Partículas idênticas e segunda quantização.

Refs.: Cap. 14, Messiah
Cap. 1, Schwabl
Cap. 1, Negele and Orland

· Inicial: sobre o problema de muitos corpos.

ideia: introdução métodos/conceitos utilizados p/ a descrição de um sistema de N partículas, em particular, sistema de N partículas interagentes.

caso geral: sistema de N partículas descrito pelo hamiltoniano:

$$H = T + U_{ext} + V$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2m} p_i^2 + \sum_{i=1}^{N} U_{ext}(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \qquad (1.1)$$

em geral: solução do problema de autovalores:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

p/ $N \gg 1$: dificuldades!

↳ procedimentos:
· aproximações de campo-médio
· funções de Green → teoria de perturbação
· grupo de renormalização
· métodos numéricos: QMC, VMC, DMRG, NRG, DMFT, ED

↳ conceitos:

- excitações elementares: quasi-partículas,
  modos coletivos;
- parâmetro de ordem;
- quebra espontânea de simetria;
- classes de universalidade;

↳

- funções de correlação

- Sobre os métodos numéricos:

QMC : quantum Monte Carlo
VMC : variational " "
DMRG : density matrix renormalization group
NRG : numerical " "
DMFT : dynamical mean-field theory
ED : exact diagonalization

· Partículas idênticas.

Mecânica clássica: partículas idênticas: distinguíveis
Mecânica quântica: " " : indistinguíveis (3.1)

ideia: estudar as consequências da <u>indistinguibilidade</u> das partículas.

Definição: 2 partículas são <u>idênticas</u> se suas propriedades (massa, carga elétrica, spin, ...) são iguais;

ou

2 partículas são idênticas se elas se comportam do mesmo modo sob as mesmas condições e, assim, elas não podem ser distinguidas através de $\forall$ processo de medida.
(Nolting) (3.2)

considerar: sistema N partículas;

notação: $\vec{r}_i, \vec{p}_i, \vec{S}_i$: variáveis dinâmicas partícula $\underline{\underline{i}}$
$x_i = (\vec{r}_i, \sigma_i)$
$\quad$ ↳ autovalor S_i^z (3.3)

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

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

nesse caso: permutação de N partículas é uma operação bem definida ↳ $\exists$ <u>operador permutação</u> associado ao espaço de Hilbert $\mathcal{E}$;

· próxima etapa: determinação dos <u>operadores de permutação</u>

· considerar: partícula i,

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

$$A(i)|\alpha(i)\rangle = \alpha|\alpha(i)\rangle \qquad (4.1)$$

↑ conjunto números quânticos

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

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

$$= |\alpha(1)\rangle|\beta(2)\rangle\ldots|\gamma(N)\rangle : \qquad (4.2)$$

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

Obs.: notação alternativa estados (4.2):

$$|\alpha_1(1)\,\alpha_2(2)\ldots\alpha_N(N)\rangle = |\alpha_1(1)\rangle|\alpha_2(2)\rangle\ldots|\alpha_N(N)\rangle \qquad (4.3)$$

Ex. 1: partículas s/ spin,

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

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

(4.4)

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

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

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

Ex. 2: partículas 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 $S^z(i) = S^z_i$ (5.1)

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

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

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

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

$= \langle x_1\, x_2 \ldots x_N | \psi\rangle = \psi(x_1, x_2, \ldots, x_N)$: (5.2)

: função de onda sistema de N partículas

· operador de permutação,

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

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

$N = 3$: P " " $\{1, P_{12}, P_{31}, P_{23}, P_{123}, P_{321}\}$ (5.3)

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

$$P_{ij}\,|\alpha(1)\,\beta(2)\ldots\mu(i)\ldots\lambda(j)\ldots\gamma(N)\rangle \equiv \quad (6.1)$$

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

notar posição índices i e j w.r.t. estado original!

notar: P_{ij} * vetor de base = vetor de base $\rightarrow P_{ij}$: op. unitário;

de fato, p/ $\forall$ P, temos que $PP^{+} = P^{+}P = 1 \quad (6.2)$

caso geral: op. permutação N partículas:

$\underbrace{P_{ij\ldots k}}$ n-índices, $n \leq N$

em particular, P_{ijk} : $i \rightarrow k$; $j \rightarrow i$; $k \rightarrow j$

Ex.: sistema $N = 3$ partículas,

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

$$(6.3)$$

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

notar notação Eqs. (6.1) e (6.3): posição do índice de partícula i preservado!

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

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

$$= \sum_{\alpha\beta\gamma} |\alpha(1)\,\beta(2)\,\gamma(3)\rangle \langle \beta(1)\,\alpha(2)\,\gamma(3)|\psi\rangle \qquad (7.1)$$

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

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

↳ $\langle \vec{r}_1\, \vec{r}_2\, \vec{r}_3 | P_{12}|\psi\rangle = P_{12}\,\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_3)$: (7.2)

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

Obs.: veja também pg. 7.1

Exercícios: mostrar que

1) $\langle \vec{r}_1\, \vec{r}_2\, \vec{r}_3 | P_{13}|\psi\rangle = P_{13}\,\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = \psi(\vec{r}_3, \vec{r}_2, \vec{r}_1)$;

2) $P_{123}|\psi\rangle = \sum_{\alpha\beta\gamma} |\alpha(1)\,\beta(2)\,\gamma(3)\rangle \langle \beta(1)\,\gamma(2)\,\alpha(3)|\psi\rangle$; (7.3)

3) $\langle \vec{r}_1\, \vec{r}_2\, \vec{r}_3 | P_{123}|\psi\rangle = P_{123}\,\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_1)$.

: caso geral, p/ sistema N partículas:

$$\langle \vec{r}_1\, \vec{r}_2 \ldots \vec{r}_i \ldots \vec{r}_j \ldots \vec{r}_N | P_{ij}|\psi\rangle = \langle \vec{r}_1\, \vec{r}_2 \ldots \vec{r}_j \ldots \vec{r}_i \ldots \vec{r}_N|\psi\rangle \qquad (7.4)$$

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

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

Eq. (7.2): procedimento alternativo.

p/ a representação de coordenadas. Eq. (6.3) assume a forma

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

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

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

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

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

· sobre os operadores,

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

similar Eq. (7.4), temos que

$$P_{ij}\,\hat{O}(1,2,\ldots,i,\ldots,j,\ldots,N)\,P^{\dagger}_{ij} = \hat{O}(1,2,\ldots,j,\ldots,i,\ldots N) \qquad (8.1)$$

em particular, p/ $N=3$:

$$P_{12}\,\hat{O}(1,2,3)\,P^{\dagger}_{12} = \hat{O}(2,1,3) \quad : \text{comparar Eq. (7.2)}$$

$$P_{123}\,\hat{O}(1,2,3)\,P^{\dagger}_{123} = \hat{O}(2,3,1) \quad : \quad \text{"} \quad \text{Eq. (7.3)} \qquad (8.2)$$

Ex.: $N=3$ e $\hat{O} = A(1)$: veja Eq. (4.1)

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

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

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

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

↳ $P_{123}\,A(1)\,P^{\dagger}_{123} = A(2)$: comparar Eq. (8.2), primeira entrada!

