

AULA 19

MECÂNICA QUÂNTICA II

Evolução Temporal

Utilizando a descrição de Heisenberg para a qual

$$\Psi_m(\vec{x}, t) = e^{iHt/\hbar} \underbrace{\Psi_m(\vec{x})}_{\text{operador de Schrödinger}} e^{-iHt/\hbar}$$

Para simplificar a notação denotaremos $x \equiv \vec{x}, m$, $\sum_m \int d^3x \rightarrow \int dx$

Tomemos o Hamiltoniano do sistema como

$$\boxed{H = K + U + V} \quad (49a)$$

$$K = \frac{-\hbar^2}{2m} \int dx \Psi^\dagger(x) \nabla^2 \Psi(x) \quad (49b)$$

$$U = \int dx \int dx' \Psi^\dagger(x) \langle x | U | x' \rangle \Psi(x') \quad (49c)$$

$$V = \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 dx_1' dx_2' \Psi^\dagger(x_1) \Psi^\dagger(x_2) \langle x_1 x_2 | V | x_1' x_2' \rangle$$

$$\Psi(x_1') \Psi(x_2') \quad (49d)$$

A equação de movimento é'

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{y}, t) = [\Psi(\vec{y}, t), H] \quad (50)$$

$$\text{Com } [\psi(\vec{y}, t), K] = [\psi(\vec{y}, t), \frac{-\hbar^2}{2m} \int dx \psi^\dagger(x) \nabla^2 \psi(x)]$$

$$= \frac{-\hbar^2}{2m} \int dx \delta(x-\vec{y}) \nabla^2 \psi(x) \quad \text{para bósons}$$

$$= \frac{-\hbar^2}{2m} \int dx \delta(x-\vec{y}) \nabla^2 \psi(x) \quad \text{para férmions}$$

$$\left. \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{y}}^2 \psi(\vec{y}, t)$$

$$[A, BC] = \{A, B\}C - B\{A, C\} = [A, B]C + B[A, C]$$

Analogamente:

$$[\psi(\vec{y}, t), U] = \int dx' \langle y | U | x' \rangle \psi(x')$$

$$[\psi(\vec{y}, t), V] = \int dx_2 dx_1' dx_2' \psi^\dagger(x_2) \langle y x_2 | V | x_1' x_2' \rangle \psi(x_2') \psi(x_1')$$

No caso de interações locais:

$$\langle x | U | x' \rangle = \delta(x-x') U(x')$$

$$\langle x_1 x_2 | V | x_1' x_2' \rangle = \delta(x_1-x_1') \delta(x_2-x_2') V(\vec{x}_2 - \vec{x}_1)$$

substituir resultados em (50) leva a

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{y}, t)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{y}}^2 \psi(\vec{y}, t) + U(\vec{y}) \psi(\vec{y}, t) + V_{\text{eff}}(\vec{y}, t) \psi(\vec{y}, t) \quad (51)$$

onde o potencial efetivo V_{eff} é dado por

$$V_{\text{eff}} = \int d^3x' \mathcal{O}(\vec{y} - \vec{x}') n(\vec{x}', t) \quad (52a)$$

↑ operador

$$\hat{n}(\vec{x}, t) = \sum_m \Psi_m^\dagger(\vec{x}, t) \Psi_m(\vec{x}, t) \quad (52b)$$

A equação (51) parece com a equação de Schrödinger mas ele é não linear devido ao termo $n(\vec{x}, t)$! Além disso (51) é a evolução temporal no espaço de Fock, isto é, em todos os \mathcal{F}_N !

Apesar de (51) não poder ser resolvido ele serve como base para a aproximação, por exemplo, substituindo $n(\vec{x}, t)$ pelo seu valor médio.

Gás de Fermions Não-Interagentes

Vamos discutir aqui um gás de fermions de spin $1/2$ não interagente. No estado fundamental $|F\rangle$ todos os estados de momento são preenchidos até que todos os férmions sejam colocados no sistema.

