TEORIA DE SISTEMAS DE MUITOS CORPOS

I - SEGUNDA QUANTIZAÇÃO : (Negele+Orland: Cap. 1)

A linguagem natural para se lidar com sistemas de muitas partículas é o uso de operadores de criação e aniquilação. Essa descrição é também chamada de "segunda quantização" (ver adiante por quê). Vamos revisar (ou aprender pela primeira vez) como funcionam esses operadores.

(i) $\underline{\mathcal{H}_N}$: Espaço de Hilbert de $\underline{N}$ partículas idênticas → espaço definido por funções complexas, quadrado integráveis de coordenadas $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots \vec{r}_N$, como:

$$\psi_N(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots \vec{r}_N) \quad \text{tal que}$$

$$\langle \psi_N | \psi_N \rangle = \int d^3r_1 \cdots d^3r_N \; |\psi_N(\vec{r}_1 \cdots \vec{r}_N)|^2 < +\infty$$

Obviamente:

$$\mathcal{H}_N = \underbrace{\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}}_{\underline{n} \text{ vezes}}$$

onde $\mathcal{H}$ é o esp. de Hilbert de 1 partícula

(ii) <u>Base canônica em $\mathcal{X}_N$</u>:

$\{|\alpha\rangle\} \Rightarrow$ Base ortonormal em $\mathcal{X}$

Def.: $|\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N) = |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \otimes \cdots |\alpha_N\rangle$
é a base canônica em $\mathcal{X}_N$ derivada de $\{|\alpha\rangle\}$

Atenção: Usaremos a notação ñ-usual $|\,)$ (com parênteses ao invés de colchetes angulares) para a base canônica (não-simetrizada)

A função de onda correspondente é:

$$\begin{aligned}\psi_{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_N}(\bar{r}_1 \cdots \bar{r}_N) &= (\bar{r}_1, \bar{r}_2, \ldots \bar{r}_N | \alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N) \\ &= \langle \bar{r}_1|\alpha_1\rangle \langle \bar{r}_2|\alpha_2\rangle \cdots \langle \bar{r}_N|\alpha_N\rangle \\ &= \phi_{\alpha_1}(\bar{r}_1) \cdots \phi_{\alpha_N}(\bar{r}_N)\end{aligned}$$

- Overlap: $(\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N | \alpha_1' \cdots \alpha_N') = \langle \alpha_1|\alpha_1'\rangle \cdots \langle \alpha_N|\alpha_N'\rangle$
- Completeza: $\displaystyle\sum_{\alpha_1, \cdots \alpha_N} |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N)(\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N| = 1$

(que seguem das propriedades do produto tensorial)

(iii) Espaços de Hilbert simetrizados

Os estados de $\underline{N}$ partículas idênticas encontrados na natureza pertencem a duas classes restritas de funções de onda:

SIMÉTRICAS: $\psi(\vec{r}_{P1}, \vec{r}_{P2}, \cdots \vec{r}_{PN}) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \cdots, \vec{r}_N)$

ANTI-SIMÉTRICAS: $\psi(\vec{r}_{P1}, \vec{r}_{P2}, \ldots, \vec{r}_{PN}) = (-1)^P \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \cdots \vec{r}_N)$

onde $(P1, P2, \cdots, PN)$ é uma permutação $\underline{P}$ de $(1, 2, \ldots, N)$ e onde $\underline{P}$ em $(-1)^P$ é a paridade da permutação, que é o número de transposições de $\underline{\underline{2}}$ partículas necessário para trazer $(P1, .. PN)$ até $(1, \cdots, N)$

Partículas descritas por funções simétricas são <u>bósons</u> (fóton, méson, gluon, ^4He) e partículas com funções de onda anti-simétricas são <u>férmions</u> (elétrons, prótons, neutrons, quarks, neutrinos, ^3He)

. Dada uma função qualquer de $\mathcal{H}_N$, podemos <u>projetar</u> sua parte física (simétrica ou anti-simétrica) usando operadores de projeção:

$$P_{B,F}\, \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots \vec{r}_N) = \frac{1}{N!} \sum_P \zeta^P \psi(\vec{r}_{P1}, \vec{r}_{P2}, \cdots \vec{r}_{PN})$$

onde a soma é sobre as $N!$ permutações de $\underline{N}$ números e $\zeta = +1$ para bósons e -1 para férmions

$P_{B,F}$ é um projetor porque é hermitiano e

$$P^2_{B,F}\,\psi(\vec{r}_1,\dots,\vec{r}_N)=\frac{1}{(N!)^2}\sum_{PP'}\zeta^P\zeta^{P'}\psi(\vec{r}_{P'P1},\vec{r}_{P'P2},\dots,\vec{r}_{P'PN})$$

Para uma permutação fixa P, as $N!$ permutações $Q=P'P$ geram o grupo completo de permutações (pelo Lema de reordenamento da Teoria de Grupos). Além disso, é óbvio que:

$$\zeta^P\zeta^{P'}=\zeta^{P+P'}=\zeta^{P'P}=\zeta^Q$$

Segue que:

$$P^2_{B,F}\,\psi(\vec{r}_1,\dots\vec{r}_N)=\frac{1}{N!}\sum_P\left[\sum_Q\frac{\zeta^Q}{N!}\psi(\vec{r}_{Q1},\dots,\vec{r}_{QN})\right]$$

$$=\frac{1}{N!}\sum_P P_{B,F}\,\psi(\vec{r}_1,\dots,\vec{r}_N)=P_{B,F}\,\psi(\vec{r}_1,\dots,\vec{r}_N)$$

$\Rightarrow\quad P^2_{B,F}=P_{B,F}$ (Note que o fator $\frac{1}{N!}$ é fundamental!)

A propriedade projetiva de $P_{B,F}$ permite que se defina as restrições:

$$B_N=P_B\,\mathcal{H}_N\,P_B \leftarrow \text{Espaço de Hilbert de bósons}$$

$$F_N=P_F\,\mathcal{H}_N\,P_F \leftarrow \text{Espaço de Hilbert de férm}$$

e as relações correspondentes p/ a base canônica:

- $$|\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N\} \overset{\text{Df.}}{\equiv} \sqrt{N!}\, P_{B,F}\, |\alpha_1, \alpha_2, \dots \alpha_N)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \xi^P\, |\alpha_{P1}\rangle \otimes |\alpha_{P2}\rangle \otimes \cdots |\alpha_{PN}\rangle$$

(Note que usamos $|\,\}$ para a base simetrizada. Essa base <u>ainda não</u> está normalizada, mas será útil mais adiante na definição dos operadores de criação e aniquilação)

- $$\sum_{\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N} P_{B,F}\, |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N)(\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N| P_{B,F} = 1$$

$$\Rightarrow \frac{1}{N!} \sum_{\alpha_1 \cdots \alpha_N} |\alpha_1 \cdots \alpha_N\}\{\alpha_1 \cdots \alpha_N| = 1 \quad (\text{em } B_N \text{ ou } F_N)$$

- Se $\{|\alpha\rangle\}$ é ortogonal em $\mathcal{H} \Rightarrow \{|\alpha_1 \cdots \alpha_N)\}$ é ortogonal em $\mathcal{H}_N$

$$\Rightarrow \{|\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\}\} \text{ é ortogonal em } B_N \text{ ou } F_N$$

