Partículas idênticas e segunda quantização

Refs.: Cap. 14, Messiah
Caps 21 e 22, Merzbacher
Caps. 18 e 19, Baym
Caps 1-3, Schwabl

Partículas idênticas:

Mecânica clássica: partículas idênticas: distinguíveis
Mecânica quântica: " " : indistinguíveis (169.1)

ideia: estudar as consequências da indistinguibilidade das partículas

Definição:
(i) 2 partículas são idênticas se suas propriedades (massa, carga elétrica, spin...) são iguais
ou (169.2)
(ii) 2 partículas são idênticas se elas se comportam do mesmo sob as mesmas condições e, assim, elas não podem ser distinguidas através de 1 processo de medida (Noeting)

considerar: sistema N partículas;

notação: $\vec{r}_i, \vec{p}_i, \vec{s}_i$: variáveis dinâmicas partícula i
$x_i = (\vec{r}_i, \sigma_i)$ (169.3)
↳ autovalor op. s_i^z

se $\mathcal{E}^{(i)}$: espaço de Hilbert i-ésima partícula

↳ $\mathcal{E} = \mathcal{E}^{(1)} \otimes \mathcal{E}^{(2)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{E}^{(N)}$: espaço de Hilbert do sistema

nesse caso: permutação de N partículas é uma operação bem definida -> ∃ operador de permutação associado ao espaço de Hilbert $\mathcal{E}$;

· próxima etapa: determinação dos operadores de permutação

· considerar: partícula i,

notação: $A(i)$: observável ~ espaço vetorial $\mathcal{E}^{(i)}$;

(170.1)

$$A(i)\,|\alpha(i)\rangle = a_\alpha\,|\alpha(i)\rangle$$

↑ conjunto números quânticos

↳ vetores $|\alpha(i)\rangle$: base p/ espaço vetorial $\mathcal{E}^{(i)}$

↳ $|\alpha(1)\,\beta(2)\ldots\nu(N)\rangle = |\alpha(1)\rangle \otimes |\beta(2)\rangle \otimes \ldots \otimes |\nu(N)\rangle$

(170.2)

$$= |\alpha(1)\rangle|\beta(2)\rangle\ldots|\nu(N)\rangle :$$

: base p/ espaço vetorial $\mathcal{E}$: representação simétrica (Messich)

Obs.: notação alternativa p/ estados (170.2):

$$|\alpha_1(1)\,\alpha_2(2)\ldots\alpha_N(N)\rangle = |\alpha_1(1)\rangle|\alpha_2(2)\rangle\ldots|\alpha_N(N)\rangle \quad (170.3)$$

Ex. 1: partícula s/ spin.

tilibra

· $\vec{r}(i)\,|\vec{r}'(i)\rangle = \vec{r}'\,|\vec{r}'(i)\rangle$

↳ $|\alpha(i)\rangle = |\vec{r}(i)\rangle = |x(i)\rangle\,|y(i)\rangle\,|z(i)\rangle$

· $\vec{p}(i)\,|\vec{p}'(i)\rangle = \vec{p}'\,|\vec{p}'(i)\rangle$

(171.1)

↳ $|\alpha(i)\rangle = |\vec{p}(i)\rangle = |p_x(i)\rangle\,|p_y(i)\rangle\,|p_z(i)\rangle$

↳ e.g.: $|\alpha(1)\,\beta(2)\ldots\gamma(N)\rangle = |\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N\rangle$

Ex. 2: partícula spin $s = 1/2$.

· $|\alpha(i)\rangle = |\vec{r}(i)\,\sigma_i\rangle = |x(i)\rangle\,|y(i)\rangle\,|z(i)\rangle\,|\sigma_i\rangle$

onde $\sigma_i = \pm$: autovalores $S^z(i) = S^z_i$ (171.2)

· $|\alpha(i)\rangle = |\vec{p}(i)\,\sigma_i\rangle = |p_x(i)\rangle\,|p_y(i)\rangle\,|p_z(i)\rangle\,|\sigma_i\rangle$

↳ e.g.: $|\alpha(1)\,\beta(2)\ldots\gamma(N)\rangle = |\vec{r}_1\sigma_1;\ \vec{r}_2\sigma_2;\ \ldots;\ \vec{r}_N\sigma_N\rangle$

$= |x_1\ x_2\ \ldots\ x_N\rangle\ ;\quad x_i = (\vec{r}_i, \sigma_i)$

· se $|\psi\rangle$: estado do sistema, temos que

$\langle \vec{r}_1\ \vec{r}_2\ \ldots\ \vec{r}_N\,|\psi\rangle = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N)$

ou $\langle \vec{r}_1\sigma_1;\ \vec{r}_2\sigma_2;\ \ldots\ \vec{r}_N\sigma_N\,|\psi\rangle = \psi(\vec{r}_1,\sigma_1;\ \vec{r}_2,\sigma_2;\ \ldots;\ \vec{r}_N\sigma_N)$

$= \langle x_1\ x_2\ \ldots\ x_N\,|\psi\rangle = \psi(x_1, x_2, \ldots, x_N)$:

(171.3)

: função de onda sistema de N partículas

tilibra

· Operador de permutação.

notação: P: elemento conjunto (grupo) ops. de permutação;

Ex.: $N=2$: P elemento do conjunto $\{1, P_{12}\}$

(172.1)

$N=3$: P " " " $\{1, P_{12}, P_{13}, P_{23}, P_{123}, P_{132}\}$

Definição: P_{ij} : op. de permutação das partículas i e j é tal que

$$P_{ij}\,|\alpha(1)\,\beta(2)\ldots\mu(i)\ldots\lambda(j)\ldots\nu(N)\rangle \equiv \tag{172.2}$$

$$\equiv |\alpha(1)\,\beta(2)\ldots\lambda(i)\ldots\mu(j)\ldots\nu(N)\rangle$$

↑ ↑ notam posições índices i e j

w.r.t. estado original!

notar: P_{ij} * vetor da base = vetor da base → P_{ij} : op. unitário

de fato, p/ $\forall P$, temos que $PP^{+} = P^{+}P = \hat{1}$ (172.3)

caso geral: op. de permutação N partículas:

$P_{ij\ldots k}$

n índices, $n \leq N$

e.g. P_{ijk} : $i \to k$; $j \to i$; $k \to j$;

Ex.: sistema $N=3$ partículas.

$$P_{12}\,|\alpha(1)\,\beta(2)\,\nu(3)\rangle = |\beta(1)\,\alpha(2)\,\nu(3)\rangle \tag{172.4}$$

tilibra

$$P_{123}\,|\alpha(1)\,\beta(2)\,\gamma(3)\rangle = |\gamma(1)\,\alpha(2)\,\beta(3)\rangle \qquad (173.1)$$

notar notação Eqs. (172.2), (172.4) e (173.1): posição do índice i de partícula preservada!

· p/ estado arbitrário $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$, temos que

$$P_{12}\,|\psi\rangle = \sum_{\alpha\beta\gamma} P_{12}\,|\alpha(1)\,\beta(2)\,\gamma(3)\rangle\langle\alpha(1)\,\beta(2)\,\gamma(3)|\psi\rangle$$

($\alpha \downarrow 1$, $\beta \downarrow 2$)

$$|\beta(1)\,\alpha(2)\,\gamma(3)\rangle \quad (\beta \downarrow 1,\ \alpha \downarrow 2)$$

$$= \sum_{\alpha\beta\gamma} |\alpha(1)\,\beta(2)\,\gamma(3)\rangle\langle\beta(1)\,\alpha(2)\,\gamma(3)|\psi\rangle \qquad (173.2)$$

em particular, p/ partículas s/ spin, rep. de coordenadas:

$$P_{12}\,|\psi\rangle = \int d^3n'_1\, d^3n'_2\, d^3n'_3\, |\vec{n}'_1\,\vec{n}'_2\,\vec{n}'_3\rangle\langle\vec{n}'_2\,\vec{n}'_1\,\vec{n}'_3|\psi\rangle$$

$$\psi(\vec{n}'_2, \vec{n}'_1, \vec{n}'_3)$$

$\hookrightarrow \langle\vec{n}_1\,\vec{n}_2\,\vec{n}_3|P_{12}|\psi\rangle = P_{12}\,\psi(\vec{n}_1,\vec{n}_2,\vec{n}_3) = \psi(\vec{n}_2,\vec{n}_1,\vec{n}_3)$:

(173.3)

: alteração das variáveis das entradas $\underline{1}$ e $\underline{2}$ da função de onda

Obs.: veja pg. 173.1 p/ procedimento alternativo

· Verifica-se que (exercício):

(i) $\langle\vec{n}_1\,\vec{n}_2\,\vec{n}_3|P_{13}|\psi\rangle = P_{13}\,\psi(\vec{n}_1,\vec{n}_2,\vec{n}_3) = \psi(\vec{n}_3,\vec{n}_2,\vec{n}_1)$

tilibra

Eq. (173.3): procedimento alternativo.

p/ a representação de coordenadas, Eq. (174.2) assume a forma

$$P_{12}|\vec{n}_1\,\vec{n}_2\,\vec{n}_3\rangle = |\vec{n}_2\,\vec{n}_1\,\vec{n}_3\rangle$$

$$\hookrightarrow P_{12}|\psi\rangle = \int d^3n'_1\, d^3n'_2\, d^3n'_3\, \underbrace{P_{12}|\vec{n}'_1\,\vec{n}'_2\,\vec{n}'_3\rangle}_{|\vec{n}'_2\,\vec{n}'_1\,\vec{n}'_3\rangle}\langle\vec{n}'_1\,\vec{n}'_2\,\vec{n}'_3|\psi\rangle$$

$$\hookrightarrow \langle\vec{n}_1\,\vec{n}_2\,\vec{n}_3|P_{12}|\psi\rangle = P_{12}\psi(\vec{n}_1,\vec{n}_2,\vec{n}_3) =$$

$$= \int d^3n'_1\, d^3n'_2\, d^3n'_3\, \underbrace{\langle\vec{n}_1\,\vec{n}_2\,\vec{n}_3|\vec{n}'_2\,\vec{n}'_1\,\vec{n}'_3\rangle}_{\langle\vec{n}_1|\vec{n}'_2\rangle\langle\vec{n}_2|\vec{n}'_1\rangle\langle\vec{n}_3|\vec{n}'_3\rangle}\langle\vec{n}'_1\,\vec{n}'_2\,\vec{n}'_3|\psi\rangle$$

$$= \psi(\vec{n}_2,\vec{n}_1,\vec{n}_3)$$

tilibra

(ii) $P_{123}|\psi\rangle = \sum_{\alpha\beta\gamma} |\alpha(1)\,\beta(2)\,\gamma(3)\rangle\langle\beta(1)\,\gamma(2)\,\alpha(3)|\psi\rangle$ (174.1)

(iii) $\langle\vec{n}_1\vec{n}_2\vec{n}_3|P_{123}|\psi\rangle = P_{123}\psi(\vec{n}_1,\vec{n}_2,\vec{n}_3) = \psi(\vec{n}_2,\vec{n}_3,\vec{n}_1)$

· caso geral p/ sistema N partículas:

$\langle\vec{n}_1\vec{n}_2\ldots\vec{n}_i\ldots\vec{n}_j\ldots\vec{n}_N|P_{ij}|\psi\rangle = \langle\vec{n}_1\vec{n}_2\ldots\vec{n}_j\ldots\vec{n}_i\ldots\vec{n}_N|\psi\rangle$

$= P_{ij}\psi(\vec{n}_1,\vec{n}_2,\ldots,\vec{n}_i,\ldots,\vec{n}_j,\ldots,\vec{n}_N)$ (174.2)

$= \psi(\vec{n}_1,\vec{n}_2,\ldots,\vec{n}_j,\ldots,\vec{n}_i,\ldots,\vec{n}_N)$

· sobre os operadores,

considerar op. $\hat{O} = \hat{O}(1,2,\ldots,N)$; $i = (\vec{n}_i,\vec{p}_i)$

similar Eq. (174.2), temos que

$P_{ij}\,\hat{O}(1,2,\ldots,i,\ldots,j,\ldots,N)\,P^{+}_{ij} = \hat{O}(1,2,\ldots,j,\ldots,i,\ldots,N)$ (174.3)

em particular, p/ $N=3$:

$P_{12}\,\hat{O}(1,2,3)\,P^{+}_{12} = \hat{O}(2,1,3)$: comparar Eq. (173.3)

(174.4)

$P_{123}\,\hat{O}(1,2,3)\,P^{+}_{123} = \hat{O}(2,3,1)$: " Eq. (174.1)

Ex.: $N=3$ e $\hat{O} = A(1)$: veja Eq. (170.1);

$P_{123}\,A(1)\,P^{+}_{123}\,|\alpha(1)\,\beta(2)\,\gamma(3)\rangle = P_{123}\,A(1)\,|\beta(1)\,\gamma(2)\,\alpha(3)\rangle$

$= \beta\,P_{123}\,|\beta(1)\,\gamma(2)\,\alpha(3)\rangle = \beta\,|\alpha(1)\,\beta(2)\,\gamma(3)\rangle$

tilibra

$= A(2)\,|\alpha(1)\,\beta(2)\,\gamma(3)\rangle$

como $|\alpha(1)\,\beta(2)\,\gamma(3)\rangle$: elemento de base

↳ $P_{123}\,A(1)\,P_{123}^{\dagger} = A(2)$: comparar c/ Eq. (174.4), primeiro entrada

· se $P\hat{O}P^{\dagger} = \hat{O} \rightarrow [P, \hat{O}] = 0$ p/ ∀ permutação P de N partículas

↳ $\hat{O}$: op. simétrico w.r.t. permutação N partículas (175.1)

Ex. ops. simétricos:

· $\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \ldots + \vec{p}_N$: momento linear (total)

· $\hat{T} = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \ldots + \frac{p_N^2}{2m} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2m} p_i^2$: energia cinética (total)

· $\rho(\vec{n}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\vec{n} - \vec{n}_i)$: op. densidade de partículas

(175.2)

· $\vec{j}(\vec{n}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2m} \vec{p}_i\, \delta(\vec{n} - \vec{n}_i) + \delta(\vec{n} - \vec{n}_i) \frac{1}{2m} \vec{p}_i$:

: op. densidade de corrente de partículas

· $\vec{S}(\vec{n}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\vec{n} - \vec{n}_i)\, \vec{S}_i$: op. densidade de spins

Obs. Eq. (175.2): expressões ops. em primeira quantização !

tilibra

· propriedades ops. de permutação.

(i) se P' e P'' : 2 permutações arbitrárias de N partículas

↳ $P = P'P''$: permutação de N partículas (176.1)

Ex. : $N=3$: veja Eqs. (172.4) e (173.1) ;

· $P_{13}P_{12}\psi(x_1,x_2,x_3) = P_{13}\psi(x_2,x_1,x_3) = \psi(x_3,x_1,x_2)$

$= P_{132}\psi(x_1,x_2,x_3)$

· $P_{12}P_{23}\psi(x_1,x_2,x_3) = P_{12}\psi(x_1,x_3,x_2) = \psi(x_3,x_1,x_2)$

$= P_{132}\psi(x_1,x_2,x_3)$

(176.2)

· $P_{12}P_{13}\psi(x_1,x_2,x_3) = P_{12}\psi(x_3,x_2,x_1) = \psi(x_2,x_3,x_1)$

$= P_{123}\psi(x_1,x_2,x_3)$

notar: $P_{13}P_{12} \neq P_{12}P_{13}$

de fato, em geral: $P'P'' \neq P''P'$ (176.3)

(ii) notar Eq. (176.2) : $P_{123} = P_{12}P_{13}$

permutação = produto permutações

$n=3$ part. $n=2$ partículas

caso geral: se P : permutação arbitrária N partículas

↳ podemos escrever

(176.4)

P = produto de permutações $n=2$ partículas (transposições)

tilibra

↳ definição: se o produto (176.4) é tal que

número par de transposições : paridade $P = +1$

(177.1)

" ímpar " " : paridade $P = -1$

notação: paridade $P : (-1)^P$ ← # transposições !

Ex.: $N = 3$: veja pg. 172 ;

	1	P_{12}	P_{13}	P_{23}	P_{123}	P_{132}
paridade:	+1	-1	-1	-1	+1	+1

(177.2)

(iii) considerar permutação P tal que $P^{-1} = P$;

como Eq. (172.3): $PP^+ = P^+P = 1 \rightarrow P^+ = P^{-1} = P \rightarrow P^+ = P$, i.e.,

P é um observável ;

além disso, $P^2 = 1 \rightarrow$ autovalores $P = \pm 1$

Ex.: permutação $n = 2$ partículas P_{ij} ;

nesse caso: $P_{ij}^{-1} = P_{ij}$ e $P_{ij}^2 = 1$

se $P_{ij}|\psi\rangle = +|\psi\rangle$: autovetor op. $P_{ij} \sim$ autovalor $+1$;

$|\psi\rangle$ simétrico w.r.t. permutação $i \leftrightarrow j$

(177.3)

se $P_{ij}|\psi\rangle = -|\psi\rangle$: autovetor op. $P_{ij} \sim$ autovalor -1 ;

$|\psi\rangle$ antisimétrico w.r.t. permutação $i \leftrightarrow j$

temos que,

tilibra

$S_{ij} = \frac{1}{2}(\hat{1} + P_{ij})$: projeta espaço autovalor +1 : op. simetrização

$A_{ij} = \frac{1}{2}(\hat{1} - P_{ij})$: " " " -1 : op. antisimetrização

↳ $S_{ij} + A_{ij} = \hat{1}$ (178.1)

p/ estado arbitrário $|\phi\rangle \in \mathcal{E}$, temos que

$$|\phi\rangle = (S_{ij} + A_{ij})|\phi\rangle = S_{ij}|\phi\rangle + A_{ij}|\phi\rangle$$

onde $S_{ij}|\phi\rangle$: componente simétrica $|\phi\rangle$ w.r.t. troca $i \leftrightarrow j$

$A_{ij}|\phi\rangle$: " antisimétrica " " " "

em particular, p/ $N = 2$:

considerar função de onda arbitrária $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$:

↳ $\psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = S_{12}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{2}(\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1))$

(178.2)

$$\psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = A_{12}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{2}(\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1))$$

próxima etapa: generalização definição estados simétricos e antisimétricos w.r.t. permutação N partículas;

· considerar: estado arbitrário $|u\rangle \in \mathcal{E}$ e

$P|u\rangle$: conjunto estados obtidos a partir de $|u\rangle$ via permutação N partículas : $N!$ estados;

Exs.:

$N = 2$: $P|u\rangle = \hat{1}|u\rangle$, $P_{12}|u\rangle$: $2! = 2$ estados

tilibra

$N=3$: $P|u\rangle = 1|u\rangle, P_{12}|u\rangle, P_{13}|u\rangle, P_{23}|u\rangle, P_{123}|u\rangle, P_{132}|u\rangle$:
: 3! estados

se $\mathcal{E}_u$: subespaço definido por $|u\rangle$ e $P|u\rangle$ → $\dim \mathcal{E}_u \leq N!$,
pois # estados linearmente independentes $\leq N!$

considerar caso particular:

$$P|u\rangle = c_p|u\rangle \; ; \; c_p \in \mathbb{C}, \text{ i.e., } \dim \mathcal{E}_u = 1 \qquad (179.1)$$

verifica-se que: $c_p = \pm 1$:
de fato, se $P = P_{ij}$ → $c_p = \pm 1$: Veja Eq. (177.3);
como $\forall P$ = produto transposições P_{ij} → $c_p = \pm 1$

↳ temos 2 tipos de estado $|u\rangle$ que satisfazem (179.1):

$P|u\rangle = |u\rangle$: $|u\rangle$ simétrico w.r.t. permutação N partículas (179.2)

$P|u\rangle = (-1)^P|u\rangle$: " antisimétrico " " " "

onde P é uma permutação arbitrária de N partículas.

notar: p/ $P = P_{ij}$: Eq. (179.2) ou c/ Eq. (177.3)!