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

↳ $\hat{O}$: op. simétrico w.r.t. permutação N partículas (8.3)

Ex. ops. simétricos:

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

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

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

(9.1)

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

: op. densidade de corrente de partículas

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

· Eq. (1.1) c/ $V(r_i, r_j) = V(r_j, r_i)$

Obs. Eq. (9.1): expressões ops. em primeira quantização!

· propriedades ops de permutação,

(i) se P' e P'' : 2 permutações arbitrárias de N partículas
↳ $P = P' P''$: permutação N partículas (9.2)

Ex.: $N = 3$; Eqs. (7.2) e (7.3):

$$P_{31} P_{12} \psi(x_1, x_2, x_3) = P_{31} \psi(x_2, x_1, x_3) = \psi(x_2, x_3, x_1) = P_{123} \psi(x_1, x_2, x_3)$$

$$P_{12} P_{31} \psi(x_1, x_2, x_3) = P_{12} \psi(x_3, x_2, x_1) = \psi(x_3, x_1, x_2) = P_{132} \psi(x_1, x_2, x_3)$$

notar: $P_{31} P_{12} \neq P_{12} P_{31}$; (9.3)

de fato, em geral : $P' P'' \neq P'' P'$

(ii) Eq. (9.3): $P_{123} = P_{12} P_{23}$, i.e.,

permutação n = 3 partículas = produto permutações n = 2 partículas

caso geral: se P: permutação arbitrária N partículas

↳ podemos escrever

$$P = \text{produto de permutações } n=2 \text{ partículas (\underline{transposições})} \tag{10.1}$$

↳ definição: se o produto (10.1) é tal que:

$$\begin{aligned} &\text{número par de transposições} : \text{paridade } P = +1 \\ &\quad\text{" ímpar " "} : \text{paridade } P = -1 \end{aligned} \tag{10.2}$$

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

Ex.: N = 3, Eq. (5.3):

	1	P_{12}	P_{31}	P_{23}	P_{123}	P_{321}
paridade:	+1	−1	−1	−1	+1	+1

(10.3)

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

como Eq. (6.2): $PP^{\dagger} = P^{\dagger}P = 1 \to P^{\dagger} = P^{-1} = P \to P^{\dagger} = P$: P é um <u>observável</u>;

além disso, $P^2 = 1$ → 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} ~ autovalor +1;
$|\psi\rangle$: simétrico w.r.t. permutação $i \leftrightarrow j$

(11.1)

se $P_{ij}|\psi\rangle = -|\psi\rangle$: autovetor op. P_{ij} ~ autovalor −1;
$|\psi\rangle$: antisimétrico w.r.t. permutação $i \leftrightarrow j$

temos que,

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

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

↳ $S_{ij} + A_{ij} = 1$ (11.2)

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 $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$;

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

(11.3)

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

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;

Ex.: $N=3$, veja Eq. (5.3):

$P|u\rangle$: $1|u\rangle$, $P_{12}|u\rangle$, $P_{31}|u\rangle$, $P_{23}|u\rangle$, $P_{123}|u\rangle$, $P_{321}|u\rangle$: : $3!$ 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:

$$P|u\rangle = c_p|u\rangle \; ; \; c_p \in \mathbb{C} \, , \; \text{i.e.,} \; \dim \mathcal{E}_u = 1 \tag{12.1}$$

verifica-se que : $c_p = \pm 1$:
de fato, se $P = P_{ij}$ -> $c_p = \pm 1$: veja Eq. (11.1);
como $\forall P$ = produto transposições P_{ij} -> $c_p = \pm 1$.

↳ temos 2 tipos de estados $|u\rangle$ que satisfazem (12.1):

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

$P|u\rangle = (-1)^P|u\rangle$: " antisimétrico " " " " (12.2)

onde P é uma permutação arbitrária de N partículas.

notar: p/ $P = P_{ij}$: Eq. (12.1) ok c/ Eq. (11.1)

· propriedade (12.2) permite definir 2 subespaços de $\mathcal{E}$:

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

(13.1)

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

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

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

(13.2)

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

Ex.: $N = 2$: $S = \frac{1}{2!}(1 + P_{12})$ e $A = \frac{1}{2!}(1 - P_{12})$: Eq. (11.2)

$N = 3$: Eqs. (10.3) e (13.2):

$$S = \frac{1}{6!}\left(1 + P_{12} + P_{31} + P_{23} + P_{123} + P_{321} \right)$$

(13.3)

$$A = \frac{1}{6!}\left(1 - P_{12} - P_{31} - P_{23} + P_{123} + P_{321} \right)$$

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

· propriedades projetores S e A:

$$SP = \frac{1}{N!} \sum_{P'} P'P \overset{\text{Eq. (10.1)}}{=} \frac{1}{N!} \sum_{P''} P'' = S$$

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

de fato, verifica-se que (exercício):

$\cdot\ SP = PS = S$ e $AP = PA = (-1)^P A$;

$\cdot\ S = S^+$ e $A = A^+$; (14.1)

$\cdot\ S^2 = S$ e $A^2 = A$.

· 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 $\rightarrow$ $\forall$ permutação P
não deve alterar as propriedades dinâmicas
do sistema de N partículas. (14.2)

· vamos verificar consequências (14.2):

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

se $|\psi(t_0)\rangle$: estado inicial sistema
$\hookrightarrow$ $|\psi(t)\rangle = U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle$: " " instante t;

similar: se $P|\psi(t_0)\rangle$: estado inicial sistema
$\xrightarrow{(14.2)}$ $P|\psi(t)\rangle = U(t,t_0)\big(P|\psi(t_0)\rangle\big)$: " " instante t;

notar:

$|\psi(t)\rangle = U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle \rightarrow P|\psi(t)\rangle = P\big(U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle\big) =$

$= U(t,t_0)\big(P|\psi(t_0)\rangle\big)$

como $|\psi(t_0)\rangle$: estado arbitrário
$\hookrightarrow$ $PU(t,t_0) = U(t,t_0)P \rightarrow [P, U(t,t_0)]$ (14.3)

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

$\hookrightarrow P\left(i\hbar \frac{dU}{dt}\right) = PHU = \left(i\hbar \frac{dU}{dt}\right) P$ Eq. (14.3)

$\rightarrow PHU = HUP = HPU$

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

$\hookrightarrow [P,H]U = 0 \rightarrow [P,H] = 0$ (15.1)

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

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

como U e PUP^{+} satisfazem a mesma eq. de movimento

$\hookrightarrow U = PUP^{+} \rightarrow [P,U] = 0$ (15.2)

Resumo Eqs. (15.1) e (15.2): 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;

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

$P|\psi\rangle$ = autoestado H ~ autovalor E;

se $|\psi\rangle \neq P|\psi\rangle \rightarrow$ autovalor E degenerado: degenerescência de troca (15.3)

(iii) observáveis: ops. simétricos.