Aula Passada

- Esp. Hilbert $\underline{N}$ partículas: $\mathcal{H}_N = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}$
- Base canônica em $\mathcal{H}_N$: Se $\{|\alpha\rangle\}$ em $\mathcal{H}$

$$\Rightarrow \quad |\alpha_1 \cdots \alpha_N) = |\alpha_1\rangle \otimes \cdots \otimes |\alpha_N\rangle \text{ em } \mathcal{H}_N$$

$$e \quad (\bar{r}_1 \cdots \bar{r}_N | \alpha_1 \cdots \alpha_N) = \varphi_{\alpha_1}(\bar{r}_1) \cdots \varphi_{\alpha_N}(\bar{r}_N)$$

Completeza: $\sum_{\alpha_1 \cdots \alpha_N} |\alpha_1 \cdots \alpha_N)(\alpha_1 \cdots \alpha_N| = 1$; Overlap: $(\alpha_1' \cdots \alpha_N' | \alpha_1 \cdots \alpha_N)$
$= \langle \alpha_1' | \alpha_1 \rangle \cdots \langle \alpha_N' | \alpha_N \rangle$

-

- Espaços simetrizados.

$$F_N \text{ e } B_N \begin{cases} F_N = P_F \mathcal{H}_N P_F \\ \\ B_N = P_B \mathcal{H}_N P_B \end{cases}$$

$$P_{B,F} |\alpha_1 \cdots \alpha_N) = \frac{1}{N!} \sum_P \zeta^P |\alpha_{P1} \cdots \alpha_{PN}) \quad ; \quad \begin{matrix} P_{B,F}^{\dagger} = P_{B,F} \\ P_{B,F}^2 = P_{B,F} \end{matrix}$$

- Base canônica (NÃO-NORMALIZADA) em B_N, F_N:

$$|\alpha_1 \cdots \alpha_N\} \equiv \sqrt{N!}\, P_{B,F} |\alpha_1 \cdots \alpha_N)$$

Completeza: $P_{B,F} \left(\sum_{\alpha_1 \cdots \alpha_N} |\alpha_1 \cdots \alpha_N)(\alpha_1 \cdots \alpha_N| \right) P_{B,F} =$

$$= \frac{1}{N!} \sum_{\alpha_1 \cdots \alpha_N} |\alpha_1 \cdots \alpha_N\}\{\alpha_1 \cdots \alpha_N| = 1$$

Se $|\alpha_1 \cdots \alpha_N)$ é ortogonal em $\mathcal{H}_N$
$|\alpha_1 \cdots \alpha_N\}$ " " em B_N, F_N

(iv) Base ortonormal de B_N ou F_N:

Para normalizarmos a base temos que calcular os overlaps:

NORMALIZAÇÃO DE $|\alpha_1 \cdots \alpha_N\}$

$$
\begin{aligned}
\{\alpha_1', \alpha_2' \cdots \alpha_N' | \alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\} &= N!\,(\alpha_1' \alpha_2' \cdots \alpha_N' | P_{B,F}^2 | \alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N) \\
&= N!\,(\alpha_1' \alpha_2' \cdots \alpha_N' | P_{B,F} | \alpha_1, \alpha_2, \cdots \alpha_N) \\
&= \sum_P \xi^P (\alpha_1' \alpha_2' \cdots \alpha_N' | \alpha_{P1} \alpha_{P2} \cdots \alpha_{PN})
\end{aligned}
$$

Dada a ortogonalidade da base $\{|\alpha\rangle\}$ os termos não-nulos são tais que:

$$\alpha_1' = \alpha_{P1} \;;\; \alpha_2' = \alpha_{P2} \;;\; \cdots \;;\; \alpha_N' = \alpha_{PN}$$

Para férmions, se $\alpha_1' \cdots \alpha_N'$ é uma permutação de $\alpha_1 \cdots \alpha_N$ só há um termo não-nulo, mas para bósons, como um estado $|\alpha\rangle$ pode estar ocupado por mais de uma partícula existem tantos termos não-nulos quantas forem as permutações que apenas permutam partículas que ocupam multiplamente um mesmo estado.

Se há $\underline{n_1}$ bósons em α_1, $\underline{n_2}$ em α_2, etc., o número de permutações é: $n_1! n_2! \cdots n_p! = \prod_\alpha n_\alpha!$

Segue que: $\{\alpha_1' \alpha_2' \cdots \alpha_N' | \alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\} = \begin{cases} (-1)^P & \text{p/ férmions} \\ \prod_\alpha n_\alpha! & \text{p/ bósons} \end{cases}$

se $\alpha_1' \alpha_2' \cdots \alpha_N'$ é uma permutação de $\alpha_1 \cdots \alpha_N$ (e zero do contrário). Como $0! = 1$, temos em geral:

$$\{\alpha_1' \cdots \alpha_N' | \alpha_1 \cdots \alpha_N\} = \zeta^P \prod_\alpha n_\alpha! \quad (\text{Se } \alpha_1' \cdots \alpha_N' \text{ é permutação de } \alpha_1 \cdots \alpha_N$$

<u>Exemplo</u>: Bósons nos estados $\vec{p}_1$, $\vec{p}_1$ e $\vec{p}_2$

Exemplo

$$|\vec{p}_1\, \vec{p}_1\, \vec{p}_2) = |\vec{p}_1\rangle \otimes |\vec{p}_1\rangle \otimes |\vec{p}_2\rangle$$

$$|\vec{p}_1\, \vec{p}_1\, \vec{p}_2\} = \sqrt{6}\, P_B\, |\vec{p}_1\, \vec{p}_1\, \vec{p}_2)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}} \Big[\underbrace{|\vec{p}_1\, \vec{p}_1\, \vec{p}_2)}_{1\,2\,3} + \underbrace{|\vec{p}_1\, \vec{p}_1\, \vec{p}_2)}_{2\,1\,3} + \underbrace{|\vec{p}_2\, \vec{p}_1\, \vec{p}_1)}_{3\,1\,2} + \underbrace{|\vec{p}_1\, \vec{p}_2\, \vec{p}_1)}_{2\,3\,1} + \underbrace{|\vec{p}_2\, \vec{p}_1\, \vec{p}_1)}_{3\,2\,1} + \underbrace{|\vec{p}_1\, \vec{p}_2\, \vec{p}_1)}_{1\,3\,2} \Big]$$

$$= \sqrt{\frac{2}{3}} \Big[|\vec{p}_1\, \vec{p}_1\, \vec{p}_2) + |\vec{p}_2\, \vec{p}_1\, \vec{p}_1) + |\vec{p}_1\, \vec{p}_2\, \vec{p}_1) \Big]$$

$$\{\vec{p}_1\, \vec{p}_1\, \vec{p}_2 | \vec{p}_1\, \vec{p}_1\, \vec{p}_2\} = \frac{2}{3} \Big[1 + 1 + 1 \Big] = 2 = n_{\vec{p}_1}!\, n_{\vec{p}_2}!$$

Definição de $|\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle$

Definição: A base ortonormal em B_N ou F_N é definida como

$$|\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{\prod_\alpha n_\alpha!}} |\alpha_1 \cdots \alpha_N\} = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_\alpha n_\alpha!}} \sum_P \zeta^P |\alpha_{P1}\rangle \otimes \cdots \otimes |\alpha_{PN}\rangle$$

Atenção para a notação que usa $|\ \rangle$ para a base normalizada.

