§ Sistemas de muitas partículas (idênticas), não interagentes

A. Bósons (sem spin)

Chamamos o sistema de 'Gás Perfeito de Bósons', para um sistema de bósons descritos pelo modelo de partícula livre. As partículas estão confinadas numa caixa de volume V, com condições periódicas de contorno, com relação de dispersão:

$$\mathcal{E}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} ,$$

sendo $\vec{k}$ o vetor de onda, com valores

$$k_i = \frac{2\pi}{V^{1/3}} \nu_i , \qquad i = x, y, z$$

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

O estado de menor energia corresponde a $\vec{k} \equiv 0$, isto é

$$\mathcal{E}(0) = 0.$$

O estado fundamental do sistema, corresponde a todos os bósons ocupando o estado com $\vec{k} = 0$ (condensado de Bose-Einstein)

Seja $|\varphi_0^N\rangle$ este estado:

$$|\varphi_0^N\rangle = \frac{(a_0^\dagger)^N}{\sqrt{N!}}|0\rangle , \qquad (1)$$

onde $a_0^\dagger$ é o operador de criação no estado de $\vec{k}=0$:

$$a_{\vec{k}}|\varphi_0^N\rangle = 0, \text{ para } \vec{k}\neq 0 ,$$

$$a_0^\dagger a_0|\varphi_0^N\rangle = N|\varphi_0^N\rangle ,$$

$$a_0|\varphi_0^N\rangle = \sqrt{N}\,|\varphi_0^{N-1}\rangle . \qquad (2)$$

Esse estado de Fock é um 'estado de número', porque o número de partículas ocupando o estado de $\vec{k}=0$ está bem definido. Como no caso eletromagnético, um estado de número está sujeito a flutuações quânticas (flutuações do vácuo). Se a ocupação do estado tiver manifestação macroscópica, esperamos que a condensação seja descrita por um campo semi-clássico. Note que para $N\to\infty$ (limite termodinâmico):

$$a_0|\varphi_0^N\rangle = \sqrt{N}\,|\varphi_0^{N-1}\rangle \approx \sqrt{N}\,|\varphi_0^N\rangle ,$$

de maneira que o estado do condensado seria um auto-estado do operador de destruição. Tentemos de resolver esse problema de forma mais geral.

Chamamos de $|\psi\rangle$ o estado do condensado que é autoestado de a_0:

$$a_0 |\psi\rangle = \psi |\psi\rangle, \qquad (3)$$

onde ψ é o autovalor (complexo). A relação (3) pode ser resolvida escrevendo $|\psi\rangle$ na rep. de número. Aqui trabalhamos exclusivamente com o modo $\vec{k}=0$:

$$|\psi\rangle = \sum_{\nu=0} c \, |\nu\rangle$$

$$a_0 |\psi\rangle = \sum_{\nu=1} c_\nu \sqrt{\nu} \, |\nu-1\rangle = \sum_{\mu=0} c_{\mu+1} \sqrt{\mu+1} \cdot |\mu\rangle$$

$$= \sum_{\nu=0} \psi c_\nu |\nu\rangle = \sum_{\mu=0} \psi c_\mu |\mu\rangle$$

obtemos a relação de recorrência:

$$c_{\mu+1} = \frac{\psi}{\sqrt{\mu+1}} c_\mu$$

com solução:

$$c_\nu = \frac{\psi^\nu}{\sqrt{\nu!}}\, c_0 .$$

O coeficiente inicial é obtido por normalização:

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = |c_0|^2 \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(|\psi|^2)^\nu}{\nu!} =$$

$$= |c_0|^2 \exp(|\psi|^2)$$

ou $\qquad c_0 = e^{i\theta} \exp\left(-\frac{|\psi|^2}{2}\right)$

Resultado:

$$\boxed{|\psi\rangle = e^{i\theta}\, e^{-\frac{|\psi|^2}{2}} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{\psi^\nu}{\sqrt{\nu!}} |\nu\rangle}$$

Este estado é chamado de Coerente. Note que é uma superposição de estados com diferentes números de ocupação de $\vec{k} = 0$. Isto é, o estado de menor energia não tem uma ocupação definida.

A probabilidade de ocupação do estado $|n\rangle$ é

$$P_n = \frac{|\psi|^{2n}}{n!} \exp(-|\psi|^2) ,$$

que representa uma distribuição de Poisson, que fornece as médias:

$$\langle n \rangle = |\psi|^2 \quad , \quad (\Delta n)^2 = |\psi|^2$$

e a dispersão relativa cai com a amplitude do campo bosônico:

$$\frac{\Delta n}{\langle n \rangle} = \frac{1}{|\psi|} \ll 1 \text{ , para } |\psi| \gg 1$$

Para $|\psi| \gg 1$, a distribuição resulta gaussiana e nesse caso, o valor mais provável coincide com o valor médio:

$$N_0 \approx \langle n \rangle = |\psi|^2 \, ,$$

ou seja $|\psi| \to \sqrt{N_0}$.

Seja $\psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi \rangle$ a função de onda. Os campos bosônicos estarão associados à

$$\Psi(\vec{x}) \longrightarrow \sqrt{N}\, \psi(\vec{x})$$

$$\Psi^\dagger(\vec{x}) \longrightarrow \sqrt{N}\, \psi^*(\vec{x})$$

Temos que $\int d^3x \, \Psi^\dagger \Psi \longrightarrow (\sqrt{N})^2 \int d^3x \, \psi^*(x) \psi(x) = N$

Dirac : operador fase (1927)

Temos: $a_0 |\Psi\rangle = \Psi |\Psi\rangle$

e escrevendo $\Psi = e^{i\theta}\sqrt{N_0}$, poderíamos pensar que o operador de destruição poderia ser representado ~~por~~

$$a_0 = e^{i\hat{\phi}}\sqrt{\hat{N}} \, ,$$

onde $(\wedge)$ denota operador. Assim:

$$a_0^{+} = \sqrt{\hat{N}}\, e^{-i\hat{\phi}}$$

A relação de comutação canônica para bósons é:

$$1 = [a_0, a_0^{+}] = e^{i\hat{\phi}}\hat{N}e^{-i\hat{\phi}} - \hat{N} \, .$$

Precisamos avaliar: $e^{i\hat{\phi}}\hat{N}e^{-i\hat{\phi}}$ usando B-H-C

$$\Rightarrow e^{i\hat{\phi}}\hat{N}e^{-i\hat{\phi}} = (1+i\hat{\phi}\cdots)\hat{N}(1-i\hat{\phi}\cdots)$$

$$= \hat{N} + i[\hat{\phi},\hat{N}] - \frac{1}{2!}[\hat{\phi},[\hat{\phi},\hat{N}]] + \cdots$$

$$= \hat{N} + 1$$

Solução :

$$[\hat{N}, \hat{\phi}] = i.$$

De maneira que $\hat{N}$ e $\hat{\phi}$ aparecem como variáveis canônicas. O estado $|\psi\rangle$ aparece como tendo a fase bem determinada

$$\exp(i\hat{\phi})|\psi\rangle = e^{i\theta}|\psi\rangle.$$

Neste caso a fase está bem definida e o número de ocupação indeterminado, com

$$\langle n\rangle = |\psi|^2 \approx N_0 \text{ , para } |\psi| \gg 1.$$

<u>Ensinamento</u>:

O estado condensado quebra espontaneamente uma simetria, escolhendo uma fase bem definida (quebra a simetria de gauge).

§ Gás ideal de férmions (spin 1/2) e suas excitações

Precisamos incluir o spin no formalismo. O operador campo agora é um 'spinor' com duas componentes

$$\Psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\vec{x}) \\ \psi_\downarrow(\vec{x}) \end{pmatrix},$$

sendo que cada componente pode ser expandida usando um conjunto completo de estados de 1-partícula:

$$\psi_\sigma(\vec{x}) = \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x},\sigma)\, a_{\vec{k}\sigma},$$

onde

$$\langle \vec{x},\sigma | \vec{k} \rangle = \varphi_{\vec{k}}(\vec{x},\sigma).$$

Também temos:

$$\Psi^\dagger(\vec{x}) = \left(\psi^\dagger_\uparrow(\vec{x}), \psi^\dagger_\downarrow(\vec{x}) \right),$$

com

$$\psi^\dagger_\sigma(\vec{x}) = \sum_{\vec{k}} \varphi^*_{\vec{k}}(\vec{x},\sigma)\, a^\dagger_{\vec{k}\sigma}.$$

A representação, em 2ª quantização, do spin é dada por:

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\int d\vec{x}\; \Psi^\dagger(\vec{x})\cdot\vec{\sigma}\cdot\Psi(\vec{x}).$$

Exemplo, a componente S_z:

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\int d\vec{x}\; \Psi^\dagger(\vec{x})\cdot\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\cdot\Psi(\vec{x}) =$$

$$= \frac{\hbar}{2}\int d\vec{x}\left[\psi^{\dagger}_{\uparrow}(\vec{x})\psi_{\uparrow}(\vec{x}) - \psi^{\dagger}_{\downarrow}(\vec{x})\psi_{\downarrow}(\vec{x})\right] = \frac{\hbar}{2}(N_{\uparrow} - N_{\downarrow})$$

$$= \frac{\hbar}{2}\sum_{\vec{k}}\left(a^{\dagger}_{\vec{k}\uparrow}a_{\vec{k}\uparrow} - a^{\dagger}_{\vec{k}\downarrow}a_{\vec{k}\downarrow}\right).$$

Usando os spinores fundamentais χ_σ, escrevemos o campo como

$$\Psi(\vec{x}) = \sum_{\vec{k},\sigma}\varphi_{\vec{k}}(\vec{x},\sigma)\, a_{\vec{k}\sigma}\chi_\sigma \,, \quad \text{onde}$$

$$\chi_{\uparrow} \equiv \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \chi_{\downarrow} \equiv \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

Os outros operadores são:

$$S_{\pm} = S_x \pm i S_y = \frac{\hbar}{2}\int d\vec{x}\, \Psi^{\dagger}(\vec{x})\cdot\sigma_{\pm}\cdot\Psi(\vec{x}),$$

com:

$$S_{+} = \hbar\int d\vec{x}\, \psi^{\dagger}_{\uparrow}\psi_{\downarrow} = \hbar\sum_{\vec{k}} a^{\dagger}_{\vec{k}\uparrow}a_{\vec{k}\downarrow} \,,$$

$$S_{-} = \hbar\int d\vec{x}\, \psi^{\dagger}_{\downarrow}\psi_{\uparrow} = \hbar\sum_{\vec{k}} a^{\dagger}_{\vec{k}\downarrow}a_{\vec{k}\uparrow} \,.$$

Seja agora um operador que não depende do spin.

Exemplo, $\vec{P}$ o momentum:

$$\vec{P} = \int d\vec{x}\, \Psi^{\dagger}(\vec{x})\cdot(-i\hbar\nabla)\cdot\Psi(\vec{x}) =$$

$$= \int d\vec{x} \left[\psi^{+}_{\uparrow}(\vec{x}) (-i\hbar\nabla) \psi_{\uparrow}(\vec{x}) + \psi^{+}_{\downarrow}(\vec{x}) (-i\hbar\nabla) \psi_{\downarrow}(\vec{x}) \right]$$

$$= \sum_{\vec{k}} \hbar\vec{k} \left(a^{+}_{\vec{k}\uparrow} a_{\vec{k}\uparrow} + a^{+}_{\vec{k}\downarrow} a_{\vec{k}\downarrow} \right)$$

$$= \sum_{\vec{k}} \hbar\vec{k} \sum_{\sigma} a^{+}_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma} = \sum_{\vec{k},\sigma} \hbar\vec{k} \, a^{+}_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma} .$$

Se a energia de um gás não-interagente não depende do spin, temos

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\vec{k},\sigma} \varepsilon_{\vec{k}} \, a^{+}_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma} .$$

Para elétrons livres

$$\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} \vec{k}^2$$

Usamos um índice composto $\alpha = (\vec{k}, \sigma)$, que inclui a onda plana normalizada

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

e o spin $\sigma = (\uparrow, \downarrow)$.

· Def. Mar de Fermi $|FS\rangle$

Assim é chamado o estado fundamental de um sistema de elétrons não interagentes. Nele são preenchidos todos os estados de energia mais baixos de um elétron até esgotar o número de partículas N.

Voltando para caso discreto (quase-contínuo) em que um estado α tem associado um volume $\frac{1}{2}\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$ no espaço $\vec{k}$, escrevemos (mudança de notação):

$$a_{\vec{k}\sigma} \longrightarrow C_{\vec{k}\sigma} = C_\alpha \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{deixar } a_{\vec{k}} \\ \text{para bósons} \\ \text{e} \\ C_{\vec{k}\sigma} \text{ para férmions} \end{array} \right.$$

O estado fundamental é então:

$$|\Phi_0(n)\rangle = |FS\rangle = \prod_{\alpha \leq N} C_\alpha^{\dagger} |0\rangle ,$$

onde a notação $\alpha \leq N$ significa que $|\vec{k}| \leq k_F$, onde k_F é o raio da superfície de Fermi. Esta separa (a temperatura nula) todos os estados ocupados dos desocupados. Os operadores campo agora são 'spinores' e escrevemos

$$\psi_\sigma(\vec{x}) = \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x})\, C_{\vec{k}\sigma} ,$$

e podemos definir um operador 'densidade de spin'

· Def: $$\rho_\sigma(\vec{x}) = \psi_\sigma^{\dagger}(\vec{x})\, \psi_\sigma(\vec{x})$$

Temos :

$$\rho_\sigma(\vec{x}) = \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \varphi^*_{\vec{k}}(\vec{x})\varphi_{\vec{k}'}(\vec{x})\, c^\dagger_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}'\sigma} ,$$

e integrando sobre todo o volume V do sistema encontramos:

$$\int_V d^3x\, \rho_\sigma(\vec{x}) = \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \left\{ \int_V d^3x\, \varphi^*_{\vec{k}}(\vec{x})\varphi_{\vec{k}'}(\vec{x}) \right\} c^\dagger_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}'\sigma} ,$$

com $\displaystyle\int_V d^3x\, \varphi^*_{\vec{k}}(\vec{x})\varphi_{\vec{k}'}(\vec{x}) = \frac{1}{V}\int_V d^3x\, e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{x}} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}$,

onde o resultado é conseqüência das condições periódicas de contorno.
Assim :

$$\int_V d^3x\, \rho_\sigma(\vec{x}) = \sum_{\vec{k}} c^\dagger_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}\sigma} = N_\sigma ,$$

é o operador número do spin $\underline{\sigma}$.

O 'mar de Fermi' é caraterizado pela propriedade :

$$c_{\vec{k}\sigma}|FS\rangle = 0 \; , \text{ para } |\vec{k}| > k_F ,$$
$$c^\dagger_{\vec{k}\sigma}|FS\rangle = 0 \; , \text{ para } |\vec{k}| < k_F$$

§ <u>Representação de partícula - buraco</u> (particle-hole rep.)

▸ <u>Def</u>. Definimos novos operadores fermiônicos por

i) operadores de partícula

$$\alpha_{\vec{k}\sigma} \equiv c_{\vec{k}\sigma} \quad , \quad \alpha^\dagger_{\vec{k}\sigma} \equiv c^\dagger_{\vec{k}\sigma} \quad , \text{ para } |\vec{k}| > k_F \; ;$$

ii) Operadores de 'buracos' (anti-partículas)

$$\beta_{\vec{k}\sigma} \equiv c^{\dagger}_{-\vec{k},-\sigma} \;, \quad \beta^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} = c_{-\vec{k},-\sigma} \;, \quad \text{para } |\vec{k}| < k_F.$$

Procedemos em analogia com a teoria de Dirac. Escrevemos o Hamiltoniano na nova representação:

$$H = \sum_{\vec{k},\sigma} \varepsilon_{\vec{k}}\, c^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}\sigma} =$$

$$= \sum_{\substack{|\vec{k}|>k_F \\ \sigma}} \varepsilon_{\vec{k}}\, \alpha^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} \alpha_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\substack{|\vec{k}|<k_F \\ \sigma}} \varepsilon_{\vec{k}}\, \beta_{-\vec{k},-\sigma} \beta^{\dagger}_{-\vec{k},-\sigma}$$

note que $\varepsilon_{-\vec{k}} = \varepsilon_{\vec{k}}$, e mudando índices mudos nas somas

$$\vec{k} \to -\vec{k} \;, \quad \sigma \to -\sigma$$

$$H = \sum_{\substack{|\vec{k}|>k_F \\ \sigma}} \varepsilon_{\vec{k}}\, \alpha^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} \alpha_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\substack{|\vec{k}|<k_F \\ \sigma}} \varepsilon_{\vec{k}}\, \underbrace{\beta_{\vec{k}\sigma} \beta^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}}_{(1 - \beta^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} \beta_{\vec{k}\sigma})}$$

e usando a regra de anticomutação de férmions finalmente obtemos:

$$H = E_0 + \sum_{\substack{|\vec{k}|>k_F \\ \sigma}} \varepsilon_{\vec{k}}\, \alpha^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}\alpha_{\vec{k}\sigma} - \sum_{\substack{|\vec{k}|<k_F \\ \sigma}} \varepsilon_{\vec{k}}\, \beta^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}\beta_{\vec{k}\sigma}$$

(mar de Fermi)

Criar excitações tipo 'partícula' aumenta a energia, enquanto que criar 'buracos' diminui a energia. Porém, para Hamiltonianos que conservam o número de partículas, toda excitação para cima da SF deixa um 'buraco' dentro da esfera de Fermi. Partículas e buracos são criados aos pares:

$$|\vec{k}',\vec{k}\rangle \equiv \alpha^{\dagger}_{\vec{k}'\sigma}\,\beta^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}\,|MF\rangle,$$

($|MF\rangle$ e em inglês $|FS\rangle$)

e a energia desse estado é

$$E(\vec{k}',\vec{k}) = E_0 + (\varepsilon_{\vec{k}'} - \varepsilon_{\vec{k}}) \geqslant 0$$

Para o operador número $\hat{N}$ temos:

$$\hat{N} = \sum_{\vec{k}\sigma} c^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}\sigma} = N + \sum_{\substack{|\vec{k}|>k_F \\ \sigma}} \alpha^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}\alpha_{\vec{k}\sigma} - \sum_{\substack{|\vec{k}|<k_F \\ \sigma}} \beta^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}\beta_{\vec{k}\sigma},$$

onde N é o número total de partículas (constante).

Finalmente, expandimos os campos nas novas variáveis

$$\psi_\sigma(\vec{x}) = \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x},\sigma)\, c_{\vec{k}\sigma} =$$

$$= \sum_{|\vec{k}|>k_F} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x},\sigma)\,\alpha_{\vec{k}\sigma} + \sum_{|\vec{k}|<k_F} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x},\sigma)\,\beta^{\dagger}_{-\vec{k},-\sigma} .$$

Note que $\varphi_{-\vec{k}}(\vec{x},\sigma) = \varphi^{*}_{\vec{k}}(\vec{x},\sigma)$, portanto

$$\boxed{\psi_\sigma(\vec{x}) = \sum_{|\vec{k}|>k_F} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x},\sigma)\,\alpha_{\vec{k}\sigma} + \sum_{|\vec{k}|<k_F} \varphi^{*}_{\vec{k}}(\vec{x},\sigma)\,\beta^{\dagger}_{\vec{k},-\sigma}} ,$$

que é a típica expansão de um campo quântico em operadores de 'partículas' e 'anti-partículas', com o mar de Fermi operando como o novo 'vácuo' das excitações:

$$\alpha_{\vec{k}\sigma}|FS\rangle = 0, \quad |\vec{k}|>k_F \qquad \beta_{\vec{k}\sigma}|FS\rangle = 0, \quad |\vec{k}|<k_F$$

O 'mar de Fermi' é o estado fundamental do sistema de partículas.

Propriedades do $|FS\rangle$

Para o número temos:

$$N = \langle \hat{N} \rangle_{FS} = \sum_{\substack{\vec{k}\sigma \\ |\vec{k}| \leq k_F}} n_{\vec{k}\sigma}$$

Se N e V forem macroscópicos, podemos usar a substituição:

$$\sum_{\vec{k}} \longrightarrow \int d^3k \left[\frac{V}{(2\pi)^3} \right]$$

densidade de estados no espaço $\vec{k}$

Resulta:

spin 1/2

$$N = \frac{2V}{(2\pi)^3} \underbrace{\int d^3k}_{\text{Esfera de Fermi}} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \times \frac{4}{3} \pi k_F^3$$

$$= \frac{V}{3\pi^2} k_F^3$$

ou

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}, \quad n \equiv \frac{N}{V}$$

e para a energia de Fermi, obtemos:

