AULA 17

MECÂNICA QUÂNTICA II

AULA 17

IV – Método de Segunda Quantização

A segunda quantização pode ser considerada como uma das etapas mais importantes na construção da teoria quântica de campos. O propósito aqui é introduzir a técnica de 2ª quantização que sustenta a formulação das teorias quânticas de muitos corpos.

(1) Espaço de Fock

Como já vimos a simetrização explícita das funções de onda é necessária para garantir indistinguibilidade em MQ: para férmions (bosons) as funções devem ser antissimétricas (simétricas) pela troca de 2 partículas.

Ex: Se o estado de duas partículas $|\lambda_1, \lambda_2\rangle_{F(B)}$ corresponde às funções $\psi_{F(B)}(x_1, x_2) = \left(\langle x_1| \otimes \langle x_2|\right) |\lambda_1, \lambda_2\rangle_{F(B)}$

$$\psi_F(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\langle x_1|\lambda_1\rangle \langle x_2|\lambda_2\rangle - \langle x_1|\lambda_2\rangle \langle x_2|\lambda_1\rangle \right)$$

$$\psi_B(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\langle x_1|\lambda_1\rangle \langle x_2|\lambda_2\rangle + \langle x_1|\lambda_2\rangle \langle x_2|\lambda_1\rangle \right)$$

então

$$|\lambda_1, \lambda_2\rangle_{F(B)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\lambda_1\rangle \otimes |\lambda_2\rangle + \varsigma\, |\lambda_2\rangle \otimes |\lambda_1\rangle \right)$$

onde $\varsigma = -1$ (férmions) ou $\varsigma = +1$ (bosons).

Para um estado de N-partículas

$$|\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_N\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{\lambda=0}^{\infty} (n_\lambda!)}} \sum_{\mathcal{P}} \varsigma^{(1-\operatorname{sgn}\mathcal{P})/2} |\lambda_{\mathcal{P}_1}\rangle \otimes |\lambda_{\mathcal{P}_2}\rangle \otimes \ldots \otimes |\lambda_{\mathcal{P}_N}\rangle \tag{1.0}$$

onde n_λ representa o número total de partículas no

estado λ (para férmions $n_\lambda \leq 1$) - A soma corre sobre os $N!$ permutações do conjunto de números quânticos $\{\lambda_1, \ldots, \lambda_N\}$, sgn. $\mathcal{P}$ = é o sinal da permutação $\mathcal{P}$ ($\text{sgn}\,\mathcal{P} = 1$ [-1] se o número de transposições de 2 elementos que leva a permutação $(\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2, \ldots, \mathcal{P}_N)$ de volta a forma original $(1, 2, \ldots, N)$ é par [ímpar]). O fator

$$\frac{1}{\sqrt{N! \prod_\lambda (n_\lambda!)}}$$ normaliza a função de muitos corpos.

No caso fermiônico as funções de onda que correspondem aos estados (1.0) são chamadas de determinantes de Slater.

A M.Q. de N-corpos assim acontece no espaço de Hilbert

$$\mathcal{H}^N \equiv \underbrace{\mathcal{H} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}}_{N \text{ cópias}}$$

$\mathcal{H}^N$ contém N cópias de espaços de Hilbert de partícula única. Nesse espaço, temos uma representação linear do grupo de permutação S^N, que designa para cada $\mathcal{P} \in S^N$ a permutação (não há ordenamento implícito de λs aqui)

$$\mathcal{P}: \mathcal{H}^N \longrightarrow \mathcal{H}^N \qquad |\lambda_1\rangle \otimes \ldots \otimes |\lambda_N\rangle \longrightarrow |\lambda_{\mathcal{P}_1}\rangle \otimes \ldots \otimes |\lambda_{\mathcal{P}_N}\rangle$$

$\mathcal{F}^N \subset \mathcal{H}^N$ subconjunto dos estados para os quais

$\mathcal{P}(\psi) \equiv \psi$ — transf. de identidade

$\mathcal{P}(\psi) \equiv \text{sgn}\,\mathcal{P}\,\psi$ — transf. alternada. (2)

Enquanto representações como (1.0) podem ser usadas para representar o espaço de Hilbert completo da M.Q. de muitos corpos, essa formulação não é muito conveniente. Em particular essa representação tem número de partículas N fixo o que muitas vezes não é conveniente.

Para tratar situações em que o número de partículas pode mudar definimos o chamado espaço de Fock. Nesse espaço falamos de representação de número de ocupação, isto é, a base dos estados de $\mathcal{F}^N$ é especificada por $|n_1 n_2 \dots\rangle$ onde $\sum_i n_i = N$

n_i = número de estados que ocupam o estado i etc.

<u>O espaço de Fock $\mathcal{F}$</u> é definido pela soma direta de todos os $\mathcal{F}^N$, isto é

$$\mathcal{F} \equiv \mathcal{F}_0 \oplus \mathcal{F}_1 \oplus \dots \equiv \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{F}^N \qquad (1.1)$$

onde $\mathcal{F}_0$ é o espaço de vácuo que descreve o setor de teoria onde não há partículas presentes. Há um único estado de base aí, o vácuo, denotado por $|0\rangle$.

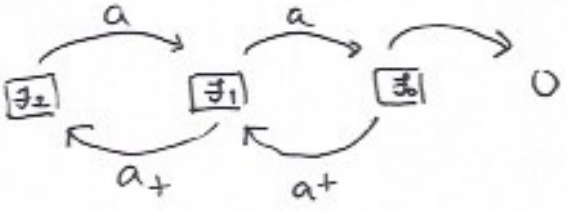
(2) Operadores de Criação e Aniquilação

Vamos aqui introduzir um conjunto de operadores lineais que atuam no espaço de Fock

Operadores que alteram o número de partículas

$$a^+ : \quad \mathcal{F}_k \longrightarrow \mathcal{F}_{k+1}$$

$$a : \quad \mathcal{F}_k \longrightarrow \mathcal{F}_{k-1}$$



(2.a) caso bosônico

Consideremos um sistema de n bosons não interagentes sob ação de um potencial $V(\vec{x})$ cujos autoestados de energia são $|E_n\rangle$. O estado fundamental contém n bósons no estado $|E_0\rangle$ (estado de menor energia), i.e. $E_0 \leq E_1 \leq E_2, \ldots$

Denotemos este estado por $|n_0\rangle$.

Definimos um operador $a_0 (a_0^+)$ que remove (adiciona) uma partícula nesse estado

$$a_0 |n_0\rangle \equiv \sqrt{n_0}\ |n_0 - 1\rangle \quad (2a)$$

$$a_0^+ |n_0\rangle \equiv \sqrt{n_0+1}\ |n_0+1\rangle \quad (2b)$$

Essa é formalmente a ação de operadores de criação/aniquilação de um oscilador harmônico. Logo, analogamente, temos

$$[a_0, a_0^+] = 1 \quad (3a)$$

$$|n_0\rangle = \frac{(a_0^+)^n}{\sqrt{n_0!}} |0\rangle \quad (3b)$$

onde aqui o vácuo $|0\rangle$ é o estado com zero bosons. Para mostrar (3a) basta notar que

$$[a_0, a_0^+]\,|n_0\rangle = (a_0 a_0^+ - a_0^+ a_0)|n_0\rangle = a_0 \sqrt{n_0+1}\ |n_0+1\rangle - a_0^+ \sqrt{n_0}\ |n_0-1\rangle$$

$$= (n_0 + 1 - n_0)\,|n_0\rangle = |n_0\rangle$$

Consideremos que dos estados possíveis, são ocupados $|E_0\rangle$ e $|E_1\rangle$, n_0 bósons em $|E_0\rangle$ e n_1 bosons em $|E_1\rangle$. Chamamos esse estado de $|n_0 n_1\rangle$

Generalizamos nesse caso (2) para

$$a_0 |n_0\, n_1\rangle = \sqrt{n_0}\; |n_0 - 1\; n_1\rangle \quad (4a)$$

$$a_0^+ |n_0\, n_1\rangle = \sqrt{n_0+1}\; |n_0+1\; n_1\rangle \quad (4b)$$

$$a_1 |n_0\, n_1\rangle = \sqrt{n_1}\; |n_0\; n_1 - 1\rangle \quad (4c)$$

$$a_1^+ |n_0\, n_1\rangle = \sqrt{n_1+1}\; |n_0\; n_1+1\rangle \quad (4d)$$

Analogamente à prova de (3a) acima, podemos mostrar que

$$[a_0, a_0^+] = [a_1, a_1^+] = 1 \quad (5a)$$

$$[a_0, a_1] = [a_0^+, a_1^+] = [a_0, a_1^+] = [a_0^+, a_1] = 0 \quad (5b)$$

As eqs (5) mostram que é irrelevante a ordem que acrescentamos/removemos os bósons do sistema, como deveria ser! Logo podemos escrever

$$|n_0 n_1\rangle = \frac{(a_1^+)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{(a_0^+)^{n_0}}{\sqrt{n_0!}} |0\,0\rangle \quad (6)$$

Em analogia ao oscilador harmônico, temos o <u>operador de número de bosons</u>

$$N \equiv a_0^+ a_0 + a_1^+ a_1 \quad (7)$$

Agora podemos generalizar para um número qualquer de estados $|E_n\rangle$. Assim

$$a_k^+ |\ldots n_k \ldots\rangle = \sqrt{n_{k+1}}\; |\ldots n_{k+1} \ldots\rangle \quad (8a)$$

$$a_k |\ldots n_k \ldots\rangle = \sqrt{n_k}\; |\ldots n_{k-1} \ldots\rangle \quad (8b)$$

e $[a_j, a_k^+] = \delta_{jk}$ (9a)

$[a_j, a_k] = [a_j^+, a_k^+] = 0$ (9b)

com o estado genérico

$$|n_0 n_1 n_2 \ldots\rangle = \ldots \frac{(a_2^+)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} \frac{(a_1^+)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{(a_0^+)^{n_0}}{\sqrt{n_0!}} |00\ldots\rangle \quad (10)$$

Note que (10) é um vetor do espaço de Fock.

(2b) caso fermiônico

Considere agora fermions no lugar de bosons. Nesse caso podemos ter apenas 0 ou 1 fermion no estado $|E_0\rangle$ devido à estatística de Fermi-Dirac. Nesse caso

$$a_0^+ |0\rangle = |1\rangle \quad (11a)$$

$$a_0^+ |1\rangle = 0 \quad (11b)$$

$$a_0 |1\rangle = |0\rangle \quad (11c)$$

$$a_0 |0\rangle = 0 \quad (11d)$$

Com isso temos

$$\left.\begin{aligned} (a_0 a_0^+ + a_0^+ a_0)|0\rangle &= a_0|1\rangle = |0\rangle \\ (a_0 a_0^+ + a_0^+ a_0)|1\rangle &= a_0^+|0\rangle = |1\rangle \end{aligned}\right\} \{a_0, a_0^+\} = 1 \quad (12)$$

Analogamente, podemos mostrar que

$$a_0^2 = 0 \quad (13a)$$

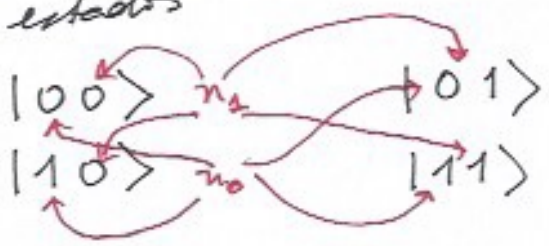
$$(a_0^+)^2 = 0 \quad (13b)$$

Note que o operador de número de férmions é

$$N_0 = a_0^+ a_0 \qquad (14)$$

pois $N_0|0\rangle = 0$ e $N_0|1\rangle = |1\rangle$.

A generalização para 2 estados de ocupação, $|E_0\rangle$ e $|E_1\rangle$ contém 4 estados



e os operadores a_0, a_0^+, a_1, a_1^+ cuja ação é

(i) $a_0|00\rangle = 0$ $\qquad a_0^+|00\rangle = |10\rangle$

$a_1|00\rangle = 0$ $\qquad a_1^+|00\rangle = |01\rangle$

(ii) $a_0|10\rangle = |00\rangle$ $\qquad a_0^+|10\rangle = 0$

$a_1|10\rangle = 0$ $\qquad a_1^+|10\rangle \equiv |11\rangle \equiv a_1^+ a_0^+|00\rangle$

(iii) $a_0|01\rangle = 0$ $\qquad a_0^+|01\rangle = a_0^+ a_1^+|00\rangle = -|11\rangle$

$a_1|01\rangle = |00\rangle$ $\qquad a_1^+|01\rangle = 0$

Quando trocamos 2 férmions o estado muda de sinal

$\Longrightarrow a_1^+ a_0^+|00\rangle = -a_0^+ a_1^+|00\rangle$ já que trocamos o 1º com o segundo férmion!

(iv) $a_0|11\rangle = -|01\rangle$ $\qquad a_0^+|11\rangle = 0$

$a_1|11\rangle = |10\rangle$ $\qquad a_1^+|11\rangle = 0$

A partir dessas relações é possível mostrar que

$$\{a_0, a_0^+\} = 1 \quad , \quad \{a_1, a_1^+\} = 1 \qquad (14a)$$

e

$$\{a_0, a_0\} = \{a_1, a_1\} = \{a_0^+, a_0^+\} = \{a_1^+, a_1^+\} = \{a_0, a_1^+\} = \{a_0^+, a_1\}$$

$$= \{a_0, a_1\} = \{a_0^+, a_1^+\} = 0 \qquad (14b)$$

Note que o estado

$$|n_0 n_1\rangle = (a_1^+)^{n_1} (a_0^+)^{n_0} |00\rangle \qquad (15)$$

A generalização para um número arbitrário de estados inclui operadores de criação/aniquilação a_k^+ / a_k para o estado $|E_k\rangle$ tais que

$$\{a_j, a_k^+\} = \delta_{jk} \qquad (16a)$$

$$\{a_j, a_k\} = \{a_j^+, a_k^+\} = 0 \qquad (16b)$$

Com os estados dados por

$$|n_0 n_1 n_2 \ldots\rangle = \ldots (a_2^+)^{n_2} (a_1^+)^{n_1} (a_0^+)^{n_0} |00\ldots0\rangle \qquad (17)$$

Tanto no caso bosônico como no caso fermiônico o operador que conta partículas é

$$N = \sum_k a_k^+ a_k \qquad (18)$$

$$= \sum_k n_k \quad \leftarrow \text{operador \# de ocupação}$$

(2c) Exemplo de uso da notação

Considere autoestados do momento linear em uma caixa de volume V. Usamos

$$\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \frac{e^{i \vec{p} \cdot \vec{x}/\hbar}}{\sqrt{V}}$$ no lugar de autoestados de energia

Nesse caso o momento linear total é dado por

$$\vec{P} = \sum_{\vec{p}} \vec{p}\, a^{+}_{\vec{p}}\, a_{\vec{p}}$$

↖ autovalores do momento de 1 partícula!

e a energia cinética

$$E_c = \sum_{\vec{p}} \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}\, a^{+}_{\vec{p}}\, a_{\vec{p}}$$

(3) Operadores de Campo $\psi(\vec{x})$ e $\psi^{+}(\vec{x})$

(3a) Propriedades Básicas

Considere o conjunto completo de autoestados do momento $\{|\vec{p}\rangle\}$ numa caixa de volume V com condições de contorno periódicas

$$\varphi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \frac{e^{i \vec{p} \cdot \vec{x}/\hbar}}{\sqrt{V}} \qquad (19)$$

onde $\vec{p} = \frac{2\pi}{L}(n_x \hat{e}_x + n_y \hat{e}_y + n_z \hat{e}_z)$

$$n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots$$

Para uma partícula com spin j e componente j_z $(m\hbar)$ os estados do sistema serão

$$\varphi_{\vec{p}m}(\vec{x}) = \varphi_{\vec{p}}(\vec{x})\,\chi_m \qquad (20)$$

↳ estado de spin normalizado.

Os operadores $a^{+}_{\vec{p}m}$ criam um estado de momento $\vec{p}$ no estado de spin m:

$$|\vec{p}\,m\rangle = a^{+}_{\vec{p}m}|0\rangle = \chi_m\,|\vec{p}\rangle \qquad (21)$$

Agora definimos, para m fixo,

$$\psi_m(\vec{x}) = \sum_{\vec{p}} \varphi_{\vec{p}}(\vec{x})\,a_{\vec{p}m} = \sum_{\vec{p}} \frac{e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}}{\sqrt{V}}\,a_{\vec{p}m} \qquad (22)$$

e o hermitiano conjugado de ψ é

$$\psi^{+}_m(\vec{x}) = \sum_{\vec{p}} \varphi^{*}_{\vec{p}}(\vec{x})\,a^{+}_{\vec{p}m} = \sum_{\vec{p}} \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}}{\sqrt{V}}\,a^{+}_{\vec{p}m} \qquad (23)$$