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

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

se " " $= P|b\rangle \to P|b\rangle \xrightarrow{\quad '' \quad} |b\rangle$

Eq. (14.2)!

↳ $B(P|b\rangle) = b(P|b\rangle) = PB|b\rangle \to [P, B] = 0$, i.e., (16.1)

B : op. simétrico : veja Eq. (8.3)

· de fato, Eqs. (15.1) e (16.1) → definição alternativa partículas idênticas: um sistema de N partículas é um sistema de partículas idênticas se o hamiltoniano H e todos os observáveis B são ops. simétricos w.r.t. permutação de N partículas. (16.2)

(iv) postulado de simetrização,

considerar, e.g. observável A : espectro discreto e limitado:

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

p/ medida simultânea $A(i)$ p/ cada partícula,

Eq. (14.2) → podemos afirmar somente que há:

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

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

$\vdots$ (16.3)

n_M " " " " " " $|M\rangle$.

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

↳ $\dfrac{N!}{\prod_{\alpha=1}^{M} n_\alpha!}$: # estados caracterizados pelo conjunto n_α (16.3)

Q.: Qual ou quais dos 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. (12.2); (17.1)

- simétricos: bósons: fótons ($s=1$), He^4, fônons ($s=0$), magnons ($s=1$), partículas α;
- antisimétricos: férmions: elétrons, prótons, nêutrons.

· além disso, temos o teorema spin-estatística:

bósons: partículas spin inteiro (17.2)
férmions: " " semi-inteiro

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

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

(v) simetria/antisimetria do estado do sistema não é alterada pela evolução temporal e medida observável;
considera, e.g., bosons:
• Eqs. (13.2) e (15.2) $\rightarrow [S, U(t,t_0)] = 0$
↳ se $|\psi(t_0)\rangle = S|\psi(t_0)\rangle$: simétrico w.r.t. permutação N part.
↳ $|\psi(t)\rangle = S|\psi(t)\rangle$: " " " " "

• Eqs. (13.2) e (16.1) $\rightarrow [S, B] = 0$
se $|\psi\rangle$: simétrico $\rightarrow |\psi\rangle = \sum_b c(b)|b\rangle$ somente autoestados B simétricos!

↳ $|\psi\rangle \xrightarrow[B=b]{\text{MEDIDA IDEAL}} |b\rangle$
estado simétrico | | estado antisimétrico

· Sistema N partículas não-interagentes.

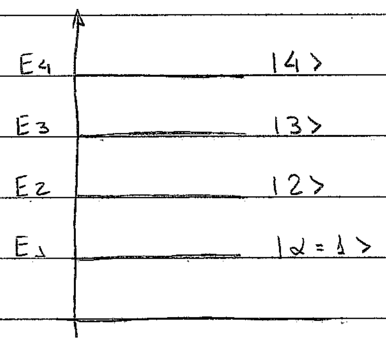
hamiltoniano:

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2m} p_i^2 + U_{ext}(\vec{r}_i) = \sum_{i=1}^{N} H_0(i) \; : \; \text{op. simétrico, Eq. (8.3)} \qquad (18.1)$$

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

ou $H_0|\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha\rangle$

hipótese: H_0: espectro discreto e não-degenerado



Obs.: notação estados:
$\alpha, \beta, \ldots, \gamma = 1, 2, \ldots$
ou $\alpha_1, \alpha_2, \ldots = 1, 2, \ldots$

considerar estado N partículas:

$$|\psi\rangle = |\alpha(1)\, \beta(2) \ldots \gamma(N)\rangle = |\alpha(1)\rangle |\beta(2)\rangle \ldots |\gamma(N)\rangle, \qquad (18.2)$$

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

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

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

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

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

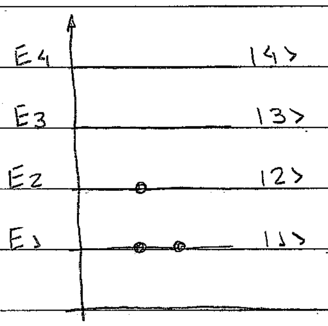
(i) bósons,

$$|\psi_s\rangle = \mathbb{C}\, S|\psi\rangle = \overset{\text{cte de normalização}}{\mathbb{C}} \frac{1}{N!}\sum_P P|\alpha(1)\beta(2)\ldots\gamma(N)\rangle$$

verifica-se que (veja abaixo)

$$|\psi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!\prod_\alpha n_\alpha!}} \sum_P P|\alpha(1)\beta(2)\ldots\gamma(N)\rangle \qquad (19.1)$$

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

$$\text{Eq. (19.1)}: \quad |\psi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!\,2!\,1!}} \sum_P P\,\underbrace{|1(1)\;1(2)\;2(3)\rangle}_{|1(1)\rangle|1(2)\rangle|2(3)\rangle} \qquad (19.2)$$

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

· Detalhes: determinação cte de normalização $\mathbb{C}$;

$$\langle\psi_s|\psi_s\rangle = |\mathbb{C}|^2\langle\psi|S^+S|\psi\rangle \overset{\text{Eq. (14.1)}}{=} |\mathbb{C}|^2\langle\psi|S|\psi\rangle$$

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

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

e.g., se $P = P_{12} \to \alpha_P = \beta,\ \beta_P = \alpha, \underbrace{\ldots, \gamma_P = \gamma}$

índices não modificados.

$\hookrightarrow \langle \psi_S | \psi_S \rangle = |C|^2 \frac{1}{N!} \sum_P \langle \alpha(1) | \alpha_P(1) \rangle \langle \beta(2) | \beta_P(2) \rangle \ldots \langle \gamma(N) | \gamma_P(N) \rangle$ (20.1)

se estado $|\psi\rangle$ (18.2) é tal que há

n_1 partículas no estado de partícula única $|\alpha = 1\rangle$
n_2 " " " " " " $|2\rangle$
$\vdots$

$\hookrightarrow$ # permutações tal que produto escalar em (20.1) $\neq 0$:

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

$\hookrightarrow \langle \psi_S | \psi_S \rangle = |C|^2 \cdot \frac{1}{N!} \left(\prod_\alpha n_\alpha! \right) = 1 \to |C| = \sqrt{\frac{N!}{\prod_\alpha n_\alpha!}}$ (20.2)

(ii) férmions,

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

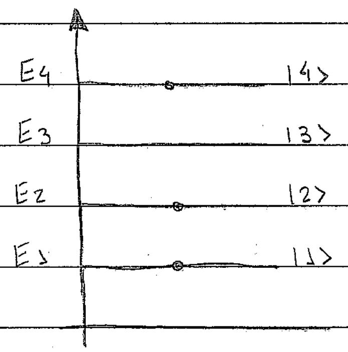
verifica-se que (veja abaixo):