Completeza

A relação de completeza fica agora

$$\sum_{\alpha_1 \cdots \alpha_N} \frac{\prod_\alpha n_\alpha!}{N!} |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle\langle\alpha_1 \cdots \alpha_N| = 1$$

Overlap com outras bases (simetrizadas ou não)

. Se é dada uma outra base $\{|\beta\rangle\}$ ortonormal podemos calcular:

$$(\beta_1 \beta_2 \cdots \beta_N | \alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_\alpha n_\alpha!}} \sum_P \zeta^P \langle\beta_1|\alpha_{P1}\rangle \cdots \langle\beta_N|\alpha_{PN}\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N! \prod_\alpha n_\alpha!}} S_{B,F}(\langle\beta_i|\alpha_j\rangle)$$

onde $S_{BF}(M_{ij})$ é um determinante para férmions:

$$S_F(M_{ij}) = \sum_P (-)^P M_{1,P1} M_{2,P2} \cdots M_{N,PN} = \det(M_{ij})$$

e um permanente para bósons:

$$S_B(M_{ij}) = \sum_P M_{1,P1} M_{2,P2} \cdots M_{N,PN} = \mathrm{per}(M_{ij})$$

Overlap com outras bases (simetrizadas ou não) (cont.)

Em particular, as funções de onda da base simetrizada são:

$$\psi_{\alpha_1\cdots\alpha_N}(\vec{r}_1,\cdots\vec{r}_N) = (\vec{r}_1\cdots\vec{r}_N|\alpha_1\cdots\alpha_N>$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!\prod_\alpha n_\alpha!}} \times \begin{cases} \det(\phi_{\alpha_i}(\vec{r}_j)) : \text{Férmions} \\ \text{per}(\phi_{\alpha_i}(\vec{r}_j)) : \text{Bósons} \end{cases}$$

Para férmions obtemos os determinantes de Slater habituais.

Analogamente:

$$<\beta_1\cdots\beta_N|\alpha_1\cdots\alpha_N> = \frac{N!}{\sqrt{\prod_\beta n_\beta!\,\prod_\alpha n_\alpha!}}(\beta_1\cdots\beta_N|P_{B,F}^2|\alpha_1\cdots\alpha_N)$$

$$= \frac{N!}{\sqrt{\prod_\beta n_\beta!\,\prod_\alpha n_\alpha!}}(\beta_1\cdots\beta_N|P_{B,F}|\alpha_1\cdots\alpha_N)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\prod_\beta n_\beta!\,\prod_\alpha n_\alpha!}}\sum_P \zeta^P <\beta_1|\alpha_{P1}>\cdots<\beta_N|\alpha_{PN}>$$

$$= \frac{S(<\beta_i|\alpha_j>)}{\sqrt{\prod_\beta n_\beta!\,\prod_\alpha n_\alpha!}}$$

. Espaço de Hilbert de $\underline{N}$ partículas:

$$\mathcal{H}_N = \underbrace{\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \cdots \mathcal{H}}_{N \text{ vezes}}$$

Base : $|\alpha_1, \alpha_2, \ldots \alpha_N) = |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \cdots \otimes |\alpha_N\rangle$

. (Anti-) Simetrizador: $P_{B,F} = \frac{1}{N!} \sum_P \zeta^P P$ tal que $P_{B,F}^2 = P_{B,F}$

$$\mathcal{B}_N = P_B \mathcal{H}_N P_B$$

$$\mathcal{F}_N = P_F \mathcal{H}_N P_F$$

$$|\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\} = \sqrt{N!}\, P_{B,F} |\alpha_1 \cdots \alpha_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \zeta^P |\alpha_{P1} \cdots \alpha_{PN})$$

. Overlap: $\{\alpha_1' \cdots \alpha_N' | \alpha_1 \cdots \alpha_N\} = \zeta^P \prod_\alpha n_\alpha!$
se $(\alpha_1' \cdots \alpha_N')$ é uma permutação de $(\alpha_1 \cdots \alpha_N)$

. Estados simetrizados e normalizados:

$$|\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{\prod_\alpha n_\alpha!}} |\alpha_1 \cdots \alpha_N\} = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_\alpha n_\alpha!}} \sum_P \zeta^P |\alpha_{P1} \cdots \alpha_{PN})$$

. $(\beta_1 \beta_2 \cdots \beta_N | \alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_\alpha n_\alpha!}} S_{B,F}(\langle \beta_i | \alpha_j \rangle)$

$$S_{B,F}(M_{ij}) = \begin{cases} \det(M_{ij}) & \text{p/ férmions} \\ \\ \operatorname{perm}(M_{ij}) & \text{p/ bósons} \end{cases}$$

(vi) <u>Operadores de criação e aniquilação</u>:

Operadores de criação e aniquilação são uma maneira compacta de escrever operadores e estados de <u>N</u> partículas idênticas, de uma maneira que incorpora automaticamente a estatística das partículas.

Espaço de Fock

Como eles alteram o número de partícula do sistema (eles "criam" e "aniquilam" partículas) é conveniente introduzir um novo espaço com estados com quaisquer número de partículas:

$$B = B_0 \oplus B_1 \oplus B_N \oplus \cdots = \bigoplus_{n=0}^{\infty} B_n$$

$$F = F_0 \oplus F_1 \oplus \cdots = \bigoplus_{n=0}^{\infty} F_n$$

onde $\oplus$ significa a soma direta dos espaços e o espaço B_0 ou F_0 com zero partículas é gerado pelo estado de vácuo $|0\rangle$ (Não confundir com o estado nulo do espaço de Hilbert).

O espaço B ou F acima é chamado "Espaço de Fock".

Completeza no Espaço de Fock

A relação de completeza é:

$$1 = |0\rangle\langle 0| + \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{\lambda_1 \cdots \lambda_N} |\lambda_1 \cdots \lambda_N\} \{\lambda_1 \cdots \lambda_N|$$

$$= |0\rangle\langle 0| + \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{\lambda_1 \cdots \lambda_N} \prod_{\lambda} n_\lambda! \, |\lambda_1 \cdots \lambda_N\rangle\langle \lambda_1 \cdots \lambda_N|$$

Definição de a^+_λ

<u>Definição</u>: Se $|\lambda>$ é um estado qualquer de $\mathcal{H}$ o operador de criação bosônico ou fermiônico a^+_λ é definido por:

$$a^+_\lambda |\lambda_1 \cdots \lambda_N\} \equiv |\lambda \lambda_1 \cdots \lambda_N\}$$

Ação de a^+_λ no vácuo

Está claro que a^+_λ leva estados em B_N ou F_N a estados de B_{N+1} ou F_{N+1}, respectivamente. Obviamente definimos:

$$a^+_\lambda |0> = |\lambda> = |\lambda\}$$

Se $|\lambda>$ é um estado de uma base ortonormal $\{|\lambda_i>\}$ temos, para bósons:

Ação de a^+_λ na base ortonormal para férmions e bósons

$$a^+_\lambda |\lambda_1 \cdots \lambda_N> = \frac{a^+_\lambda}{\sqrt{\prod_{\lambda'} n_{\lambda'}!}} |\lambda_1 \cdots \lambda_N\} = \frac{|\lambda \lambda_1 \cdots \lambda_N\}}{\sqrt{\prod_{\lambda' \neq \lambda} n_{\lambda'}!}\,\sqrt{n_\lambda!}}$$

$$= \sqrt{n_\lambda + 1}\, |\lambda \lambda_1 \cdots \lambda_N>$$

Para férmions, obviamente:

$$a^+_\lambda |\lambda_1 \cdots \lambda_N> = \begin{cases} |\lambda \lambda_1 \cdots \lambda_N> & \text{se } |\lambda> \text{ não está ocupado em } |\lambda_1 \cdots \lambda_N> \\ 0 & \text{do contrário} \end{cases}$$

pelo princípio de exclusão de Pauli.