O Hamiltoniano do sistema que consideramos é

$$H = \sum_{\vec{k}, m} \epsilon_{\vec{k}} a_{\vec{k}m}^\dagger a_{\vec{k}m} \quad (53)$$

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

Se k_F é o módulo do maior k preenchido, então o estado fundamental é

$$|F\rangle = \sum_m \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} a_{\mathbf{k}m}^\dagger |0\rangle \quad (54)$$



Este estado também pode ser definido por

$$a_{\mathbf{k}m}^\dagger |F\rangle = 0 \quad \text{se } |\mathbf{k}| \leq k_F \quad (55)$$

e

$$a_{\mathbf{k}m} |F\rangle = 0 \quad \text{se } |\mathbf{k}| > k_F \quad (56)$$

Estados excitados são obtidos passando 1 fermião para $|\mathbf{k}'| > k_F$

$$a_{\mathbf{k}'m'}^\dagger a_{\mathbf{k}m} |F\rangle \quad \text{com } |\mathbf{k}'| > k_F \quad |\mathbf{k}| \leq k_F \quad (57)$$

a diferença de energia com respeito ao estado fundamental é

$$\Delta E_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}} \quad (58)$$

É comum tratar $|F\rangle$ como sendo o vácuo do sistema.

É costumeiro fazer com que a energia desse estado seja zero.

Assim sendo a diferença de energia (58) escreve-se como

$$\Delta E_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = (\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_F) + (\epsilon_F - \epsilon_{\mathbf{k}}) \quad (59)$$

Neste formato tratamos o sistema em termos de

(28)

estados excitados e buracos. Podemos tratar formalmente

os buracos definindo

$$b_{\vec{k}m}^{\dagger} = a_{\vec{k}m} \quad \text{p/ } |\vec{k}| \leq k_F \quad (60)$$

que cria um buraco retirando um férmion do estado $|\vec{k}m\rangle$! Assim sendo escrevemos (55) e (56) como

$$b_{\vec{k}m} |F\rangle = 0 \quad \text{para } |\vec{k}| \leq k_F \quad (61)$$

$$a_{\vec{k}m} |F\rangle = 0 \quad \text{para } |\vec{k}| > k_F$$

os operadores $b_{\vec{k}m}^{\dagger}$ c/ $|\vec{k}| \leq k_F$ e $a_{\vec{k}m}^{\dagger}$ com $|\vec{k}| > k_F$

são os operadores de criação de buracos e partículas excitadas. Juntos esses operadores são os operadores de criação de "quase-partículas"!

Em termos desses operadores o Hamiltoniano (53) é escrito como

$$H = \sum_{\substack{|\vec{k}| \leq k_F \\ m}} (\epsilon_F - \epsilon_k) b_{\vec{k}m}^{\dagger} b_{\vec{k}m} + \sum_{\substack{|\vec{k}| > k_F \\ m}} (\epsilon_k - \epsilon_F) a_{\vec{k}m}^{\dagger} a_{\vec{k}m} \quad (62)$$

O valor de k_F é determinado pela condição

$$\begin{aligned} N = \# \text{ de férmions} &= \sum_{|\vec{k}| \leq k_F} n_{\vec{k}m} k_F \\ &= \sum_{\substack{m \\ |\vec{k}| \leq k_F}} 1 = 2 \sum_{|\vec{k}| \leq k_F} \rightarrow 2 \int_0^{k_F} d^3k \frac{V}{(2\pi)^3} = \frac{k_F^3 V}{3\pi^2} \quad (63) \end{aligned}$$

(29)

$$n = \frac{N}{V} \Rightarrow k_F^3 = 3\pi^2 n \quad \text{densidade média de partículas}$$

Correlações no gás de férmions Não-Interagentes

Inicialmente avaliamos o valor esperado da densidade

$$\rho(\vec{x}) = \sum_m \psi_m^\dagger(\vec{x}) \psi_m(\vec{x})$$

$$\begin{aligned} \langle \rho(\vec{x}) \rangle &= \sum_m \langle F | \psi_m^\dagger(\vec{x}) \psi_m(\vec{x}) | F \rangle \\ &= \sum_n \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}}{\sqrt{V}} \frac{e^{i\vec{k}'\cdot\vec{x}}}{\sqrt{V}} \langle F | a_{\vec{k}m}^\dagger a_{\vec{k}'m} | F \rangle \end{aligned}$$

para que o valor esperado não seja nulo devemos remover e devolver o férmion ao mesmo estado i.e

$$\langle F | a_{\vec{k}m}^\dagger a_{\vec{k}'m} | F \rangle = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \langle F | a_{\vec{k}m}^\dagger a_{\vec{k}m} | F \rangle = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} n_{\vec{k}m} \quad (64)$$

$n_{\vec{k}m} \rightarrow 0, 1$

logo

$$\langle \rho(\vec{x}) \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, m} n_{\vec{k}m} = \frac{N}{V} = n \quad \text{que é const. (como esperado!)}$$

a densidade do gás é uniforme.