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3},$$

$$k_F \sim n^{1/3}, \qquad \varepsilon_F \sim n^{2/3}.$$

Calculamos a energia do estado fundamental (aqui resulta grandeza finita)

$$E_0 = \langle H \rangle_{FS} = \sum_{\substack{\sigma \\ |\vec{k}| \leq k_F}} \frac{\hbar^2}{2m} \vec{k}^2 \longrightarrow$$

$$\longrightarrow \underset{\text{spin}}{2} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \frac{V}{(2\pi)^3} \underbrace{\int d^3k \; k^2}_{\text{Esfera de Fermi}} = \frac{8\pi}{5} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \frac{V}{(2\pi)^3} k_F^5 =$$

$$= \frac{3}{5} N \varepsilon_F \quad , \quad \text{finita!}$$

$$\varepsilon_0 = \frac{E_0}{N} = \frac{3}{5} \varepsilon_F \quad ,$$

energia por partícula.

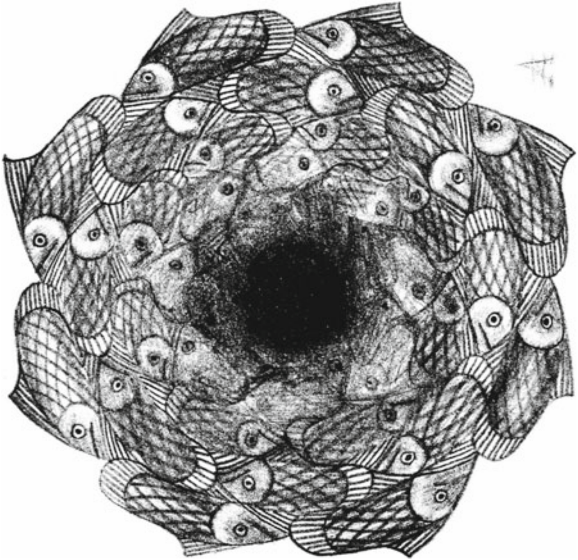

Fig. 2.2 Fermi surface and Fermi sphere

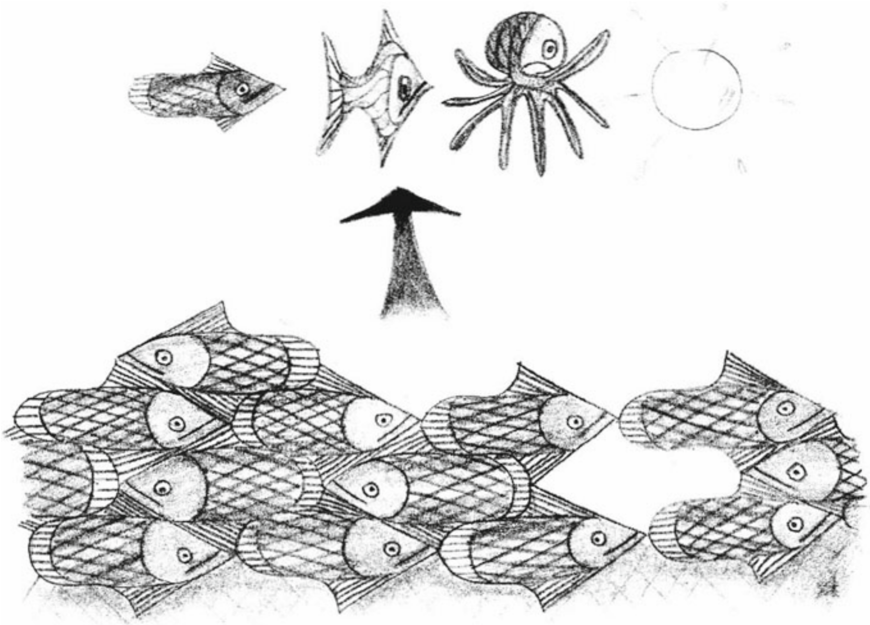

Fig. 2.1 Quasiparticles in the Fermi system