

Considerando a permutação de 2 partículas  $P_{ij}$ , notamos que essas propriedades são satisfeitas pelos projetores  $\Lambda$ , sendo que:

$$P_{ij} S = S ,$$

$$P_{ij} A = -A ,$$

por que a transposição  $P_{ij}$  é ímpar.

As funções de onda que representam os estados físicos de muitas partículas idênticas são escritas como:

$$\Psi_{\{N\}}^{k_1 k_2 \dots k_N}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) =$$

$$= N^{\{N\}} \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N | \Lambda | k_1 k_2 \dots k_N \rangle$$

$$= N^{\{N\}} \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in S_N} \lambda_{\sigma} \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N | k_{\sigma(1)} k_{\sigma(2)} \dots k_{\sigma(N)} \rangle ,$$

onde  $N^{\{N\}}$  é uma constante de normalização.

É claro que a degenerescência de troca é levantada e não tem sentido físico perguntar sobre o estado ocupado por uma partícula individual. A única informação relevante é saber quantas partículas ocupam um determinado estado. Vemos que essa informação é codificada nos números de ocupação  $\{n_i\}$ .

Definimos kets  $\{ |n_1 n_2 \dots n_i \dots \rangle \}$  que contém essa informação, por:

$$\begin{aligned} \text{Def. } \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N | n_1 n_2 \dots \rangle &= \\ &= N^{\{N\}} \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N | \Lambda | k_1 k_2 \dots k_N \rangle. \end{aligned}$$

O conjunto dos  $\{n_i\}$  são os números de ocupação e o ket-estado  $|n_1 n_2 \dots n_i \dots \rangle$  possui a simetria 'correta' para  $N$  partículas idênticas:

i) Bósons: o ket estado  $|n_1 n_2 \dots n_i \dots \rangle$  está completamente simetrizado. Portanto, um dado estado quântico de 1-partícula pode ser ocupado por qualquer número de partículas. Temos:

$$n_i = 0, 1, 2, \dots, N, \text{ para todo } \underline{i}.$$

ii) Férmions: o ket estado  $|n_1 n_2 \dots n_i \dots \rangle$  está completamente anti-simetrizado. Um dado estado quântico de 1-partícula não pode ter ocupação dupla ou maior (nesse caso, a antisimetrização produz um estado identicamente nulo). Temos então que:

$$n_i = 0, 1.$$

Este resultado é chamado de Princípio de Exclusão de Pauli

Exercício 1.

Mostrar que a constante de normalização é dada por:

$$i) \Lambda = S,$$

$$N^{\{S\}} = \sqrt{\frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_i! \dots}}$$

$$ii) \Lambda = A$$

$$N^{\{A\}} = \sqrt{N!}$$

Exercício 2

No caso antisimétrico, mostre que a função de onda de  $N$  férmions, pode ser escrita como um determinante:

$$\Psi^{\{A\}}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) =$$

$$\prod_{k_1, k_2, \dots, k_N}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \langle \vec{x}_1 | k_1 \rangle & \langle \vec{x}_1 | k_2 \rangle & \dots & \langle \vec{x}_1 | k_N \rangle \\ \langle \vec{x}_2 | k_1 \rangle & \langle \vec{x}_2 | k_2 \rangle & \dots & \langle \vec{x}_2 | k_N \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \vec{x}_N | k_1 \rangle & \dots & \dots & \langle \vec{x}_N | k_N \rangle \end{vmatrix}$$

(Determinante de Slater)

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'.

Vejam os 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  $^\dagger$ )

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  $\delta_{ij}$  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  $\epsilon_i$ :

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

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  $\epsilon_i$ .

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:

$$a_i^2 = 0$$

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  $\epsilon_i$  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  $|0\rangle$ ,

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

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 contém as propriedades de antisimetrização.

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

onde  $\psi_i$  é a função de onda associada à energia  $\epsilon_i$ .

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  $\lambda_i$  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  $\Psi^\dagger, \Psi$ :

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 autestado 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  $P_{\sigma}$  de  $n$ -partículas, com  $\epsilon_{\sigma}$  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  $\psi^\dagger$  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

$$F = \frac{1}{2} \int d\vec{x} \int d\vec{x}' \underbrace{\psi^\dagger(\vec{x}) \psi^\dagger(\vec{x}') g(\vec{x}, \vec{x}') \psi(\vec{x}') \psi(\vec{x})}_{\text{estrutura de 'camadas de cebola'}}$$

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  $V \rightarrow \infty$ ,  $\Phi_S$  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  $\alpha$  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:

$$F = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i, i' \\ j, j'}} \langle j j' | \hat{V} | i i' \rangle a_j^\dagger a_{j'}^\dagger a_i a_{i'}$$

#### 4. Gases ideais quânticos

Para um gás ideal homogêneo (simetria de translação), um bom número quântico é o momentum  $\vec{p}$  ou equivalentemente o vetor de onda  $\vec{k}$ ,  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ . O Hamiltoniano é dado por

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d\vec{x} \psi^\dagger(\vec{x}) \nabla^2 \psi(\vec{x})$$

Os estados de partícula livre estão normalizados para o volume do sistema:

$$\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} = \phi_{\vec{k}}(\vec{x})$$

O spin  $S$  das partículas, entram como um fator de degenerescência  $(2S+1)$  nas fórmulas da Mecânica Estatística. Com condições periódicas de contorno, o vetor de onda é quantizado, com

$$k_i = \left(\frac{2\pi}{L}\right) \nu_i, \quad \nu_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ i = x, y, z$$

Expandimos os campos em termos desses estados, como

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}) &= \sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}}(\vec{x}) a_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} a_{\vec{k}} \\ \psi^\dagger(\vec{x}) &= \sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^*(\vec{x}) a_{\vec{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} a_{\vec{k}}^\dagger \end{aligned}$$

Por causa das condições periódicas de contorno, as funções  $\phi_{\vec{k}}$  são ortogonais:

$$\langle \vec{k} | \vec{k}' \rangle = \int d\vec{x} \frac{1}{V} e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{x}} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}$$

Para o Hamiltoniano, precisamos calcular:

$$\nabla^2 \psi(\vec{x}) = - \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} (\vec{k})^2 e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} a_{\vec{k}}$$

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}'}^\dagger a_{\vec{k}} \underbrace{\frac{1}{V} \int d\vec{x} e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{x}}}_{\delta_{\vec{k}\vec{k}'}}$$

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}, \text{ resulta diagonal em } \vec{k},$$

com a relação de dispersão  $\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$ .

Outros observáveis podem ser obtidos da mesma forma:

$$\vec{P} = -i\hbar \int d\vec{x} \psi^\dagger(\vec{x}) \nabla \psi(\vec{x}) = \sum_{\vec{k}} (\hbar \vec{k}) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}$$

$$N = \int d\vec{x} \psi^\dagger(\vec{x}) \psi(\vec{x}) = \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}$$

Todos estes comutam entre si (estão na forma diagonal).  
O número associado a um estado é

$$N_{\vec{k}} = a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}.$$

Estes também são operadores dinâmicos e todos comutam