§ Gás 'perfeito' de bósons (sem spin)

Em contraste com o caso de férmions, o estado fundamental de um sistema de Bose, N bósons sem interação, é um condensado de Bose-Einstein, onde todas as partículas ocupam o estado de menor energia. Se a relação de dispersão é de partícula livre

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

a energia e o momentum do condensado são nulos:

$$\varepsilon(\vec{k}=0) = 0, \qquad \vec{P} = \sum_{\vec{k}} \hbar\vec{k} = 0.$$

Isto é, o estado fundamental $|\varphi_0^N\rangle$ é caraterizado por (a $T = 0°K$)

$$|\varphi_0^N\rangle : \begin{cases} n_{\vec{k}} = N, & \text{para } \vec{k}=0, \\ n_{\vec{k}} = 0, & \text{para } \vec{k} \neq 0, \end{cases}$$

com

$$a_{\vec{k}} |\varphi_0^N\rangle = 0, \quad \text{para todo } \vec{k} \neq 0,$$
$$a_0^+ a_0 |\varphi_0^N\rangle = N |\varphi_0^N\rangle.$$

A $T = 0°K$ a condensação é completa:

$$n_{\vec{k}=0} = N.$$

No caso de incluir interações entre os bósons ('líquido de Bose'), esperamos ter processos de espalhamento (com potencial repulsivo) que tiram partículas do condensado. Trataremos o caso de potencial de 'esfera dura' em aplicações para a teoria da superfluidez (ver próxima seção).

Notas / Notes

As excitações de 1-partícula do condensado de Bose são estados do tipo:

$$|\vec{k}, N+1\rangle \equiv a^{+}_{\vec{k}} |\varphi_0^N\rangle \quad , \quad \vec{k} \neq 0$$

$$|\vec{k}, N\rangle \equiv a^{+}_{\vec{k}} a_0 |\varphi_0^N\rangle = a^{+}_{\vec{k}} |\varphi_0^{N-1}\rangle$$

Se a ocupação do estado fundamental for macroscópica, podemos escrever:

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

Essa última relação, define um estado coerente, cuja representação é:

$$|\varphi_0^N\rangle = e^{\sqrt{N}\,(a_0^+ - a_0)} \, |0\rangle$$

Quando A e B comutam com seu comutador $[A,B]$, é válida a identidade:

$$e^{A+B} = e^{-\frac{1}{2}[A,B]} \, e^{A} e^{B} .$$

Usar com $A = \sqrt{N} a_0^+$, $B = -\sqrt{N} a_0$:

$$[A,B] = N\,[a_0^+, -a_0] = N\,[a_0, a_0^+] = N ,$$

Portanto:

$$e^{\sqrt{N}\,(a_0^+ - a_0)} = e^{-\frac{1}{2}N} \, e^{\sqrt{N} a_0^+} \, e^{-\sqrt{N} a_0}$$

Aplicando sobre o vácuo:

$$|\varphi_0^N\rangle = e^{\sqrt{N}(a_0^+ - a_0)}|0\rangle = e^{-\frac{1}{2}N} e^{\sqrt{N}a_0^+} e^{-\sqrt{N}a_0}|0\rangle$$

$$= e^{-\frac{1}{2}N} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{N^{\frac{n}{2}}}{n!}(a_0^+)^n|0\rangle$$

$$= e^{-\frac{1}{2}N} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(N^{\frac{1}{2}})^n}{\sqrt{n!}}\left\{\frac{(a_0^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle\right\}$$

$$= e^{-\frac{1}{2}N} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{N^{\frac{n}{2}}}{\sqrt{n!}}|n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle$$

O condensado de Bose aparece como sendo uma superposição (coerente) de estados com diferentes números de partículas, com distribuição de probabilidade:

$$P_n \equiv |c_n|^2 = e^{-N}\frac{N^n}{n!}, \quad (\text{Poisson}).$$

Sabemos que agora N pode ser interpretado como o valor médio do número:

$$\sum_{n=0}^{\infty} n P_n = N = \bar{n}.$$

Veremos que esta é uma interpretação interessante do estado fundamental do condensado, que poderá ser estendida para o caso do 'líquido' de Bose, quando sejam incluídas as interações entre bósons.

Um estado coerente arbitrário é definido com amplitude complexa:

$$|z\rangle \equiv e^{z a_0^+ - z^* a_0} |0\rangle$$
$$= e^{-\frac{1}{2}|z|^2} e^{z a_0^+} |0\rangle ,$$

com a propriedade:

$$a_0 |z\rangle = z \; |z\rangle . \qquad (a_0 \rightarrow z)$$

Portanto, no caso mais geral poderiamos incluir uma fase:

$$z = e^{i\phi} \sqrt{N}$$

<u>Pergunta</u>: Podemos construir o operador 'fase' como um observável? Nessa representação:

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

Relação de comutação canônica?

