

Da discussão anterior, vemos que não tem mais sentido físico se perguntar que estado individual uma dada partícula está ocupando. Os estados físicos são completamente simetrizados ou anti-simetrizados. Isso pode ser expressado de maneira compacta através do formalismo dos números de ocupação: a única informação relevante é saber quantas partículas (idênticas) estão ocupando um determinado estado.

Os 'kets' $|n_0 n_1 \dots n_i \dots\rangle$ de todas as possíveis seqüências $\{n_i\}$, com $\sum_i n_i = n$, formam uma base de todos os estados possíveis de n partículas idênticas. A soma direta desses espaços para $n=0, 1, 2, \dots$ é chamada de Espaço de Fock.

Para bósons, todos os estados são simetrizados. Para férmions são todos anti-simetrizados. Para percorrer o espaço de Fock, tratando de estados com diferentes números de partículas, definimos operadores auxiliares (não são observáveis) chamados operadores de 'destruição' e 'criação'.

Vejamos primeiro o caso de bósons.

(A) 2ª Quantização de bósons

Tratamos exclusivamente com estados simetrizados na representação dos números de ocupação. Assumimos completudeza e ortonormalidade:

$$\sum_{\{n_i\}} |n_0 n_1 \dots n_i \dots\rangle \langle n_0 n_1 \dots n_i \dots| = 1,$$

$$\langle n_0 n_1 \dots n_i \dots | n'_0 n'_1 \dots n'_i \dots \rangle = \delta_{n_0 n'_0} \delta_{n_1 n'_1} \dots$$

19

► Def. Operador de 'destruição', a_i

$$a_i |n_0 \dots n_i \dots\rangle \equiv \sqrt{n_i} |n_0 \dots (n_i-1) \dots\rangle$$

a_i destrói uma partícula no estado $|n_i\rangle$, cujo número de ocupação era n_i . Pesquisamos a álgebra dos operadores:

i) seja $i < j$

$$\begin{aligned} a_i a_j |n_0 \dots n_i \dots n_j \dots\rangle &= \sqrt{n_j} a_i |n_0 \dots n_i \dots (n_j-1) \dots\rangle \\ &= \sqrt{n_j n_i} |n_0 \dots (n_i-1) \dots (n_j-1) \dots\rangle \\ &= a_j a_i |n_0 \dots n_i \dots n_j \dots\rangle. \end{aligned}$$

Os operadores comutam: $a_i a_j = a_j a_i$

► Def. Comutador de A com B,

$$[A, B] \equiv AB - BA$$

Resultado: Como todo operador comuta com ele mesmo,

$$[a_i, a_j] = 0, \text{ para todos } (i, j).$$

► Def. Operador de 'criação', a_i^+

$$a_i^+ |n_0, n_1 \dots n_i \dots\rangle \equiv \sqrt{n_i+1} |n_0, n_1 \dots (n_i+1) \dots\rangle$$

Pode-se facilmente demonstrar que a_i^\dagger é o hermitiano conjugado do operador de destruição (de maneira que se justifica a notação, com o símbolo †)

Resultado: $[a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0$, para todo (i, j)

Falta pesquisar as relações de comutação com produtos cruzados.

ii) seja $i < j$

$$\begin{aligned} a_i a_j^\dagger |n_0 \dots n_i \dots n_j \dots\rangle &= \sqrt{n_j+1} a_i |n_0 \dots n_i \dots (n_j+1) \dots\rangle \\ &= \sqrt{n_i(n_j+1)} |n_0 \dots (n_i-1) \dots (n_j+1) \dots\rangle \\ &= a_j^\dagger a_i |n_0 \dots n_i \dots n_j \dots\rangle \end{aligned}$$

Resultado: $[a_i, a_j^\dagger] = 0$, para $i \neq j$.

iii) conferir $i = j$

$$\begin{aligned} a_i a_i^\dagger |n_0 \dots n_i \dots\rangle &= \sqrt{n_i+1} a_i |n_0 \dots (n_i+1) \dots\rangle \\ &= (n_i+1) |n_0 \dots n_i \dots\rangle ; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a_i^\dagger a_i |n_0 \dots n_i \dots\rangle &= \sqrt{n_i} a_i^\dagger |n_0 \dots (n_i-1) \dots\rangle \\ &= n_i |n_0 \dots n_i \dots\rangle \end{aligned}$$

Resultado: $a_i a_i^\dagger = a_i^\dagger a_i + 1$,

ou equivalentemente:

$$[a_i, a_i^\dagger] = 1$$

Resumo: Obtemos as relações de comutação seguintes:

$$[a_i, a_j] = 0, \quad [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0,$$

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij},$$

onde δ_{ij} é o símbolo 'delta de Kronecker'.