Fisicamente, a^+_λ adiciona uma partícula ao estado $|\lambda\rangle$ e simetriza ou anti-simetriza o resultado.

a^+_λ's geram todo o Espaço de Fock

Qualquer estado na base do espaço de Fock pode ser obtido pela ação repetida dos a^+_λ no vácuo

$$|\lambda_1 \cdots \lambda_N\} = a^+_{\lambda_1} a^+_{\lambda_2} \cdots a^+_{\lambda_N} |0\rangle$$

$$|\lambda_1 \cdots \lambda_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{\prod_\lambda n_\lambda!}}\, a^+_{\lambda_1} \cdots a^+_{\lambda_N} |0\rangle$$

Álgebra dos a^+_λ's

Os operadores a^+_λ obedecem a um álgebra particular que incorpora as propriedades estatísticas das partículas.

$$a^+_\lambda a^+_\mu |\lambda_1 \cdots \lambda_N\} = |\lambda \mu \lambda_1 \cdots \lambda_N\} =$$

$$= \zeta |\mu \lambda \lambda_1 \cdots \lambda_N\}$$

$$= \zeta a^+_\mu a^+_\lambda |\lambda_1 \cdots \lambda_N\}$$

$$\Rightarrow a^+_\lambda a^+_\mu - \zeta a^+_\mu a^+_\lambda = 0 \quad \text{ou}$$

$[a^+_\lambda, a^+_\mu] = 0$ para bósons e

$\{a^+_\lambda, a^+_\mu\} = 0$ para férmions, onde $\{A,B\} = AB + BA$

Álgebra dos adjuntos a_λ's

Os adjuntos a $a^\dagger_\lambda$, a_λ, obedecem a álgebra:

$$a_\lambda a_\mu - \xi a_\mu a_\lambda = 0 \qquad \text{ou}$$

$$[a_\lambda , a_\mu] = 0 \qquad (\text{Bósons})$$

$$\{a_\lambda , a_\mu\} = 0 \qquad (\text{Férmions})$$

como pode ser obtido tomando-se o hermitiano conjugado da álgebra dos operadores $a^\dagger_\lambda$.

Ação de a_λ à direita

Vamos estudar a ação de a_λ à direita. Para estados quaisquer:

$$\{\alpha_1 \cdots \alpha_M | a_\lambda | \beta_1 \cdots \beta_N\} = \{\lambda\, \alpha_1 \cdots \alpha_M | \beta_1 \cdots \beta_N\}$$

que é não nulo apenas se $M+1 = N$. Portanto, a_λ aje à direita, diminuindo o número de partículas no estado de 1. Em particular:

$$a_\lambda |0\rangle = 0 \qquad \forall\, |\lambda\rangle .$$

Ação de a_λ à direita (cont.)

A ação de a_λ em um estado qualquer pode ser calculada da seguinte forma. Suponha que $|\lambda\rangle$ é um estado da base considerada $\{|\alpha\rangle\}$ (para o caso geral ver adiante). Usando a relação de completeza da base canônica simetrizada:

$$a_\lambda|\alpha_1\cdots\alpha_N\} = \sum_{M=0}^{\infty}\frac{1}{M!}\sum_{\beta_1\cdots\beta_M}|\beta_1\cdots\beta_M\}\{\beta_1\cdots\beta_M|a_\lambda|\alpha_1\cdots\alpha_N\}$$

$$= \sum_{M=0}^{\infty}\frac{1}{M!}\sum_{\beta_1\cdots\beta_M}\{\lambda\beta_1\cdots\beta_M|\alpha_1\cdots\alpha_N\}\,|\beta_1\cdots\beta_M\} = (*)$$

Antes de mais nada, notemos que apenas $M=N-1$ sobrevive à soma acima:

$$(*) = \frac{1}{(N-1)!}\sum_{\beta_1\cdots\beta_{N-1}}\{\lambda\beta_1\cdots\beta_{N-1}|\alpha_1\cdots\alpha_N\}\,|\beta_1\cdots\beta_{N-1}\}$$

É também óbvio que $(\lambda\beta_1\cdots\beta_{N-1})$ tem que ser uma permutação de $\alpha_1\cdots\alpha_N$ para que o produto escalar seja não-nulo, como já vimos anteriormente. Vamos analisar as duas estatísticas separadamente:

BÓSONS: Nesse caso, se $(\lambda\beta_1\cdots\beta_{N-1})$ é uma permutação de $(\alpha_1\cdots\alpha_N)$:

$\{\lambda\beta_1\cdots\beta_{N-1}|\alpha_1\cdots\alpha_N\} = \prod_\alpha n_\alpha!$ onde os n_α's são

Ação de $a_\lambda^\dagger$ à direita (cont.)

as ocupações dos estados α em $|\alpha_1 \cdots \alpha_N\}$

Como $(\lambda\, \beta_1 \cdots \beta_{N-1})$ tem que ser uma permutação de $(\alpha_1 \cdots \alpha_N)$, λ tem que ser igual a algum α_i de $(\alpha_1 \cdots \alpha_N)$. Tomemos um desses α's (pode haver mais de um se a ocupação for maior que 1 nesse estado) e chamemo-lo de $k \Rightarrow \lambda = \alpha_k$. Segue que $(\beta_1 \cdots \beta_{N-1})$ tem que ser uma permutação de $(\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_k \cdots \alpha_N)$, onde a notação ao lado indica que α_k <u>foi removido</u> do conjunto $(\alpha_1 \cdots \alpha_N)$

Agora note que estamos somando sobre todos os valores de $\beta_1 \cdots \beta_{N-1}$ possíveis. Quantos termos existirão, que satisfarão ao critério de que

$$(\beta_1 \cdots \beta_{N-1}) \text{ é permutação de } (\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_k \cdots \alpha_N)$$

Se todas as ocupações fossem 0 ou 1, existiriam $(N-1)!$ valores de $(\beta_1 \cdots \beta_{N-1})$ que satisfariam o critério, correspondentes às $(N-1)!$ permutações de $(\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_k \cdots \alpha_N)$. Se alguns α's forem multiplamente ocupados, algumas dessas permutações são espúrias pois correspondem ao mesmo conjunto $(\beta_1 \cdots \beta_{N-1})$. Portanto, o número total de termos não nulos é

$$\frac{(N-1)!}{\prod_{\alpha \neq k} n_\alpha! \, (n_k - 1)!}$$

→ Número total de permutações "espúrias" do conjunto $(\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_k \cdots \alpha_N)$, pois correspondem aos mesmos valores de $(\beta_1 \cdots \beta_{N-1})$

Ação de a_+ à direita (cont.)

Notem que a ocupação de α_k foi decrescida de 1 em $(\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_k \cdots \alpha_N)$, daí o termo em $(n_k-1)!$ em vez de $n_k!$.

Finalmente, levando em consideração que para cada um desses valores do conjunto $(\beta_1 \cdots \beta_{N-1})$, podemos reordenar $|\beta_1 \cdots \beta_{N-1}\}$ na ordem original em $|\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_k \cdots \alpha_N\}$ (sem nenhum sinal adicional) podemos escrever:

$$a_\lambda |\alpha_1 \cdots \alpha_N\} = \left[\frac{1}{(N-1)!}\right] \underbrace{\left[\prod_\alpha n_\alpha!\right]}_{\text{valor do overlap}} \underbrace{\left[\frac{(N-1)!}{\prod_{\alpha \neq k} n_\alpha!\,(n_k-1)!}\right]}_{\substack{\text{Número total de} \\ \text{termos não-nulos} \\ \text{da soma em } (\beta_1 \cdots \beta_{N-1})}} |\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_k \cdots \alpha_N\}$$

$$= (n_k)\, |\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_k \cdots \alpha_N\}$$

Se $n_k > 1$, α_k aparece mais de uma vez em $(\alpha_1 \cdots \alpha_N)$ e podemos escrever:

$$a_\lambda |\alpha_1 \cdots \alpha_N\} = \sum_{i=1}^{N} \delta_{\lambda \alpha_i} |\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_i \cdots \alpha_N\} \quad \left(\text{Para bósons}\right)$$

que é o resultado procurado. Note como a_λ diminui a ocupação de λ de uma unidade.

Ação de a_λ à direita

<u>FÉRMIONS</u>: Nesse caso também, é preciso que $(\lambda\beta_1\cdots\beta_{N-1})$ seja uma permutação de $(\alpha_1\cdots\alpha_N)$ para que o produto escalar seja não-nulo e ele é igual a:

$$\{\lambda\beta_1\cdots\beta_{N-1}|\alpha_1\cdots\alpha_N\} = \zeta^P$$

onde P é a paridade da permutação que leva $(\alpha_1\cdots\alpha_N)$ a $(\lambda\beta_1\cdots\beta_{N-1})$. Também nesse caso é necessário que λ seja igual a algum α de $(\alpha_1\cdots\alpha_N)$, que chamaremos de novo de $\alpha_k \Rightarrow \lambda=\alpha_k$ (Só poderá haver um α_k, pelo princípio de exclusão de Pauli)

Segue que $(\beta_1\cdots\beta_{N-1})$ tem que ser uma permutação de $(\alpha_1\cdots\hat{\alpha}_k\cdots\alpha_N)$. Haverá dessa vez $(N-1)!$ valores possíveis de $(\beta_1\cdots\beta_{N-1})$ que satisfarão esse critério:

$$(\beta_1\cdots\beta_{N-1}) = (\alpha_{P1}\cdots\hat{\alpha}_k\cdots\alpha_{PN})$$

para todas as $(N-1)!$ permutações de $(1,\dots,\hat{k},\dots N)$

Portanto, a soma sobre $(\beta_1\cdots\beta_{N-1})$ é equivalente à soma sobre as $(N-1)!$ permutações $(\alpha_{P1}\cdots\hat{\alpha}_k\cdots\alpha_{PN})$

$$\Rightarrow a_\lambda|\alpha_1\cdots\alpha_N\} = \frac{1}{(N-1)!}\sum_P \zeta^P|\alpha_{P1}\cdots\hat{\alpha}_k\cdots\alpha_{PN}\}\times\zeta^{k-1}$$

Ação de a_λ à direita (cont)

O fator ζ^{k-1} acima corresponde ao sinal que deve ser usado para trazer $\underline{\underline{\lambda}}$ da primeira posição em $|\lambda\beta_1 \cdots \beta_{N-1}\}$ até a $\underline{\underline{k}}$-ésima posição correspondente a α_k em $|\alpha_{P1} \cdots \alpha_k \cdots \alpha_{PN}\}$. Dessa forma, o expoente P de ζ^P passa a ser a paridade da permutação de $(N-1)$ elementos apenas $[(\beta_1 \cdots \beta_{N-1})]$ necessária para reordenar $(\beta_1 \cdots \beta_{N-1})$ em $|\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_k \cdots \alpha_N\}$

Note agora que:

$$\frac{1}{(N-1)!} \sum_P \zeta^P |\alpha_{P1} \cdots \hat{\alpha}_k \cdots \alpha_{PN}\} = P_F |\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_k \cdots \alpha_N\}$$

$$= |\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_k \cdots \alpha_N\}$$

Portanto:

$$a_\lambda |\alpha_1 \cdots \alpha_N\} = \zeta^{k-1} |\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_k \cdots \alpha_N\}$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \delta_{\lambda\alpha_i} \zeta^{i-1} |\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_i \cdots \alpha_N\} \quad \left(\text{Para férmions}\right)$$

Ação de $a_\lambda^\dagger$ e a_λ (cont.)

Podemos condensar os resultados para as duas estatísticas em:

$$\boxed{a_\lambda |\alpha_1 \cdots \alpha_N\} = \sum_{i=1}^{N} \delta_{\lambda\alpha_i} \zeta^{i-1} |\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_i \cdots \alpha_N\}}$$

Ação de a_λ diretamente em $|\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle$

Para os estados normalizados $|\;\rangle$ temos:

$$|\alpha_1 \cdots \alpha_N\} = \sqrt{\prod_\alpha n_\alpha!}\; |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle$$

$$|\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_i \cdots \alpha_N\} = \sqrt{\prod_{\alpha \neq i} n_\alpha! \,(n_i - 1)!}\; |\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_i \cdots \alpha_N\rangle$$

$$\Rightarrow a_\lambda |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_\lambda}} \sum_{i=1}^{N} \zeta^{i-1} \delta_{\lambda\alpha_i} |\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_i \cdots \alpha_N\rangle$$

Esse resultado pode ser escrito de uma maneira mais familiar se, mais uma vez, distinguirmos as estatísticas:

<u>BÓSONS</u>: Usando a chamada base de estados de ocupação:

$$|\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle \equiv |n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} \cdots\rangle$$

então: $a_\lambda |n_{\alpha_1} \cdots n_\lambda \cdots\rangle = \sqrt{n_\lambda}\, |n_{\alpha_1} \cdots (n_\lambda - 1) \cdots\rangle$

que lembra a atuação de <u>a</u> no oscilador harmônico

Ação de a_λ à direita em $|\alpha_1 \cdots \alpha_N>$

FÉRMIONS:

$$a_\lambda |\alpha_1 \cdots \alpha_N> = \begin{cases} (-)^{k-1} |\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_\lambda \cdots \alpha_N> & \text{se } \lambda = \alpha_k \text{ está ocupado} \\ 0 & \text{se } \lambda \text{ está desocupado.} \end{cases}$$

. RELAÇÕES DE (ANTI) COMUTAÇÃO DE a_λ E a_λ^+:

Relações de comutação entre a_λ e a_λ^+

Sejam λ e μ dois estados da base $\{|\alpha>\}$.

$$a_\lambda a_\mu^+ |\alpha_1 \cdots \alpha_N\} = a_\lambda |\mu \alpha_1 \cdots \alpha_N\}$$

$$= \delta_{\lambda\mu} |\alpha_1 \cdots \alpha_N\} + \sum_{i=1}^{N} \delta_{\lambda\alpha_i} \zeta^{i} |\mu \alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_i \cdots \alpha_N\}$$

$$a_\mu^+ a_\lambda |\alpha_1 \cdots \alpha_N\} = \sum_{i=1}^{N} \zeta^{i-1} \delta_{\lambda\alpha_i} |\mu \alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_i \cdots \alpha_N\}$$

$$\Rightarrow (a_\lambda a_\mu^+ - \zeta a_\mu^+ a_\lambda) |\alpha_1 \cdots \alpha_N\} = \delta_{\lambda\mu} |\alpha_1 \cdots \alpha_N\}$$

Como $|\alpha_1 \cdots \alpha_N\}$ é uma base completa:

$$\Rightarrow a_\lambda a_\mu^+ - \zeta a_\mu^+ a_\lambda = \delta_{\mu\lambda}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \text{BÓSONS: } [a_\lambda, a_\mu^+] = \delta_{\mu\lambda} \\ \text{FÉRMIONS: } \{a_\lambda, a_\mu^+\} = \delta_{\lambda\mu} \end{cases}$$

Aula passada

. Normalização: $\{\alpha_1' \cdots \alpha_N' | \alpha_1 \cdots \alpha_N\} = \zeta^P \prod_\alpha n_\alpha!$

. Estados normalizado: $|\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{\prod_\alpha n_\alpha!}} |\alpha_1 \cdots \alpha_N\}$

. Operadores:

1 corpo: $$\frac{(\alpha_1 \cdots \alpha_N | \hat{U} | \beta_1 \cdots \beta_N)}{(\alpha_1 \cdots \alpha_N | \beta_1 \cdots \beta_N)} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\langle \alpha_i | \hat{U}_i | \beta_i \rangle}{\langle \alpha_i | \beta_i \rangle}$$

2 corpos: $$\frac{(\alpha_1 \cdots \alpha_N | \hat{V} | \beta_1 \cdots \beta_N)}{(\alpha_1 \cdots \alpha_N | \beta_1 \cdots \beta_N)} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{(\alpha_i \alpha_j | \hat{V}_{ij} | \beta_i \beta_j)}{(\alpha_i \alpha_j | \beta_i \beta_j)}$$

. Espaço de Fock:

$$B = B_0 \oplus B_1 \oplus \cdots B_j \oplus \cdots$$
$$F = F_0 \oplus F_1 \oplus \cdots$$

$\hookrightarrow B_0, F_0$ gerado pelo vácuo $|0\rangle$

. Def.: $a_\lambda^\dagger |\alpha_1 \cdots \alpha_N\} = |\lambda \alpha_1 \cdots \alpha_N\}$

$a_\lambda^\dagger |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle = \sqrt{n_\lambda + 1}\, |\lambda \alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle$ BÓSONS

$= |\lambda \alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle$ FÉRMION se λ não ESTÁ OCUPADO EM $(\alpha_1 \cdots \alpha_N)$

. Estado geral: $|\alpha_1 \cdots \alpha_N\} = a_{\alpha_1}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle$

. Álgebra: $[a_\lambda^\dagger, a_\mu^\dagger] = 0$ BÓSONS $[a_\lambda, a_\mu] = 0$

$\{a_\lambda^\dagger, a_\mu^\dagger\} = 0$ FÉRMIONS $\{a_\lambda, a_\mu\} = 0$

. Ação de a_λ: $a_\lambda |\alpha_1 \cdots \alpha_N\} = \sum_{i=1}^{N} \delta_{\lambda \alpha_i} \zeta^{i-1} |\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_i \cdots \alpha_N\}$

$a_\lambda |n_{\alpha_1} \cdots\rangle = \sqrt{n_\lambda}\, |n_{\alpha_1} \cdots n_\lambda - 1 \cdots\rangle$ (BÓSONS)

$a_{\alpha_k} |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle = (-)^{k-1} |\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_k \cdots \alpha_N\rangle$ se α_k ESTÁ OCUPADO (FÉRMION

• MUDANÇA DE BASE

Mudança de base para a_λ's e a^{+}_λ's

Seja uma outra base de $\mathcal{H}$ $\{|\tilde{\alpha}\rangle\}$. A transformação entre uma base e outra é feita da seguinte maneira:

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \sum_{\alpha} \langle \alpha | \tilde{\alpha} \rangle \, |\alpha\rangle$$

Pela definição:

$$\begin{aligned} a^{+}_{\tilde{\alpha}} \, |\tilde{\alpha}_1 \cdots \tilde{\alpha}_N\} &= |\tilde{\alpha}\tilde{\alpha}_1 \cdots \tilde{\alpha}_N\} \\ &= \sum_{\alpha} \langle \alpha | \tilde{\alpha} \rangle \, |\alpha \tilde{\alpha}_1 \cdots \tilde{\alpha}_N\} \\ &= \sum_{\alpha} \langle \alpha | \tilde{\alpha} \rangle \, a^{+}_{\alpha} \, |\tilde{\alpha}_1 \cdots \tilde{\alpha}_N\} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{a^{+}_{\tilde{\alpha}} = \sum_{\alpha} \langle \alpha | \tilde{\alpha} \rangle \, a^{+}_{\alpha} \quad \text{e} \quad a_{\tilde{\alpha}} = \sum_{\alpha} \langle \tilde{\alpha} | \alpha \rangle \, a_{\alpha}}$$

Segue que: $\left\{ [A, B]_\zeta \equiv AB - \zeta BA \right\}$

Mudança de base e relações de comutação

$$\begin{aligned} [a_{\tilde{\alpha}}, a^{+}_{\tilde{\beta}}]_\zeta &= \sum_{\alpha\beta} \langle \tilde{\alpha} | \alpha \rangle \langle \beta | \tilde{\beta} \rangle \, [a_\alpha, a^{+}_\beta]_\zeta \\ &= \sum_{\alpha} \langle \tilde{\alpha} | \alpha \rangle \langle \alpha | \tilde{\beta} \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \tilde{\beta} \rangle \end{aligned}$$

Se a nova base também é ortonormal $\langle \tilde{\alpha} | \tilde{\beta} \rangle = \delta_{\tilde{\alpha}\tilde{\beta}}$

$\Rightarrow [a_{\tilde{\alpha}}, a^{+}_{\tilde{\beta}}]_\zeta = \delta_{\tilde{\alpha},\tilde{\beta}}$ e diz-se que a transformação é canônica. Analogamente: $[a_{\tilde{\alpha}}, a_{\tilde{\beta}}]_\zeta = [a^{+}_{\tilde{\alpha}}, a^{+}_{\tilde{\beta}}]_\zeta = 0$

. OPERADORES DE CAMPO

Operadores de campo

Um caso especial importante é aquele em que a base de $\mathcal{H}$ ~~é~~ são os auto-estados do operador posição: $\{|\vec{r}\rangle\}$. Nesse caso, convencionalmente, adotamos a notação:

$$a^{+}_{\vec{r}} \equiv \psi^{+}(\vec{r}) \quad e \quad a_{\vec{r}} \equiv \psi(\vec{r})$$

Esses operadores são chamados operadores de campo. Segue que

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

$$e \quad [\psi(\vec{r}), \psi^{+}(\vec{r}\,')]_{\zeta} = \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}\,')$$

Se expandirmos esses operadores de campo na base $\{|\alpha\rangle\}$ temos:

$$\psi^{+}(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \langle\alpha|\vec{r}\rangle a^{+}_{\alpha} = \sum_{\alpha} \phi^{*}_{\alpha}(\vec{r})\, a^{+}_{\alpha}$$

e

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \langle\vec{r}|\alpha\rangle a_{\alpha} = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}(\vec{r})\, a_{\alpha}$$

Em particular, se $\{|\alpha\rangle\} = \{|\vec{p}\rangle\}$

$$\psi^{+}(\vec{r}) = \sum_{\vec{p}} \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}}\, a^{+}_{\vec{p}} \quad ; \quad \psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{p}} \frac{e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}}\, a_{\vec{p}}$$

Propriedades dos operadores de muitos corpos

(10) Operadores de muitos corpos:

Se $\hat{O}$ é um operador qualquer em B_N ou F_N, segue da indistinguibilidade entre as partículas que:

$$(\alpha_{P1}\alpha_{P2}\cdots\alpha_{PN}|\hat{O}|\alpha'_{P1}\alpha'_{P2}\cdots\alpha'_{PN}) =$$

$$= (\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_N|\hat{O}|\alpha'_1\alpha'_2\cdots\alpha'_N)$$

Exemplos

Exemplos: Energia cinética : $\sum_{i=1}^{N}\frac{\hat{p}_i^2}{2m}$

Energia de interação: $\sum_{i<j} V(\vec{r}_i-\vec{r}_j)$

Operador de 1 corpo

- Operadores de um corpo: São operadores cuja ação sobre um estado $|\alpha_1\cdots\alpha_N)$ é a soma sobre as ações em cada partícula individual:

$$\hat{U}|\alpha_1\cdots\alpha_N) = \sum_{i=1}^{N}\hat{U}_i|\alpha_1\cdots\alpha_N)$$

onde $\hat{U}_i$ atua no espaço de Hilbert $\mathcal{H}_i$ da i-ésima partícula apenas. Um exemplo de operador de um corpo é a energia ~~cin~~ cinética.

Elementos de Matriz de op. de 1 corpo

- Elementos de matriz de operadores de um corpo:

$$(\alpha_1\cdots\alpha_N|\hat{U}|\beta_1\cdots\beta_N) = \sum_{i=1}^{N}(\alpha_1\cdots\alpha_N|\hat{U}_i|\beta_1\cdots\beta_N) =$$

$$= \sum_{i=1}^{N}\left[\prod_{k\neq i}\langle\alpha_k|\beta_k\rangle\langle\alpha_i|\hat{U}_i|\beta_i\rangle\right]$$

Elementos de matriz de ops. de 1 corpo (cont.)

Portanto, se $|\alpha_1 \cdots \alpha_N)$ e $|\beta_1 \cdots \beta_N)$ não são ortogonais:

$$\frac{(\alpha_1 \cdots \alpha_N | \hat{U} | \beta_1 \cdots \beta_N)}{(\alpha_1 \cdots \alpha_N | \beta_1 \cdots \beta_N)} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\langle \alpha_i | \hat{U}_i | \beta_i \rangle}{\langle \alpha_i | \beta_i \rangle}$$

que depende <u>apenas</u> da ação de $\hat{U}_i$ em $\mathcal{H}$!
Isso vai ser importante mais adiante.

Operadores de 2 corpos

• <u>Operadores de dois corpos</u>: Analogamente, operadores de dois corpos são aqueles cuja ação é a soma das ações sobre todos os <u>pares</u> distintos de partículas:

$$\hat{V} |\alpha_1 \cdots \alpha_N) = \sum_{i<j} \hat{V}_{ij} |\alpha_1 \cdots \alpha_N)$$
$$= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{V}_{ij} |\alpha_1 \cdots \alpha_N)$$

já que $\hat{V}_{ij} = \hat{V}_{ji}$

Analogamente:

Elementos de matriz de ops. de 2 corpos

$$(\alpha_1 \cdots \alpha_N | \hat{V} | \beta_1 \cdots \beta_N) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \prod_{\substack{k \neq i \\ k \neq j}} \langle \alpha_k | \beta_k \rangle \, (\alpha_i \alpha_j | \hat{V}_{ij} | \beta_i \beta_j)$$

e $$\frac{(\alpha_1 \cdots \alpha_N | \hat{V} | \beta_1 \cdots \beta_N)}{(\alpha_1 \cdots \alpha_N | \beta_1 \cdots \beta_N)} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{(\alpha_i \alpha_j | \hat{V}_{ij} | \beta_i \beta_j)}{(\alpha_i \alpha_j | \beta_i \beta_j)}$$

que também só depende da ação de $\hat{V}$ em $\mathcal{H}_2$!

OPERADORES EM TERMOS DE OPERADORES DE CRIAÇÃO E ANIQUILAÇÃO

O uso de operadores de criação e aniquilação gera todos os estados de $\mathcal{B}$ e $\mathcal{F}$. Além disso, quaisquer operadores em $\mathcal{B}$ e $\mathcal{F}$ podem ser escritos como somas de produtos de operadores a_α e a^+_α. Vejamos como.

Vamos definir primeiro o operador número:

Operador número

$$\hat{n}_\alpha \equiv a^+_\alpha a_\alpha$$

Para ver qual é a ação desse operador tomemos um estado geral:

$$\hat{n}_\alpha |\alpha_1 \cdots \alpha_N\} = a^+_\alpha a_\alpha |\alpha_1 \cdots \alpha_N\}$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \delta_{\alpha\alpha_i} \zeta^{i-1} a^+_\alpha |\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_i \cdots \alpha_N\}$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \delta_{\alpha\alpha_i} \zeta^{i-1} |\alpha_i\, \alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_i \cdots \alpha_N\}$$

$$= \left(\sum_{i=1}^{N} \delta_{\alpha\alpha_i}\right) |\alpha_1 \cdots \alpha_N\}$$

Mas é claro que $\sum_{i=1}^{N} \delta_{\alpha\alpha_i}$ conta o número de vezes que $\underline{\underline{\alpha}}$ aparece em $|\alpha_1 \cdots \alpha_N\}$, ou seja, é a ocupação do estado $\underline{\underline{\alpha}}$ em $|\alpha_1 \cdots \alpha_N\}$. Além disso.

$$\hat{N} = \sum_\alpha n_\alpha = \sum_\alpha a^+_\alpha a_\alpha$$

conta o número total de partículas em $|\alpha_1 \cdots \alpha_N\}$

O truque agora consiste em calcular os operad[ores] de um corpo e dois corpos numa base em que eles sejam diagonais. Em $\mathcal{H}$, se $\hat{U}$ é um operador de um corpo:

Ação de $\hat{U}$ numa base que o diagonaliza

$$\hat{U} = \sum_{\alpha} U_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad \text{onde} \quad U_\alpha = \langle\alpha|U|\alpha\rangle$$

Então, em $\mathcal{B}_N, \mathcal{F}_N$:

$$\{\alpha_1' \cdots \alpha_N' | \hat{U} | \alpha_1 \cdots \alpha_N\} = N! \, (\alpha_1' \cdots \alpha_N' | P_{B,F} \, \hat{U} \, P_{B,F} | \alpha_1 \cdots \alpha_N)$$

$$= N! \, (\alpha_1' \cdots \alpha_N' | P_{B,F} \, \hat{U} | \alpha_1 \cdots \alpha_N)$$

$$= \sum_P \zeta^P (\alpha_{P1}' \cdots \alpha_{PN}' | \hat{U} | \alpha_1 \cdots \alpha_N)$$

$$= \sum_P \zeta^P \sum_{i=1}^{N} \prod_{k \neq i} \langle \alpha_{Pk}' | \alpha_k \rangle \langle \alpha_{Pi}' | \hat{U} | \alpha_i \rangle$$

Mas, se $\hat{U} = \sum_\beta U_\beta |\beta\rangle\langle\beta|$

$$\langle \alpha_{Pi}' | \hat{U} | \alpha_i \rangle = \sum_\beta U_\beta \langle \alpha_{Pi}' | \beta \rangle \langle \beta | \alpha_i \rangle$$

$$= \sum_\beta U_\beta \langle \alpha_{Pi}' | \beta \rangle \, \delta_{\beta \alpha_i}$$

$$= U_{\alpha_i} \langle \alpha_{Pi}' | \alpha_i \rangle$$

A: Se $\hat{U}$ na base que o diagonaliza (cont.)