Note que

$$a_{\vec{p}m} = \int d^3x\,\frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}}{\sqrt{V}}\,\psi_m(\vec{x})$$

$$= \int d^3x\;\varphi^{*}_{\vec{p}}(\vec{x})\,\psi_m(\vec{x}) \qquad (24)$$

Fato importante: o operador $\psi_m^+(\vec{x})$ cria uma partícula na posição $\vec{x}$ com projeção de spin m. De fato,

$$\langle \vec{x}' | \psi_m^+(\vec{x}) | 0 \rangle = \langle \vec{x}' | \sum_{\vec{p}} \frac{e^{-i\vec{p}.\vec{x}/\hbar}}{\sqrt{V}} a^+_{\vec{p}m} | 0 \rangle$$

$$= \langle \vec{x}' | \sum_{\vec{p}} \frac{e^{-i\vec{p}.\vec{x}/\hbar}}{\sqrt{V}} \chi_m | \vec{p} \rangle = \chi_m \sum_{\vec{p}} \frac{e^{-i\vec{p}.\vec{x}/\hbar}}{\sqrt{V}} \frac{e^{i\vec{p}.\vec{x}'}}{\sqrt{V}}$$

$$= \chi_m \, \delta(\vec{x} - \vec{x}')$$

Analogamente o operador de campo $\psi_m(\vec{x})$ destroi uma partícula de projeção de spin m no ponto $\vec{x}$.

Obtenhamos os comutadores (anticomutadores) de ψ_m e ψ_m^+ para o caso de bosons (fermions):

(i) $\psi_m(\vec{x}) \psi_{m'}(\vec{x}') \overset{\text{bosons}}{\underset{\text{fermions}}{\mp}} \psi_{m'}(\vec{x}') \psi_m(\vec{x})$

$$= \sum_{\vec{p}\,\vec{p}'} \frac{e^{i\vec{p}.\vec{x}/\hbar}}{\sqrt{V}} \frac{e^{i\vec{p}'.\vec{x}'/\hbar}}{\sqrt{V}} \underbrace{\left(a_{\vec{p}m} a_{\vec{p}'m'} \mp a_{\vec{p}'m'} a_{\vec{p}m} \right)}_{\| \; 0} = 0 \quad (25)$$

(ii) Analogamente

$$\psi_m^+(\vec{x}) \psi_{m'}^+(\vec{x}') \mp \psi_{m'}^+(\vec{x}') \psi_m^+(\vec{x}) = 0 \quad (26)$$

(iii)

$$\psi_m(x) \psi_{m'}^+(\vec{x}') \mp \psi_{m'}^+(\vec{x}') \psi_m(\vec{x}) =$$

$$= \sum_{\vec{p},\vec{p}'} \frac{e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}}{\sqrt{V}} \frac{e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{x}'/\hbar}}{\sqrt{V}} \underbrace{\left(a_{\vec{p}m} a^{\dagger}_{\vec{p}'m'} \mp a^{\dagger}_{\vec{p}'m'} a_{\vec{p}m} \right)}_{\delta_{\vec{p},\vec{p}'}\,\delta_{mm'}} =$$

$$= \delta_{mm'} \sum_{\vec{p}} \frac{e^{i\vec{p}(\vec{x}-\vec{x}')/\hbar}}{\sqrt{V}} = \delta_{mm'}\,\delta(\vec{x}-\vec{x}') \quad (27)$$

Que podemos resumir como:

bosons

$$\begin{aligned} &[\psi_m(\vec{x}), \psi_{m'}(\vec{x}')] = 0 \\ &[\psi^{+}_m(\vec{x}), \psi^{+}_{m'}(\vec{x}')] = 0 \\ &[\psi_m(\vec{x}), \psi^{+}_{m'}(\vec{x}')] = \delta_{mm'}\,\delta(\vec{x}-\vec{x}') \end{aligned} \quad (28a)$$

fermions

$$\begin{aligned} &\{\psi_m(\vec{x}), \psi_{m'}(\vec{x}')\} = 0 \\ &\{\psi^{+}_m(\vec{x}), \psi^{+}_{m'}(\vec{x}')\} = 0 \\ &\{\psi_m(\vec{x}), \psi^{+}_{m'}(\vec{x}')\} = \delta_{mm'}\,\delta(\vec{x}-\vec{x}') \end{aligned} \quad (28b)$$