A álgebra carrega em forma compacta a informação sobre a simetrização dos estados de bósons.

Como subproduto da última demonstração, temos construído o operador hermitiano $(a_i^\dagger a_i)$, cujos autovalores são exatamente os números de ocupação.

• Def. Operador número de partículas no estado de energia ϵ_i :

$$N_i \equiv a_i^\dagger a_i$$

Este é o primeiro operador dinâmico construído com os operadores 'auxiliares' (a, a^\dagger). Os autovalores dos $\{N_i\}$ são os números de ocupação:

$$N_i |n_0, n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_0, n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$$

• Def. Número total de partículas:

$$N \equiv \sum_i N_i = \sum_i a_i^\dagger a_i$$

Temos:

$$N |n_0, n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \sum_i n_i |n_0, n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = n |n_0, n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$$

com
$$n = \sum_i n_i$$

Propriedades

i) Relações de comutação

$$[N_i, a_j] = [a_i^\dagger a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j] a_i = -\delta_{ij} a_i,$$

com
$$[N_i, a_i] = -a_i;$$

$$[N_i, a_j^\dagger] = [a_i^\dagger a_i, a_j^\dagger] = a_i^\dagger [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij} a_i^\dagger,$$

com
$$[N_i, a_i^\dagger] = a_i^\dagger.$$

Resultado:
$$a_i^\dagger |n_0, n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$$

é autoestado de N_i com autovalor (n_{i+1}) . De fato:

$$\begin{aligned} N_i (a_i^\dagger |n_0 n_1 \dots n_i \dots\rangle) &= (a_i^\dagger N_i + a_i^\dagger) |n_0 n_1 \dots n_i \dots\rangle \\ &= (n_{i+1}) (a_i^\dagger |n_0 n_1 \dots n_i \dots\rangle) \quad \dots \dots \text{c.q.d.} \end{aligned}$$

ii) Teorema. Os autovalores de N_i são não negativos.

Dem.

$$\begin{aligned} \langle n_0 n_1 \dots n_i \dots | N_i | n_0 n_1 \dots n_i \dots \rangle &= n_i \\ &= \langle n_0 n_1 \dots n_i \dots | a_i^\dagger a_i | n_0 n_1 \dots n_i \dots \rangle \end{aligned}$$

Seja : $|\varphi\rangle \equiv a_i |n_0, n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$

$$n_i = (\langle n_0 n_1 \dots n_i | a_i^\dagger) (a_i | n_0 n_1 \dots n_i \dots \rangle) = \langle \varphi | \varphi \rangle \geq 0$$

Resultado : $\boxed{n_i \geq 0}$ ('positivo definido')

\Rightarrow O processo de aplicar o operador a_i tem um limite

$$(a_i)^m |n_0 n_1 \dots n_i \dots\rangle = \sqrt{n_i (n_i - 1) \dots (n_i - m + 1)} |n_0 n_1 \dots (n_i - m) \dots\rangle$$

portanto

$$n_i - m \geq 0, \text{ para todo } m$$

A partir de $m = n_i$, a aplicação de a_i deve zerar:

$$a_i |n_0, n_1, \dots, \underset{(i)}{0}, \dots\rangle = 0.$$

Se não, teríamos autovalores negativos.

Def. Vácuo do 'campo' de bósons, $|0\rangle$

$|0\rangle$ é o estado para o qual

$$a_i |0\rangle = 0,$$

$$N_i |0\rangle = 0, \text{ para todo } i.$$

Informalmente, o vácuo é o estado 'sem partículas'.