· propriedade (179.2) permite definir 2 subespaços de $\mathcal{E}$:

$\mathcal{E}^{(S)}$: subespaço simétrico: p/ $\forall |u\rangle \in \mathcal{E}^{(S)}$
↳ $P|u\rangle = |u\rangle$, p/ $\forall P$; (179.3)

$\mathcal{E}^{(A)}$: subespaço antisimétrico: p/ $\forall |u\rangle \in \mathcal{E}^{(A)}$
↳ $P|u\rangle = (-1)^P|u\rangle$

tilibra

verifica-se que (veja Sec. 14.4, Messich) os respectivos projetores são dados por:

$$S = \frac{1}{N!} \sum_P P : \text{projetor subespaço } \mathcal{E}^{(S)} : \text{op. simetrização} \tag{180.1}$$

$$A = \frac{1}{N!} \sum_P (-1)^P P : \quad " \quad " \quad \mathcal{E}^{(A)} : \text{op. antisimetrização}$$

Exs.:

• $N = 2$: $S = \frac{1}{2!}(1 + P_{12})$ e $A = \frac{1}{2!}(1 - P_{12})$: Eq. (178.1)

• $N = 3$: Eqs. (177.2) e (180.1):

$$S = \frac{1}{6!}\left(1 + P_{12} + P_{13} + P_{23} + P_{123} + P_{132}\right) \tag{180.2}$$

$$A = \frac{1}{6!}\left(1 - P_{12} - P_{13} - P_{23} + P_{123} + P_{132}\right)$$

notar: $S + A \neq 1$: de fato, OK p/ $N > 2$!

• propriedades projetores S e A (veja pg. 180.1):

$$SP = \frac{1}{N!} \sum_{P'} P'P = \frac{1}{N''} \sum_{P''} P'' = S$$

(Eq. (176.1))

$$AP = \frac{1}{N!} \sum_{P'} (-1)^{P'} P'P = \frac{1}{N!} \sum_{P'} (-1)^P (-1)^{P_1 P'} \underbrace{P'P}_{(-1)^{P''} P''} = (-1)^P A \tag{180.3}$$

- novamente: propriedades projetores $\underline{\underline{S}}$ e $\underline{\underline{A}}$:

$$\underline{\underline{P}}\,\underline{\underline{S}} = \frac{1}{N!}\sum_{P'} \underline{\underline{P}}\,\underline{\underline{P}}' = \frac{1}{N!}\sum_{P''} \underline{\underline{P}}'' = \underline{\underline{S}}$$

$$\underline{\underline{P}}\,\underline{\underline{A}} = \frac{1}{N!}\sum_{P'} (-1)^{P'}\,\underline{\underline{P}}\,\underline{\underline{P}}' = \frac{1}{N!}\sum_{P'} (-1)^{P}(-1)^{P+P'}\,\underline{\underline{P}}\,\underline{\underline{P}}' = (-1)^{P}\,\underline{\underline{A}}$$

$$(-1)^{P''}\,\underline{\underline{P}}''$$

↳ $\underline{\underline{S}}\,\underline{\underline{P}} = \underline{\underline{P}}\,\underline{\underline{S}} = \underline{\underline{S}}$ e $\underline{\underline{A}}\,\underline{\underline{P}} = \underline{\underline{P}}\,\underline{\underline{A}} = (-1)^{P}\,\underline{\underline{A}}$ (180.4)

- como $\underline{\underline{P}} = \underline{\underline{P}}^{+}$ e $(-1)^{P} = (-1)^{P^{+}}$

↳ $\underline{\underline{S}} = \underline{\underline{S}}^{+}$ e $\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{A}}^{+}$ (180.5)

- $$\underline{\underline{S}}^{2} = \frac{1}{N!}\sum_{P} \underline{\underline{S}}\,\underline{\underline{P}} = \frac{1}{N!}\sum_{P} \underline{\underline{S}} = \underline{\underline{S}}\,\frac{1}{N!}\sum_{P} = \underline{\underline{S}}$$

$$\underline{\underline{A}}^{2} = \frac{1}{N!}\sum_{P} (-1)^{P}\,\underline{\underline{A}}\,\underline{\underline{P}} = \frac{1}{N!}\sum_{P} (-1)^{P}\cdot(-1)^{P}\,\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{A}}$$

↳ $\underline{\underline{S}}^{2} = \underline{\underline{S}}$ e $\underline{\underline{A}}^{2} = \underline{\underline{A}}$ (180.6)

tilibra

Resumo: determinação op. (unitário) de permutação;
identificação subespaços simétrico $\mathcal{E}^{(S)}$
e antisimétrico $\mathcal{E}^{(A)}$
e respectivos projetores / ops. simetrização
e antisimetrização

· hipótese: indistinguibilidade partículas -> ✓ permutação P
não deve alterar as propriedades dinâmicas
do sistema de N partículas. (181.1)

próximo etapa: verificar as consequências (181.1):

(i) invariância eq. de movimento w.r.t. permutação N partículas.

Se $|\psi(t_0)\rangle$: estado inicial sistema
↳ $|\psi(t)\rangle = U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle$: estado sistema instante t;

similar:
Se $P|\psi(t_0)\rangle$: estado inicial sistema
↳ Eq. 181.1 → $P|\psi(t)\rangle = U(t,t_0)\left(P|\psi(t_0)\rangle\right)$: estado sistema instante t;

notar: $|\psi(t)\rangle = U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle$

↳ $P|\psi(t)\rangle = P\left(U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle\right) \overset{!}{=} U(t,t_0)\left(P|\psi(t_0)\rangle\right)$;

como $|\psi(t_0)\rangle$: estado arbitrário

↳ $PU(t,t_0) = U(t,t_0)P$ -> $[P, U(t,t_0)] = 0$ (181.2)

como $i\hbar \frac{d}{dt} U(t,t_0) = H\,U(t,t_0)$

tilibra

↳ $P\left(i\hbar\frac{dU}{dt}\right) = PHU = \left(i\hbar\frac{dU}{dt}\right)P$

Eq. (181.2) ↑ ; Eq. (181.2) ↓

$\rightarrow PHU = HUP = HPU$

como $\left(i\hbar\frac{dU}{dt}\right)P = HUP$

↳ $[P,H]U = 0 \rightarrow [P,H] = 0$ (182.1)

similar, VOLTA: se $[P,H] = 0$, temos que

$$i\hbar\frac{d}{dt}(PUP^\dagger) = P\left(i\hbar\frac{dU}{dt}\right)P^\dagger = P(HU)P^\dagger \overset{!}{=} H(PUP^\dagger)$$

como U e $PUP^\dagger$ satisfazem a mesma eq. de movimento

↳ $U = PUP^\dagger \rightarrow [P,U] = 0$ (182.2)

Resumo Eqs. (182.1) e (182.2): se $[P,H] = 0 \leftrightarrow [P,U(t,t_0)] = 0$:

: condição associada à invariância eq. de movimento w.r.t. permutação N partículas.

(ii) degenerescência de troca.

considerar: $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ e $[P,H] = 0$ p/ $\forall P$;

↳ $H(P|\psi\rangle) = PH|\psi\rangle = E(P|\psi\rangle)$, i.e.,

$P|\psi\rangle$: autoestado H ~ autovalor E; (182.3)

se $|\psi\rangle \neq P|\psi\rangle \rightarrow$ autovalor E degenerado: degenerescência de troca

(iii) observáveis: ops. simétricos.

considerar observável B: $B|b\rangle = b|b\rangle$

tilibra

se estado do sistema = $|b\rangle$ $\rightarrow$ $|b\rangle$ $\xrightarrow[B=b]{\text{MEDIDA IDEAL}}$ $|b\rangle$;

se " " " = $P|b\rangle \rightarrow P|b\rangle$ " $\rightarrow |b\rangle$

↑ Eq. (181.1)

↳ $B(P|b\rangle) = b(P|b\rangle) = Pb|b\rangle = PB|b\rangle$

(183.1)

↳ $[P, B] = 0$, i.e., B: op. simétnico : veja Eq. (175.1)

· de fato, Eqs. (182.1) e (183.1)

↳ definição alternativa partículas idênticas:
um sistema de N partículas é um sistema de partículas idênticas se o hamiltoniano $\underline{H}$ e todos os observáveis $\underline{B}$ são ops. simétnicos w.r.t. permutação de N partículas.

(183.2)

(iv) postulado de simetrização,
considerar, e.g., observável A: espectro discreto e limitado:

$$A(i)\,|\alpha(i)\rangle = a_\alpha\,|\alpha(i)\rangle \;:\; \alpha = 1, 2, \ldots, M$$

considerar: medida simultânea $A(i)$ p/ cada partícula;
Eq. (182.1) $\rightarrow$ podemos afirmar somente que há:
n_1 partículas no estado de partícula única $|\alpha = 1\rangle$,
n_2 " " " " " " $|2\rangle$,
⋮ (183.3)
n_M " " " " " " $|M\rangle$

como $\sum_{\alpha=1}^{M} n_\alpha = N$: # total partículas (vínculo)

↳ $\dfrac{N!}{n_1!\, n_2! \cdots n_M!}$: # estados caracterizados pelo conjunto $\{n_1, n_2, \ldots, n_M\}$ (183.3) !

tilibra

(v) vamos verificar que evolução temporal e medida observável não altera simetria/antisimetria do estado do sistema; considerar, e.g., bósons:

- Eq. (180.1) $\Leftrightarrow$ $[P, U(t,t_0)] = 0 \rightarrow [S, U(t,t_0)] = 0$

↳ se $|\psi(t_0)\rangle = S|\psi(t_0)\rangle$: simétrico w.r.t. permutação N part.

↳ $|\psi(t)\rangle = S|\psi(t)\rangle$: " " " " "

- Eq. (180.1) $\Leftrightarrow$ $[P, B] = 0 \rightarrow [S, B] = 0$

se $|\psi\rangle$: simétrico $\rightarrow$ $|\psi\rangle = \sum_b c(b)|b\rangle$ (somente auto estados) B simétricos!

↳ $|\psi\rangle$ — MEDIDA IDEAL → $|b\rangle$

estado simétrico	$B = b$	estado simétrico

Obs.: teorema spin-estatística verificado em teoria quântica de campos.

Lembrar:

bósons: estatística Bose-Einstein

férmions: " Fermi-Dirac

tilibra

↳ Q.: Qual ou quais estados acima correspondem a possíveis estados do sistema?

A.: Postulado de simetrização: os possíveis estados de um sistema de N partículas idênticas são todos simétricos ou todos antisimétricos w.r.t. permutação de N partículas, veja Eq. (179.2);

(183.4)

- simétricos: bósons: fótons (s=1), He^4, fônons (s=0), mágnons (s=1), partículas α;

- antisimétricos: férmions: elétrons, prótons, nêutrons.

- além disso, temos o teorema spin-estatística:

bósons: partículas spin inteiro (183.5)
férmions: " " semi-inteiro

Obs.: teorema spin-estatística verificado via teoria quântica de campos.

Lembrar: bósons: estatística Bose-Einstein
férmions: " Fermi-Dirac

tilibra

· Sistema N partículas não-interagentes.

hamiltoniano:

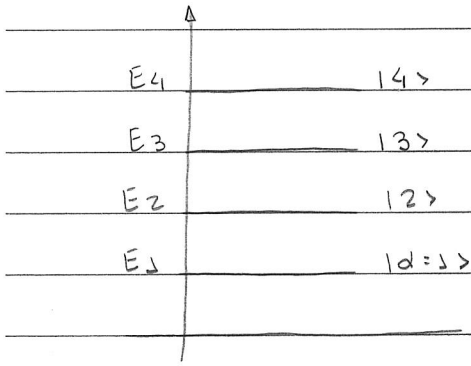
$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2m} p_i^2 + U_{ext}(\vec{r}_i) = \sum_{i=1}^{N} H_0(i) \quad \text{: op. simétrico : Eq. (175.1)}$$

considerar: $H_0(i)\,|\alpha(i)\rangle = E_\alpha\,|\alpha(i)\rangle$; $i = 1, 2, \ldots, N$ (partículas)

$\alpha = 1, 2, \ldots$ (estados)

ou $H_0|\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha\rangle$ (184.1)

hipótese: H0 espectro discreto e não-degenerado



considerar estados N partículas:

$$|\psi\rangle = |\alpha(1)\,\beta(2)\ldots r(N)\rangle = |\alpha(1)\rangle|\beta(2)\rangle\ldots|r(N)\rangle. \quad (184.2)$$

α, β, ..., r : índices fixos!

notar: $|\psi\rangle$: autoestado H:

$$H|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} H_0(i)\,|\alpha(1)\,\beta(2)\ldots r(N)\rangle$$

$$= \left(E_\alpha + E_\beta + \ldots + E_r\right)|\psi\rangle = E|\psi\rangle ;$$

entretanto, é necessário simetrizar e antisimetrizar $|\psi\rangle$!

tilibra

(i) bósons.

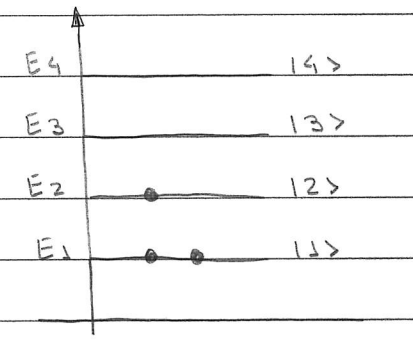
$$|\psi_S\rangle = \mathcal{C}\, S\,|\psi\rangle = \mathcal{C}\,\frac{1}{N!}\sum_P P\,|\alpha(1)\beta(2)\ldots\gamma(N)\rangle$$

(cte de normalização)

verifica-se que (veja abaixo)

$$|\psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!\prod_\alpha n_\alpha!}}\sum_P P\,|\alpha(1)\,\beta(2)\ldots\gamma(N)\rangle \qquad (185.1)$$

Ex.: sistema $N=3$ partículas e $n_1=2$, $n_2=1$, $n_\alpha=0$, p/ $\alpha\geq 3$;



$n_\alpha = 0$ p/ $\alpha \geq 3$

$N = \sum_\alpha n_\alpha = 3$: vínculo

Eq. (185.1): $|\psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!\,2!\,1!}}\sum_P P\,\underbrace{|1(1)\,1(2)\,2(3)\rangle}_{|1(1)\rangle|1(2)\rangle|2(3)\rangle}$

(185.2)

↳ $|\psi_S\rangle = \frac{2}{\sqrt{12}}\left(|1(1)\,1(2)\,2(3)\rangle + |2(1)\,1(2)\,1(3)\rangle + |1(1)\,2(2)\,1(3)\rangle\right)$

· sobre a determinação da cte de normalização $\mathcal{C}$:

$$\langle\psi_S|\psi_S\rangle = |\mathcal{C}|^2\langle\psi|S^+S|\psi\rangle \overset{\text{Eqs. (180.5) e (180.6)}}{=} |\mathcal{C}|^2\langle\psi|S|\psi\rangle$$

$$= |\mathcal{C}|^2\,\frac{1}{N!}\sum_P \langle\alpha(1)\beta(2)\ldots\gamma(N)|\,\underbrace{P\,|\alpha(1)\beta(2)\ldots\gamma(N)\rangle}_{|\alpha_P(1)\,\beta_P(2)\ldots\gamma_P(N)\rangle}$$

onde $\alpha_P, \beta_P, \ldots, \gamma_P$ = permutação $\alpha, \beta, \ldots, \gamma$

tilibra

e.g., se $P = P_{12} \rightarrow \alpha_p = \beta$, $\beta_p = \alpha$, ... $r_p = r$

índices não-modificados

↳ $\langle \psi_S | \psi_S \rangle = |C|^2 \frac{1}{N!} \sum_P \langle \alpha(1) | \alpha_p(1) \rangle \langle \beta(2) | \beta_p(2) \rangle \ldots \langle r(N) | r_p(N) \rangle$ (186.1)

se estado (184.2) é tal que há

n_1 partículas no estado de partícula única $|\alpha = 1\rangle$

n_2 " " " " " " $|2\rangle$

⋮

↳ # permutações tal que produto escalar em (186.1) ≠ 0 :

$n_1! n_2! \ldots = \prod_\alpha n_\alpha!$ (lembrar que $0! = 1$)

↳ $\langle \psi_S | \psi_S \rangle = |C|^2 \cdot \frac{1}{N!} \left(\prod_\alpha n_\alpha! \right) = 1 \rightarrow |C| = \sqrt{\frac{N!}{\prod_\alpha n_\alpha!}}$ (186.2)

(ii) férmions,

$|\psi_A\rangle = C A |\psi\rangle = C \frac{1}{N!} \sum_P (-1)^P P |\alpha(1)\, \beta(2) \ldots r(N)\rangle$; C = cte

verifica-se que (veja abaixo):

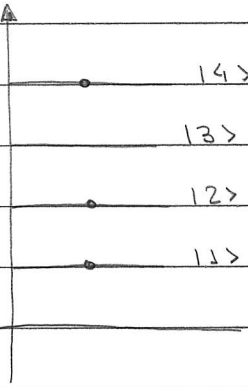
$|\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P P |\alpha(1)\, \beta(2) \ldots r(N)\rangle$

ou (186.3)

tilibra

$$|\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |\alpha(1)\rangle & |\alpha(2)\rangle & \dots & |\alpha(N)\rangle \\ |\beta(1)\rangle & |\beta(2)\rangle & \dots & |\beta(N)\rangle \\ \vdots & & & \\ |r(1)\rangle & |r(2)\rangle & \dots & |r(N)\rangle \end{vmatrix} : \text{determinante de Slater}$$

nesse caso, devido à antisimetria de $|\psi_A\rangle$, temos que $n_\alpha = 0$ ou 1 ~ princípio de exclusão de Pauli:



p/ férmions: $n_\alpha = 0$ ou 1 (187.1)

de fato, se, e.g., partículas 1 e 2 no estado $|\alpha\rangle$, temos que

$$|\alpha(1)\,\alpha(2)\dots r(N)\rangle = \frac{1}{2}(1 + P_{12})\,|\alpha(1)\,\alpha(2)\dots r(N)\rangle$$

mas, Eq.(180.4): $A(1 + P_{12}) = (1 + (-1)^P)\,A = 0$;

notar det. de Slater: se $|\alpha\rangle = |\beta\rangle \rightarrow |\psi_A\rangle = 0$

· notar: $P_{ij}\,|\psi_A\rangle = \sqrt{N!}\,P_{ij}\,A\,|\alpha(1)\,\beta(2)\dots r(N)\rangle$

Eq.(180.4) $= \sqrt{N!}\,(-1)^1\,A\,|\alpha(1)\,\beta(2)\dots r(N)\rangle = -|\psi_A\rangle$, i.e.

permutação partículas i e j → troca sinal do estado antisimétrico $|\psi_A\rangle$;
p/ o determinante de Slater, ação op. permutação P_{ij} corresponde à troca colunas i e j!

tilibra

Ex.: sistema $N=3$ partículas e $n_1 = n_2 = n_4 = 1$, $n_3 = 0$

e $n_\alpha = 0$, p/ $\alpha \geq 5$: veja Eq. (187.1);

Eq. (186.3): $|\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_P (-1)^P P \, |1(1)\, 2(2)\, 4(3)\rangle$

$$= \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{vmatrix} |1(1)\rangle & |1(2)\rangle & |1(3)\rangle \\ |2(1)\rangle & |2(2)\rangle & |2(3)\rangle \\ |4(1)\rangle & |4(2)\rangle & |4(3)\rangle \end{vmatrix} \qquad (187.2)$$

· sobre a determinação de de normalização $\mathcal{C}$:

Eqs. (180.5) e (180.6)

$\langle \psi_A | \psi_A \rangle = |\mathcal{C}|^2 \langle \psi | A^+ A | \psi \rangle = |\mathcal{C}|^2 \langle \psi | A | \psi \rangle$

$= |\mathcal{C}|^2 \frac{1}{N!} \sum_P (-1)^P \langle \alpha(1)\beta(2)\ldots\gamma(N) | P | \alpha(1)\beta(2)\ldots\gamma(N)\rangle$

$|\alpha_P(1)\beta_P(2)\ldots\gamma_P(N)\rangle$

$= |\mathcal{C}|^2 \cdot \frac{1}{N!}$: pois, como $n_\alpha = 0$ ou 1, apenas a permutação $P=1$ → produto escalar $\neq 0$;

escolhendo a fase de → $\mathcal{C} = \sqrt{N!}$

tilibra

· Segunda quantização

(p/ detalhes veja Caps. 1-3, Schwabl)

ideia: alternativa p/ descrição sistema N partículas em termos de estados relacionados ao número de ocupação dos estados de partícula única.

