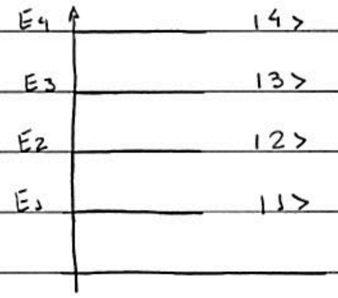
· Sistema N partículas não-interagentes.

hamiltoniano:

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + V(\vec{r}_i) = \sum_{i=1}^{N} H_0(i) \quad : \text{comparar c/ Eq. (175.1)} \qquad (184.1)$$

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

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



Notação estados:

$\alpha, \beta, \ldots, \gamma = 1, 2, 3, 4, \ldots$

e $|\psi\rangle = |\alpha(1)\ \beta(2) \ldots \gamma(N)\rangle$

; $\alpha, \beta, \ldots, \gamma$ :: fixos !

$= |\alpha(1)\rangle\,|\beta(2)\rangle \ldots |\gamma(N)\rangle$

em princípio: $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$; $E = E_\alpha + E_\beta + \ldots + E_\gamma$

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

(i) bósons.

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

vamos determinar a cte de normalização C ;

$\langle \psi_S | \psi_S \rangle = |C|^2 \langle \psi | S^\dagger S | \psi \rangle = |C|^2 \langle \psi | S | \psi \rangle$

↑ Eqs. (179.5) e (179.6)

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

pois $|\alpha(i)\rangle$: ortonormais

$$\underbrace{\quad}_{\vphantom{}} \quad \vdots \quad \langle \alpha(1) | \alpha_P(1) \rangle \langle \beta(2) | \beta_P(2) \rangle \dots \langle \gamma(N) | \gamma_P(N) \rangle \qquad (185.1)$$

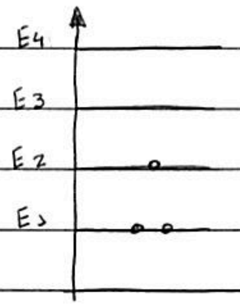
onde $\alpha_P, \beta_P, \dots, \gamma_P$ = permutação $\alpha, \beta, \dots, \gamma$

se estado $|\psi\rangle$ é tal que há

n_1 partículas no estado (de uma partícula) $|1\rangle$

n_2 " " " " $|2\rangle$

$\vdots$



$n_i = 0, \ i \geq 3$

$n_2 = 1$

$n_1 = 2$ $\qquad$ ⊕ vínculo: $\sum_i n_i = N$

↳ # permutações tal que produto escalar em (185.1) é $\neq 0$:

$n_1!\, n_2! \dots$ $\qquad$ (Lembrar $0! = 1$)

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

↳ $$|\psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_\alpha n_\alpha!}} \sum_P P |\alpha(1)\, \beta(2) \dots \gamma(N)\rangle \qquad (185.2)$$

Ex.: sistema $N=3$ partículas e $n_1=2$, $n_2=1$, $n_i=0$, $i \geq 3$;

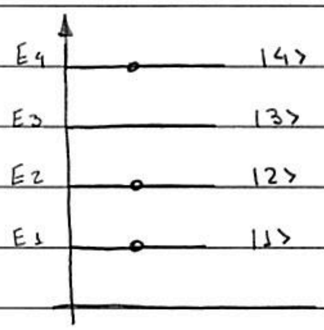
$$|\psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!\,2!\,1!}} \sum_P P \underbrace{|1(1)\,1(2)\,2(3)\rangle}_{|1(1)\rangle\,|1(2)\rangle\,|2(3)\rangle}$$

$$= \frac{2}{\sqrt{12}}\Big(|1(1)\,1(2)\,2(3)\rangle + |2(1)\,1(2)\,1(3)\rangle + |1(1)\,2(2)\,1(3)\rangle \Big)$$

(ii) férmions.

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

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



p/ férmions: $n_i = 0$ ou 1.

considerar, e.g., partículas 1 e 2 no estado $|\alpha\rangle$; temos que

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

mas, Eq. (179.3): $A(1+P_{12}) = (1+(-1)^P)A = 0$.

sobre a cte de normalização C, similar Eq. (185.1):

$$\langle\psi_A|\psi_A\rangle = |C|^2\langle\psi|A^\dagger A|\psi\rangle = |C|^2\langle\psi|A|\psi\rangle$$

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

$= |C|^2 \cdot \frac{1}{N!}$: pois como $n_i = 0$ ou 1 há apenas 1 permutação tal que produto escalar $\neq 0$.

escolhendo a fase de C, podemos escrever

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

ou (187.1)

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

notar: - se $|\alpha\rangle = |\beta\rangle \rightarrow |\psi_A\rangle = 0$

- $P_{ij} |\psi_A\rangle = \sqrt{N!}\, P_{ij} A |\alpha(1)\, \beta(2) \ldots \gamma(N)\rangle$

Eq. (179.4) $\;= \sqrt{N!}\, (-1)^1 A |\alpha(1)\, \beta(2) \ldots \gamma(N)\rangle = -|\psi_A\rangle$, i.e.

permutação partículas i e j $\rightarrow$ troca sinal do estado antisimétrico $|\psi_A\rangle$; (187.2)

p/ o determinante de Slater, ação op. permutação P_{ij} corresponde à troca colunas i e j !

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

$n_3 = 0$ e $n_i = 0$, $i \geq 5$;

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

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

notar: apenas $P=1$ contribui p/ determinação cte de normalização C!

tilibra

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

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

notar: $a^{+}_{\vec{p}} / a_{\vec{p}}$: op. criação/destruição partícula (boson) no estado de partícula única $|\vec{p}\rangle$ (veja discussão abaixo p/ detalhes)

· vamos verificar que

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

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

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

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

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

$n_\alpha |\alpha_1(1) \ldots \alpha_N(N)\rangle$, pois termos não-nulos são tais que $\langle\alpha(i)|\alpha_j(i)\rangle \neq 0$, i.e., $\alpha = \alpha_j$!

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

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

· operadores de duas partículas ou dois corpos:

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