Apesar desse resultado esperado existem correlações não triviais!

(a) Correlação de 1 partícula.

Definimos $G_m(\vec{x}, \vec{x}') \equiv \langle F | \psi_m^\dagger(\vec{x}) \psi_m(\vec{x}') | F \rangle \quad (65)$

(30)

← mesmo m

que é a amplitude para remover uma partícula de spin
 m de posição \vec{x}' e devolvê-la à posição \vec{x} . Da definição
 de ψ_m^+ e ψ_m temos

$$G_m(\vec{x}, \vec{x}') = \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}}}{\sqrt{V}} \frac{e^{i\vec{k}' \cdot \vec{x}'}}{\sqrt{V}} \langle F | a_{\vec{k}m}^+ a_{\vec{k}'m} | F \rangle$$

$$\stackrel{(64)}{=} \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{x}' - \vec{x})} n_{\vec{k}m} \quad (66)$$

no limite do contínuo

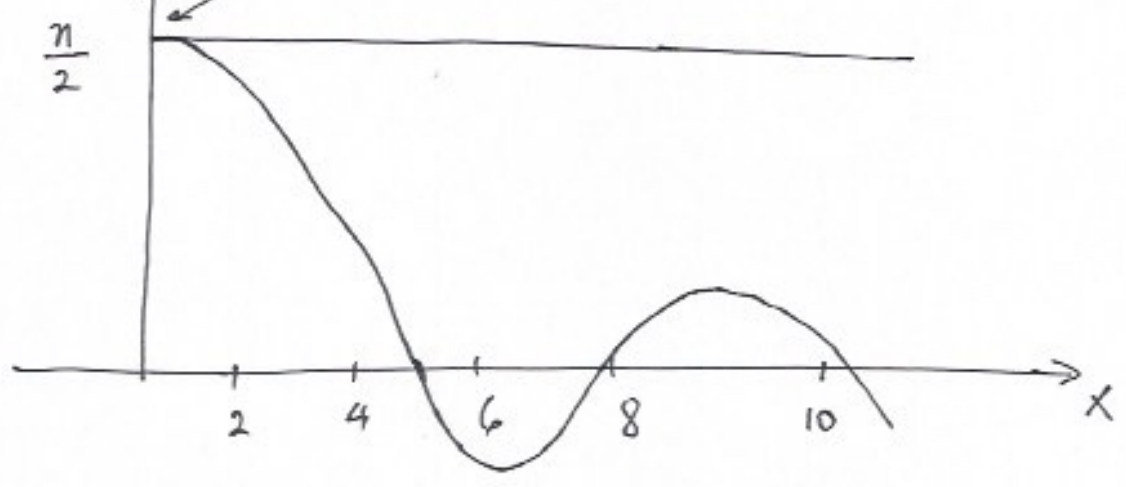
$$G_m(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{1}{V} \int_0^{k_F} d^3k \frac{V}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}(\vec{x}' - \vec{x})} = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{k_F} dk k^2 \int_{-1}^1 d(\cos\theta)$$

$$e^{ik|\vec{x} - \vec{x}'| \cos\theta}$$

$$\Rightarrow G_m(\vec{x}, \vec{x}') = G_m(|\vec{x} - \vec{x}'|) = \frac{3}{2} n \frac{\sin x - x \cos x}{x^3} \quad (67)$$

onde $x = k_F |\vec{x} - \vec{x}'|$

$G_m(x)$ \nearrow p/ $\vec{x} = \vec{x}' \Rightarrow G_m(0) = \frac{n}{2}$ coerente com $\langle \rho(x) \rangle = n$



(b) Conclusão de Pares

Dessejamos obter a probabilidade de encontrar um férmion no ponto \vec{x}' dada a existência de outro férmion no ponto \vec{x} .

Em um gás de férmions existe uma tendência das partículas de mesmo spin evitarem umas as outras. Princípio de Pauli.

2 partículas com o mesmo spin não podem ocupar o mesmo ponto do espaço \Rightarrow amplitude de estarem próximas deve ser relativamente pequena.

Para obter a probabilidade desejada vamos remover inicialmente uma partícula do ponto \vec{x}' , deixando o sistema com $N-1$ partículas:

$$|\phi(\vec{x}, m)\rangle \equiv \Psi_m(\vec{x}) |F\rangle \quad (68)$$

e calculamos o valor médio nesse estado de $S_{m'}(\vec{x}') = \Psi_{m'}^+(\vec{x}') \Psi_{m'}(\vec{x}')$

$$\langle \phi(\vec{x}, m) | \Psi_{m'}^+(\vec{x}') \Psi_{m'}(\vec{x}') | \phi(\vec{x}, m) \rangle = \langle F | \Psi_m^+(\vec{x}) \Psi_{m'}^+(\vec{x}') \Psi_{m'}(\vec{x}') \Psi_m(\vec{x}) | F \rangle \equiv \left(\frac{n}{2}\right)^2 G_{mm'}(\vec{x}, \vec{x}') \quad (69)$$

Substituindo em (69) a expansão de Ψ^+ e Ψ temos

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 G_{mm'}(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_{\vec{q}, \vec{q}'} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{x}} e^{-i(\vec{q}-\vec{q}')\vec{x}'} \times \quad (32)$$

$$\langle F | a_{\vec{k}m}^+ a_{\vec{q}m'}^+ a_{\vec{q}'m'} a_{\vec{k}m} | F \rangle \quad (70)$$

Para o valor esperado em (70) não ser nulo devemos devolver (com $a^+ a^+$) exatamente as 2 partículas retiradas (por $a a$). Isso se dá em 2 casos:

$$(i) \text{ Para } m \neq m' \Rightarrow \vec{k}' = \vec{k} \text{ e } \vec{q}' = \vec{q} \quad (C1)$$

$$(ii) \text{ Para } m = m' \Rightarrow \vec{k}' = \vec{q} \text{ e } \vec{q}' = \vec{k} \quad (C2)$$

$$\vec{k}' = \vec{k} \text{ e } \vec{q}' = \vec{q} \quad (C3)$$

no caso (i) temos

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 G_{mm'}(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k}, \vec{q}'} \langle F | a_{\vec{k}m}^+ a_{\vec{k}m} a_{\vec{q}'m'}^+ a_{\vec{q}'m'} | F \rangle$$

$$= \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} n_{\vec{k}m} n_{\vec{q}m'} = \left(\frac{n}{2}\right)^2 \quad (71)$$

$\therefore G_{mm'}(\vec{x}, \vec{x}') = 1$ independente de distância. O

princípio de exclusão não afete partículas de spin opostos!

No caso (ii) as possibilidades (C2) e (C3) levam a

$$\langle F | a_{\vec{k}m}^+ a_{\vec{q}m}^+ a_{\vec{q}'m'} a_{\vec{k}'m'} | F \rangle = \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{\vec{q}, \vec{q}'} \langle F | a_{\vec{k}m}^+ a_{\vec{q}m}^+ a_{\vec{q}'m'} a_{\vec{k}'m'} | F \rangle$$

$$+ \delta_{\vec{k}, \vec{q}'} \delta_{\vec{k}', \vec{q}} \langle F | a_{\vec{k}m}^+ a_{\vec{q}m}^+ a_{\vec{k}m} a_{\vec{q}m} | F \rangle$$

$$= \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{\vec{q}, \vec{q}'} \langle F | a_{\vec{k}m}^+ a_{\vec{k}m} a_{\vec{q}'m'}^+ a_{\vec{q}'m'} | F \rangle$$

(33)

$$- \delta_{\vec{k}, \vec{q}} \langle F | a_{\vec{k}m}^+ a_{\vec{q}m}^{\rightarrow 0} | F \rangle + \delta_{\vec{k}, \vec{q}'} \delta_{\vec{q}, \vec{k}'} (- \langle F | a_{\vec{k}m}^+ a_{\vec{k}m} a_{\vec{q}m}^+ a_{\vec{q}m} | F \rangle + \delta_{\vec{k}, \vec{q}} \langle F | a_{\vec{k}m}^+ a_{\vec{q}m}^{\rightarrow 0} | F \rangle)$$

$$= (\delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{\vec{q}, \vec{q}'} - \delta_{\vec{k}, \vec{q}'} \delta_{\vec{q}, \vec{k}'}) \underbrace{\langle F | a_{\vec{k}m}^+ a_{\vec{k}m} a_{\vec{q}m}^+ a_{\vec{q}m} | F \rangle}_{n_{\vec{k}m} n_{\vec{q}m}}$$

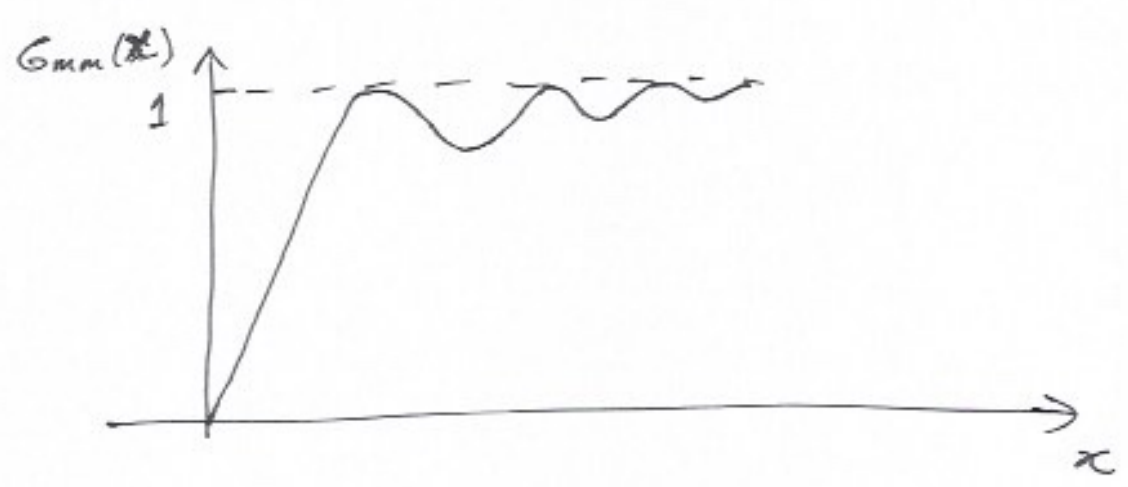
logo

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 G_{mm}(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{q}, \vec{k}} (1 - e^{-i(\vec{k}-\vec{q})(\vec{x}-\vec{x}')}) n_{\vec{k}m} n_{\vec{q}m}$$

$$\stackrel{(66)+(71)}{=} \left(\frac{n}{2}\right)^2 - [G_m(|\vec{x}-\vec{x}'|)]^2 \quad (72)$$

$$G_{mm}(\vec{x}, \vec{x}') = G_m(|\vec{x}-\vec{x}'|) = 1 - 9 \frac{(\sin x - x \cos x)^2}{x^6} \quad (73)$$

con $|\vec{x}-\vec{x}'| k_F \equiv x$



Note:

(i) $G_{mm}(0) \equiv 0$ i.e. 2 férmions com o mesmo spin-3 não podem ocupar o mesmo lugar no espaço.

De fato há uma diminuição substancial na probabilidade de encontrar 2 férmions com o mesmo spin a distâncias $\lesssim \frac{1}{k_F}$. O princípio de exclusão produz grandes correlações para partículas de mesma projeção de spin.

(ii) p) $|\vec{x} - \vec{x}'| \rightarrow \infty$ os férmions são distinguíveis! A probabilidade $\rightarrow 1$, o mesmo valor de spins opostos.

$G_{mm'}(|\vec{x} - \vec{x}'|)$ é chamado de função de correlação de pares.

Note:

$$\{ a_{\vec{k}m}, a_{\vec{k}'m'}^\dagger \} = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{mm'}$$

$$\{ a_{\vec{k}m}^{(+)}, a_{\vec{k}'m'}^{(+)} \} = 0 \Rightarrow a_{\vec{k}m} a_{\vec{k}'m'} = -a_{\vec{k}'m'} a_{\vec{k}m}$$

$$\frac{1}{4\pi^2} \int_0^{k_F} dk k^2 \int_{-1}^1 d\omega \theta e^{ikx\omega\theta} = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{k_F} k^2 dk \frac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{ikx}$$

$$= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{k_F} dk k^2 \frac{2 \operatorname{sen} kx}{kx}$$

$$\begin{aligned} kx &= y \\ x dk &= dy \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{k_F x} \frac{dy}{x} \frac{y^2}{x^2} \frac{\sin y}{y} = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{x^3} \int_0^{k_F x} dy \underbrace{y \sin y}_{\sin y - y \cos y} \\
&= \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{x^3} \left(\sin k_F x - k_F x \cos k_F x \right) \frac{k_F^3}{k_F^3} \quad ; \quad n = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \\
&= \frac{3}{2} n \frac{\sin x' - x' \cos x'}{x'^3}
\end{aligned}$$