Um estado arbitrário $|n_0 n_1 \dots n_i \dots\rangle$ pode ser representado a partir do vácuo. Ilustramos o processo no caso de um estado, com operadores (a, a^\dagger) :

$$a^\dagger |0\rangle = \sqrt{1} |1\rangle$$

$$a^\dagger |1\rangle = \sqrt{2} |2\rangle$$

$$\vdots$$

$$a^\dagger |m-1\rangle = \sqrt{m} |m\rangle,$$

por indução vemos que:

$$|m\rangle = \frac{(a^\dagger)^m}{\sqrt{m!}} |0\rangle.$$

Generalizando para vários estados, obtemos:

$$|n_0 n_1 \dots n_i \dots\rangle = \frac{(a_0^\dagger)^{n_0} (a_1^\dagger)^{n_1} \dots (a_i^\dagger)^{n_i} \dots}{\sqrt{n_0! n_1! \dots n_i! \dots}} |0\rangle,$$

onde a ordem não importa porque todos os operadores comutam. Temos:

$$n_0, n_1, \dots, n_i, \dots = 0, 1, 2, \dots, \infty$$

(B) 2ª Quantização de Férmions

Tratamos agora com estados anti-simetrizados.

► Def. Operador de destruição, a_i

$$a_i |n_0, n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\delta_i} n_i |n_0, n_1, \dots, (n_i-1), \dots\rangle,$$

onde a fase é dada por

$$\delta_i \equiv \sum_{k < i} n_k.$$

Portanto, aparece um sinal (fase) que depende da ocupação de todos os estados à 'esquerda' de ϵ_i .

Ao contrário do caso de bósons, a ordem em $|n_0, n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$ sim importa. Pesquisamos a álgebra dos operadores

Seja $i < j$, obtemos:

$$\begin{aligned} a_i a_j |n_0, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle &= (-1)^{\delta_j} n_j (a_i |n_0, \dots, n_i, \dots, (n_j-1), \dots\rangle) \\ &= (-1)^{\delta_i + \delta_j} n_i n_j |n_0, \dots, (n_i-1), \dots, (n_j-1), \dots\rangle. \end{aligned}$$

Operamos agora no sentido inverso:

$$\begin{aligned} a_j a_i |n_0, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle &= (-1)^{\delta_i} n_i (a_j |n_0, \dots, (n_i-1), \dots, n_j, \dots\rangle) \\ &= (-1)^{\delta_i + \delta_j - 1} n_i n_j |n_0, \dots, (n_i-1), \dots, (n_j-1), \dots\rangle. \end{aligned}$$

Como operamos sobre uma base (completa), obtemos:

$$a_i a_j = -a_j a_i$$

Portanto, não comutam.

► Def. Anticomutador de dois operadores

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

Obtemos então, para $i \neq j$:

$$\{a_i, a_j\} = 0$$

Para incluir o Princípio de Exclusão de Pauli, devemos admitir

$$\{a_i, a_j\} = 0, \text{ para todo } (i, j).$$

Em particular, para $i = j$, temos:

$$\boxed{a_i^2 = 0}$$

O operador de criação é o hermitiano conjugado (como no caso de bósons), obtendo as relações:

$$\{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0, \quad (a_i^\dagger)^2 = 0.$$

Mas, por conveniência de cálculo, definimos o operador de criação como:

► Def. Operador de criação, a_i^\dagger

$$a_i^\dagger |n_0, n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{s_i} (1 - n_i) |n_0, n_1, \dots, (n_i - 1), \dots\rangle$$

O fator $(1 - n_i)$ garante que o estado de energia ϵ_i só pode ser ocupado uma vez (não pode ser ocupado mais de uma vez).

Precisamos pesquisar a álgebra dos produtos cruzados. Outra vez, supomos que $i < j$

$$\begin{aligned}
 a_i a_j^\dagger |n_0 \dots n_i \dots n_j \dots\rangle &= (-1)^{\delta_j} (1-n_j) (a_i |n_0 n_1 \dots n_i \dots (n_j+1) \dots\rangle) \\
 &= (-1)^{\delta_j + \delta_i} n_i (1-n_j) |n_0 \dots (n_i-1) \dots (n_j+1) \dots\rangle
 \end{aligned}$$