· Espaço de Fock e operadores de criação e destruição.

vamos considerar separadamente os dois tipos de partículas idênticas:

(A) Bósons,

o estado (185.1) pode ser escrito como:

$$|n_1 n_2 \ldots\rangle = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_\alpha n_\alpha!}} \sum_P P\,|\alpha_1(1) \ldots \alpha_N(N)\rangle \qquad (188.1)$$

alpha gamma

onde n_α: número de ocupação: # partículas no estado de partícula única $|\alpha\rangle$, $\alpha = 1, 2, \ldots$;

em princípio, $n_\alpha = 0, 1, 2, \ldots$,

entretanto, lembrar vínculo $\sum_{\alpha \geq 1} n_\alpha = N$: # partículas

lembrar: p/ observável A ~ espaço vetorial de 1 partícula $\mathcal{E}$:

$$A|\alpha\rangle = a_\alpha |\alpha\rangle \quad ; \quad \alpha = 1, 2, \ldots \qquad (188.2)$$

ou $A(i)|\alpha(i)\rangle = a_\alpha |\alpha(i)\rangle$: Eq. (170.1)

onde $A(i)$ ~ espaço vetorial partícula i: $\mathcal{E}^{(i)}$

tilibra

vetores $|n_1 n_2 \ldots\rangle$: base espaço vetorial simétrico de N-partículas $\mathcal{E}_N^{(S)}$;

entretanto, é interessante considerar o espaço vetorial

$$\tilde{\mathcal{F}} = \mathcal{E}_{N=0}^{(S)} \oplus \mathcal{E}_{N=1}^{(S)} \oplus \mathcal{E}_{N=2}^{(S)} \oplus \ldots = \bigoplus_{N \geq 0} \mathcal{E}_N^{(S)}$$: espaço de Fock

nesse caso, vetores $|n_1 n_2 \ldots\rangle$: base ortonormal p/ $\tilde{\mathcal{F}}$:

$$\langle n'_1 n'_2 \ldots | n_1 n_2 \ldots \rangle = \delta_{n'_1, n_1} \delta_{n'_2, n_2} \ldots \quad (189.1)$$

$$\text{e} \quad \sum_{n_1, n_2, \ldots \geq 0} |n_1 n_2 \ldots\rangle\langle n_1 n_2 \ldots| = \hat{1}$$

notar: $n_i = 0, 1, 2, \ldots$, i.e., $\neq$ espaço $\mathcal{E}_N^{(S)}$, o espaço de Fock $\tilde{\mathcal{F}}$ não apresenta restrição sob o número de partículas.

em particular,

$|0\rangle \equiv |0\,0 \ldots\rangle \in \mathcal{E}_{N=0}^{(S)}$: estado $N = 0$ partículas : vácuo (estado de referência) (189.2)

· similar aos operadores escada p/ o oscilador harmônico 1-D, é interessante introduzir os operadores:

$$a_\alpha^\dagger |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle = \sqrt{n_\alpha + 1}\, |n_1 n_2 \ldots, n_\alpha + 1, \ldots\rangle \quad (189.3)$$

$$\text{e} \quad a_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle = \sqrt{n_\alpha}\, |n_1 n_2 \ldots, n_\alpha - 1, \ldots\rangle$$

onde

tilibra

$a^\dagger_\alpha$: op. de criação : adiciona 1 partícula (bóson) no estado de partícula única $|\alpha\rangle$

a_α : op. de destruição : remove 1 partícula (bóson) do estado de partícula única $|\alpha\rangle$

em particular : $a_\alpha |n_1 n_2 \ldots, n_\alpha = 0, \ldots\rangle = 0$

· álgebra : verifica-se que os ops. a_α e $a^\dagger_\alpha$ satisfazem as seguintes relações de comutação :

$$[a_\alpha, a_\beta] = [a^\dagger_\alpha, a^\dagger_\beta] = 0 \quad \text{e} \quad [a_\alpha, a^\dagger_\beta] = \delta_{\alpha\beta} \qquad (190.1)$$

de fato,

(i) se $\alpha = \beta$, temos que $[a_\alpha, a_\beta] = 0$;

(ii) se $\alpha \neq \beta$, Eq. (189.3) :

$$a_\alpha a_\beta |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots n_\beta \ldots\rangle = \sqrt{n_\beta}\, a_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots, n_\beta - 1, \ldots\rangle$$

$$= \sqrt{n_\alpha n_\beta}\, |n_1 n_2 \ldots, n_\alpha - 1, \ldots, n_\beta - 1, \ldots\rangle$$

e $a_\beta a_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots n_\beta \ldots\rangle = \sqrt{n_\alpha}\, a_\beta |n_1 n_2 \ldots, n_\alpha - 1, \ldots, n_\beta \ldots\rangle$

$$= \sqrt{n_\alpha n_\beta}\, |n_1 n_2 \ldots, n_\alpha - 1, \ldots, n_\beta - 1, \ldots\rangle$$

como $|n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots n_\beta \ldots\rangle$ vetor base $\rightarrow a_\alpha a_\beta - a_\beta a_\alpha = 0$

(iii) se $\alpha \neq \beta$,

$a_\alpha a^\dagger_\beta |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots n_\beta \ldots\rangle =$

tilibra

· sobre a definição (189.3):

notar: $a_\alpha^\dagger \,|n'_1\, n'_2 \ldots n'_\alpha \ldots\rangle = \sqrt{n'_\alpha + 1}\,|n'_1\, n'_2 \ldots, n'_\alpha + 1, \ldots\rangle$

↳ $\langle n'_1\, n'_2 \ldots n'_\alpha \ldots |\, a_\alpha = \sqrt{n'_\alpha + 1}\,\langle n'_1\, n'_2 \ldots, n'_\alpha + 1, \ldots|$

* $|n_1\, n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle$:

$\langle n'_1\, n'_2 \ldots n'_\alpha \ldots |\, a_\alpha\, |n_1\, n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle =$

$= \sqrt{n'_\alpha + 1}\;\langle n'_1\, n'_2 \ldots, n'_\alpha + 1, \ldots |\, n_1\, n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle$

$\underbrace{\qquad\qquad}_{\prod_{\beta \neq \alpha} \delta_{n'_\beta, n_\beta}\; \delta_{n'_\alpha + 1, n_\alpha}}$

$= \sqrt{n_\alpha}\; \prod_{\beta \neq \alpha} \delta_{n'_\beta, n_\beta}\; \delta_{n'_\alpha, n_\alpha - 1}$

$= \sqrt{n_\alpha}\;\langle n'_1\, n'_2 \ldots n'_\alpha \ldots |\, n_1\, n_2 \ldots, n_\alpha - 1, \ldots\rangle$

como estado $\langle n'_1\, n'_2 \ldots n'_\alpha \ldots|$ é arbitrário

↳ definição op. a_α.

tilibra

$= \sqrt{n_\beta + 1}\; a_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots, n_\beta + 1, \ldots\rangle$

$= \sqrt{n_\alpha (n_\beta + 1)}\; |n_1 n_2 \ldots, n_\alpha - 1, \ldots, n_\beta + 1, \ldots\rangle$

e $a^\dagger_\beta a_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots n_\beta \ldots\rangle = \sqrt{n_\alpha}\; a^\dagger_\beta |n_1 n_2 \ldots, n_\alpha - 1, \ldots, n_\beta, \ldots\rangle$

$= \sqrt{n_\alpha (n_\beta + 1)}\; |n_1 n_2 \ldots, n_\alpha - 1, \ldots, n_\beta + 1, \ldots\rangle$

$\hookrightarrow a_\alpha a^\dagger_\beta - a^\dagger_\beta a_\alpha = 0$

(iv) se $\alpha = \beta$,

$a_\alpha a^\dagger_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle = \sqrt{n_\alpha + 1}\; a_\alpha |n_1 n_2 \ldots, n_\alpha + 1, \ldots\rangle$

$= (n_\alpha + 1)\; |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle$

(191.1)

e $a^\dagger_\alpha a_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle = \sqrt{n_\alpha}\; a^\dagger_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha - 1 \ldots\rangle$

$= n_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle$

$\hookrightarrow a_\alpha a^\dagger_\alpha - a^\dagger_\alpha a_\alpha = 1$

· os vetores da base $|n_1 n_2 \ldots\rangle$ podem ser escrito em termos do estado de vácuo $|0\rangle$ e dos ops. de criação, e.g.,

$|0\,0 \ldots n_\alpha = 1 \ldots\rangle = a^\dagger_\alpha |0\rangle$

(191.2)

$|0\,0 \ldots n_\alpha = 2 \ldots n_\beta = 1 \ldots\rangle = \frac{1}{\sqrt{2!}} (a^\dagger_\alpha)^2 a_\beta |0\rangle$

↑ cte de normalização

de fato, temos que

tilibra

$$|n_1 n_2 \ldots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \ldots}} (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \ldots |0\rangle \qquad (192.1)$$

· mudança de base,

consideram 2 bases distintas p/ os estados de partícula única:

- observável A: $A(i)|\alpha(i)\rangle = a_\alpha |\alpha(i)\rangle$ ou $A|\alpha\rangle = a_\alpha |\alpha\rangle$

- observável B: $B(i)|\beta(i)\rangle = b_\beta |\beta(i)\rangle$ ou $B|\beta\rangle = b_\beta |\beta\rangle$

Ex.: A: op. posição $\vec{r}$: $|\alpha\rangle \sim |\vec{r}\rangle$

B: op. momento $\vec{p}$: $|\beta\rangle \sim |\vec{p}\rangle$

podemos identificar, veja Eq. (191.2):

$$|\alpha\rangle = |0\,0 \ldots n_\alpha = 1 \ldots\rangle = a_\alpha^\dagger |0\rangle \qquad (192.2)$$
$$|\beta\rangle = |0\,0 \ldots n_\beta = 1 \ldots\rangle = b_\beta^\dagger |0\rangle$$

como, p/ os estados de partícula única,

$$|\alpha\rangle = \sum_\beta |\beta\rangle\langle\beta|\alpha\rangle$$

$\hookrightarrow$ $|\alpha\rangle = a_\alpha^\dagger |0\rangle = \sum_\beta \langle\beta|\alpha\rangle\, b_\beta^\dagger |0\rangle$, i.e.

$$a_\alpha^\dagger = \sum_\beta \langle\beta|\alpha\rangle\, b_\beta^\dagger$$

: relação entre ops. $a_\alpha / a_\alpha^\dagger$

$$\text{e} \quad a_\alpha = \sum_\beta \langle\alpha|\beta\rangle\, b_\beta \qquad \text{e} \quad b_\beta / b_\beta^\dagger \qquad (192.3)$$

tilibra

· sobre a representação de operadores em termos de ops. de criação e destruição,

· operador número de partículas:

$$\hat{n}_\alpha = a^\dagger_\alpha a_\alpha \qquad (193.1)$$

Eq. (193.1): $\hat{n}_\alpha |n_1 n_2 \dots n_\alpha \dots\rangle = n_\alpha |n_1 n_2 \dots n_\alpha \dots\rangle$, i.e.,

$|n_1 n_2 \dots n_\alpha \dots\rangle$: autovetor op. $\hat{n}_\alpha$ ~ autovalor n_α =
= # ocupação do estado de partícula única $|\alpha\rangle$.

↳ $\hat{N} = \sum_\alpha \hat{n}_\alpha = \sum_\alpha a^\dagger_\alpha a_\alpha$: operador número total de partículas (193.2)

notar: $\hat{N} |n_1 n_2 \dots\rangle = \left(\sum_\alpha n_\alpha\right) |n_1 n_2 \dots\rangle$

· operadores de uma partícula ou um corpo:

Definição: $\hat{O}_1 = \sum_{i=1}^{\tilde{N}} \hat{O}_i$ (193.3)
↑ índice de partícula

Ex.: op. energia cinética p/ N partículas massa m:

$$\hat{T} = \sum_{i=1}^{\tilde{N}} \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} \; ; \; \vec{p}_i : \text{momento partícula } i \qquad (193.4)$$

· considerar vetores base $|\alpha(i)\rangle$ ~ espaço de Hilbert $\mathcal{E}^{(i)}$ da i-ésima partícula tal que a representação do op. $\hat{O}_i$ = matriz diagonal;

temos que.

tilibra

$$\hat{O}_1 = \sum_{i=1}^{\tilde{N}} \hat{O}_i = \sum_i \sum_\alpha |\alpha(i)\rangle \langle \alpha(i)|\hat{O}_i|\alpha(i)\rangle \langle \alpha(i)|$$

$\langle \alpha|\hat{O}|\alpha\rangle$: op. $\hat{O}$ apresenta a mesma representação em todos $\varepsilon^{(i)}$

$$= \sum_\alpha \langle \alpha|\hat{O}|\alpha\rangle \sum_i |\alpha(i)\rangle\langle\alpha(i)|$$

$= \hat{n}_\alpha$: veja abaixo

$$\hookrightarrow \hat{O}_1 = \sum_\alpha \langle \alpha|\hat{O}|\alpha\rangle\, a_\alpha^\dagger a_\alpha \qquad (194.1)$$

caso geral: Eqs. (192.3) e (194.1):

$$\hat{O}_1 = \sum_\alpha \sum_{\beta,\beta'} \langle \alpha|\hat{O}|\alpha\rangle \langle \beta|\alpha\rangle \langle \alpha|\beta'\rangle\, b_\beta^\dagger b_{\beta'}$$

$$= \sum_{\beta,\beta'} \langle \beta| \underbrace{\left(\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{O}|\alpha\rangle\langle\alpha| \right)}_{\hat{O}} |\beta'\rangle\, b_\beta^\dagger b_{\beta'}$$

ou $$\hat{O}_1 = \sum_{\alpha\alpha'} \langle \alpha|\hat{O}|\alpha'\rangle\, a_\alpha^\dagger a_{\alpha'} \qquad (194.2)$$

notar: $\hat{O}_1$: quadrático ops. de criação / destruição; depende elemento de matriz entre estados de 1 partícula.

Ex.: op. energia cinética (193.4),

considerando a representação de momento p/ os estados de partícula única, temos que

$$\langle \vec{p}|T|\vec{p}'\rangle = \langle \vec{p}|\frac{\hat{p}^2}{2m}|\vec{p}'\rangle = \frac{p^2}{2m}\delta(\vec{p}-\vec{p}')$$

tilibra

Eq. (194.2): $\hat{T} = \sum_{\vec{p}\,\vec{p}'} \langle \vec{p}|\hat{T}|\vec{p}'\rangle\, a^\dagger_{\vec{p}}\, a_{\vec{p}'}$

$$\hat{T} = \sum_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m}\, a^\dagger_{\vec{p}}\, a_{\vec{p}} \qquad (195.1)$$

notar: $a^\dagger_{\vec{p}}$ / $a_{\vec{p}}$: op. criação / destruição partícula (bóson) no estado de partícula única $|\vec{p}\rangle$

(veja discussão abaixo p/ detalhes)

· vamos verificar que

$$\hat{n}_\alpha = a^\dagger_\alpha a_\alpha = \sum_i |\alpha(i)\rangle\langle\alpha(i)|$$

Eq. (188.1) em termos op. simetrização (179.1):

$$\left(\sum_i |\alpha(i)\rangle\langle\alpha(i)|\right) |n_1 n_2 \ldots\rangle = \qquad (195.2)$$

$$= \underbrace{\left(\sum_i |\alpha(i)\rangle\langle\alpha(i)|\right)}_{(I)} \underbrace{\sqrt{\frac{N!}{\prod_i n_{\alpha_i}!}}}_{\mathbb{C}}\, S\, |\alpha_1(1)\ldots\alpha_N(N)\rangle$$

$$= \mathbb{C}\, S \underbrace{\sum_i |\alpha(i)\rangle\langle\alpha(i)|\alpha_1(1)\ldots\alpha_N(N)\rangle}_{n_\alpha\, |\alpha_1(1)\ldots\alpha_N(N)\rangle}, \text{ pois (I) op. simétrico}$$

pois termos não-nulos são tais que $\langle\alpha(i)|\alpha_i(i)\rangle \neq 0$, i.e., $\alpha = \alpha_i$!

$$= n_\alpha\, \mathbb{C}\, S\, |\alpha_1(1)\ldots\alpha_N(N)\rangle$$

$$= n_\alpha\, |n_1 n_2 \ldots\rangle = \hat{n}_\alpha\, |n_1 n_2 \ldots\rangle$$

· operadores de duas partículas ou dois corpos:

Definição: $\hat{O}_2 = \sum_{i<j=1}^{\sim} \hat{O}_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i\neq j} \hat{O}_{ij}$, $\qquad (195.3)$

tilibra

pois $\hat{O}_{ij} = \hat{O}_{ji}$.

Ex.: op. de interação entre pares de partículas,

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \qquad (196.1)$$

· similar op. de uma partícula, considerar base $|\alpha(i)\rangle$ tal que a representação op. O_{ij} seja uma matriz diagonal, i.e.,

$$\hat{O}_{ij} = \sum_{\alpha\alpha'} |\alpha(i)\,\alpha'(j)\rangle \langle\alpha(i)\,\alpha'(j)|\, \hat{O}_{ij}\, |\alpha(i)\,\alpha'(j)\rangle \langle\alpha(i)\,\alpha'(j)|$$

onde $|\alpha(i)\,\alpha'(j)\rangle = |\alpha(i)\rangle |\alpha'(j)\rangle \in \mathcal{E}^{(i)} \otimes \mathcal{E}^{(j)}$;

temos que,

$$\hat{O}_2 = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{O}_{ij}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{\alpha\alpha'} |\alpha(i)\,\alpha'(j)\rangle \langle\alpha(i)\,\alpha'(j)|\, \hat{O}_{ij}\, |\alpha(i)\,\alpha'(j)\rangle \langle\alpha(i)\,\alpha'(j)|$$

$\langle \alpha\alpha' | \hat{O} | \alpha\alpha' \rangle$:

: op. $\hat{O}$ apresenta a mesma representação nos subespaços $\mathcal{E}^{(i)} \otimes \mathcal{E}^{(j)}$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\alpha\alpha'} \langle \alpha\alpha' | \hat{O} | \alpha\alpha' \rangle \sum_{i \neq j} |\alpha(i)\,\alpha'(j)\rangle \langle\alpha(i)\,\alpha'(j)|$$

$= \hat{n}_\alpha \hat{n}_{\alpha'} - \delta_{\alpha\alpha'} \hat{n}_\alpha$: veja abaixo

como:

$$\hat{n}_\alpha \hat{n}_{\alpha'} - \delta_{\alpha\alpha'} \hat{n}_\alpha = a^\dagger_\alpha a_\alpha a^\dagger_{\alpha'} a_{\alpha'} - \delta_{\alpha\alpha'} a^\dagger_\alpha a_\alpha$$

Eq. (190.1) $\rightarrow = a^\dagger_{\alpha'} a_\alpha + \delta_{\alpha\alpha'}$

$$= a^\dagger_\alpha a^\dagger_{\alpha'} a_\alpha a_{\alpha'} = a^\dagger_\alpha a^\dagger_{\alpha'} a_{\alpha'} a_\alpha$$

tilibra

↳ $\hat{O}_2 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\alpha'} \langle \alpha\alpha' | \hat{O} | \alpha\alpha' \rangle \, a^\dagger_\alpha a^\dagger_{\alpha'} a_{\alpha'} a_\alpha$ (197.1)

notar ordem ops. !

caso geral : Eqs. (192.3) e (197.1) :

$$\hat{O}_2 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\alpha'} \sum_{\lambda\mu\nu\sigma} \langle \alpha\alpha' | \hat{O} | \alpha\alpha' \rangle \langle \lambda|\alpha\rangle \langle \mu|\alpha'\rangle \langle \alpha'|\nu\rangle \langle \alpha|\sigma\rangle \, *$$

$$* \, b^\dagger_\lambda b^\dagger_\mu b_\nu b_\sigma$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu\nu\sigma} \langle \lambda\mu | \underbrace{\left(\sum_{\alpha\alpha'} |\alpha\alpha'\rangle \langle \alpha\alpha' | \hat{O} | \alpha\alpha' \rangle \langle \alpha\alpha'| \right)}_{\hat{O}} |\sigma\nu\rangle \, *$$

$$* \, b^\dagger_\lambda b^\dagger_\mu b_\nu b_\sigma$$

ou $\hat{O}_2 = \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu\nu\sigma} \langle \lambda\mu | \hat{O} | \sigma\nu \rangle \, a^\dagger_\lambda a^\dagger_\mu a_\nu a_\sigma$ (197.2)

↑ notar ordem

notar: $\hat{O}_2$: quântico ops. de criação / destruição ;
depende elementos de matriz entre estados
de 2 partículas $|\lambda\mu\rangle = |\lambda\rangle \otimes |\mu\rangle \in \mathcal{E}^{(1)} \otimes \mathcal{E}^{(1)}$.

· vamos verificar que

$$\underbrace{\sum_{i \neq j} |\alpha(i)\alpha'(j)\rangle \langle \alpha(i)\alpha'(j)|}_{(\Pi)} = \hat{n}_\alpha \hat{n}_{\alpha'} - \delta_{\alpha,\alpha'} \hat{n}_\alpha$$

similar Eq. (195.2) :

$$(\Pi) \, |n_1 n_2 \ldots\rangle = (\Pi) \, \mathcal{C} \, S \, |\alpha_1(1) \ldots \alpha_N(N)\rangle$$

$$= \mathcal{C} \, S \, (\Pi) \, |\alpha_1(1) \ldots \alpha_N(N)\rangle$$

tilibra

$$= \mathbb{C}\,S \sum_{i\neq j} |\alpha(i)\alpha'(j)\rangle \langle \alpha(i)\alpha'(j)| \left(|\alpha_1(1)\rangle |\alpha_2(2)\rangle \ldots |\alpha_N(N)\rangle \right)$$

$$|\alpha_1(1)\rangle \ldots \langle \alpha(i)|\alpha_i(i)\rangle \ldots \langle \alpha'(j)|\alpha_j(j)\rangle \ldots |\alpha_N(N)\rangle$$

$$= 1, \text{ se } \alpha = \alpha_i \qquad = 1, \text{ se } \alpha' = \alpha_j$$

$$= \begin{cases} n_\alpha n_{\alpha'} |\alpha_1(1) \ldots \alpha_N(N)\rangle, & \text{se } \alpha \neq \alpha' \\ n_\alpha (n_\alpha - 1) |\alpha_1(1) \ldots \alpha_N(N)\rangle, & \text{se } \alpha = \alpha' \end{cases}$$

$$= \mathbb{C}\,S \left(n_\alpha n_{\alpha'} - n_\alpha \delta_{\alpha\alpha'} \right) |\alpha_1(1) \ldots \alpha_N(N)\rangle$$

$$= \left(n_\alpha n_{\alpha'} - n_\alpha \delta_{\alpha\alpha'} \right) \mathbb{C}\,S\, |\alpha_1(1) \ldots \alpha_N(N)\rangle$$

$$|n_1 n_2 \ldots\rangle$$

$$= \left(\hat{n}_\alpha \hat{n}_{\alpha'} - \delta_{\alpha\alpha'} \hat{n}_\alpha \right) |n_1 n_2 \ldots\rangle \qquad (198.1)$$

(B) Fermions.

similar Eq. (188.1), Eq. (186.1) pode ser escrita como

$$|n_1 n_2 \ldots\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P P\, |\alpha_1(1) \ldots \alpha_N(N)\rangle, \qquad (198.2)$$

alpha gamma

onde n_α : número de ocupação : # partículas no estado de partícula única $|\alpha\rangle$, $\alpha = 1, 2, \ldots$;

$n_\alpha = 0$ ou 1 ⊕ vínculo $\sum_{\alpha>,1} n_\alpha = N$.

vetores $|n_1 n_2 \ldots\rangle$: base espaço vetorial antisimétrico de N-partículas $\mathcal{E}_N^{(A)}$;

similar, é interessante considerar o espaço de Fock:

tilibra

$$\mathcal{F} = \mathcal{E}^{(A)}_{N=0} \oplus \mathcal{E}^{(A)}_{N=1} \oplus \mathcal{E}^{(A)}_{N=2} \oplus \ldots = \bigoplus_{N \geq 0} \mathcal{E}^{(A)}_{N}$$

vetores $|n_1 n_2 \ldots\rangle$: base ortonormal, i.e.,

$$\langle n'_1 n'_2 \ldots | n_1 n_2 \ldots \rangle = \delta_{n'_1, n_1} \delta_{n'_2, n_2} \ldots$$

(199.1)

$$\underline{\underline{e}} \sum_{n_1, n_2, \ldots = 0, 1} |n_1 n_2 \ldots\rangle\langle n_1 n_2 \ldots| = \hat{1}$$

· $|0\rangle = |0\,0 \ldots\rangle \in \mathcal{E}^{(A)}_{N=0}$: estado $N=0$ partículas : vácuo (estado de referência)

· sobre os operadores de criação e destruição ;
a fim de preservar a propriedade (187.1), definimos

$$a^\dagger_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle = (1 - n_\alpha)(-1)^{\sum_{\beta<\alpha} n_\beta} |n_1 n_2 \ldots n_\alpha + 1 \ldots\rangle$$

$$\underline{\underline{e}} \; a_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle = n_\alpha (-1)^{\sum_{\beta<\alpha} n_\beta} |n_1 n_2 \ldots n_\alpha - 1 \ldots\rangle$$

(199.2)

(*)

onde,

$a^\dagger_\alpha$: op. de criação : adiciona 1 partícula (férmion) no estado de partícula única $|\alpha\rangle$ se $n_\alpha = 0$;

$$\text{se } n_\alpha = 1 \rightarrow a^\dagger_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha = 1, \ldots\rangle = 0 ; \qquad (199.3)$$

a_α : op. de destruição : remove 1 partícula (férmion) do estado de partícula única $|\alpha\rangle$ se $n_\alpha = 1$;

$$\text{se } n_\alpha = 0 \rightarrow a_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha = 0 \ldots\rangle = 0 ; \qquad (199.4)$$

tilibra

· sobre a definição (199.2),

$$a_\alpha^\dagger \,|\, n'_1\, n'_2 \ldots n'_\alpha \ldots\rangle = (1 - n'_\alpha)(-1)^{\sum_{\beta<\alpha} n'_\beta} \,|\, n'_1\, n'_2 \ldots, n'_\alpha + 1, \ldots\rangle$$

↳ H.C. * $|n_1\, n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle$:

$$\langle n'_1\, n'_2 \ldots n'_\alpha \ldots | a_\alpha | n_1\, n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle =$$

$$= (1 - n'_\alpha)(-1)^{\sum_{\beta<\alpha} n'_\beta} \langle n'_1\, n'_2 \ldots, n'_\alpha + 1, \ldots | n_1\, n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle$$

$$\prod_{r \neq \alpha} \delta_{n'_r, n_r}\, \delta_{n'_\alpha + 1, n_\alpha}$$

$$= n_\alpha (-1)^{\sum_{\beta<\alpha} n_\beta} \prod_{r \neq \alpha} \delta_{n'_r, n_r}\, \delta_{n'_\alpha, n_\alpha - 1}$$

$$= n_\alpha (-1)^{\sum_{\beta<\alpha} n_\beta} \langle n'_1\, n'_2 \ldots n'_\alpha \ldots | n_1\, n_2 \ldots, n_\alpha - 1, \ldots\rangle$$

como $\langle n'_1\, n'_2 \ldots n'_\alpha \ldots |$ é arbitrário → definição op. a_α

notar: $(1 - n'_\alpha)\, \delta_{n'_\alpha + 1, n_\alpha} = n_\alpha\, \delta_{n'_\alpha, n_\alpha - 1}$

$n'_\alpha = 0 \rightarrow n_\alpha = 1$: $\quad 1 \quad = \quad 1$

$n'_\alpha = 1 \rightarrow n_\alpha = 0$: $\quad 0 \quad = \quad 0$

tilibra

importante: ≠ bósons, aqui é necessário escolher uma ordem p/ os estados de 1 partícula ~ fotón (*);

fotón (*) ~ antisimetria dos estados $|\psi_\alpha\rangle$.

· álgebra: verifica-se que os ops. a_α e $a^\dagger_\alpha$ satisfazem as seguintes relações de anticomutação:

$$\{a_\alpha, a_\beta\} = \{a^\dagger_\alpha, a^\dagger_\beta\} = 0 \quad \text{e} \quad \{a_\alpha, a^\dagger_\beta\} = \delta_{\alpha,\beta}, \qquad (200.1)$$

onde $\{A, B\} = AB + BA$

notar:

$\{a^\dagger_\alpha, a^\dagger_\alpha\} = 0 \rightarrow a^\dagger_\alpha a^\dagger_\alpha = -a^\dagger_\alpha a^\dagger_\alpha = 0$: ok. c/ Eq. (199.3)

$\{a_\alpha, a_\alpha\} = 0 \rightarrow a_\alpha a_\alpha = -a_\alpha a_\alpha = 0$: ok c/ Eq. (199.4)

sobre a álgebra:

(i) se $\alpha \neq \beta$,

$$a_\alpha a^\dagger_\beta |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots n_\beta \ldots\rangle =$$

$$= (1 - n_\beta)(-1)^{\sum_{r<\beta} n_r} a_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots, n_\beta + 1, \ldots\rangle$$

$$= (1 - n_\beta) n_\alpha (-1)^{\sum_{r<\beta} n_r} (-1)^{\sum_{r<\alpha} n_r} |n_1 n_2 \ldots, n_\alpha - 1, \ldots, n_\beta + 1, \ldots\rangle$$

$$(-1)^{n_\alpha} (-1)^{\sum_{\alpha<r<\beta} n_r}$$

$$\text{e} \quad a^\dagger_\beta a_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots n_\beta \ldots\rangle =$$

$$= n_\alpha (-1)^{\sum_{r<\alpha} n_r} a^\dagger_\beta |n_1 n_2 \ldots, n_\alpha - 1, \ldots n_\beta \ldots\rangle$$

tilibra

$$= (1 - n_\beta)\, n_\alpha\, (-1)^{\sum_{r<\alpha} n_r}\, (-1)^{\sum_{r<\alpha} n_r}\, (-1)^{n_\alpha - 1}\, (-1)^{\sum_{\alpha<r<\beta} n_r} *$$

$$\underbrace{\qquad\qquad\qquad\qquad}_{1}$$

$$* \,|n_1\, n_2 \ldots, n_\alpha - 1, \ldots, n_\beta + 1, \ldots\rangle ;$$

se $n_\alpha = 0$ → os dois termos são nulos;

se $n_\alpha = 1$ → $(-1)^{n_\alpha} = -1$ e $(-1)^{n_\alpha - 1} = +1$;

↳ p/ os dois casos $a_\alpha a^\dagger_\beta + a^\dagger_\beta a_\alpha = 0$!

(ii) se $\alpha = \beta$,

$$a_\alpha a^\dagger_\alpha \,|n_1\, n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle = (1 - n_\alpha)\,(-1)^{\sum_{r<\alpha} n_r}\, a_\alpha \,|n_1\, n_2 \ldots, n_\alpha + 1, \ldots\rangle$$

$$= (1 - n_\alpha)(1 + n_\alpha)\,|n_1\, n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle$$

$$\text{e} \quad a^\dagger_\alpha a_\alpha \,|n_1\, n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle = n_\alpha\,(-1)^{\sum_{r<\alpha} n_r}\, a^\dagger_\alpha \,|n_1\, n_2 \ldots, n_\alpha - 1, \ldots\rangle$$

$$= n_\alpha (1 - n_\alpha + 1)\,|n_1\, n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle$$

(201.1)

como:

	$n_\alpha = 0$	$n_\alpha = 1$
$(1 - n_\alpha)(1 + n_\alpha)$	1	0
$n_\alpha (2 - n_\alpha)$	0	1

↳ $(a_\alpha a^\dagger_\alpha + a^\dagger_\alpha a_\alpha)\,|n_1\, n_2 \ldots\rangle = |n_1\, n_2 \ldots\rangle$

Exercício: utilizar o procedimento acima e verificar as demais relações de anticomutação (200.1).

· similar Eq. (192.1), os vetores de base $|n_1\, n_2 \ldots\rangle$ podem ser escritos em termos do estado de vácuo $|0\rangle$ e dos ops. de criação:

tilibra

$$|n_1 n_2 \ldots\rangle = (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \ldots |0\rangle \; ; \; n_i = 0 \text{ ou } 1 \qquad (202.1)$$

Ex.:

$$a_3^\dagger |n_1 n_2, n_3 = 0, \ldots\rangle = a_3^\dagger \left((a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \ldots |0\rangle \right)$$

$$= (-1)^{n_1} (a_1^\dagger)^{n_1} a_3^\dagger (a_2^\dagger)^{n_2} \ldots |0\rangle$$

Eq. (200.1) ↓

$$= (-1)^{n_1+n_2} (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} a_3^\dagger \ldots |0\rangle = (-1)^{n_1+n_2} |n_1 n_2, n_3 = 1, \ldots\rangle :$$

: OK c/ Eq. (199.2) !

notar: ordem dos ops. $a_\alpha^\dagger$ em (202.1) é importante.

· sobre a representação de operadores em termos de ops. de criação e destruição;
similar caso bosônico, temos que,

· op. número de partícula:

$$\hat{n}_\alpha = a_\alpha^\dagger a_\alpha \qquad (202.2)$$

de fato, Eq. (201.1):

$$\hat{n}_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle = n_\alpha (2 - n_\alpha) |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle =$$

$$= \begin{cases} 0, & \text{se } n_\alpha = 0 \\ 1, & \text{se } n_\alpha = 1 \end{cases}$$

$$= n_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle$$

· ops. de uma partícula e ops. de duas partículas:

tilibra

$$\hat{O}_1 = \sum_{\alpha\alpha'} \langle \alpha | O | \alpha' \rangle \, a^\dagger_\alpha a_{\alpha'}$$

(203.1)

$$\hat{O}_2 = \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu\nu\sigma} \langle \lambda\mu | \hat{O} | \sigma\nu \rangle \, a^\dagger_\lambda a^\dagger_\mu a_\nu a_\sigma$$

(*)

Obs.: p/ bósons, ordem dos ops. em (*) não é importante
p/ férmions, " " " " " é " !

Exercício: mostrar que, p/ férmions:

$$\sum_i |\alpha(i)\rangle\langle\alpha(i)| = a^\dagger_\alpha a_\alpha$$

(203.2)

$$\text{e} \quad \sum_{i \neq j} |\alpha(i)\alpha'(j)\rangle\langle\alpha(i)\alpha'(j)| = \hat{n}_\alpha \hat{n}_{\alpha'} - \delta_{\alpha,\alpha'} \hat{n}_\alpha = (\text{II})$$

· notar: $(\text{II}) = a^\dagger_\alpha a_\alpha a^\dagger_{\alpha'} a_{\alpha'} - \delta_{\alpha\alpha'} a^\dagger_\alpha a_\alpha = - a^\dagger_\alpha a^\dagger_{\alpha'} a_\alpha a_{\alpha'}$

$= - a^\dagger_{\alpha'} a_\alpha + \delta_{\alpha,\alpha'}$

Eq. (200.1)

$= + a^\dagger_\alpha a^\dagger_{\alpha'} a_{\alpha'} a_\alpha$ (*)

· próxima etapa: devido às analogias acima, é possível discutir os sistemas de férmions e bósons de uma única forma;
nesse caso, é interessante escrever as álgebras (190.1) e (200.1) como:

$$[a_\alpha, a_\beta]_\mp = [a^\dagger_\alpha, a^\dagger_\beta]_\mp = 0 \quad \text{e} \quad [a_\alpha, a^\dagger_\beta]_\mp = \delta_{\alpha\beta}$$

(203.3)

onde $[A,B]_+ = \{A,B\} = AB + BA$

$[A,B]_- = [A,B] = AB - BA$

tilibra

· Operadores de campo.

Lembrar Eq. (192.3): $b^\dagger_\beta = \sum_\alpha \langle \alpha | \beta \rangle a^\dagger_\alpha$ e $b_\beta = \sum_\alpha \langle \beta | \alpha \rangle a_\alpha$

considerar, caso particular, estados de uma partícula

$|\beta\rangle = |\vec{r}\rangle$;

se $\langle \vec{r} | \alpha \rangle = \varphi_\alpha(\vec{r})$, temos que

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_\alpha \varphi_\alpha(\vec{r})\, a_\alpha$$

$$\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) = \sum_\alpha \varphi^*_\alpha(\vec{r})\, a^\dagger_\alpha \qquad \text{: ops. de campo} \qquad (204.1)$$

nesse caso,

$\hat{\psi}^\dagger(\vec{r})$: adiciona 1 partícula ao estado partícula única $|\vec{r}\rangle$

$\hat{\psi}(\vec{r})$: remove " " do " " " "

· álgebra: Eq. (203.3)

i.e. $[\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}(\vec{r}')]_\mp = [\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')]_\mp = 0$

e $[\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')]_\mp = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$ (204.2)

de fato, Eqs. (203.3) e (204.1):

$$[\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')]_\mp = \sum_{\alpha\beta} \varphi_\alpha(\vec{r})\, \varphi^*_\beta(\vec{r}')\, [a_\alpha, a^\dagger_\beta]_\mp$$

$$= \sum_\alpha \varphi_\alpha(\vec{r})\, \varphi^*_\alpha(\vec{r}') = \sum_\alpha \langle \vec{r} | \alpha \rangle \langle \alpha | \vec{r}' \rangle = \langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle$$

· sobre a expansão dos operadores de uma e duas partículas em termos dos operadores de campo.

tilibra

Eq. (203.1) p/ $|\alpha\rangle = |\vec{n}\rangle$,

$$\hat{O}_1 = \int d^3n\, d^3n' \langle \vec{n}|\hat{O}|\vec{n}'\rangle \hat{\Psi}^\dagger(\vec{n}) \hat{\Psi}(\vec{n}')$$

$$= \int d^3n\, d^3n' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{n}) \langle \vec{n}|\hat{O}|\vec{n}'\rangle \hat{\Psi}(\vec{n}') \quad \text{: forma geral, inclui elementos de matriz diferenciais!} \qquad (205.1)$$

$$\hat{O}_2 = \frac{1}{2}\int d^3n_1 d^3n_2 d^3n_3 d^3n_4 \langle \vec{n}_1\vec{n}_2|\hat{O}|\vec{n}_4\vec{n}_3\rangle \hat{\Psi}^\dagger(\vec{n}_1)\hat{\Psi}^\dagger(\vec{n}_2)\hat{\Psi}(\vec{n}_3)\hat{\Psi}(\vec{n}_4)$$

$$= \frac{1}{2}\int d^3n_1 d^3n_2 d^3n_3 d^3n_4 \hat{\Psi}^\dagger(\vec{n}_1)\hat{\Psi}^\dagger(\vec{n}_2)\langle \vec{n}_1\vec{n}_2|\hat{O}|\vec{n}_4\vec{n}_3\rangle \hat{\Psi}(\vec{n}_3)\hat{\Psi}(\vec{n}_4) \qquad (205.2)$$

Ex. 1: op. de energia cinética (193.4),

como $\langle \vec{n}|\frac{\hat{p}^2}{2m}|\vec{n}'\rangle = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\delta(\vec{n}-\vec{n}')$: elemento de matriz, estados de partícula única $|\vec{n}\rangle$

↳ Eq. (205.1): $\hat{T} = \int d^3n\, d^3n' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{n})\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\delta(\vec{n}-\vec{n}')\right)\hat{\Psi}(\vec{n}')$

$$\hat{T} = \int d^3n\, \hat{\Psi}^\dagger(\vec{n})\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right)\hat{\Psi}(\vec{n}) \qquad (205.3)$$

Ex. 2: potencial externo $U = U(\vec{n})$.

$$\hat{U} = \sum_{i=1}^{\tilde{N}} \hat{U}(\vec{n}_i)$$

como $\langle \vec{n}|\hat{U}|\vec{n}'\rangle = U(\vec{n})\delta(\vec{n}-\vec{n}')$, temos que

$$\hat{U} = \int d^3n\, \hat{\Psi}^\dagger(\vec{n})U(\vec{n})\hat{\Psi}(\vec{n}) = \int d^3n\, U(\vec{n})\hat{\Psi}^\dagger(\vec{n})\hat{\Psi}(\vec{n}) \qquad (205.4)$$

tilibra

Ex. 3: interação entre duas partículas (196.1).

como $\langle \vec{r}_1\, \vec{r}_2 | V | \vec{r}_4\, \vec{r}_3 \rangle = V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\, \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_4)\, \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_3)$

↳ Eq. (205.2) ⊕ $\vec{r}_1 \to \vec{r}$ e $\vec{r}_2 \to \vec{r}'$:

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int d^3r\, d^3r'\, \hat{\psi}^\dagger(\vec{r})\, \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')\, V(\vec{r}, \vec{r}')\, \hat{\psi}(\vec{r}')\, \hat{\psi}(\vec{r}) \qquad (206.1)$$

· notar: Eqs. (205.3), (205.4) e (206.1) → hamiltoniano p/ sistema de partículas interagentes sob potencial externo $U(\vec{r})$ em termos dos ops. de campo:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} + \hat{V} \qquad (206.2)$$

· importante: nas eqs. acima $\hat{\psi}(\vec{r})$ não é uma função de onda mas um operador!

Ex. 4: operador densidade de partículas (175.2).

$$\hat{\rho}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$$

como $\hat{\rho}(\vec{r})$ é um op. de uma partícula é

$$\langle \vec{r}_1 | \delta(\vec{r} - \vec{r}') | \vec{r}_2 \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}_1)\, \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

↑ considerar como parâmetro!

↳ $$\hat{\rho}(\vec{r}) = \int d^3r_1\, d^3r_2\, \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1) \langle \vec{r}_1 | \delta(\vec{r} - \vec{r}') | \vec{r}_2 \rangle \hat{\psi}(\vec{r}_2)$$

$$\hat{\rho}(\vec{r}) = \hat{\psi}^\dagger(\vec{r})\, \hat{\psi}(\vec{r}) \qquad (206.3)$$

Eqs. (193.2) e (206.3):

tilibra

$\hat{N} = \int d^3n\, \hat{\rho}(\vec{n}) = \int d^3n\, \hat{\psi}^\dagger(\vec{n})\, \hat{\psi}(\vec{n})$: op. número total de partículas (207.1)

Ex. 5: operador densidade de corrente de partículas (175.2), verifica-se que

$$\vec{J}(\vec{n}) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\hat{\psi}^\dagger(\vec{n})\,\vec{\nabla}\,\hat{\psi}(\vec{n}) - (\vec{\nabla}\,\hat{\psi}^\dagger(\vec{n}))\,\hat{\psi}(\vec{n})\right) \quad (207.2)$$

· op. de campo $\hat{\psi}(\vec{n})$ na versão de Heisenberg,

$$\hat{\psi}(\vec{n},t) = U^\dagger(t,0)\,\hat{\psi}(\vec{n})\,U(t,0) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\,\hat{\psi}(\vec{n})\,e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (207.3)$$

p/ hamiltoniano $\hat{H}$ = Eq. (206.2), verifica-se que a eq. de movimento p/ $\hat{\psi}(\vec{n},t)$ é dada por:

$$i\hbar\partial_t\hat{\psi}(\vec{n},t) = \left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + U(\vec{n})\right)\hat{\psi}(\vec{n},t) + \int d^3n'\, \hat{\psi}^\dagger(\vec{n}',t)\,V(\vec{n},\vec{n}')\,\hat{\psi}(\vec{n}',t)\,\hat{\psi}(\vec{n},t) : \quad (207.4)$$

: equação de campo

Eq. (207.4): similar eq. de Schrödinger não-linear p/ uma função de onda $\psi(\vec{n},t)$

notar: Eqs. (206.3), (207.2) e (207.4) são formalmente iguais às correspondentes eqs. p/ um sistema de uma única partícula descrita pela função de onda $\psi(\vec{n},t)$; entretanto, aqui, p/ sistema N-partículas, $\hat{\psi}(\vec{n},t)$ é um operador; essa analogia → termo segunda quantização!

tilibra

Obs.: p/ detalhes Eq. (207.4), veja Sec. 1.5, Schwabe

· Representação de momento.

ideia: considerar estados de partícula única $|\alpha\rangle = |\vec{p}\rangle$: autoestados op. momento e determinar a expansão ops. $\hat{O}_1$ e $\hat{O}_2$ em termos ops. de criação / destruição;

Lembrar pg. 141: partícula livre na "caixa" ⊕ condições periódicas de contorno:

$$\langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad ; \quad k_i = \frac{2\pi}{L} n_i \quad ; \quad i = x, y, z$$

$$n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

(208.1)

$$\langle \vec{k} | \vec{k}' \rangle = \int d^3r \, \langle \vec{k} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \vec{k}' \rangle = \int d^3r \, \varphi^*_{\vec{k}}(\vec{r}) \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \delta_{\vec{k},\vec{k}'}$$

· ops. de criação e destruição:

$a^\dagger_{\vec{k}}$: adiciona 1 partícula ao estado partícula única $|\vec{k}\rangle$

$a_{\vec{k}}$: remove " " do " " " "

· op. número de partículas (193.2) e (202.2):

$$\hat{n}_{\vec{k}} = a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}} \qquad (208.2)$$

· op. de uma partícula (194.2) e (203.1):

$$\hat{O}_1 = \sum_{\vec{k},\vec{p}} \langle \vec{k} | \hat{O} | \vec{p} \rangle \, a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{p}} \qquad (208.3)$$

· op. de duas partículas (197.2) e (203.1):

tilibra

$$\hat{O}_2 = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\vec{p},\vec{q},\vec{k}'} \langle \vec{k}\,\vec{p} | \hat{V} | \vec{k}'\vec{q} \rangle\, a^\dagger_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{q}} a_{\vec{k}'} \qquad (209.1)$$

Ex. 1 : op. de energia cinética (193.4),

como $\langle \vec{k} | \frac{\hbar^2 \hat{k}^2}{2m} | \vec{p} \rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \delta_{\vec{k},\vec{p}}$, temos que

$$\hat{T} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}} \qquad (209.2)$$

Ex. 2 : potencial externo $U = U(\hat{r})$,

como $\langle \vec{k} | \hat{U} | \vec{p} \rangle = \int d^3r\, d^3r' \underbrace{\langle \vec{k} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \hat{U} | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \vec{p} \rangle}$

$$\frac{1}{L^3} \exp(-i\vec{k}\cdot\vec{r})\, U(\vec{r})\, \delta(\vec{r}-\vec{r}')\, \exp(+i\vec{p}\cdot\vec{r}')$$

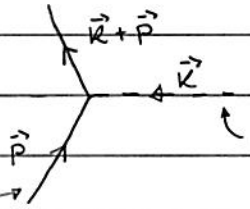
$$= \frac{1}{L^3} \int \underbrace{d^3r\, e^{-i(\vec{k}-\vec{p})\cdot\vec{r}}\, U(\vec{r})}$$

$= U_{\vec{k}-\vec{p}}$: transf. Fourier $U(\vec{r})$

$$\hookrightarrow \hat{U} = \sum_{\vec{k},\vec{p}} \langle \vec{k} | \hat{U} | \vec{p} \rangle a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{p}} = \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{k},\vec{p}} U_{\vec{k}-\vec{p}}\, a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{p}}$$

$$= \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{k},\vec{p}} U_{\vec{k}}\, a^\dagger_{\vec{k}+\vec{p}}\, a_{\vec{p}} \qquad (209.3)$$

esquematicamente:



tilibra

Ex. 3: interação entre duas partículas (196.1).

como $\langle \vec{k}\,\vec{p}\,|\,\hat{V}\,|\,\vec{k}'\vec{q}\rangle = (I) =$

$$= \int d^3n_1 d^3n_2 d^3n_3 d^3n_4 \langle \vec{k}|\vec{n}_1\rangle\langle\vec{p}|\vec{n}_2\rangle \underbrace{\langle \vec{n}_1\vec{n}_2|V|\vec{n}_4\vec{n}_3\rangle}_{V(\vec{n}_1,\vec{n}_2)\,\delta(\vec{n}_1-\vec{n}_4)\,\delta(\vec{n}_2-\vec{n}_3)} * \langle\vec{n}_4|\vec{k}'\rangle\langle\vec{n}_3|\vec{q}\rangle$$

$$= \frac{1}{L^6}\int d^3n_1 d^3n_2\, e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{n}_1}\, e^{-i(\vec{p}-\vec{q})\vec{n}_2}\, V(\vec{n}_1,\vec{n}_2)$$

hipótese: $V(\vec{n}_1,\vec{n}_2) = V(\vec{n}_1-\vec{n}_2)$

se $\vec{n}_1 \to \vec{n}+\vec{n}_2$ e $\vec{n}_2 \to \vec{n}'$

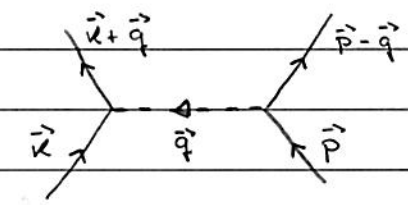
$$\hookrightarrow (II) = \frac{1}{L^6}\underbrace{\int d^3n' \exp\left(-i(\vec{k}-\vec{k}'+\vec{p}-\vec{q})\cdot\vec{n}'\right)}_{L^3\,\delta_{\vec{k}-\vec{k}'+\vec{p}-\vec{q},0}} \underbrace{\int d^3n\, e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{n}} V(\vec{n})}_{=V_{\vec{k}-\vec{k}'}}$$

dessa forma, Eq. (209.1):

$$\hat{O}_2 = \frac{1}{2L^3}\sum_{\vec{k},\vec{p},\vec{q}} \underbrace{V_{\vec{q}-\vec{p}}\, a^\dagger_{\vec{k}'-\vec{p}+\vec{q}}\, a^\dagger_{\vec{p}}\, a_{\vec{q}}\, a_{\vec{k}'}}_{V_{\vec{p}}\, a^\dagger_{\vec{k}'+\vec{p}}\, a^\dagger_{\vec{q}-\vec{p}}\, a_{\vec{q}}\, a_{\vec{k}'}\ :\ -\vec{p}\to\vec{p}-\vec{q}}$$

ou $$\hat{O}_2 = \frac{1}{2L^3}\sum_{\vec{k},\vec{p},\vec{q}} V_{\vec{q}}\, a^\dagger_{\vec{k}+\vec{q}}\, a^\dagger_{\vec{p}-\vec{q}}\, a_{\vec{p}}\, a_{\vec{k}} \qquad (210.1)$$

esquematicamente, similar pg. 209:



tilibra

· Eqs. (209.2), (209.3) e (210.1):

$$H = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{k},\vec{p}} U_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{k}+\vec{p}} a_{\vec{p}} +$$

$$+ \frac{1}{2L^3} \sum_{\vec{k},\vec{p},\vec{q}} V_{\vec{q}} a^\dagger_{\vec{k}+\vec{q}} a^\dagger_{\vec{p}-\vec{q}} a_{\vec{p}} a_{\vec{k}} \quad : \qquad (211.1)$$

: hamiltoniano (forma geral) sistema N-partículas (bósons/férmions) interagentes sob potencial externo $U(\vec{r})$

Obs.: comparar Eq. (211.1) c/ Eq. (206.2), equivalente na representação de coordenadas.

Ex. 4: operador densidade de partículas, como Eqs. (204.1) e (208.1):

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} a_{\vec{k}} \quad e \quad \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} a^\dagger_{\vec{k}} \qquad (211.2)$$

↳ Eq. (206.3): $\hat{\rho}(\vec{r}) = \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}'}$

considerando a transf. de Fourier:

$$\hat{\rho}(\vec{q}) = \int d^3r\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\, \hat{\rho}(\vec{r}) = \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} \underbrace{\int d^3r\, e^{-i(\vec{q}+\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}}}_{L^3\,\delta_{\vec{k}',\vec{k}+\vec{q}}} a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}'}$$

↳ $$\hat{\rho}(\vec{q}) = \sum_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}+\vec{q}} \quad : \qquad (211.3)$$

: comparar c/ Eq. (208.2): número ocupação estado partícula única $|\vec{k}\rangle$!

tilibra

· sobre o spin das partículas;

ideia: incluir explicitamente o número quântico spin;

· p/ ops. de campo (204.1):

$\hat{\psi}(\vec{r}) \to \hat{\psi}_\sigma(\vec{r})$, onde $\hbar\sigma$: autovalores S_z.

nesse caso, a álgebra (204.2) assume a forma:

$$[\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}')]_\pm = [\hat{\psi}^\dagger_\sigma(\vec{r}), \hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(\vec{r}')]_\pm = 0$$

$$\Leftrightarrow [\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}), \hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(\vec{r}')]_\pm = \delta(\vec{r}-\vec{r}')\,\delta_{\sigma\sigma'} \qquad (212.1)$$

notar, e.g.,

(i) op. densidade (206.3):

$$\hat{\rho}(\vec{r}) = \sum_\sigma \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\vec{r})\,\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) \qquad (212.2)$$

(ii) hamiltoniano (206.2) p/ interação entre as partículas independente spin:

$$H = \sum_\sigma \int d^3r\; \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + U(\vec{r})\right) \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3r\, d^3r'\; \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\vec{r})\,\hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(\vec{r}')\,V(\vec{r},\vec{r}')\,\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}')\,\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) \qquad (212.3)$$

nesse caso: $\vec{r} \to (\vec{r},\sigma)$

$\vec{r}' \to (\vec{r}',\sigma')$

Ex.: operador densidade de spins.

similar Eq. (175.2), podemos definir:

tilibra

$$\hat{S}^{\alpha}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)\, S_i^{\alpha} \quad ; \quad \alpha = x, y, z \qquad (213.1)$$

em termos dos ops. de campo;

como:

$$\langle \vec{r}_1, \sigma_1 | \delta(\vec{r} - \vec{r}') S^{\alpha} | \vec{r}_2 \sigma_2 \rangle =$$

$$= \langle \vec{r}_1 | \delta(\vec{r} - \vec{r}') | \vec{r}_2 \rangle \langle \sigma_1 | S^{\alpha} | \sigma_2 \rangle$$

$$= \delta(\vec{r} - \vec{r}_1)\, \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\, S^{\alpha}_{\sigma_1, \sigma_2}$$

em particular, p/ férmions spin-½, temos que:

$$\hat{S}^{\alpha}(\vec{r}) = \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int d^3 r_1\, d^3 r_2\, \hat{\psi}^{\dagger}_{\sigma_1}(\vec{r}_1) \langle \vec{r}_1 \sigma_1 | \delta(\vec{r} - \vec{r}') S^{\alpha} | \vec{r}_2 \sigma_2 \rangle \hat{\psi}_{\sigma_2}(\vec{r}_2)$$

$$= \frac{1}{2} \hbar \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \hat{\psi}^{\dagger}_{\sigma_1}(\vec{r})\, \sigma^{\alpha}_{\sigma_1, \sigma_2}\, \hat{\psi}_{\sigma_2}(\vec{r})$$

ou (213.2)

$$\vec{S}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \hbar \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \hat{\psi}^{\dagger}_{\sigma_1}(\vec{r})\, \hat{\sigma}_{\sigma_1 \sigma_2}\, \hat{\psi}_{\sigma_2}(\vec{r}),$$

onde $\hat{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$

tilibra

· Aplicações segunda quantização.

Ex. 1: gás de férmions spin-½ não interagentes

considerar: sistema N férmions livres, spin-½,

temperatura $T = 0$;

hamiltoniano (211.1):

$$H = \sum_{\vec{k}} \sum_{\sigma} \epsilon(\vec{k})\, C^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} C_{\vec{k}\sigma} \quad ; \quad \epsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad (214.1)$$

onde

$C^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}$: op. criação partícula no estado de partícula única $|\vec{k}\sigma\rangle$

$C_{\vec{k}\sigma}$: " destruição " " " " " " $|\vec{k}\sigma\rangle$

e álgebra (200.1): $\{C_{\vec{k}\sigma}, C_{\vec{p}\sigma'}\} = \{C^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}, C^{\dagger}_{\vec{p}\sigma'}\} = 0$

$$\{C_{\vec{k}\sigma}, C^{\dagger}_{\vec{p}\sigma'}\} = \delta_{\vec{k},\vec{p}}\, \delta_{\sigma\sigma'} \qquad (214.2)$$

estado fundamental:

$$|\Phi_0\rangle = \prod_{\substack{\vec{k} \\ k<k_F}} \prod_{\sigma} C^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} |0\rangle \qquad (214.3)$$

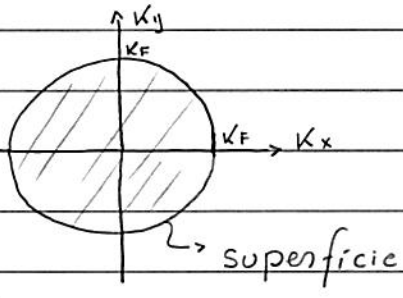
($|0\rangle$: vácuo)

i.e., todos os estados de partícula única $|\vec{k}\rangle$ c/ $k < k_F$ estão duplamente ocupados

k_F : número de onda de Fermi

esquematicamente:

(2-D)



tilibra

Definição: superfície de Fermi: superfície que separa os estados ocupados $|\vec{k}| \leq k_F$ do estados vazios $|\vec{k}| > k_F$

· propriedades estado fundamental.

· valor esperado op. número de partículas (208.2):

$$n_{\vec{p}\sigma} = \langle \Phi_0 | \hat{n}_{\vec{p}\sigma} | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | c^\dagger_{\vec{p}\sigma} c_{\vec{p}\sigma} | \Phi_0 \rangle = \begin{cases} 1, \text{ se } p \leq k_F \\ 0, \text{ se } p > k_F \end{cases}$$

Eq. (202.2) $\rightsquigarrow = n_{\vec{p}\sigma} | \Phi_0 \rangle$

(215.1)

Eq. (215.1): ocupação do estado de partícula única $|\vec{k}\sigma\rangle$

como $\frac{1}{L^3} \sum_{\vec{k}} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$, temos que

$$N = \sum_{\vec{p}\sigma} n_{\vec{p}\sigma} = 2 \cdot \sum_{|\vec{p}| < k_F} 1 = 2 \cdot \frac{L^3}{(2\pi)^3} \underbrace{\int_0^{k_F} k^2 dk \int d\Omega}_{4\pi k_F^3/3} = \frac{V k_F^3}{3\pi^2}$$

onde $V = L^3$

ou $k_F^3 = 3\pi^2 \frac{N}{V} = 3\pi^2 n$: relação entre k_F e a densidade de partículas n

Definição: $p_F = \hbar k_F$: momento de Fermi (215.2)

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \text{ : energia de Fermi}$$

· valor esperado do op. densidade (212.2):

$$\langle \hat{\rho}(\vec{r}) \rangle = \sum_\sigma \langle \Phi_0 | \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\vec{r}) \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) | \Phi_0 \rangle \oplus \text{Eq. (211.2)}:$$

tilibra

↳ $\langle \hat{\rho}(\vec{n}) \rangle = \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \sum_{\sigma} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{n}} \underbrace{\langle \Phi_0 | C^\dagger_{\vec{k}\sigma} C_{\vec{k}'\sigma} | \Phi_0 \rangle}_{\delta_{\vec{k},\vec{k}'} \langle \Phi_0 | \hat{n}_{\vec{k}\sigma} | \Phi_0 \rangle}$

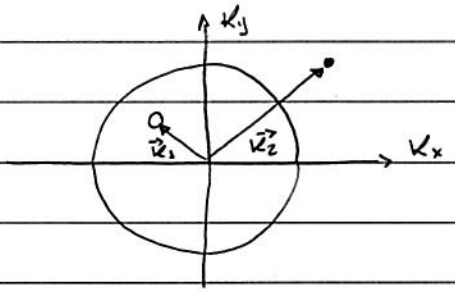
$= \frac{1}{L^3} \cdot \sum_{\vec{k},\sigma} n_{\vec{k}\sigma} = \frac{N}{V} = n$ (216.1)

como $\langle \hat{\rho}(\vec{n}) \rangle = n = cte$ → densidade gás : uniforme

- estado excitado : par partícula - buraco ;
nesse caso, temos que

$|\Phi\rangle = C^\dagger_{\vec{k}_2\sigma_2} C_{\vec{k}_1\sigma_1} |\Phi_0\rangle$; $k_1 < k_F$ e $k_2 > k_F$ (216.2)

esquematicamente (2-D) :



nesse caso: ausência férmion no estado $|\vec{k}_1, \sigma_1\rangle$
~ adição partícula carga positiva (buraco) no estado $|\vec{k}_1, \sigma_1\rangle$;

podemos definir:
$b^\dagger_{\vec{k}\sigma} \equiv C_{-\vec{k},-\sigma}$: op. criação buraco no estado $|\vec{k}\sigma\rangle$
$b_{\vec{k}\sigma} \equiv C^\dagger_{-\vec{k},-\sigma}$: " destruição " " " "

onde álgebra ops. $\underline{b}$ e $\underline{b}^\dagger$: Eq. (200.1)

· sobre as funções de correlação,
as funções de correlação são quantidades interessantes p/ a descrição de um sistema de várias partículas ;
vamos considerar 2 exemplos abaixo ;

tilibra

(1) função de correlação de 1-partículas, considerar, e.g.

$$G_\sigma(\vec{r}-\vec{r}') = \langle \Phi_0 | \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\vec{r}) \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}') | \Phi_0 \rangle \qquad (217.1)$$

sobre Eq. (217.1): amplitude de probabilidade de remover do estado fundamental partícula spin σ da posição $\vec{r}'$ e retornar ao estado fundamental adicionando uma partícula de spin σ na posição $\vec{r}$;

similar Eq. (216.1), temos que:

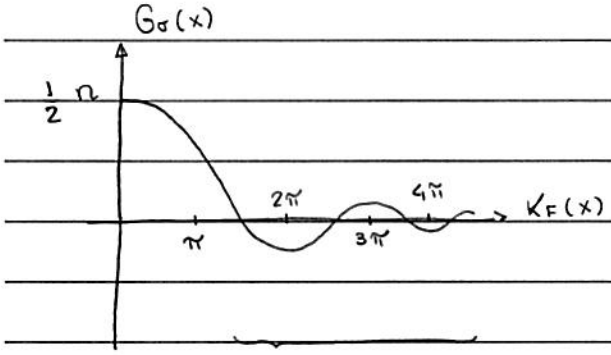
$$G_\sigma(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \vec{k}'\cdot\vec{r}')} \underbrace{\langle \Phi_0 | c^\dagger_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}'\sigma} | \Phi_0 \rangle}_{\delta_{\vec{k},\vec{k}'}\, n_{\vec{k}\sigma}}$$

$$= \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} n_{\vec{k}\sigma} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} \Theta(k_F - k)$$

$$= \int_0^{k_F} \frac{k^2 dk}{(2\pi)^3} \underbrace{\int d\theta d\phi \sin\theta\, e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|\cos\theta}}_{\frac{4\pi}{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}\sin k|\vec{r}-\vec{r}'|}$$

$$= \frac{1}{2\pi^2 x} \underbrace{\int_0^{k_F} dk\, k \sin kx}_{\frac{1}{x^2}(\sin k_F x - k_F x \cos k_F x)} \quad ; \quad x = |\vec{r}-\vec{r}'|$$

$$= \underbrace{\frac{k_F^3}{2\pi^2}}_{\text{Eq. (215.2)} \rightarrow \frac{3n}{2}} \frac{1}{(k_F x)^3}(\sin k_F x - k_F x \cos k_F x) \qquad (217.2)$$



oscilações período $1/k_F \sim$ ∃ superfície de Fermi

notar: $G_\sigma(\vec{r}-\vec{r}'=0) = \frac{1}{2}n$: ok c/ Eq. (216.1)

(2) função de correlação de 2-partículas.

considerar, e.g.,

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{\sigma\sigma'}(\vec{r}-\vec{r}') \equiv \langle \Phi_0 | \hat{\psi}^+_\sigma(\vec{r})\, \hat{\psi}^+_{\sigma'}(\vec{r}')\, \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}')\, \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) | \Phi_0 \rangle :$$

: função de distribuição de pares (218.1)

sobre Eq. (218.1):

(i) similar Eq. (217.1), $g_{\sigma\sigma'}(\vec{r}-\vec{r}')$ ~ amplitude de probabilidade encontrar partícula spin σ' em $\vec{r}'$ dado que há uma partícula spin σ em $\vec{r}$

ou

(ii) se $|\Phi'(\vec{r},\sigma)\rangle \equiv \psi_\sigma(\vec{r})|\Phi_0\rangle$ e $\hat{\rho}_{\sigma'}(\vec{r}') = \hat{\psi}^+_{\sigma'}(\vec{r}')\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}')$

↳ $g_{\sigma\sigma'}(\vec{r}-\vec{r}') = \langle \Phi'(\vec{r},\sigma) | \hat{\rho}_{\sigma'}(\vec{r}') | \Phi'(\vec{r},\sigma)\rangle$, i.e.,

" = valor esperado op. densidade no estado de $(N-1)$ partículas $|\Phi'(\vec{r},\sigma)\rangle$

· como: $\hat{\psi}^+_\sigma(\vec{r})\,\hat{\psi}^+_{\sigma'}(\vec{r}')\,\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}')\,\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) =$

$= -\hat{\psi}^+_\sigma(\vec{r})\,\hat{\psi}^+_{\sigma'}(\vec{r}')\,\hat{\psi}_\sigma(\vec{r})\,\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}')$

$-\hat{\psi}_\sigma(\vec{r})\,\hat{\psi}^+_{\sigma'}(\vec{r}') + \delta_{\sigma\sigma'}\,\delta(\vec{r}-\vec{r}')$

tilibra

$$\hookrightarrow \left(\frac{N}{2}\right)^2 g_{\sigma\sigma'}(\vec{r}-\vec{r}') = \langle \Phi_0 | \hat{\rho}_\sigma(\vec{r})\, \hat{\rho}_{\sigma'}(\vec{r}') | \Phi_0 \rangle -$$

$$- \delta_{\sigma\sigma'}\, \delta(\vec{r}-\vec{r}')\, \langle \Phi_0 | \hat{\rho}_\sigma(\vec{r}) | \Phi_0 \rangle \qquad (219.1)$$

Similar Eq. (217.2), temos que

$$g_{\sigma\sigma'}(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{n^2}\frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k},\vec{p},\vec{q},\vec{k}'} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r} - i(\vec{p}-\vec{q})\cdot\vec{r}'} *$$

$$* \underbrace{\langle \Phi_0 | c^\dagger_{\vec{k}\sigma} c^\dagger_{\vec{p}\sigma'} c_{\vec{q}\sigma'} c_{\vec{k}'\sigma} | \Phi_0 \rangle}_{(I)}$$

vamos considerar 2 casos.

(i) $\sigma \neq \sigma'$: nesse caso, $(I) \neq 0$ se $\vec{k} = \vec{k}'$ e $\vec{p} = \vec{q}$,

$$(I) = \underbrace{\langle \Phi_0 | c^\dagger_{\vec{k}\sigma} c^\dagger_{\vec{p}\sigma'} c_{\vec{p}\sigma'} c_{\vec{k}\sigma} | \Phi_0 \rangle}_{c_{\vec{k}\sigma}\, c^\dagger_{\vec{p}\sigma'}\, c_{\vec{p}\sigma'}} \delta_{\vec{k},\vec{k}'}\, \delta_{\vec{p},\vec{q}}$$

$$= \delta_{\vec{k},\vec{k}'}\, \delta_{\vec{p},\vec{q}}\, \langle \Phi_0 | \hat{n}_{\vec{k}\sigma}\, \hat{n}_{\vec{p}\sigma} | \Phi_0 \rangle = \delta_{\vec{k},\vec{k}'}\, \delta_{\vec{p},\vec{q}}\, n_{\vec{k}\sigma}\, n_{\vec{p}\sigma}$$

$$\hookrightarrow g_{\sigma\sigma'}(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{n^2}\frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}\sigma} \sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}\sigma} = \frac{1}{n^2}\cdot\frac{1}{V^2}\cdot\frac{N}{2}\cdot\frac{N}{2} = 1 : \qquad (219.2)$$

: probabilidade encontrar duas partículas em $\vec{r}$ e $\vec{r}'$ c/ spins opostos independe distância $|\vec{r}-\vec{r}'|$ ~ princípio de exclusão de Pauli

(ii) $\sigma = \sigma'$: nesse caso, $(I) \neq 0$ se

$$\langle \Phi_0 | c^\dagger_{\vec{k}\sigma} c^\dagger_{\vec{p}\sigma} c_{\vec{q}\sigma} c_{\vec{k}'\sigma} | \Phi_0 \rangle = (I) \qquad (219.3)$$

tilibra

$$(1) = \delta_{\vec{k},\vec{q}}\,\delta_{\vec{p},\vec{k}'} \langle \Phi_0 | C^\dagger_{\vec{k}\sigma} C^\dagger_{\vec{p}\sigma} C_{\vec{k}\sigma} C_{\vec{p}\sigma} | \Phi_0 \rangle +$$

$$= - C_{\vec{k}\sigma} C^\dagger_{\vec{p}\sigma}, \text{ pois } \vec{k} \neq \vec{p}:$$

$$\text{se } \vec{k} = \vec{p} \to (C_{\vec{k}\sigma})^2 = 0$$

$$+ \delta_{\vec{k},\vec{k}'}\,\delta_{\vec{p},\vec{q}} \langle \Phi_0 | C^\dagger_{\vec{k}\sigma} C^\dagger_{\vec{p}\sigma} C_{\vec{p}\sigma} C_{\vec{k}\sigma} | \Phi_0 \rangle$$

$$+ C_{\vec{k}\sigma} C^\dagger_{\vec{p}\sigma} C_{\vec{p}\sigma}$$

$$= \left(\delta_{\vec{k},\vec{k}'}\,\delta_{\vec{p},\vec{q}} - \delta_{\vec{k},\vec{q}}\,\delta_{\vec{p},\vec{k}'} \right) \langle \Phi_0 | \hat{n}_{\vec{k}\sigma}\, \hat{n}_{\vec{p}\sigma} | \Phi_0 \rangle$$

$$\hookrightarrow g_{\sigma\sigma'}(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{4}{n^2} \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k},\vec{p}} \left(1 - e^{-i(\vec{k}-\vec{p})\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} n_{\vec{k}\sigma}\, n_{\vec{p}\sigma} \right)$$

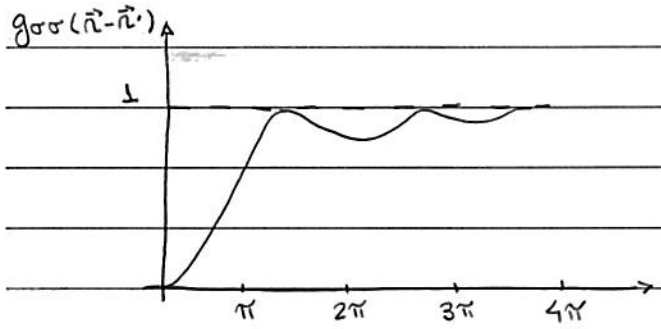
$$= \frac{4}{n^2} \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}\sigma} \sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}\sigma} + \frac{4}{n^2} \left| \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} n_{\vec{k}\sigma} \right|^2$$

$$g_{\sigma\sigma'}(\vec{r}-\vec{r}') = 1 - |G_\sigma(\vec{r}-\vec{r}')|^2 \cdot \frac{4}{n^2} \qquad (220.1)$$

$$= 1 - \frac{9}{(k_F x)^6} \left(\sin k_F x - k_F x \cos k_F x \right)^2 ;$$

Eq. (217.2)

$$x = |\vec{r}-\vec{r}'|$$



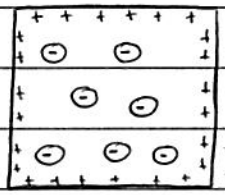
notar: $g_{\sigma\sigma}(\vec{r}-\vec{r}') < 1$ p/ $|\vec{r}-\vec{r}'| < 1/k_F$: pequena probabilidade encontrar 2 férmions c/ o mesmo spin separados por distância $|\vec{r}-\vec{r}'| < 1/k_F$ ~ princípio de exclusão de Pauli

tilibra

importante: $g_{\sigma\sigma}(\vec{r}-\vec{r}') < 1$ p/ $|\vec{r}-\vec{r}'| < 1/k_F$ ~ antisimetria do estado fundamental e NÃO interações!

Obs.: $g_{\sigma\sigma}(\vec{r}-\vec{r}') < 1$ p/ $k_F|\vec{r}-\vec{r}'| < 1$: buraco de correlação

Ex. 2: Gás de elétrons degenerado;
considerar: sistema N elétrons interagentes
⊂ volume $V = L^3$
⊕ distribuição uniforme de íons positivos @ paredes volume V ~ neutralidade de carga sistema



(221.3)

: modelo simples p/ metal

hamiltoniano:

$$H = H_{ee} + H_{ION} + H_{ION-ee} \qquad (221.2)$$

onde hamiltoniano eletrônico H_{ee} = Eq. (211.1):

$$H_{ee} = \sum_{\vec{k}\sigma} C^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} C_{\vec{k}\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k},\vec{p},\vec{q}} \sum_{\sigma\sigma'} V_{\vec{q}}\, C^{\dagger}_{\vec{k}+\vec{q}\sigma}\, C^{\dagger}_{\vec{p}-\vec{q}\sigma'}\, C_{\vec{p}\sigma'}\, C_{\vec{k}\sigma};$$

H_{ION} ~ energia potencial eletrostática p/ distribuição de carga $\rho_{ION}(\vec{r})$:

$$H_{ION} = \frac{1}{2}\int d^3r\, d^3r'\, \rho_{ION}(\vec{r})\, \rho_{ION}(\vec{r}')\, V(\vec{r}-\vec{r}');$$

H_{ION-ee} ~ energia potencial elétrons devido potencial eletrostático ~ distribuição de cargas $\rho_{ION}(\vec{r})$:

tilibra

$$H_{ION-el} = \sum_{i=1}^{N} (-e)\,\Phi(\vec{r}_i) \cdot \sum_{i=1}^{N} (-e) \int d^3r\, \rho(\vec{r})\, V(\vec{r}-\vec{r}_i)$$

↑ potencial eletrostático

· considerar: $\rho_{ION}(\vec{r}) = e\frac{N}{V}$ e $V(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{e^{-\alpha|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$; $e>0$;

temos que

$$\cdot H_{ION} = \frac{e^2}{2}\left(\frac{N}{V}\right)^2 \int d^3r\, d^3r' \frac{e^{-\alpha|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} = \frac{e^2}{2}\left(\frac{N}{V}\right)^2 \underbrace{\int d^3r}_{V} \underbrace{\int d^3x \frac{e^{-\alpha x}}{x}}_{4\pi/\alpha^2}$$

$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{x}$

$$= \frac{2\pi e^2}{\alpha^2} \cdot \frac{N^2}{V}$$

$$\cdot H_{ION-el} = -e^2 \frac{N}{V} \cdot \sum_{i=1}^{N} \underbrace{\int d^3r \frac{e^{-\alpha|\vec{r}-\vec{r}_i|}}{|\vec{r}-\vec{r}_i|}}_{4\pi/\alpha^2} = -\frac{4\pi e^2}{\alpha^2} \cdot \frac{N^2}{V}$$

↳ $H_{ION} + H_{ION-el} = -\frac{2\pi e^2}{\alpha^2} \cdot \frac{N^2}{V}$ (222.1)

· p/ interação elétron-elétron, temos que

$$V(\vec{r}-\vec{r}') = e^2 \frac{e^{-\alpha|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$$

↳ $V_{\vec{q}} = \int d^3r\, V(r)\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} = e^2 \int r^2 dr \frac{e^{-\alpha r}}{r} \int d\theta\, d\phi \sin\theta\, e^{-iqr\cos\theta}$

$$= \frac{4\pi e^2}{\alpha^2 + q^2} \quad (222.2)$$

· notar: termo $\vec{q}=0$ de H_{el}:

tilibra

$$\frac{1}{2V}\sum_{\vec{k},\vec{p}}\sum_{\sigma\sigma'}\frac{4\pi e^2}{\alpha^2}\, C^+_{\vec{k}\sigma} C^+_{\vec{p}\sigma'} C_{\vec{p}\sigma'} C_{\vec{k}\sigma} =$$

$$- C^+_{\vec{p}\sigma'} C_{\vec{k}\sigma} C_{\vec{p}\sigma'}$$

$$+ C_{\vec{k}\sigma} C^+_{\vec{p}\sigma'} - \delta_{\vec{k},\vec{p}}\,\delta_{\sigma,\sigma'}$$

$$= \frac{2\pi e^2}{\alpha^2}\frac{1}{V}\sum_{\vec{k},\vec{p}}\sum_{\sigma\sigma'}\hat{n}_{\vec{k}\sigma}\left(\hat{n}_{\vec{p}\sigma} - \delta_{\vec{k},\vec{p}}\,\delta_{\sigma,\sigma'}\right) = \frac{2\pi e^2}{\alpha^2}\frac{1}{V}\left(\hat{N}^2 - \hat{N}\right)$$

pois # partículas fixo : $\hat{N} \to N$!

$$= \frac{2\pi e^2}{\alpha^2}\left(\frac{N^2}{V} - \frac{N}{V}\right) \qquad (223.1)$$

notar: 1º termo Eq. (223.1) ⊕ Eq. (222.1) = 0

2º termo Eq. (223.1) $\xrightarrow[V\to\infty]{}$ 0

↳ hamiltoniano do sistema:

$$H = \sum_{\vec{k}\sigma} C^+_{\vec{k}\sigma} C_{\vec{k}\sigma} + \frac{1}{2V}\sum_{\substack{\vec{k},\vec{p},\vec{q}\\ q\neq 0\\ \sigma,\sigma'}}\frac{4\pi e^2}{q^2} C^+_{\vec{k}+\vec{q}\sigma} C^+_{\vec{p}-\vec{q}\sigma'} C_{\vec{p}\sigma'} C_{\vec{k}\sigma} \qquad (223.2)$$

$$= \hat{H}_0 + \hat{V}$$

· próxima etapa: determinar a energia do estado fundamental em teoria de perturbação, 1ª ordem: aproximação Hartree-Fock

considerar: estado não-perturbado : estado fundamental H_0 = Eq. (214.3);

temos que:

$$E_{GS} \simeq E_0 + E^{(1)}$$

onde $E_0 = \langle \Phi_0 | \hat{H}_0 | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \hat{T} | \Phi_0 \rangle$

$E^{(1)} = \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle$

tilibra

Eqs. (215.1) e (215.2):

$$\cdot E_0 = \sum_{\vec{k},\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \langle \Phi_0 | \hat{n}_{\vec{k}\sigma} | \Phi_0 \rangle = 2 \cdot \frac{\hbar^2}{2m} V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k^2 \theta(k_F - k)$$

$$= 2 \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{V}{8\pi^3} \int_0^{k_F} dk\, k^4 \int d\Omega = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{1}{5\pi^2} \underbrace{V k_F^5}_{k_F^2 V k_F^3 = k_F^2 \cdot 3\pi^2 N}$$

$$= \frac{3}{5} \left(\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \right) N = \frac{3}{5} \epsilon_F N$$

é interessante introduzir os parâmetros:

$\cdot \frac{V}{N} = \frac{4}{3} \pi r_0^3$; $r_0 \sim$ distância entre partículas

$\cdot r_s = \frac{r_0}{a_0}$; $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$: raio de Bohr

$r_s \sim$ densidade de partículas

verifica-se que (exercício):

$$k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3} = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{1}{r_0}$$

$$\hookrightarrow E_0 = \frac{e^2}{2a_0} \cdot \frac{3}{5} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{1}{r_s^2} N = \frac{e^2}{2a_0} \cdot \frac{2.21}{r_s^2} N \qquad (224.1)$$

$$\cdot E^{(1)} = \frac{2\pi e^2}{V} \sum_{\vec{k},\vec{p},\vec{q}\neq 0} \sum_{\sigma\sigma'} \underbrace{\langle \Phi_0 | c^\dagger_{\vec{k}+\vec{q}\sigma} c^\dagger_{\vec{p}-\vec{q}\sigma'} c_{\vec{p}\sigma'} c_{\vec{k}\sigma} | \Phi_0 \rangle}_{\delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\vec{p},\vec{k}+\vec{q}} \langle \Phi_0 | c^\dagger_{\vec{k}+\vec{q}\sigma} c^\dagger_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}+\vec{q}\sigma} c_{\vec{k}\sigma} | \Phi_0 \rangle} :$$

pois $\vec{q} \neq 0 \rightsquigarrow = - c^\dagger_{\vec{k}+\vec{q}\sigma} c^\dagger_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}\sigma}$

(224.2)

: termo de troca

↳ $E^{(1)} = -\frac{e^2}{2V} \sum_{\vec{k},\vec{q}\neq 0} \sum_{\sigma} \frac{4\pi}{q^2} n_{\vec{k}+\vec{q}\sigma} n_{\vec{k}\sigma}$

$= -\frac{e^2}{2a_0} \frac{3}{2\pi} \cdot \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{N}{n_s} = -\frac{e^2}{2a_0} \cdot \frac{0.916}{n_s} N$ (225.1)

↳ $\frac{E_{GS}}{N} = \frac{e^2}{2a_0}\left(\frac{2.21}{n_s^2} - \frac{0.916}{n_s} + \ldots\right)$ (225.2)

↳ energia de correlação

→ " " troca

Obs. 1: sobre a validade Eq. (225.2),

Eq. (223.2) em 1ª quantização:

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i\neq j=1}^{N} \frac{e^2}{r_{ij}}$$

se $r'_i = \frac{r_i}{r_0}$ e $p'_i = r_0 p_i$

↳ $H = \frac{1}{r_0^2}\left(\sum_{i=1}^{N} \frac{p_i'^2}{2m} + \frac{1}{2} r_0 \sum_{i\neq j=1}^{N} \frac{e^2}{r_{ij}}\right)$

↳ p/ $r_0 \ll 1$ ($r_s \ll 1$) interação Coulombiana pode ser considerada como uma perturbação ao termo cinético

↳ Eq. (225.2) ok p/ $r_s \ll 1$ ou gás de elétrons de alta densidade!

· em geral, p/ metais, temos que $1.8 \leq r_s \leq 5.5$

Obs. 2: Lembrar princípio variacional de Ritz (87.1): Eq. (225.2) é um limite superior p/ energia do estado fundamental.

Obs. 3: comparar Eqs. (219.3) e (224.2): além do termo de troca, temos, em princípio, um segundo termo

tilibra

$\langle \Phi_0 | C^\dagger_{\vec{k}+\vec{q}\sigma} C^\dagger_{\vec{p}-\vec{q}\sigma'} C_{\vec{p}\sigma'} C_{\vec{k}\sigma} | \Phi_0 \rangle =$

$= \delta_{q,0} \langle \Phi_0 | \hat{n}_{\vec{k}\sigma} \hat{n}_{\vec{p}\sigma'} | \Phi_0 \rangle$: termo direto; (226.1)

aqui, termo de troca ausente devido íons positivos

Obs. 4: vamos verificar Eq. (225.1),

$$E^{(1)} = -\frac{4\pi e^2}{2} \cdot 2 \cdot V \int \frac{d^3k\, d^3q}{(2\pi)^6} \frac{1}{q^2} \Theta(k_F - |\vec{k}+\vec{q}|)\, \Theta(k_F - k)$$

$$= -\frac{4\pi e^2 V}{(2\pi)^6} \int d^3k\, \Theta(k_F - k) \int d^3q \frac{1}{(\vec{q}-\vec{k})^2} \Theta(k_F - q)$$

$$\underbrace{\int_0^{k_F} q^2 dq \int d\theta d\varphi \sin\theta \frac{1}{k^2+q^2-2kq\cos\theta}}$$

$$\underbrace{\frac{\pi}{qk} \ln \frac{(q+k)^2}{(q-k)^2}}$$

$$\pi \left(2k_F + \frac{k_F^2 - k^2}{2k} \ln \frac{(k_F+k)^2}{(k_F-k)^2} \right)$$

$$= -\frac{4\pi^2 e^2 V}{(2\pi)^6} \int_0^{k_F} dk \left(2k_F k^2 + \frac{k}{2}(k_F^2 - k^2) \ln \frac{(k_F+k)^2}{(k_F-k)^2} \right) \int d\Omega$$

$$\underbrace{k_F^4 \int_0^1 dx \left(2x^2 + \frac{1}{2} x(1-x)^2 \ln \frac{(1+x)^2}{(1-x)^2} \right)}_{k = k_F x}$$

$= 1$

$$= -\frac{16\pi^3 e^2 V}{(2\pi)^6} k_F \underbrace{\left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)}_{k_F^3} = -\frac{e^2}{2a_0} \cdot \frac{3}{2\pi} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{N}{n_s}$$

tilibra

Ex. 3: gás de bosons s/ spin não-interagente,

considerar: sistema N bósons livres, s/ spin

hamiltoniano (211.1):

$$H = \sum_{\vec{\kappa}} \epsilon(\vec{\kappa})\, a^{\dagger}_{\vec{\kappa}} a_{\vec{\kappa}}\,; \qquad \epsilon(\vec{\kappa}) = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \tag{227.1}$$

onde

$a^{\dagger}_{\vec{\kappa}}$: op. criação partícula no estado partícula única $|\vec{\kappa}\rangle$

$a_{\vec{\kappa}}$: " destruição " " " " " $|\vec{\kappa}\rangle$

e álgebra (190.1): $[a_{\vec{\kappa}}, a_{\vec{p}}] = [a^{\dagger}_{\vec{\kappa}}, a^{\dagger}_{\vec{p}}] = 0$

$$[a_{\vec{\kappa}}, a^{\dagger}_{\vec{p}}] = \delta_{\vec{\kappa},\vec{p}} \tag{227.2}$$

· considerar um possível estado do sistema:

$$|\Phi\rangle = |n_{\vec{\kappa}=0}, n_{\vec{\kappa}_1}, \ldots\rangle \quad ; \quad n_{\vec{\kappa}} = 0, 1, 2, \ldots \tag{227.3}$$

· valor esperado do op. densidade (212.2):

$$\langle \hat{\rho}(\vec{r}) \rangle = \langle \Phi | \hat{\Psi}^{\dagger}(\vec{r})\, \hat{\Psi}(\vec{r}) | \Phi \rangle$$

Eq. (211.2) $\rightarrow$ $= \frac{1}{V} \sum_{\vec{\kappa},\vec{p}} e^{-i(\vec{\kappa}-\vec{p})\cdot\vec{r}} \underbrace{\langle \Phi | a^{\dagger}_{\vec{\kappa}} a_{\vec{p}} | \Phi \rangle}$

$\delta_{\vec{\kappa},\vec{p}} \langle \Phi | \hat{n}_{\vec{\kappa}} | \Phi \rangle$

$= n_{\vec{\kappa}} |\Phi\rangle$

↑ Eq. (193.1)

$= \frac{1}{V} \sum_{\vec{\kappa}} n_{\vec{\kappa}} = \frac{N}{V} = n =$ cte : densidade uniforme

tilibra

· função de distribuição de pares (218.1):

$$n^2 g(\vec{r}-\vec{r}') = \langle \phi | \hat{\psi}^\dagger(\vec{r})\, \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')\, \hat{\psi}(\vec{r}')\, \hat{\psi}(\vec{r}) | \phi \rangle \qquad (228.1)$$

$$= \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k},\vec{p},\vec{q},\vec{k}'} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r} - i(\vec{p}-\vec{q})\cdot\vec{r}'} \underbrace{\langle \phi | a^\dagger_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{q}} a_{\vec{k}'} | \phi \rangle}_{(I)}$$

nesse caso, é necessário considerar 2 casos:

(i) $\vec{k} \neq \vec{p}$

$$\langle \phi | a^\dagger_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{q}} a_{\vec{k}'} | \phi \rangle = \delta_{\vec{k},\vec{q}}\, \delta_{\vec{p},\vec{k}'} \underbrace{\langle \phi | a^\dagger_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{k}} a_{\vec{p}} | \phi \rangle}_{= a_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{p}}} +$$

$$+ \delta_{\vec{k},\vec{k}'}\, \delta_{\vec{p},\vec{q}} \underbrace{\langle \phi | a^\dagger_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{p}} a_{\vec{k}} | \phi \rangle}_{= a_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{p}}}$$

(ii) $\vec{k} = \vec{p}$: ausente p/ férmions!

$$\delta_{\vec{k},\vec{p}} \langle \phi | a^\dagger_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{q}} a_{\vec{k}'} | \phi \rangle =$$

$$= \delta_{\vec{k},\vec{p}}\, \delta_{\vec{k},\vec{q}}\, \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \underbrace{\langle \phi | a^\dagger_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}} a_{\vec{k}} | \phi \rangle}_{a_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{k}} - 1}$$

↳ $(I) = (1 - \delta_{\vec{k},\vec{p}})\left(\delta_{\vec{k},\vec{q}}\, \delta_{\vec{p},\vec{k}'} + \delta_{\vec{k},\vec{k}'}\, \delta_{\vec{p},\vec{q}}\right) n_{\vec{k}}\, n_{\vec{p}} +$

$$+ \delta_{\vec{k},\vec{p}}\, \delta_{\vec{k},\vec{q}}\, \delta_{\vec{k},\vec{k}'}\, n_{\vec{k}}(n_{\vec{k}} - 1)$$

↳ $$n^2 g(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k},\vec{p}} (1 - \delta_{\vec{k},\vec{p}})\left(1 + e^{-i(\vec{k}-\vec{p})\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}\right) n_{\vec{k}}\, n_{\vec{p}}$$

$$+ \delta_{\vec{k},\vec{p}}\, e^{-i(\vec{k}-\vec{p})\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}\, n_{\vec{k}}(n_{\vec{k}} - 1)$$

tilibra

$$n^2 g(\vec{r}-\vec{r}') = \underbrace{\frac{1}{V^2}\sum_{\vec{k},\vec{p}} n_{\vec{k}}\, n_{\vec{p}}}_{(N/V)^2} - \frac{1}{V^2}\sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}}(n_{\vec{k}}+1) +$$

$$+ \underbrace{\frac{1}{V^2}\sum_{\vec{k},\vec{p}} e^{-i(\vec{k}-\vec{p})\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}\, n_{\vec{k}}\, n_{\vec{p}}}_{\left|\frac{1}{V}\sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}\, n_{\vec{k}}\right|^2} \qquad (229.1)$$

vamos considerar 2 casos:

(i) $n_{\vec{k}} = N\,\delta_{\vec{k},\vec{p}_0}$

↳ $n^2 g(\vec{r}-\vec{r}') = n^2 - \frac{1}{V^2}N(N+1) + \frac{N^2}{V^2} = \frac{N}{V}\cdot\frac{(N-1)}{V} = cte$; (229.2)

como $g(\vec{r}-\vec{r}') = cte$ → ∄ conexões no sistema;

Eq. (229.2): probabilidade observação 1ª partículas = N/V

e " " 2ª " $= (N-1)/V$

(ii) $n_{\vec{k}} = n\left(\frac{2\pi}{\pi^{1/2}\Delta}\right)^3 e^{-(\vec{k}-\vec{k}_0)/\Delta}$: feixe de partículas momento em torno $\hbar\vec{k}_0$

temos que:

$$\cdot\ \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, n_{\vec{k}} = n \text{ : normalização}$$

$$\cdot\ \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}\, n_{\vec{k}} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}\, n_{\vec{k}}$$

$$= n\, e^{-(\vec{r}-\vec{r}')^2\Delta^2/4}\, e^{-i\vec{k}_0\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}$$

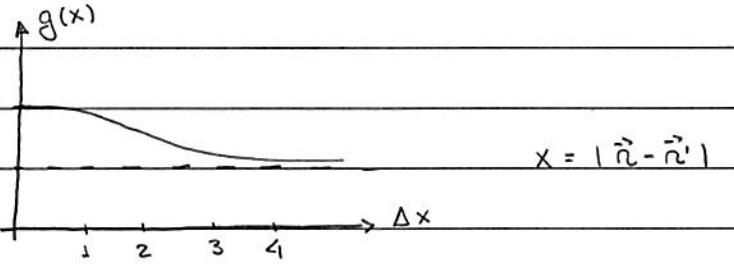
tilibra

$$\cdot \frac{1}{V}\sum_{\vec{\kappa}} n^2_{\vec{\kappa}} = \int \frac{d^3\vec{\kappa}}{(2\pi)^3}\, n^2_{\vec{\kappa}} \sim \frac{n^2}{V\Delta^3}$$

notar: p/ Δ fixo, 2º termo Eq. (229.1) $\xrightarrow[V\to+\infty]{} 0$

↳ $n^2 g(\vec{r}-\vec{r}') = n^2 + n^2 e^{-(\vec{r}-\vec{r}')^2\Delta^2/2}$

ou $$g(\vec{r}-\vec{r}') = 1 + \exp\left(-(\vec{r}-\vec{r}')^2\Delta^2/2\right) \qquad (230.1)$$



notar: aumento $g(\vec{r}-\vec{r}')$ p/ $|\vec{r}-\vec{r}'| \to 0$: aumento probabilidade encontrar dois bósons separados por uma distância pequena.

· Lembrar: gás ideal (não-interagente) de bósons:
p/ $T < T_{BE}$
onde $k_B T_{BE} = 3{,}31 \frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}$.

↳ condensação de Bose-Einstein;
nesse caso, temos uma ocupação macroscópica do modo de menor energia $\vec{\kappa} = 0$ (veja Eq. (227.1)), i.e.,

$$N = N_0(T) + \sum_{\vec{\kappa}\neq 0} n_{\vec{\kappa}} \;;\; n_{\vec{\kappa}=0} = N_0$$

e $N - N_0(T) \ll N_0(T) \lesssim N$

tilibra

Ex. 4: gás de bósons fracamente interagente (3-D).

considerar: sistema N bósons interagentes c/ volume $V = L^3$;

temperatura $T = 0$;

hamiltoniano: Eq. (231.1):

$$H = \sum_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k})\, a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k},\vec{p},\vec{q}} V_{\vec{q}}\, a^\dagger_{\vec{k}+\vec{q}}\, a^\dagger_{\vec{p}-\vec{q}}\, a_{\vec{p}}\, a_{\vec{k}}. \qquad (231.1)$$

onde

$$\epsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

como $T < T_{BE}$ → hipótese: estado fundamental $|\Phi_0\rangle$ é tal que o modo de partícula única de menor energia $\vec{k} = 0$: macroscopicamente ocupado, i.e.,

$N_0 = \langle \Phi_0 | a^\dagger_{\vec{k}=0} a_{\vec{k}=0} | \Phi_0 \rangle$ é tal que

$$N - N_0 \ll N_0 \lesssim N \qquad (231.2)$$

como número de partículas c/ $\vec{k} \neq 0 \ll N_0$

↳ hipótese (1): vamos considerar apenas a interação entre partículas c/ $\vec{k} \neq 0$ e $\vec{k} = 0$;

dessa forma, p/ o termo interagente em (231.1), temos que:

$\vec{k} = \vec{q} = \vec{p} = 0$: $V_0\, a^\dagger_0 a^\dagger_0 a_0 a_0$

$\vec{k} \neq 0,\ \vec{p} = \vec{q} = 0$: $V_0\, a^\dagger_{\vec{k}} a^\dagger_0 a_0 a_{\vec{k}}$

$\vec{p} \neq 0,\ \vec{k} = \vec{q} = 0$: $V_0\, a^\dagger_0 a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{p}} a_0$

$\vec{q} \neq 0,\ \vec{k} = \vec{p} = 0$: $V_{\vec{q}}\, a^\dagger_{\vec{q}} a^\dagger_{-\vec{q}} a_0 a_0$

$\vec{q} \neq 0,\ \vec{k} = -\vec{q},\ \vec{p} = +\vec{q}$: $V_{\vec{q}}\, a^\dagger_0 a^\dagger_0 a_{\vec{q}} a_{-\vec{q}}$

$\vec{k} = 0,\ \vec{p} = +\vec{q},\ \vec{q} \neq 0$: $V_{\vec{q}}\, a^\dagger_{\vec{q}} a^\dagger_0 a_{\vec{q}} a_0$

$\vec{q} \neq 0,\ \vec{p} = 0,\ \vec{k} = -q$: $V_{\vec{q}}\, a^\dagger_0 a^\dagger_{-\vec{q}} a_0 a_{-\vec{q}}$

tilibra

hamiltoniano (231.1):

$$H = \sum_{\vec{\kappa}} \epsilon(\vec{\kappa})\, a^\dagger_{\vec{\kappa}} a_{\vec{\kappa}} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{\kappa}\neq 0} V_0 \left(a^\dagger_{\vec{\kappa}} a^\dagger_0 a_0 a_{\vec{\kappa}} + a^\dagger_0 a^\dagger_{\vec{\kappa}} a_{\vec{\kappa}} a_0 \right) +$$

$$+ V_{\vec{\kappa}} \left(a^\dagger_{\vec{\kappa}} a^\dagger_0 a_{\vec{\kappa}} a_0 + a^\dagger_0 a^\dagger_{-\vec{\kappa}} a_0 a_{-\vec{\kappa}} \right)$$

$a^\dagger_0 a_0 a^\dagger_{\vec{\kappa}} a_{\vec{\kappa}}$; $a^\dagger_0 a^\dagger_{\vec{\kappa}} a_0 a_{\vec{\kappa}}$: $\vec{\kappa} \to -\kappa$ ⊕ $V_{-\vec{\kappa}} = V_{\vec{\kappa}}$

$a^\dagger_0 a_0 a^\dagger_\kappa a_\kappa$

$$+ V_{\vec{\kappa}} \left(a^\dagger_{\vec{\kappa}} a^\dagger_{-\vec{\kappa}} a_0 a_0 + a^\dagger_0 a^\dagger_0 a_{\vec{\kappa}} a_{-\vec{\kappa}} \right)$$

$$+ \frac{1}{2V} V_0\, a^\dagger_0 a^\dagger_0 a_0 a_0 + O(a^3_\kappa) \qquad (232.1)$$

$$H = \frac{1}{2V} V_0\, a^\dagger_0 a^\dagger_0 a_0 a_0 + \sum_{\vec{\kappa}} \epsilon(\vec{\kappa})\, a^\dagger_{\vec{\kappa}} a_{\vec{\kappa}} +$$

$$+ \frac{1}{2V} \sum_{\vec{\kappa}\neq 0} 2(V_0 + V_{\vec{\kappa}})\, a^\dagger_0 a_0 a^\dagger_{\vec{\kappa}} a_{\vec{\kappa}} +$$

$$+ V_{\vec{\kappa}} \left(a_0 a_0 a^\dagger_{\vec{\kappa}} a^\dagger_{-\vec{\kappa}} + a^\dagger_0 a^\dagger_0 a_{\vec{\kappa}} a_{-\vec{\kappa}} \right) + O(a^3_\kappa) \qquad (232.2)$$

· Eq. (189.3):

$$a_0 |N_0, \ldots\rangle = \sqrt{N_0}\, |N_0 - 1, \ldots\rangle$$

$$a^\dagger_0 |N_0, \ldots\rangle = \sqrt{N_0 + 1}\, |N_0 + 1, \ldots\rangle$$

como $N_0 \sim N \gg 1$

↳ hipótese (2): vamos considerar $a_0 = a^\dagger_0 = N_0^{1/2}$ (232.3)

Eq. (232.2) ⊕ (232.3):

tilibra

$$H \simeq \frac{1}{2V} V_0 N_0^2 + \sum_{\vec{u}\neq 0} \left(\epsilon(\vec{u}) + \frac{N_0}{V}(V_0 + V_{\vec{u}}) \right) a^\dagger_{\vec{u}} a_{\vec{u}} +$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{N_0}{V} V_{\vec{u}} \left(a^\dagger_{\vec{u}} a^\dagger_{-\vec{u}} + a_{-\vec{u}} a_{\vec{u}} \right) + \ldots \quad (233.1)$$

notar: Eq. (233.1) não conserva o número de partículas!

a fim de incluir o vínculo: $\langle \hat{N} \rangle = N = N_0 + \sum_{\vec{u}\neq 0} a^\dagger_{\vec{u}} a_{\vec{u}}$ (233.2)

é possível proceder de duas formas:

(i) adicionando potencial químico μ

ou (ii) substituir (233.2) em (233.1) e eliminar N_0;

considerando (ii), temos que:

$$\cdot N_0^2 = N^2 - 2N \sum_{\vec{u}\neq 0} a^\dagger_{\vec{u}} a_{\vec{u}} + \sum_{\vec{u},\vec{p}} a^\dagger_{\vec{u}} a_{\vec{u}} a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{p}} \simeq N^2 - 2N \sum_{\vec{u}}{}' a^\dagger_{\vec{u}} a_{\vec{u}}$$

$$\cdot \sum_{\vec{u}\neq 0}{}' \frac{N_0}{V} V_{\vec{u}} a^\dagger_{\vec{u}} a_{\vec{u}} = \sum_{\vec{u}}{}' \frac{N}{V} V_{\vec{u}} a^\dagger_{\vec{u}} a_{\vec{u}}$$

↳ considerando apenas os termos quadráticos, Eq. (233.1):

$$H \simeq \frac{1}{2} n^2 V_0 + \sum_{\vec{u}}{}' \left(\epsilon(\vec{u}) + n V_{\vec{u}} \right) a^\dagger_{\vec{u}} a_{\vec{u}} +$$

$$+ \frac{1}{2} n V_{\vec{u}} \left(a^\dagger_{\vec{u}} a^\dagger_{-\vec{u}} + a_{-\vec{u}} a_{\vec{u}} \right) \quad (233.3)$$

notar: problema inicial (233.1) interagente aproximado por um problema efetivo não-interagente (233.3):
exemplo: aproximação de campo médio.

· a fim de diagonalizar (233.3), vamos considerar a seguinte transformação de Bogoliubov:

tilibra

$$a_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} b^{\dagger}_{-\vec{k}} \qquad (234.1)$$

$$a^{\dagger}_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} b^{\dagger}_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} b_{-\vec{k}}$$

onde $u_{-\vec{k}} = u_{\vec{k}} \in \mathbb{R}$ e $v_{-\vec{k}} = v_{\vec{k}} \in \mathbb{R}$

notar:

- $[a_{\vec{k}}, a_{\vec{p}}] = [u_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} b^{\dagger}_{-\vec{k}} ; u_{\vec{p}} b_{\vec{p}} + v_{\vec{p}} b^{\dagger}_{-\vec{p}}] =$

$$= u_{\vec{k}} v_{\vec{p}} \underbrace{[b_{\vec{k}}, b^{\dagger}_{-\vec{p}}]}_{\delta_{\vec{k},-\vec{p}}} + v_{\vec{k}} u_{\vec{p}} \underbrace{[b^{\dagger}_{-\vec{k}}, b_{\vec{p}}]}_{-\delta_{\vec{k},-\vec{p}}} = 0 ;$$

- $[a_{\vec{k}}, a^{\dagger}_{\vec{p}}] = [u_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} b^{\dagger}_{-\vec{k}} ; u_{\vec{p}} b^{\dagger}_{\vec{p}} + v_{\vec{p}} b_{-\vec{p}}] =$

$$= u_{\vec{k}} u_{\vec{p}} \underbrace{[b_{\vec{k}}, b^{\dagger}_{\vec{p}}]}_{\delta_{\vec{k},\vec{p}}} + v_{\vec{k}} v_{\vec{p}} \underbrace{[b^{\dagger}_{-\vec{k}}, b_{-\vec{p}}]}_{-\delta_{\vec{k},\vec{p}}} = \delta_{\vec{k},\vec{p}} ;$$

i.e., ops. $b_{\vec{k}}$ e $b^{\dagger}_{\vec{k}}$ satisfazem álgebra (227.2) se

$$u^2_{\vec{k}} - v^2_{\vec{k}} = 1 \qquad (234.2)$$

como transf. (234.1) preserva álgebra : transformação canônica

como $\epsilon(\vec{k}) = \epsilon(-\vec{k})$ e $V_{\vec{k}} = V_{-\vec{k}}$, podemos reescrever (233.3) como

$$H = \frac{1}{2} n^2 V_0 - \frac{1}{2} {\sum_{\vec{k}}}' (\epsilon(\vec{k}) + n V_{\vec{k}}) + \qquad (234.3)$$

$$+ \frac{1}{2} {\sum_{\vec{k}}}' \underbrace{(\epsilon(\vec{k}) + n V_{\vec{k}})(a^{\dagger}_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + a_{-\vec{k}} a^{\dagger}_{-\vec{k}})}_{\equiv A_{\vec{k}}} + \underbrace{n V_{\vec{k}} (a^{\dagger}_{\vec{k}} a^{\dagger}_{-\vec{k}} + a_{-\vec{k}} a_{\vec{k}})}_{\equiv B_{\vec{k}}}$$

tilibra

Eqs. (234.1) e (234.3):

$$H = \frac{1}{2} n^2 V_0 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{u}}{}' \left(\epsilon(\vec{u}) + n V_{\vec{u}} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{u}}{}'$$

$$\underbrace{\left(A_{\vec{u}} \left(u_{\vec{u}}^2 + v_{\vec{u}}^2 \right) + B_{\vec{u}} \cdot 2 \cdot u_{\vec{u}} v_{\vec{u}} \right)}_{(I)} \left(b_{\vec{u}}^\dagger b_{\vec{u}} + b_{-\vec{u}} b_{-\vec{u}}^\dagger \right) +$$

$$+ \underbrace{\left(A_{\vec{u}} \cdot 2 \cdot u_{\vec{u}} v_{\vec{u}} + B_{\vec{u}} \left(u_{\vec{u}}^2 + v_{\vec{u}}^2 \right) \right)}_{(II)} \left(b_{\vec{u}}^\dagger b_{-\vec{u}}^\dagger + b_{-\vec{u}} b_{\vec{u}} \right)$$

verifica-se que (veja abaixo) se

$$u_{\vec{u}}^2 = \frac{1}{2} + \frac{A_{\vec{u}}}{2\omega_{\vec{u}}} \; ; \quad v_{\vec{u}}^2 = -\frac{1}{2} + \frac{A_{\vec{u}}}{\omega_{\vec{u}}} \; ; \quad \omega_{\vec{u}} = \sqrt{A_{\vec{u}}^2 - B_{\vec{u}}^2}$$

$$\text{e} \quad u_{\vec{u}} v_{\vec{u}} = -\frac{B_{\vec{u}}}{2\omega_{\vec{u}}} \qquad (235.1)$$

↳ $(I) = \omega_{\vec{u}}$; $(II) = 0$ e $u_{\vec{u}}^2 - v_{\vec{u}}^2 = 1$;

temos que

$$H = \frac{1}{2} n v_0^2 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{u}}{}' A_{\vec{u}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{u}}{}' \omega_{\vec{u}} \underbrace{\left(b_{\vec{u}}^\dagger b_{\vec{u}} + b_{-\vec{u}} b_{-\vec{u}}^\dagger \right)}_{1 + b_{-\vec{u}}^\dagger b_{-\vec{u}}}$$

↳ $$H = \underbrace{\frac{1}{2} n v_0^2 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{u}}{}' \left(A_{\vec{u}} - \omega_{\vec{u}} \right)}_{\equiv E_0} + \sum_{\vec{u}}{}' \omega_{\vec{u}} b_{\vec{u}}^\dagger b_{\vec{u}} \qquad (235.2)$$

nesse caso, o estado fundamental do sistema é tal que

$b_{\vec{k}}|0\rangle = 0$, p/ $\forall\, \vec{k}$ (236.1)

↳ E_0 : energia do estado fundamental

$b^\dagger_{\vec{k}}$: op. criação de uma excitação : quasipartícula

e $\omega_{\vec{k}}$: energia quasipartículas

notar:

(i) Eqs. (233.2) e (234.1) :

$$N - N_0 = \sum_{\vec{k}}{}' \langle 0|a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}}|0\rangle = \sum_{\vec{k}}{}' v^2_{\vec{k}} \quad : \quad (236.2)$$

$$\langle 0|(u_{\vec{k}} b^\dagger_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} b_{-\vec{k}})(u_k b_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} b^\dagger_{-\vec{k}})|0\rangle$$

$$v^2_{\vec{k}} \langle 0|b_{-\vec{k}} b^\dagger_{-\vec{k}}|0\rangle = v^2_{\vec{k}}$$

$$(1 + b^\dagger_{-\vec{k}} b_{-\vec{k}})|0\rangle$$

: número de partículas (bósons $a_{\vec{k}}$) $\notin$ do condensado

Lembrar: p/ gás ideal $N_0(T=0) = N$;

aqui $N_0(T=0) < N$ ~ interações

(ii) sobre a energia das excitações (quasipartículas):

$$\omega_{\vec{k}} = \left(A^2_{\vec{k}} - B^2_{\vec{k}}\right)^{1/2} = \left(\epsilon^2(\vec{k}) + 2n\epsilon(\vec{k}) V_{\vec{k}}\right)^{1/2}$$

p/ $k \ll 1$, temos que

$$\omega_{\vec{k}} \simeq \left(2n\epsilon(\vec{k}) V_{\vec{k}=0}\right)^{1/2} = \left(2n \frac{\hbar^2 k^2}{2m} V_0\right)^{1/2} = \underbrace{\left(\frac{nV_0}{m}\right)^{1/2}}_{=c} \hbar k, \quad (236.3)$$

i.e., $\omega_{\vec{k}} \propto k$ p/ $k \ll 1$: similar fônons

↳ c : velocidade do som

tilibra

· detalhes Eq. (235.1):

como $u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 = 1$, podemos considerar:

$u_{\vec{k}} = \cosh \varphi_{\vec{k}}$ e $v_{\vec{k}} = \sinh \varphi_{\vec{k}}$

↳ $(\Pi) = A_{\vec{k}}\, 2 \sinh \varphi_{\vec{k}} \cosh \varphi_{\vec{k}} + B_{\vec{k}} (\cosh^2 \varphi_{\vec{k}} + \sinh^2 \varphi_{\vec{k}}) = 0$

$\sinh 2\varphi_{\vec{k}}$ $\qquad$ $\cosh 2\varphi_{\vec{k}}$

↳ $\tanh 2\varphi_{\vec{k}} = -\dfrac{B_{\vec{k}}}{A_{\vec{k}}}$ $\rightarrow$ $\cosh 2\varphi_{\vec{k}} = \dfrac{A_{\vec{k}}}{\sqrt{A_{\vec{k}}^2 - B_{\vec{k}}^2}} = \dfrac{A_{\vec{k}}}{\omega_{\vec{k}}}$

e $\sinh 2\varphi_{\vec{k}} = \dfrac{-B_{\vec{k}}}{\sqrt{A_{\vec{k}}^2 - B_{\vec{k}}^2}} = -\dfrac{B_{\vec{k}}}{\omega_{\vec{k}}}$

como $2\cosh^2 \varphi_{\vec{k}} = 1 + \cosh 2\varphi_{\vec{k}}$

↳ $u_{\vec{k}}^2 = \dfrac{1}{2}\left(1 + \dfrac{A_{\vec{k}}}{\omega_{\vec{k}}}\right)$

e $2\sinh^2 \varphi_{\vec{k}} = -1 + \cosh 2\varphi_{\vec{k}}$

↳ $v_{\vec{k}}^2 = \dfrac{1}{2}\left(-1 + \dfrac{A_{\vec{k}}}{\omega_{\vec{k}}}\right)$

Obs.: o procedimento discutido acima é a chamada teoria de Bogoliubov p/ o gás de bosons fracamente interagente.

tilibra