Correlações no Gás de Bósons Não-Interagentes

Vamos agora avaliar a função de correlação de pares para um sistema de bósons de spin 0 não interagentes no estado

$$|\phi\rangle = |n_0, n_{p_1}, \dots\rangle$$

a densidade nesse estado é

$$\langle \phi | \psi^\dagger(\vec{x}) \psi(\vec{x}) | \phi \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \langle \phi | e^{-i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{x}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} | \phi \rangle$$

$$= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} \equiv n$$

Correlação de Pares

$$\begin{aligned}
\left(\frac{n}{2}\right) G(\vec{x}, \vec{x}') &= \left(\frac{n}{2}\right)^2 G(\vec{x} - \vec{x}') = \frac{1}{V^2} \langle \phi | \psi^\dagger(\vec{x}) \psi^\dagger(\vec{x}') \psi(\vec{x}') \psi(\vec{x}) | \phi \rangle \\
&= \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \sum_{\vec{q}, \vec{q}'} e^{-i(\vec{p}-\vec{p}') \cdot \vec{x}} e^{-i(\vec{q}-\vec{q}') \cdot \vec{x}'} \langle \phi | a_{\vec{p}}^\dagger a_{\vec{p}}^\dagger a_{\vec{q}} a_{\vec{q}'} | \phi \rangle
\end{aligned}$$

$$\langle \phi | a_{\vec{p}}^\dagger a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}'} a_{\vec{p}'} | \phi \rangle \neq 0$$

apenas se $\vec{p} = \vec{p}'$ e $\vec{q} = \vec{q}'$ ou $\vec{p} = \vec{q}'$ e $\vec{q} = \vec{p}'$, mas
esses casos são iguais se $\vec{p} = \vec{q}$. Assim temos

$$\langle \phi | a_{\vec{p}}^\dagger a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}'} a_{\vec{p}'} | \phi \rangle = \delta_{\vec{p}, \vec{p}'} \delta_{\vec{q}, \vec{q}'} n_{\vec{p}} n_{\vec{q}}$$

$$+ \delta_{\vec{p}, \vec{q}'} \delta_{\vec{q}, \vec{p}'} n_{\vec{p}} n_{\vec{q}} - \delta_{\vec{p}, \vec{q}} \delta_{\vec{p}', \vec{q}'} \delta_{\vec{q}, \vec{p}'} (n_{\vec{p}}^2 + n_{\vec{q}})$$

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 G(\vec{x} - \vec{x}') = \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}} \sum_{\vec{q}} n_{\vec{p}} n_{\vec{q}} + \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}} \sum_{\vec{q}} e^{-i(\vec{p}-\vec{q}) \cdot \vec{x}} e^{-i(\vec{q}-\vec{p}) \cdot \vec{x}'} n_{\vec{p}} n_{\vec{q}}$$

$$\frac{-1}{V^2} \sum_{\vec{p}} (n_{\vec{p}} + 1) n_{\vec{p}} = \left(\sum_{\vec{p}} \frac{n_{\vec{p}}}{V} \right)^2 + \left| \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} e^{-i(\vec{p}, (\vec{x} - \vec{x}')} n_{\vec{p}} \right|^2 - \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}} (n_{\vec{p}} + 1)$$

$$= n^2 + \left| \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} e^{-i\frac{\vec{p}}{V} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} n_{\vec{p}} \right|^2 - \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}} (n_{\vec{p}} + 1)$$

Se todas as partículas estiverem em um único estado

$$\frac{n^2}{4} G(\vec{x} - \vec{x}') = n^2 + n^2 - \frac{1}{V^2} (N+1)N = \frac{N(N-1)}{V^2}$$

isso diz apenas que a amplitude relativa para remover

a 1ª partícula é $\frac{N}{V}$, enquanto que para remover a

2ª partícula é $\frac{N-1}{V}$