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

ou (21.1)

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

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 (21.2)

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

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

mas, Eq. (14.1): $A(1 + P_{12}) = (1 + (-1)^P) A = 0$;

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

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

$$\overset{\text{Eq. (14.1)}}{=} \sqrt{N!}\,(-1)^1 A|\alpha(1)\,\beta(2)\dots\gamma(N)\rangle = -|\psi_A\rangle\text{, i.e.,}$$

permutação partículas i e j -> troca sinal do estado antisimétrico $|\psi_A\rangle$; (22.1)

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 $n_\alpha=0$ p/ $\alpha\geq 5$,

veja Eq. (21.2)

Eq. (27.1): $|\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}}\sum_P (-1)^P P\,|1(1)\,2(2)\,4(3)\rangle$

$$= \frac{1}{\sqrt{3!}}\begin{vmatrix} |1(1)\rangle & |1(2)\rangle & |1(3)\rangle \\ |2(1)\rangle & |2(2)\rangle & |2(3)\rangle \\ |4(1)\rangle & |4(2)\rangle & |4(3)\rangle \end{vmatrix} \qquad (22.2)$$

· Detalhes: determinação cte de normalização C;

$$\langle\psi_A|\psi_A\rangle = |C|^2\langle\psi|A^\dagger A|\psi\rangle \overset{\text{Eq. (14.1)}}{=} |C|^2\langle\psi|A|\psi\rangle$$

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

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

escolhendo a fase dada -> $C=\sqrt{N!}$

· Segunda quantização
(p/ detalhes, veja Caps. 1-3, Schwabe)

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 (19.1) pode ser escrito como:

$$|n_1 n_2 \ldots\rangle = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_\alpha n_\alpha!}} \sum_P P |\alpha(1)\beta(2)\ldots\gamma(N)\rangle \tag{23.1}$$

onde $\alpha, \beta, \ldots, \gamma$: índices fixos;
n_α: número de ocupação : # partículas no estado de partícula única $|\alpha\rangle$, $\alpha = 1, 2, \ldots$,
lembrar Eq. (4.1):

$$A(i)|\alpha(i)\rangle = \alpha|\alpha(i)\rangle \quad \underline{\text{ou}} \quad A|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad \alpha = 1, 2, \ldots, \tag{23.2}$$

onde $A(i)$: observável ~ espaço vetorial 1 partícula $\mathcal{E}^{(i)}$;

em princípio, $n_\alpha = 0, 1, 2, \ldots$,
entretanto, lembrar vínculo: $\sum_{\alpha \geq 1} n_\alpha = N$: # partículas.

· vetores $|n_1 n_2 \ldots\rangle$: base espaço vetorial simétrico de N-partículas $\mathcal{E}_N^{(S)}$: Eq. (13.1);

· ao invés de $\mathcal{E}_N^{(S)}$, é interessante considerar o espaço vetorial

$$F = \mathcal{E}_{N=0}^{(S)} \oplus \mathcal{E}_{N=1}^{(S)} \oplus \mathcal{E}_{N=2}^{(S)} \oplus \ldots = \bigoplus_{N\geq 0} \mathcal{E}_N^{(S)} \quad : \text{espaço de Fock} \tag{24.1}$$

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

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

$$(24.2)$$

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

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

em particular,

$$|0\rangle \equiv |0\,0 \ldots\rangle \in \mathcal{E}_{N=0}^{(S)} : \text{estado } N=0 \text{ partículas: vácuo (estado de referência)} \tag{24.3}$$

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

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

$$(24.4)$$

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

onde: a_α^{+} : op. de criação : adiciona 1 partícula (bóson) no estado de partícula única $|\alpha\rangle$

$$(24.5)$$

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

· sobre a definição (24.5).

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

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

$* \; | n_1\, n_2 \dots n_\alpha \dots \rangle$:

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

$$= \sqrt{n'_\alpha + 1}\, \underbrace{\langle n'_1\, n'_2 \dots, n'_\alpha - 1, \dots | n_1\, n_2 \dots n_\alpha \dots \rangle}_{\prod_{\beta \neq \alpha} \delta_{n'_\beta, n_\beta}\, \delta_{n'_\alpha + 1, n_\alpha}}$$

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

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

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

↳ definição op. a_α

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:
(veja pg. 25.1 p/ detalhes)

$$[a_\alpha, a_\beta] = [a^\dagger_\alpha, a^\dagger_\beta] = 0 \quad e \quad [a_\alpha, a^\dagger_\beta] = \delta_{\alpha,\beta} \qquad (25.1)$$

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

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

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

de fato, temos que:

$$|n_1 n_2 \ldots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \ldots}} (a^\dagger_1)^{n_1} (a^\dagger_2)^{n_2} \ldots |0\rangle \qquad (25.2)$$

Exercício: mostrar que estado (25.2) é normalizado.

· mudança de base,
considerar 2 bases distintas p/ os estados de partícula única:

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

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

Ex.: A: op. posição $\vec{r}$: $|\alpha\rangle = |\vec{r}\rangle$
B: " momento $\vec{p}$: $|\beta\rangle = |\vec{p}\rangle$

· sobre a álgebra (25.1);

· $[a_\alpha, a_\beta] = 0$:

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

(ii) se $\alpha \neq \beta$, Eq. (24.4):

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

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

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 $\rightarrow a_\alpha a_\beta - a_\beta a_\alpha = 0$

· $[a_\alpha, a^\dagger_\beta] = \delta_{\alpha,\beta}$

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

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

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

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

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

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

(ii) $\alpha = \beta$,

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

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

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

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

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

podemos identificar, veja Eq. (25.2):

$$|\alpha\rangle = |00\ldots n_\alpha = 1 \ldots\rangle = a^\dagger_\alpha |0\rangle \qquad (26.1)$$

$$|\beta\rangle = |00\ldots n_\beta = 1 \ldots\rangle = b^\dagger_\beta |0\rangle$$

como, p/ os estados de partícula única: $|\alpha\rangle = \sum_\beta |\beta\rangle\langle\beta|\alpha\rangle$

↳ $|\alpha\rangle = a^\dagger_\alpha|0\rangle = \sum_\beta \langle\beta|\alpha\rangle b^\dagger_\beta |0\rangle$, i.e.,

$$a^\dagger_\alpha = \sum_\beta \langle\beta|\alpha\rangle b^\dagger_\beta$$

: relação entre ops. $a_\alpha / a^\dagger_\alpha$

e $a_\alpha = \sum_\beta \langle\alpha|\beta\rangle b_\beta$ e $b_\beta / b^\dagger_\beta$ (26.2)

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

· operador número de partículas:

$$\hat{n}_\alpha = a^\dagger_\alpha a_\alpha \qquad (26.3)$$

Eq. (24.4) → $\hat{n}_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle = a^\dagger_\alpha a_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle$

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

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

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

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

↳ $\hat{N} = \sum_{\alpha} \hat{n}_{\alpha} = \sum_{\alpha} a^{+}_{\alpha} a_{\alpha}$: operador número total de partículas (27.1)

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

· operadores de uma partícula ou um corpo:

Definição: $\hat{O}_1 = \sum_{i=1}^{N} \hat{O}_i$ (27.2)
$\hat{O}_i$ ↳ índice de partícula

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

$$\hat{T} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2m} p_i^2 \; ; \; \vec{p}_i : \text{momento partícula } i \qquad (27.3)$$

Eq. (27.3) : op. $\hat{T}$ em primeira quantização

· 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,

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

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

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

$= \hat{n}_{\alpha}$: veja pg. 28.1

↳ $\hat{O}_1 = \sum_{\alpha} \langle\alpha|\hat{O}|\alpha\rangle a^{+}_{\alpha} a_{\alpha}$ (27.4) caso geral: Eqs. (26.2) e (27.4):

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

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

ou $\hat{O}_1 = \sum_{\alpha\alpha'} \langle\alpha|\hat{O}|\alpha'\rangle\, a^{+}_{\alpha} a_{\alpha'}$ (28.1)

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

Ex.: op. energia cinética (27.3),

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

$$\langle\vec{p}|\hat{T}|\vec{p}'\rangle = \langle\vec{p}|\frac{1}{2m}\hat{p}^2|\vec{p}'\rangle = \frac{p^2}{2m}\,\delta(\vec{p}-\vec{p}');$$

Eq. (28.1): $\hat{T} = \sum_{\vec{p},\vec{p}'} \langle\vec{p}|\hat{T}|\vec{p}'\rangle\, a^{+}_{\vec{p}} a_{\vec{p}'}$

(28.2)

$\hat{T} = \sum_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} a^{+}_{\vec{p}} a_{\vec{p}}$: op. $\hat{T}$ em segunda quantização

notar: $a^{+}_{\vec{p}}/a_{\vec{p}}$: op. criação/destruição partícula (bóson) no estado de partícula única $|\vec{p}\rangle$.
(veja pg. 39 p/ detalhes).

: vamos verificar que

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

Eq. (23.1) em termos op. de simetrização (13.2):

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

$$= \underbrace{\left(\sum_i |\alpha(i)\rangle\langle\alpha(i)|\right)}_{(I)} \underbrace{\sqrt{\frac{N!}{\prod_\alpha n_\alpha!}}}_{C} S|\alpha_1(1)\, \alpha_2(2) \ldots \alpha_N(N)\rangle ;$$

$\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N$: fixos!

$$= C\, S \underbrace{\sum_i |\alpha(i)\rangle\langle\alpha(i)|\alpha_1(1)\, \alpha_2(2) \ldots \alpha_N(N)\rangle}_{n_\alpha |\alpha_1(1) \ldots \alpha_N(N)\rangle}$$

, pois (I) é 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., $\alpha = \alpha_j$!

$$= n_\alpha\, C\, S |\alpha_1(1)\, \alpha_2(2) \ldots \alpha_N(N)\rangle$$

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

como $|n_1 n_2 \ldots\rangle$ vetor base $\to$ (*).

· Operadores de duas partículas ou dois corpos:

Definição: $\hat{O}_2 = \sum_{i<j=1}^{N} \hat{O}_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{O}_{ij}$, (29.1)

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

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

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \qquad (29.2)$$

· 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,

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

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

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

$$= \frac{1}{2} \sum_{\alpha\alpha'} \langle\alpha\alpha'|\hat{O}|\alpha\alpha'\rangle \underbrace{\sum_{i \neq j} |\alpha(i)\alpha'(j)\rangle\langle\alpha(i)\alpha'(j)|}_{= \hat{n}_\alpha \hat{n}_{\alpha'} - \delta_{\alpha\alpha'} \hat{n}_\alpha}$$

$= \hat{n}_\alpha \hat{n}_{\alpha'} - \delta_{\alpha\alpha'} \hat{n}_\alpha$: veja pg. 30.1

como:

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

$$= a^+_\alpha a^+_{\alpha'} a_\alpha a_{\alpha'} = a^+_\alpha a^+_{\alpha'} a_{\alpha'} a_\alpha$$

$$\hookrightarrow \hat{O}_2 = \frac{1}{2}\sum_{\alpha\alpha'} \langle\alpha\alpha'|\hat{O}|\alpha\alpha'\rangle\, a^+_\alpha a^+_{\alpha'} \underbrace{a_{\alpha'} a_\alpha}_{\text{notar ordem ops.!}} \quad (30.1)$$

caso geral: Eqs. (26.2) e (30.1):

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

$$* \; b^+_\lambda b^+_\mu b_\nu b_\sigma$$

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

$$* \; b^+_\lambda b^+_\mu b_\nu b_\sigma$$

ou

$$\hat{O}_2 = \frac{1}{2}\sum_{\lambda\mu\nu\sigma} \langle\lambda\mu|\hat{O}|\sigma\nu\rangle\, a^+_\lambda \underbrace{a^+_\mu}_{} \underbrace{a_\nu a_\sigma}_{} \quad (30.2)$$

notar ordem

notar: $\hat{O}_2$: quântico em ops. de criação/destruição;

depende elementos de matriz entre estados

de 2 partículas $|\lambda\mu\rangle = |\lambda\rangle \otimes |\mu\rangle \in \mathcal{E}^{(i)} \otimes \mathcal{E}^{(j)}$

Vamos verificar que

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

similar pg. 28.1:

$$(\mathrm{II})\,|n_1 n_2 \ldots\rangle = (\mathrm{II})\, C\, S\, |\alpha_1(1)\alpha_2(2)\ldots\alpha_N(N)\rangle$$

$$= C\, S\, (\mathrm{II})\, |\alpha_1(1)\alpha_2(2)\ldots\alpha_N(N)\rangle$$

$$= C \underbrace{\sum_{i\neq j} |\alpha(i)\alpha'(j)\rangle \underbrace{\langle\alpha(i)\alpha'(j)|\left(|\alpha_1(1)\rangle|\alpha_2(2)\rangle\ldots|\alpha_N(N)\rangle\right)}_{|\alpha_1(1)\rangle\ldots\underbrace{\langle\alpha(i)|\alpha_i(i)\rangle}_{1,\text{ se }\alpha=\alpha_i}\ldots\underbrace{\langle\alpha'(j)|\alpha_j(j)\rangle}_{1,\text{ se }\alpha'=\alpha_j}\ldots|\alpha_N(N)\rangle}}$$

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

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

$$= \left(n_\alpha n_{\alpha'} - n_\alpha\delta_{\alpha,\alpha'}\right)\underbrace{C\, S\, |\alpha_1(1)\ldots\alpha_N(N)\rangle}_{|n_1 n_2\ldots\rangle}$$