Agora:

$$\begin{aligned}
 a_j^\dagger a_i |n_0 \dots n_i \dots n_j \dots\rangle &= (-1)^{\delta_i} n_i (a_j^\dagger |n_0 \dots (n_i-1) \dots n_j \dots\rangle) \\
 &= (-1)^{\delta_i + \delta_j - 1} n_i (1-n_j) |n_0 \dots (n_i-1) \dots (n_j+1) \dots\rangle
 \end{aligned}$$

portanto obtemos

$$\{a_i, a_j^\dagger\} = 0, \text{ para } i \neq j.$$

Tratamos o caso $i=j$,

$$\begin{aligned}
 a_i a_i^\dagger |n_0 \dots n_i \dots\rangle &= (-1)^{\delta_i} (1-n_i) a_i |n_0 \dots (n_i+1) \dots\rangle \\
 &= (-1)^{2\delta_i} (n_i+1)(1-n_i) |n_0 \dots n_i \dots\rangle
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 a_i^\dagger a_i |n_0 \dots n_i \dots\rangle &= (-1)^{\delta_i} n_i (a_i^\dagger |n_0 \dots (n_i-1) \dots\rangle) \\
 &= (-1)^{2\delta_i} n_i (1-n_i+1) |n_0 \dots n_i \dots\rangle
 \end{aligned}$$

Notemos que a relação $(a_i^\dagger)^2 = 0$ implica na equação $n_i(1-n_i) = 0$, cujas soluções são $n_i = 0, 1$ e é satisfeita a relação $n_i^2 = n_i$.

$$\text{Assim: } (1+n_i)(1-n_i) = 1-n_i^2 = 1-n_i,$$

$$n_i(2-n_i) = 2n_i - n_i^2 = n_i.$$

Portanto, obtemos:

$$a_i a_i^\dagger |n_0 \dots n_i \dots\rangle = (1-n_i) |n_0 \dots n_i \dots\rangle$$

$$e \quad a_i^\dagger a_i |n_0 \dots n_i \dots\rangle = n_i |n_0 \dots n_i \dots\rangle,$$

obtendo-se

$$a_i a_i^\dagger + a_i^\dagger a_i = \{a_i, a_i^\dagger\} = 1,$$

Obtemos o resultado geral:

$$\{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij},$$

junto com

$$\{a_i, a_j\} = 0 = \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\}$$

Como subproduto da demonstração acima, podemos definir

Def. Operador número

$$N_i \equiv a_i^\dagger a_i,$$

$$N_i |n_0 \dots n_i \dots\rangle = n_i |n_0 \dots n_i \dots\rangle$$

Vejamos que o formalismo é consistente:

$$\begin{aligned} N_i^2 &= a_i^\dagger a_i a_i^\dagger a_i = a_i^\dagger (1 - a_i^\dagger a_i) a_i = a_i^\dagger a_i - \underbrace{(a_i^\dagger)^2 a_i^2}_0 \\ &= a_i^\dagger a_i = N_i \end{aligned}$$

$$\Rightarrow N_i \text{ satisfaz a equação } N_i (N_i - 1) = 0,$$

que é também satisfeita pelos autovalores.

$$\text{Solução: } n_i = 0, 1.$$

Aqui também $N_i = a_i^\dagger a_i$ é um operador positivo definido, de maneira que $n_i \geq 0$. Essa propriedade

implica na existência do vácuo $|0\rangle$,

$$\begin{cases} a_i |0\rangle = 0, \\ N_i |0\rangle = 0, \text{ para todo } \varepsilon_i. \end{cases}$$

Todo ket $|n_0, n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$ pode ser expressado em termos do vácuo, como

$$|n_0, n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = (a_0^\dagger)^{n_0} (a_1^\dagger)^{n_1} \dots (a_i^\dagger)^{n_i} \dots |0\rangle,$$

mas agora a ordem importa porque os operadores anticomutam. Os kets já contêm as propriedades de antisimetria.