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

Obtemos:

$$e^{i\hat{\phi}} \hat{N} e^{-i\hat{\phi}} = \hat{N} + 1$$

Usamos a identidade de Baker-Hausdorff:

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

$$= \hat{N} + i[\hat{\phi},\hat{N}] + \dots = \hat{N}+1$$

Solução: $i[\hat{\phi},\hat{N}] = 1 \Rightarrow [\hat{N},\hat{\phi}] = i$

Aparecem como variáveis canônicas. O estado $|z\rangle$ pode ser interpretado como tendo uma fase dada e número indeterminado (Princípio de Incerteza):

$$|z\rangle = |e^{i\phi}\sqrt{N}\rangle,$$

e

$$\begin{cases} \hat{\phi}|z\rangle = e^{i\phi}|z\rangle \\ N = \langle z|\hat{N}|z\rangle. \end{cases}$$

O estado do condensado quebra espontaneamente uma simetria escolhendo uma fase (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:

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

com

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

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:

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

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

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

Usando os spinores fundamentais χ_σ, escrevemos o campo como

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

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

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:

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

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:
$$\rho_\sigma(\vec{x}) = \psi^\dagger_\sigma(\vec{x})\, \psi_\sigma(\vec{x})$$

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)

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

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

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

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

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:

$$|\vec{k}', \vec{k}\rangle \equiv \alpha^\dagger_{\vec{k}'\sigma}\, \beta_{\vec{k}\sigma} |MF\rangle ,$$

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

e a energia desse estado é

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

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:

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

$$|\vec{k}|>k_F \qquad\qquad |\vec{k}|<k_F$$

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

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

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

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)

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

spin

$$\rightarrow 2 \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k \, k^2 = \frac{8\pi^2}{5} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \frac{V}{(2\pi)^3} k_F^5 =$$

Esfera de Fermi

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

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

energia por partícula.

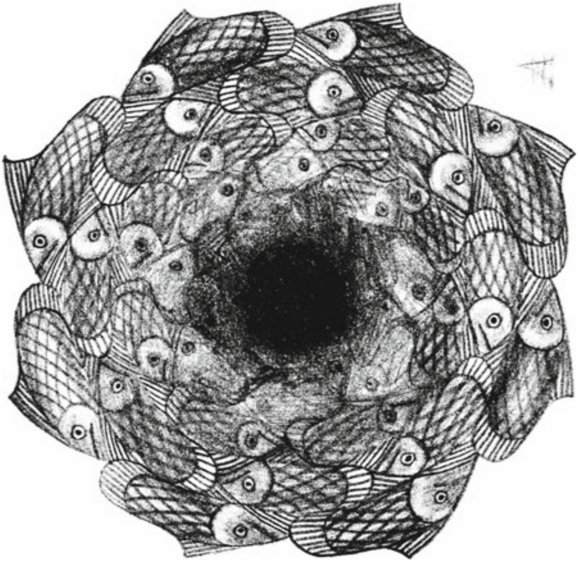

Fig. 2.2 Fermi surface and Fermi sphere

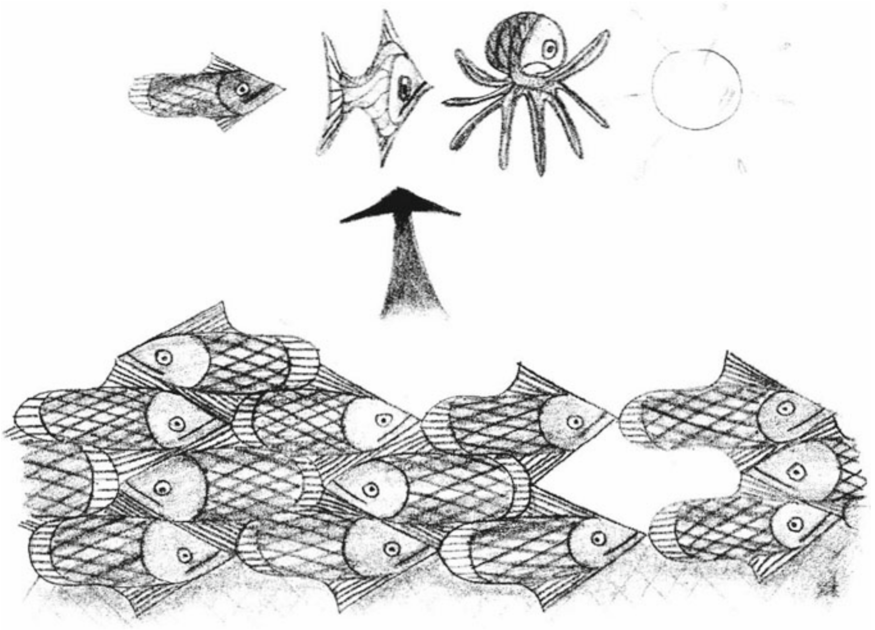

Fig. 2.1 Quasiparticles in the Fermi system