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

(B) Férmions,

Similar à Eq. (23.1), o estado (21.1) pode ser escrito como

$$|n_1 n_2 \ldots\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P P |\alpha(1)\beta(2)\ldots\gamma(N)\rangle \qquad (31.1)$$

onde $\alpha, \beta, \ldots, \gamma$: índices fixos;

n_α : número de ocupação : # partículas no estado de partícula única $|\alpha\rangle$, $\alpha = 1, 2, \ldots$: veja Eq. (23.2);

$$n_\alpha = 0 \text{ ou } 1 \oplus \text{vínculo: } \sum_{\alpha \geq 1} n_\alpha = N : \# \text{ partículas.}$$

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

· similar bósons, é interessante considerar o espaço de Fock:

$$F = \mathcal{E}_{N=0}^{(A)} \oplus \mathcal{E}_{N=1}^{(A)} \oplus \mathcal{E}_{N=2}^{(A)} \oplus \ldots = \bigoplus_{N \geq 0} \mathcal{E}_N^{(A)}; \qquad (31.2)$$

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

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

$$(31.3)$$

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

· $|0\rangle = |00\ldots\rangle \in \mathcal{E}_{N=0}^{(A)}$: estado N = 0 partículas: vácuo (estado de referência)

· sobre os operadores de criação e destruição;
a fim de preservar a propriedade (22.2), definimos:

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

e $$a_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle = n_\alpha \underbrace{(-1)^{\sum_{\beta<\alpha} n_\beta}}_{(*)} |n_1 n_2 \ldots, n_\alpha-1, \ldots\rangle \qquad (32.1)$$

onde

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

se $n_\alpha = 1 \to a^\dagger_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha = 1 \ldots\rangle = 0$; (32.2)

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

se $n_\alpha = 0 \to a_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha = 0 \ldots\rangle = 0$; (32.3)

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

de fato, (*) ~ antisimetria dos estados $|\Psi_A\rangle$.

· álgebra: verifica-se que os ops. a_α e $a^\dagger_\alpha$ satisfazem as seguintes relações de anticomutação: (veja pg. 32.2 p/ detalhes)

$$\{a_\alpha, a_\beta\} = \{a^\dagger_\alpha, a^\dagger_\beta\} = 0 \quad \text{e} \quad \{a_\alpha, a^\dagger_\beta\} = \delta_{\alpha,\beta} \qquad (32.4)$$

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

notar: $\{a^\dagger_\alpha, a^\dagger_\alpha\} = 0 \to a^\dagger_\alpha a^\dagger_\alpha = -a^\dagger_\alpha a^\dagger_\alpha = 0$: ok c/ Eq. (32.2)

$\{a_\alpha, a_\alpha\} = 0 \to a_\alpha a_\alpha = -a_\alpha a_\alpha = 0$: ok c/ Eq. (32.3)

· sobre a definição (32.1).

$$a^\dagger_\alpha |n'_1 n'_2 \dots n'_\alpha \dots\rangle = (1-n'_\alpha)(-1)^{\sum_{\beta<\alpha} n'_\beta} |n'_1 n'_2 \dots, n'_\alpha+1, \dots\rangle$$

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

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

$$= (1-n'_\alpha)(-1)^{\sum_{\beta<\alpha} n'_\beta} \underbrace{\langle n'_1 n'_2 \dots, n'_\alpha+1, \dots | n_1 n_2 \dots n_\alpha \dots\rangle}_{\prod_{r\neq\alpha} \delta_{n'_r, n_r} \delta_{n'_\alpha+1, n_\alpha}}$$

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

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

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

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

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

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

· sobre a álgebra (32.4):

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

(ii) $\alpha = \beta$

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

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

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

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

como:

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

$\hookrightarrow (a_\alpha a_\alpha^\dagger + a_\alpha^\dagger a_\alpha)|n_1 n_2 \dots\rangle = |n_1 n_2 \dots\rangle$

Exercício: utilizar o procedimento acima e verificar as demais relações de anticomutação (32.4).

· Similar Eq. (25.2), 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:

$$|n_1 n_2 \ldots\rangle = (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \ldots |0\rangle \ ; \ n_\alpha = 0 \text{ ou } 1 \qquad (33.1)$$

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. (32.4)

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

: ok c/ Eq. (32.1)

notar: ordem dos ops. $a_\alpha^\dagger$ em (33.1) é importante!

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

· op. número de partículas:

$$\hat{n}_\alpha = a_\alpha^\dagger a_\alpha \qquad (33.2)$$

Eq. (32.1) $\rightarrow$ $\hat{n}_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle = a_\alpha^\dagger a_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle$

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

$$= \underbrace{n_\alpha (1 - n_\alpha + 1)}_{n_\alpha (2 - n_\alpha)} |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle = n_\alpha |n_1 n_2 \ldots n_\alpha \ldots\rangle,$$

pois $n_\alpha(2-n_\alpha) = \begin{cases} 0, & \text{se } n_\alpha = 0 \\ 1, & \text{se } n_\alpha = 1 \end{cases}$

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

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

(34.1)

$$\hat{O}_2 = \frac{1}{2}\sum_{\lambda\mu\nu\sigma} \langle\lambda\mu|\hat{O}|\sigma\nu\rangle \underbrace{a^+_\lambda a^+_\mu}_{(*)} \underbrace{a_\nu a_\sigma}_{(*)}$$

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

Exercício: mostrar que, p/ férmions:

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

(34.2)

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

· notar: $(\text{II}) = a^+_\alpha \underbrace{a_\alpha a^+_{\alpha'}}_{-a^+_{\alpha'}a_\alpha + \delta_{\alpha\alpha'}} a_{\alpha'} - \delta_{\alpha\alpha'} a^+_\alpha a_\alpha$ ← Eq. (32.4)

$$= -a^+_\alpha a^+_{\alpha'} a_\alpha a_{\alpha'} = + a^+_\alpha a^+_{\alpha'} \underbrace{a_{\alpha'} a_\alpha}_{(*)}$$

· 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 (25.1) e (32.4) como:

$$[a_\alpha, a_\beta]_\pm = [a^+_\alpha, a^+_\beta]_\pm = 0 \quad \text{e} \quad [a_\alpha, a^+_\beta]_\pm = \delta_{\alpha\beta} \qquad (34.3)$$

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

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

· Operadores de campo,

Lembrar Eq. (26.2): $b^+_\beta = \sum_\alpha \langle\alpha|\beta\rangle a^+_\alpha$ 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

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

: ops. de campo (35.1)

$$\hat{\psi}^+(\vec{r}) = \sum_\alpha \varphi^*_\alpha(\vec{r})\, a^+_\alpha$$

nesse caso,

$\hat{\psi}^+(\vec{r})$: adiciona 1 partícula no estado partícula única $|\vec{r}\rangle$

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

· álgebra: Eq. (34.3)

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

(35.2)

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

de fato, Eqs. (34.3) e (35.1):

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

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

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

Eq. (34.1) p/ $|\alpha\rangle = |\vec{r}\rangle$:

$$\hat{O}_1 = \int d^3r\, d^3r' \, \langle \vec{r}|\hat{O}|\vec{r}'\rangle \, \hat{\psi}^+(\vec{r})\, \hat{\psi}(\vec{r}')$$

$$= \int d^3r\, d^3r' \, \hat{\psi}^+(\vec{r}) \langle \vec{r}|\hat{O}|\vec{r}'\rangle \, \psi(\vec{r}') \tag{36.1}$$

: forma geral, inclui elementos de matriz diferenciais!

$$\hat{O}_2 = \frac{1}{2}\int d^3r_1 d^3r_2 d^3r_3 d^3r_4 \, \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2|\hat{O}|\vec{r}_4 \vec{r}_3\rangle \, \psi^+(\vec{r}_1)\, \psi^+(\vec{r}_2)\, \psi(\vec{r}_3)\, \psi(\vec{r}_4)$$

$$= \frac{1}{2}\int d^3r_1 d^3r_2 d^3r_3 d^3r_4 \, \hat{\psi}^+(\vec{r}_1)\, \hat{\psi}^+(\vec{r}_2) \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2|\hat{O}|\vec{r}_4 \vec{r}_3\rangle \, \psi(\vec{r}_3)\, \psi(\vec{r}_4) \tag{36.2}$$

Ex. 1: op. de energia cinética (27.3),

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

↳ Eq. (36.1): $\hat{T} = \int d^3r\, d^3r' \, \hat{\psi}^+(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\delta(\vec{r}-\vec{r}')\right) \hat{\psi}(\vec{r}')$

$$\hat{T} = \int d^3r \, \hat{\psi}^+(\vec{r}) \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\right) \hat{\psi}(\vec{r}) \tag{36.3}$$

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

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

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

$$\hat{U} = \int d^3r \, \hat{\psi}^+(\vec{r})\, U(\vec{r})\, \hat{\psi}(\vec{r}) = \int d^3r \, U(\vec{r})\, \hat{\psi}^+(\vec{r})\, \psi(\vec{r}) \tag{36.4}$$

Ex. 3: interação entre duas partículas (29.2),

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

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\int d^3r\, d^3r'\, \hat{\Psi}^+(\vec{r})\, \hat{\Psi}^+(\vec{r}')\, V(\vec{r}, \vec{r}')\, \hat{\Psi}(\vec{r}')\, \hat{\Psi}(\vec{r}) \qquad (37.1)$$

· notar: Eqs. (36.3), (36.4) e (37.1) → hamiltoniano p/ sistema de partículas interagentes sob potencial externo $U(\vec{r})$ em termos dos ops. de campo:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} + \hat{V} \qquad (37.2)$$

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

Ex. 4: operador densidade de partículas (9.1):

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

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

considerar como parâmetro!

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

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

$$\hat{\rho}(\vec{r}) = \hat{\Psi}^+(\vec{r})\, \hat{\Psi}(\vec{r}) \qquad (37.3)$$

notar: Eqs. (27.1) e (37.3)

$\hookrightarrow \hat{N} = \int d^3r\, \hat{\rho}(\vec{r}) = \int d^3r\, \hat{\psi}^\dagger(\vec{r})\,\hat{\psi}(\vec{r})$: op. número total de partículas (38.1)

Ex. 5: operador densidade de corrente de partículas (9.1); verifica-se que

$$\vec{J}(\vec{r}) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\hat{\psi}^\dagger(\vec{r})\,\vec{\nabla}\,\hat{\psi}(\vec{r}) - \left(\vec{\nabla}\hat{\psi}^\dagger(\vec{r})\right)\hat{\psi}(\vec{r})\right) \quad (38.2)$$

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

$$\hat{\psi}(\vec{r},t) = U^\dagger(t,0)\,\hat{\psi}(\vec{r})\,U(t,0) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\,\hat{\psi}(\vec{r})\,e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (38.3)$$

p/ hamiltoniano H = Eq. (37.2), verifica-se que a eq. de movimento p/ $\hat{\psi}(\vec{r},t)$ é dada por (veja Sec. 1.5, Schwabl):

$$i\hbar\,\partial_t \hat{\psi}(\vec{r},t) = \left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + U(\vec{r})\right)\hat{\psi}(\vec{r},t) +$$

$$+ \int d^3r'\, \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}',t)\, V(\vec{r},\vec{r}')\,\hat{\psi}(\vec{r}',t)\,\hat{\psi}(\vec{r},t) : \quad (38.4)$$

: equação de campo

Eq. (38.4): similar eq. de Schrödinger não-linear p/ uma função de onda $\psi(\vec{r},t)$

notar: Eqs. (37.3), (38.2) e (38.4) são formalmente iguais às correspondentes eqs. p/ um sistema de uma única partícula descrita pela função de onda $\psi(\vec{r},t)$; entretanto, aqui, p/ sistema N-partículas, $\hat{\psi}(\vec{r},t)$ é um operador; essa analogia → termo segunda quantização!

· 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: partícula livre na "caixa" ⊕ condições periódicas de contorno:

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

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

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

$$\langle \vec{k}|\vec{k}'\rangle = \int d^3r \, \langle \vec{k}|\vec{r}\rangle\langle \vec{r}|\vec{k}'\rangle = \int d^3r \, \varphi^*_{\vec{k}}(\vec{r})\varphi_{\vec{k}'}(\vec{r}) = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \tag{39.1}$$

· ops. de criação e destruição:

$a^\dagger_{\vec{k}}$: adiciona 1 partícula no estado partícula única $|\vec{k}\rangle$

$a_{\vec{k}}$: remove " " do " " " " (39.2)

· op. número de partículas (26.3) e (33.2):

$$\hat{n}_{\vec{k}} = a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}} \tag{39.3}$$

· op. de uma partícula (27.4) e (34.1):

$$\hat{O}_1 = \sum_{\vec{k},\vec{p}} \langle \vec{k}|\hat{O}|\vec{p}\rangle a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{p}} \tag{39.4}$$

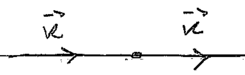
· op. de duas partículas (30.2) e (34.1):

$$\hat{O}_2 = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k},\vec{p},\vec{q},\vec{k}'} \langle \vec{k}\,\vec{p}|\hat{V}|\vec{k}'\,\vec{q}\rangle a^\dagger_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{q}} a_{\vec{k}'} \tag{39.5}$$

Ex. 1: op. de energia cinética (27.3).