Ex. a) $\langle \vec{x} | (a_i^\dagger |0\rangle) = \psi_i(\vec{x}),$

onde ψ_i é a função de onda associada à energia ε_i .

b) duas partículas:

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | (a_i^\dagger a_j^\dagger |0\rangle) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_i(\vec{x}_1) \psi_j(\vec{x}_2) - \psi_j(\vec{x}_1) \psi_i(\vec{x}_2)] \\ &= \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | 1_i 1_j \rangle = - \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | 1_j 1_i \rangle \\ &= - \langle \vec{x}_2, \vec{x}_1 | 1_i 1_j \rangle \end{aligned}$$

Para introduzir a representação de coordenadas é conveniente introduzir os operadores

► Def. Operadores de Campo

Sejam $\phi_i(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle$ os estados associados a um autovalor λ_i de uma observável de 1-partícula.

Definimos os operadores:

$$\Psi(\vec{x}) = \sum_i \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle a_i = \sum_i \phi_i(\vec{x}) a_i,$$

onde a_i é o operador de destruição associado ao estado $|\lambda_i\rangle$. Para o hermitiano conjugado (operador de criação) temos:

$$\Psi^\dagger(\vec{x}) = \sum_i \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle^* a_i^\dagger = \sum_i \phi_i^*(\vec{x}) a_i^\dagger.$$

Estas definições são genéricas, para campos de bósons e férmions. Para levar em conta tanto as relações de comutação como as de anticomutação, escrevemos:

$$[A, B]_{\pm} \equiv AB \pm BA.$$

Assim temos:

$$\begin{aligned} [\Psi(\vec{x}), \Psi^\dagger(\vec{x}')] &= \sum_{ij} \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle \langle \vec{x}' | \lambda_j \rangle^* \underbrace{[a_i, a_j^\dagger]_{\pm}}_{\delta_{ij}} \\ &= \sum_{ij} \delta_{ij} \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle \langle \lambda_j | \vec{x}' \rangle = \sum_i \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle \langle \lambda_i | \vec{x}' \rangle \\ &= \langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}'). \end{aligned}$$

Também temos:

$$[\Psi(\vec{x}), \Psi(\vec{x}')] = 0 = [\Psi^\dagger(\vec{x}), \Psi^\dagger(\vec{x}')].$$

O operador $\Psi^\dagger(\vec{x})\Psi(\vec{x})$ pode ser interpretado como uma 'densidade de partículas'. De fato:

$$\begin{aligned} \int d\vec{x} \Psi^\dagger(\vec{x})\Psi(\vec{x}) &= \sum_{ij} a_i^\dagger a_j \underbrace{\int d\vec{x} \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle^* \langle \vec{x} | \lambda_j \rangle}_{\langle \lambda_i | \lambda_j \rangle} \\ &= \sum_{ij} \delta_{ij} a_i^\dagger a_j = \sum_i a_i^\dagger a_i = \sum_i N_i = N. \end{aligned}$$

O operador $\Psi(\vec{x})$ foi construído em analogia com a função de onda na teoria de Schrödinger.

⇒ Interpretação física dos operadores Ψ^\dagger, Ψ :

i) $\Psi^\dagger(\vec{x})|0\rangle$ é um estado de uma partícula.

Calculamos primeiro o comutador:

$$\begin{aligned} [N, \Psi^\dagger(\vec{x})] &= \int d\vec{x}' [\Psi^\dagger(\vec{x}')\Psi(\vec{x}'), \Psi^\dagger(\vec{x})] \\ &= \int d\vec{x}' \Psi^\dagger(\vec{x}') [\Psi(\vec{x}'), \Psi^\dagger(\vec{x})]_{\pm} = \int d\vec{x}' \Psi^\dagger(\vec{x}') \delta_{(\vec{x}' - \vec{x})}^{(3)} \\ &= \Psi^\dagger(\vec{x}). \end{aligned}$$

Agora operamos com o número:

$$\begin{aligned} N(\Psi^\dagger(\vec{x})|0\rangle) &= \{\Psi^\dagger(\vec{x})N + \Psi^\dagger(\vec{x})\}|0\rangle \\ &= \Psi^\dagger(\vec{x})|0\rangle, \text{ porque } N|0\rangle = 0. \end{aligned}$$

Portanto $\psi^\dagger(\vec{x})|0\rangle$ é autoestado de N com autovalor 1.