$$\Rightarrow \{\alpha_1' \cdots \alpha_N' | \hat{U} | \alpha_1 \cdots \alpha_N\} = \sum_P \zeta^P \sum_{i=1}^{N} U_{\alpha_i} \prod_{k \neq i} \langle \alpha'_{Pk} | \alpha_k \rangle \langle \alpha'_{Pi} | \alpha_i \rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{N} U_{\alpha_i} \underbrace{\sum_P \zeta^P \prod_k \langle \alpha'_{Pk} | \alpha_k \rangle}_{\{\alpha_1' \cdots \alpha_N' | \alpha_1 \cdots \alpha_N\}}$$

$$= \sum_{i=1}^{N} U_{\alpha_i} \{\alpha_1' \cdots \alpha_N' | \alpha_1 \cdots \alpha_N\}$$

$$= \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^{N} U_\alpha \delta_{\alpha \alpha_i} \{\alpha_1' \cdots \alpha_N' | \alpha_1 \cdots \alpha_N\}$$

$$= \sum_{\alpha} \{\alpha_1' \cdots \alpha_N' | U_\alpha n_\alpha | \alpha_1 \cdots \alpha_N\}$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{U} = \sum_\alpha U_\alpha n_\alpha = \sum_\alpha \langle \alpha | U | \alpha \rangle a^\dagger_\alpha a_\alpha}$$

Ação geral de $\hat{U}$ em termos de a's e $a^\dagger$'s

Agora podemos transformar o resultado acima da base especial usada para uma base qualquer

$$\hat{U} = \sum_\alpha U_\alpha \sum_\lambda \langle \lambda | \alpha \rangle a^\dagger_\lambda \sum_\mu \langle \alpha | \mu \rangle a_\mu$$

$$= \sum_{\lambda\mu} \langle \lambda | \underbrace{\sum_\alpha U_\alpha | \alpha \rangle \langle \alpha |}_{\hat{U}} | \mu \rangle a^\dagger_\lambda a_\mu$$

$$\boxed{\hat{U} = \sum_{\lambda\mu} \langle \lambda | \hat{U} | \mu \rangle a^\dagger_\lambda a_\mu}$$

Exemplos: Energia cinética : $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r\, \psi^\dagger(\vec{r}) (\vec{\nabla})^2 \psi(\vec{r})$

Potencial de um corpo (externo): $\hat{U} = \int d^3r\, \psi^\dagger(\vec{r}) U(\vec{r}) \psi(\vec{r})$

Ação de $\hat{V}$ na base que o diagonaliza

Analogamente, para operadores de dois corpos, usamos uma base que o diagonalize:

$$\hat{V} = \sum_{\alpha\beta} (\alpha\beta|V|\alpha\beta)\,|\alpha\beta)(\alpha\beta| = \sum_{\alpha\beta} V_{\alpha\beta}\,|\alpha\beta)(\alpha\beta|$$

Assim, obteremos na base canônica correspondente:

$$\{\alpha_1' \cdots \alpha_N' | \hat{V} | \alpha_1 \cdots \alpha_N\} = \sum_P \zeta^P (\alpha'_{P1} \cdots \alpha'_{PN} | \hat{V} | \alpha_1 \cdots \alpha_N)$$

$$= \sum_P \zeta^P \sum_{i \neq j} \left(\frac{1}{2}\right) \prod_{\substack{k \neq i \\ k \neq j}} \langle \alpha'_{Pk} | \alpha_k \rangle (\alpha'_{Pi}\, \alpha'_{Pj} | \hat{V} | \alpha_i\, \alpha_j) = (*)$$

$$(\alpha'_{Pi}\,\alpha'_{Pj} | \hat{V} | \alpha_i\,\alpha_j) = \sum_{\lambda\mu} V_{\lambda\mu}\, (\alpha'_{Pi}\,\alpha'_{Pj} | \lambda\mu)(\lambda\mu | \alpha_i\,\alpha_j)$$

$$= \sum_{\lambda\mu} V_{\lambda\mu}\, (\alpha'_{Pi}\,\alpha'_{Pj} | \lambda\mu)\, \delta_{\lambda\alpha_i}\, \delta_{\mu\alpha_j}$$

$$= V_{\alpha_i\alpha_j}\, (\alpha'_{Pi}\,\alpha'_{Pj} | \alpha_i\,\alpha_j)$$

$$(*) = \sum_P \zeta^P \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{\alpha_i\alpha_j} \prod_k \langle \alpha'_{Pk} | \alpha_k \rangle$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{\alpha_i\alpha_j} \{\alpha_1' \cdots \alpha_N' | \alpha_1 \cdots \alpha_N\}$$

Para que possamos inserir $V_{\alpha_i\alpha_j}$ entre os estados simetrizados na forma de uma soma sobre todos os estados da base (ao invés da soma sobre os estados ocupados $\alpha_i\,\alpha_j$) precisamos de um operador que conte quantas vezes um dado par de estados (α,β) aparece na soma sobre i,j acima. Chamemo-lo de $N_{\alpha\beta}$

Ação de V na base que o diagonaliza

– Se $\alpha \neq \beta$, obviamente o par (α, β) aparece $n_\alpha n_\beta$ vezes na soma $\sum_{i \neq j} V_{\alpha_i \alpha_j}$

– Se $\alpha = \beta$, no entanto, o número de vezes é $n_\alpha (n_\alpha - 1)$

Portanto:
$$N_{\alpha\beta} = n_\alpha n_\beta - \delta_{\alpha\beta} n_\alpha = \underbrace{a_\alpha^\dagger a_\alpha a_\beta^\dagger a_\beta}_{} - \delta_{\alpha\beta} a_\alpha^\dagger a_\alpha$$

$$a_\alpha^\dagger \left[\zeta a_\beta^\dagger a_\alpha + \delta_{\alpha\beta}\right] a_\beta = \zeta a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\alpha a_\beta + \delta_{\alpha\beta} a_\alpha^\dagger a_\alpha$$

$$\Rightarrow N_{\alpha\beta} = \zeta a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\alpha a_\beta = a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\beta a_\alpha$$

Portanto:

$$\{\alpha_1' \cdots \alpha_N' | \hat{V} | \alpha_1 \cdots \alpha_N\} = \frac{1}{2} \{\alpha_1' \cdots \alpha_N' | \sum_{\alpha\beta} V_{\alpha\beta} N_{\alpha\beta} | \alpha_1 \cdots \alpha_N\}$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} V_{\alpha\beta} N_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} (\alpha\beta | V | \alpha\beta)\, a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\beta a_\alpha}$$

Ação geral de V em termos de a's e $a^\dagger$'s

Transformando para uma base geral:

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu\nu\rho} (\lambda\mu | V | \nu\rho)\, a_\lambda^\dagger a_\mu^\dagger a_\rho a_\nu$$

Atenção: Compare a ordem dos índices $\lambda\mu\nu\rho$ ~~no~~ no elemento de matriz e no produto de operadores $a, a^\dagger$.

Exemplo: Interação $V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$ de dois corpos:

$$\Rightarrow \hat{V} = \frac{1}{2} \int d^3x\, d^3y\, \psi^{+}(\bar{x})\, \psi^{+}(\bar{y})\, \psi(\bar{y})\, \psi(\bar{x})\, V(\bar{x} - \bar{y})$$