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

$$\hat{T} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}} \qquad (40.1)$$

esquematicamente: 

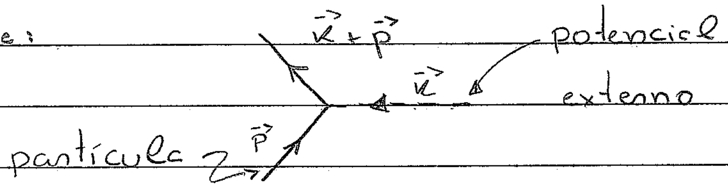
Ex. 2: potencial externo $U = U(\vec{r})$.

como $$\langle \vec{k} | \hat{U} | \vec{p} \rangle = \int d^3r\, d^3r' \underbrace{\langle \vec{k} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \hat{U} | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \vec{p} \rangle}_{\frac{1}{L^3} \exp(-i\vec{k}\cdot\vec{r})\, U(\vec{r})\, \delta(\vec{r}-\vec{r}')\, \exp(+i\vec{p}\cdot\vec{r})}$$

$$= \frac{1}{L^3} \underbrace{\int d^3r\, e^{-i(\vec{k}-\vec{p})\cdot\vec{r}}\, U(\vec{r})}_{U_{\vec{k}-\vec{p}}\,:\ \text{transf. Fourier } U(\vec{r})}$$

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

$$= \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{k},\vec{p}} U_{\vec{k}}\, a^\dagger_{\vec{k}+\vec{p}} a_{\vec{p}} \qquad (40.2)$$

esquematicamente: 

Ex. 3: interação entre duas partículas (29.2).

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

$$(I) = \int d^3r_1 d^3r_2 d^3r_3 d^3r_4 \, \langle \vec{k} | \vec{r}_1 \rangle \langle \vec{p} | \vec{r}_2 \rangle \underbrace{\langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | V | \vec{r}_4 \vec{r}_3 \rangle}_{V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\, \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_4)\, \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_3)} *$$

$$* \langle \vec{r}_4 | \vec{k}' \rangle \langle \vec{r}_3 | \vec{q} \rangle$$

$$= \frac{1}{L^6} \int d^3r_1 d^3r_2 \, e^{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}_1} e^{-i(\vec{p} - \vec{q}) \cdot \vec{r}_2} V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

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

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

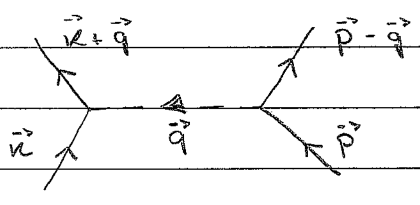
$$\hookrightarrow (I) = \frac{1}{L^6} \underbrace{\int d^3r' \exp\left(-i(\vec{k} - \vec{k}' + \vec{p} - \vec{q}) \cdot \vec{r}\,'\right)}_{L^3 \delta_{\vec{k} - \vec{k}' + \vec{p} - \vec{q}, 0}} \underbrace{\int d^3r \, e^{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}} V(\vec{r})}_{= V_{\vec{k} - \vec{k}'}}$$

dessa forma, Eq. (39.5):

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

ou $$\hat{O}_2 = \frac{1}{2L^3} \sum_{\vec{k}, \vec{p}, \vec{q}} V_{\vec{q}} \, a^\dagger_{\vec{k} + \vec{q}} \, a^\dagger_{\vec{p} - \vec{q}} \, a_{\vec{p}} \, a_{\vec{k}} \qquad (41.1)$$

esquematicamente,
similar Eq. (40.2):



notar: Eqs. (40.1), (40.2) e (41.1): hamiltoniano (forma geral) sistema N-partículas (bósons ou férmions) interagentes sob potencial externo $U(\vec{r})$, i.e.,

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

$$+ \frac{1}{2L^3} \sum_{\vec{k},\vec{p},\vec{q}} V_{\vec{q}}\, a^\dagger_{\vec{k}+\vec{q}}\, a^\dagger_{\vec{p}-\vec{q}}\, a_{\vec{p}}\, a_{\vec{k}} \tag{42.1}$$

Obs.: comparar Eq. (42.1) c/ Eq. (37.2), equivalente na representação de coordenadas.

Ex. 4: operador densidade de partículas;

Eqs. (35.1) e (39.1)

$$\hookrightarrow \hat{\psi}(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} a_{\vec{k}} \quad e \quad \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} a^\dagger_{\vec{k}} \tag{42.2}$$

Eq. (37.3):

$$\hat{\rho}(\vec{r}) = \hat{\psi}^\dagger(\vec{r})\,\hat{\psi}(\vec{r}) = \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}}\, a^\dagger_{\vec{k}}\, a_{\vec{k}'}$$

considerando a transf. de Fourier:

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

$$\hookrightarrow \hat{\rho}(\vec{q}) = \sum_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{k}}\, a_{\vec{k}+\vec{q}} \; : \tag{42.3}$$

: comparar c/ Eq. (39.3): número ocupação estado de partícula única $|\vec{k}\rangle$!

· Sobre o spin das partículas;
ideia: incluir explicitamente o número quântico de spin;

· p/ ops. de campo (35.1):

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

↳ álgebra (35.2) assume a forma:

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

$$\text{e} \quad [\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}), \hat{\psi}^+_{\sigma'}(\vec{r}')]_\pm = \delta(\vec{r}-\vec{r}')\,\delta_{\sigma\sigma'} \qquad (43.1)$$

notar, e.g.,
(i) op. densidade (37.3):

$$\hat{\rho}(\vec{r}) = \sum_\sigma \hat{\rho}_\sigma(\vec{r}) = \sum_\sigma \hat{\psi}^+_\sigma(\vec{r})\,\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) \qquad (43.2)$$

(ii) hamiltoniano (37.2) p/ interação entre as partículas independente de spin:

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

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3r\, d^3r'\, \hat{\psi}^+_\sigma(\vec{r})\, \hat{\psi}^+_{\sigma'}(\vec{r}')\, V(\vec{r},\vec{r}')\, \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}')\, \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) \qquad (43.3)$$

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

· operador densidade de spins,
similar Eq. (9.1), podemos definir:

$$\hat{S}^\alpha(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\vec{r}-\vec{r}_i)\, \hat{S}_i^\alpha \quad ; \quad \alpha = x, y, z \tag{44.1}$$

em termos dos ops. de campo;

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

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

↑ elemento matriz, representação S^α na base $|\sigma\rangle$

· Eq. (36.1)

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

$$= \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \hat{\psi}_{\sigma_1}(\vec{r})\, S^\alpha_{\sigma_1,\sigma_2}\, \psi_{\sigma_2}(\vec{r}) \tag{44.2}$$

em particular, p/ férmions spin $S = 1/2$, temos que

$$\vec{S} = \frac{1}{2}\hbar\, \hat{\sigma} \quad , \quad \hat{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$$

↳ Eq. (44.2) : $\vec{S}(\vec{r}) = \frac{1}{2}\hbar \sum_{\alpha,\beta} \hat{\psi}^\dagger_\alpha(\vec{r})\, (\hat{\sigma})_{\alpha\beta}\, \hat{\psi}_\beta(\vec{r})$ (44.3)

Exercício: Escrever componentes $S^\alpha(r)$ em termos de $\psi_\uparrow(\vec{r}), \psi_\downarrow(\vec{r}), \ldots$