$\Rightarrow \psi^\dagger(\vec{x})|0\rangle$ é um estado de 1-partícula. Projetamos na representação de coordenadas para obtermos a função de onda:

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}' | (\psi^\dagger(\vec{x})|0\rangle) &= \langle \vec{x}' | \left(\sum_i \phi_i^*(\vec{x}) a_i^\dagger |0\rangle \right) \\ &= \sum_i \phi_i^*(\vec{x}) \langle \vec{x}' | a_i^\dagger |0\rangle = \sum_i \phi_i^*(\vec{x}) \phi_i(\vec{x}') \\ &= \sum_i \langle \vec{x}' | \lambda_i \rangle \langle \lambda_i | \vec{x} \rangle = \langle \vec{x}' | \vec{x} \rangle = \delta^{(3)}(\vec{x}' - \vec{x}), \end{aligned}$$

que é a função de onda de 1-partícula com coordenada \vec{x} .

Resultado: O operador $\psi^\dagger(\vec{x})$ cria uma partícula no espaço real, com coordenada \vec{x} . Mas o problema de 1-partícula é trivial. Passamos então para 2-partículas:

$$\begin{aligned} \psi^\dagger(\vec{x}_1) \psi^\dagger(\vec{x}_2) |0\rangle &= \sum_{i,j} \langle \vec{x}_1 | \lambda_i \rangle^* \langle \vec{x}_2 | \lambda_j \rangle^* a_i^\dagger a_j^\dagger |0\rangle \\ &= \sum_{i,j} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\lambda_i\rangle |\lambda_j\rangle \pm |\lambda_j\rangle |\lambda_i\rangle \right) \langle \lambda_i | \vec{x}_1 \rangle \langle \lambda_j | \vec{x}_2 \rangle \end{aligned}$$

onde \pm se refere a bósons ou férmions. Usando a completude dos estados de 1-partícula, obtemos:

$$\psi^\dagger(\vec{x}_1) \psi^\dagger(\vec{x}_2) |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\vec{x}_1\rangle |\vec{x}_2\rangle \pm |\vec{x}_2\rangle |\vec{x}_1\rangle \right)$$

de maneira que obtemos os estados de dois partículas que são fisicamente relevantes. Escrever:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} \psi(\vec{x}_1) \psi(\vec{x}_2) |0\rangle &= \frac{1}{2} (|\vec{x}_1 \vec{x}_2\rangle \pm |\vec{x}_2 \vec{x}_1\rangle) \\ &= \begin{cases} S |\vec{x}_1 \vec{x}_2\rangle, & (\text{bósons}) \\ A |\vec{x}_1 \vec{x}_2\rangle, & (\text{férmions}), \end{cases} \end{aligned}$$

onde $S(A)$ é o simetrizador (anti-simetrizador) do estado de 2-partículas.

Em geral, para n -partículas temos:

$$S = \frac{1}{n!} \sum_{\sigma \in S_n} P_{\sigma},$$

$$A = \frac{1}{n!} \sum_{\sigma \in S_n} \epsilon_{\sigma} P_{\sigma},$$

onde somamos sobre todas as permutações P_{σ} de n -partículas, com ϵ_{σ} sendo o sinal da permutação:

$$\epsilon_{\sigma} = \begin{cases} +1, & \text{para } \sigma \text{ par} \\ -1, & \text{para } \sigma \text{ ímpar} \end{cases}$$

'Teorema' (sem demonstração)

Uma permutação P é par (ímpar) quando é resolvida num número par (ímpar) de transposições de duas partículas P_{ij}

Por indução, obtemos o resultado:

$$\frac{1}{\sqrt{n!}} \psi^\dagger(\vec{x}_1) \psi^\dagger(\vec{x}_2) \dots \psi^\dagger(\vec{x}_n) |0\rangle = \begin{cases} S |\vec{x}_1 \dots \vec{x}_n\rangle, & (\text{bósons}). \\ A |\vec{x}_1 \dots \vec{x}_n\rangle, & (\text{férmions}). \end{cases}$$

Notamos que para bósons os operadores ψ^\dagger comutam entre si. Para férmions, eles anti-comutam. Assim é levada em conta a simetria dos estados físicos.

Os espaços de n -partículas convenientemente simetrizados são chamados espaços de Fock. Nesses espaços, todos os observáveis poderão ser escritos em termos dos operadores de criação e destruição. Na versão de Schrödinger, as coordenadas das partículas aparecem como parâmetros (teoria de Campos). Na versão de Heisenberg, os operadores contêm a dinâmica:

$$\begin{array}{ccc} \psi(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{x}) & \longrightarrow & \psi(\vec{x}, t), \psi^\dagger(\vec{x}, t) \\ \text{Schrödinger} & & \text{Heisenberg} \end{array}$$

Nesse último caso, a analogia com teoria de Campos é completa.

§ Representação de alguns observáveis

Consideramos um Hamiltoniano de n -partículas idênticas:

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \sum_i V_{\text{ext}}(\vec{x}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{\text{int}}(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|),$$

separamos em duas parcelas:

$$\mathcal{H}^{(1)} = \sum_i \left\{ \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\vec{x}_i; e) \right\},$$

$$\mathcal{H}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{\text{int}}(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|).$$

$\mathcal{H}^{(1)}$ é um termo de 1-partícula. As interações (binárias) estão em $\mathcal{H}^{(2)}$, que é um termo de 2-partículas.

Tratamos separadamente os casos:

a) Seja F um operador (de n -partículas idênticas) que é soma de operadores de 1-partícula:

$$F = \sum_{i=1}^n f(\vec{x}_i, \vec{p}_i).$$

A representação de F no espaço de Fock é dada por:

$$F = \int d\vec{x} \Psi^\dagger(\vec{x}) f(\vec{x}, \vec{p}) \Psi(\vec{x}).$$

Introduzindo uma representação de estados de 1-partícula, temos:

$$\psi(\vec{x}) = \sum_i \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle a_i, \quad \psi^\dagger(\vec{x}) = \sum_j \langle \vec{x} | \lambda_j \rangle^* a_j^\dagger,$$

onde os índices (i, j) agora se referem a estados de 1-partícula

$$F = \sum_{i,j} a_j^\dagger a_i \int d\vec{x} \langle \vec{x} | \lambda_j \rangle^* f(\vec{x}, \vec{p}) \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle$$

notamos que a integral representa um elemento da matriz de f na representação de coordenadas:

$$\int d\vec{x} \langle \vec{x} | \lambda_j \rangle^* f(\vec{x}, \vec{p}) \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle = \langle \lambda_j | \hat{f} | \lambda_i \rangle \equiv f_{ji},$$

ou seja:

$$F = \sum_{i,j} f_{ji} a_j^\dagger a_i$$

b) Seja F um operador que é soma de operadores de 2-partículas:

$$F = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} g(\vec{x}_i, \vec{x}_j), \quad i, j = 1, 2, \dots, m$$

A representação de F no espaço de Fock é dada por

$$F = \frac{1}{2} \int d\vec{x} \int d\vec{x}' \psi^\dagger(\vec{x}) \psi^\dagger(\vec{x}') g(\vec{x}, \vec{x}') \psi(\vec{x}') \psi(\vec{x})$$

estutura de 'camadas de cebola'

Usando uma rep. de 1-partícula, obtemos:

$$F = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sum_{i',j'} a_j^\dagger a_j^\dagger a_i a_i \times \\ \times \int d\vec{x} \int d\vec{x}' \phi_j^*(\vec{x}) \phi_j^*(\vec{x}') g(\vec{x}, \vec{x}') \phi_i(\vec{x}') \phi_i(\vec{x}).$$

Aparecem elementos de matriz do operador g na representação de coordenadas. Escrevemos:

$$\langle \lambda_j \lambda_j | \hat{g} | \lambda_i \lambda_i \rangle \equiv \int d\vec{x} \int d\vec{x}' \phi_j^*(\vec{x}) \phi_j^*(\vec{x}') g(\vec{x}, \vec{x}') \phi_i(\vec{x}') \phi_i(\vec{x}),$$

obtendo-se:

$$F = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sum_{i',j'} \langle \lambda_j \lambda_j | \hat{g} | \lambda_i \lambda_i \rangle a_j^\dagger a_j^\dagger a_i a_i$$

Exemplo 1. Energia cinética

$$K = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m} = \sum_i f(\vec{p}_i)$$

Na representação de coordenadas:

$$f(\vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

Calculamos elementos de matriz de f :

$$\langle \lambda_j | \hat{f} | \lambda_i \rangle = \int d\vec{x} \phi_j^*(\vec{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \phi_i(\vec{x}) =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d\vec{x} \phi_j^*(\vec{x}) \nabla^2 \phi_i(\vec{x}) .$$

Usamos a identidade:

$$f \nabla^2 g = \nabla \cdot (f \nabla g) - \nabla f \cdot \nabla g ,$$

de maneira que

$$f_{ji} = \langle \lambda_j | \hat{f} | \lambda_i \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d\vec{x} \nabla \cdot [\phi_j^*(\vec{x}) \nabla \phi_i(\vec{x})] + \\ + \frac{\hbar^2}{2m} \int d\vec{x} \nabla \phi_j^*(\vec{x}) \cdot \nabla \phi_i(\vec{x})$$

Usando o Teorema de Gauss, a 1ª integral pode ser convertida em uma integral de fluxo:

$$\int_V d\vec{x} \nabla \cdot (\phi_j^* \nabla \phi_i) = \int_{S(V)} d\vec{a} \cdot (\phi_j^* \nabla \phi_i) = \Phi_S ,$$

quando $V \rightarrow \infty$, Φ_S é o fluxo no infinito. Supondo que as partículas 'não escapam', esse fluxo é nulo. Assim, obtemos a forma simetrizada:

$$f_{ji} = \int d\vec{x} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla \phi_j^*(\vec{x}) \cdot \nabla \phi_i(\vec{x}) .$$

Sejam (a_i, a_i^\dagger) os operadores de destruição e criação associados com os estados $\{|\lambda_i\rangle\}$. O operador de energia cinética se escreve como:

$$K = \sum_{ij} f_{ji} a_j^\dagger a_i$$

Ele é manifestamente hermitiano, porque $f_{ji}^* = f_{ij}$.

$$K^\dagger = \sum_{i,j} f_{ji}^* a_i^\dagger a_j = \sum_{i,j} f_{ij} a_i^\dagger a_j = K.$$

2. Modelo 1-dim de sólido cristalino (espaço real)

O índice i representa sítios numa rede 1-dim. Os estados associados a cada sítio são originários de orbitais atômicos. Em Estado Sólido são chamados orbitais de Wannier. Por simetria de translação, eles têm a mesma forma em torno de sítios da rede R_i :

$$\phi_{R_i}^{(\alpha)}(x) = \phi^{(\alpha)}(x - R_i) \equiv \phi_i^{(\alpha)}(x)$$

O índice α indica o tipo de orbital. Supomos também que os orbitais só têm superposição não nula para primeiros vizinhos e consideramos um único orbital por sítio (o mesmo orbital):



As únicas integrais não nulas são do tipo:

$$t \equiv \int d\vec{x} \nabla \phi_i^*(\vec{x}) \cdot \nabla \phi_{i+1}(\vec{x})$$

$$t^* = \int d\vec{x} \nabla \phi_i^*(\vec{x}) \cdot \nabla \phi_{i-1}(\vec{x})$$

Sejam (c_i, c_i^\dagger) os operadores de férmions (elétrons) associados aos orbitais de Wannier. A energia cinética dos elétrons se escreve como:

$$K = \sum_i (t c_i^\dagger c_{i+1} + t^* c_{i+1}^\dagger c_i).$$

Se a integral t (chamada 'hopping') for real, obtemos:

$$K = t \sum_i (c_{i+1}^\dagger c_i + c_i^\dagger c_{i+1}),$$

que descreve a difusão dos elétrons ao longo da rede.

3. Interações entre as partículas

$$F = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|)$$

Exemplo importante da interação de Coulomb 'blindada':

$$F = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|} \exp(-\mu |\vec{x}_i - \vec{x}_j|),$$

onde a interação de longo alcance é obtida para $\mu \rightarrow 0$.

Precisamos calcular elementos de matriz de $V(\vec{x}, \vec{x}')$ entre estados de duas partículas:

$$\langle jj' | \hat{V} | ii' \rangle = \int d\vec{x} \int d\vec{x}' \phi_j^*(\vec{x}) \phi_{j'}^*(\vec{x}') V(\vec{x}, \vec{x}') \phi_i(\vec{x}) \phi_{i'}(\vec{x}')$$

e a forma de F em 2ª quantização é dada por: