AULA 20

MECÂNICA QUÂNTICA II

AULA 20

Distribuição de Wigner

Estados quânticos (puros ou mistos) podem ser representados de uma forma que lembra muito as distribuições de espaço de fase da mecânica clássica.

Considere um sistema 1D com a matriz densidade ρ na representação de coordenadas, i.e. $\langle q_1 | \rho | q_2 \rangle$. A <u>distribuição de Wigner</u> é definida por

$$f(q,p) = \int_{-\infty}^{+\infty} ds \; e^{-ips/\hbar} \langle q + \tfrac{1}{2}s | \rho | q - \tfrac{1}{2}s \rangle \quad (74)$$

$f(q,p)$ tem 3 propriedades:

- como $\rho = \rho^{+} \Rightarrow f \in \mathbb{R}$
- $\displaystyle\int \frac{dp}{2\pi\hbar} f(q,p) = \langle q | \rho | q \rangle$ distrib. prob. das coordenadas.
- $\displaystyle\int \frac{dq}{2\pi\hbar} f(q,p) = \langle p | \rho | p \rangle$ distrib. prob. dos momentos.

$f(q,p)$ não é uma distribuição de probabilidade pois não é positiva-mente definida para estados arbitrários. Não é surpreendente pois a incompatibilidade das coord. e momento (princípio de incerteza) $\Rightarrow$ distrib. prob. conjunta de q e p não pode existir exceto em circunstâncias especiais.

Se A é um observável, definimos uma função $A(q,p)$ tal que

$$\int \frac{dq}{2\pi\hbar} dp \; A(q,p) \, f(q,p) = \mathrm{Tr}\, A\rho \quad (75)$$

É possível mostrar que

$$f(q,p) = \int ds\; e^{-ips/\hbar} \langle q + \tfrac{1}{2}s | A | q - \tfrac{1}{2}s \rangle \quad (76)$$

A generalização para um sistema de N partículas é simples

$$dq \longrightarrow dq_1 \dots dq_N \qquad \frac{dp}{2\pi\hbar} \longrightarrow \frac{dp_1}{2\pi\hbar} \cdots \frac{dp_N}{2\pi\hbar} \quad (77)$$

Funções de Distribuição de N-partículas

Como na mecânica estatística clássica, é suficiente restringir nossa atenção para o comportamento de partícula única ou de pares de partículas tomando a média sobre o resto do sistema.
Com esse propósito podemos definir matrizes densidades reduzidas e funções de distribuição.

Seja ρ uma matriz densidade arbitrária definida em $\mathcal{F}$, com o traço ~~todo~~ tomado sobre um conj. completo em $\mathcal{F}$. Definimos as matrizes de distribuição de N-partículas

$$\langle x_1' | W_1 | x_1 \rangle = \mathrm{Tr}\left(\rho\, \psi^+(x_1)\, \psi(x_1')\right) \quad (78)$$

$$\langle x_1' x_2' | W_2 | x_1 x_2 \rangle = \mathrm{Tr}\left(\rho\, \psi^+(x_1)\, \psi^+(x_2)\, \psi(x_2')\, \psi(x_1')\right) \quad (79)$$

onde $x \equiv (\vec{x}, m)$

$$\langle \vec{x}\, m | W_1 | \vec{x}\, m \rangle = \mathrm{Tr}\; \rho\, \psi_m^+(\vec{x})\, \psi_m(\vec{x}) \quad (80)$$ é claramente a

densidade de partículas com projeção de spin m em $\vec{x}$

Os elementos fora da diagonal de W_1 também tem significado físico, pois ~~a~~ distribuição de momento, definida como o número de partículas tendo momento $\vec{p}$ e projeção de spin m é

$$Tr\, \rho\, a^+_{\vec{p}m}\, a_{\vec{p}m} = \frac{1}{V}\int d\vec{x}\, d\vec{x}'\, e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')} \langle \vec{x}\, m | W_1 | \vec{x}' m\rangle \quad (81)$$

pois

$$Tr\, \rho\, a^+_{\vec{p}m}\, a_{\vec{p}m} = \frac{1}{\sqrt{V}}\int d\vec{x}'\, e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}'}\ \frac{1}{\sqrt{V}}\int d\vec{x}\ e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}}\ Tr\, \rho\, \psi^+_m(\vec{x}')\, \psi_m(\vec{x})$$

$$= \frac{1}{V}\int d\vec{x}\, d\vec{x}'\, e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')} \langle \vec{x}\, m | W_1 | \vec{x}' m\rangle$$

assim W_1 incorpora as densidades no espaço de coordenadas e momentos. De fato W_n, a matriz de distribuição de n-partículas é a distribuição de Wigner (fora a normalização)

Note que $\langle \vec{x}\, m | W_1 | \vec{x}\, m\rangle$ está normalizada como

$$\sum_m \int d\vec{x}\ \langle \vec{x}\, m | W_1 | \vec{x}\, m\rangle = \langle N \rangle \quad (82)$$

A função de distribuição de pares

$$\langle x_1\, x_2 | W_2 | x_1\, x_2\rangle = Tr\, \rho\, \psi^+(x_1)\, \psi^+(x_2)\, \psi(x_2)\, \psi(x_1) \quad (83)$$

tem grande importancia, como pelas relações de comutação/anticomutação

$$\psi^+(x_1)\,\psi^+(x_2)\,\psi(x_2')\,\psi(x_1') = \psi^+(x_1)\,\psi(x_1')\,\psi^+(x_2)\,\psi(x_2')$$

$$- \delta(x_2 - x_2')\,\psi^+(x_1)\,\psi(x_1')$$

para ambos férmions e bosons, então

$$\sum_{m,s}\int d\vec{x}_1\, d\vec{x}_2 \;\langle \vec{x}_1 m\, \vec{x}_2 s \,|\, W_2 \,|\, \vec{x}_1 m\, \vec{x}_2 s\rangle = \langle N^2\rangle - \langle N\rangle$$

Para um sistema de muitas partículas, $N \to \infty$, $\langle N\rangle \ll \langle N^2\rangle$, nessas circunstâncias $\langle N^2\rangle = \langle N\rangle^2$

$$P(x_1, x_2) = \frac{1}{\langle N\rangle^2} \langle x_1 x_2 \,|\, W_2 \,|\, x_1 x_2\rangle \qquad (84)$$

que é a probabilidade conjunta para qualquer par de partículas.

Quando ρ é invariante sob simetrias espaciais, essas simetrias se refletem nessas matrizes de distribuição. Por exemplo, ignorando a gravidade, um fluido em equilíbrio térmico é espacialmente homogêneo e isotrópico exceto nas vizinhanças das fronteiras. $\Rightarrow$ $\langle x_1 x_2 | W_2 | x_1 x_2\rangle$ só pode depender da diferença $|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$ a não ser que $\vec{x}_1$ e/ou $\vec{x}_2$ estão perto da fronteira.

Se ρ for invariante por translação i.e. $[\rho, \vec{P}] = 0$

$$\psi_m(\vec{x} - \vec{a}) = e^{i\vec{P}\cdot\vec{a}}\, \psi_m(\vec{x})\, e^{-i\vec{P}\cdot\vec{a}}$$

a mesma transformação aplica-se a qualquer operador $A(\vec{x})$ como $\psi_m^+(\vec{x})\,\psi_{m'}(\vec{x})$, além disso

$$Tr\,\rho A(\vec{x}) B(\vec{x}') = Tr\,\rho\, e^{i\vec{P}.\vec{x}} A(0)\, e^{-i\vec{P}.(\vec{x}-\vec{x}')} B(0)\, e^{-i\vec{P}.\vec{x}'}$$

mas $Tr\,XY = Tr\,YX$ e $[\rho, \vec{P}] = 0$, logo

$$Tr\,\rho\, A(\vec{x})\, B(\vec{x}') = Tr\rho\, A(\vec{x}-\vec{x}')\, B(0) \quad (85)$$

$\Longrightarrow$ as matrizes de distribuição W_n são funções da diferença de coordenadas se ρ for invariante por translação!

Se ρ for invariante por rotação, há mais simplificações.

Se $[\rho, \vec{\Sigma}] = [\rho, \vec{S}] = 0$, então (acoplamento spin-órbita negligenciável!)

$$\langle \vec{x}_1 m_1 \ldots \vec{x}_N m_N | W_N | x_1' m_1' \ldots x_N' m_N' \rangle$$

é uma função do valor absoluto da diferença de coordenadas e é nulo se

$$\sum_{j=1}^{N} m_j \neq \sum_{j=1}^{N} m_j'$$

Se ρ for invariante sob translações, a representação dos momentos oferece muitas vantagens

$$\langle p_1 \ldots p_n | \tilde{W}_n | p_1' \ldots p_N' \rangle \equiv V^{-n} \int d\vec{x}_1 \ldots d\vec{x}_n'\, e^{-i(\vec{p}_1 \cdot \vec{x}_1 + \ldots + \vec{p}_N \cdot \vec{x}_N)}$$

$$\langle x_1 \ldots x_N | W_N | x_1' \ldots x_N' \rangle\, e^{i(\vec{p}_1' \cdot x_1' + \ldots + \vec{p}_N' \cdot \vec{x}_N')}$$

$$= Tr\,\rho\, a_{p_n'}^+ \ldots a_{p_1'}^+\, a_{p_n} \ldots a_{p_1} \quad (86)$$

a invariância por translação $\Longrightarrow$ $\tilde{W}_n$ é nulo a menos que

$$\sum_{j=1}^{N} \vec{P}_j = \sum_{j=1}^{N} \vec{P}_j'$$

Gases em Equilíbrio Térmico e Ensemble Grand Canônico

No Ensemble Grand Canônico o número N de partículas não está fixo, o sistema é acoplado a um banho térmico à temperatura T (fixa) de potencial químico μ (fixo)

A função de partição é

$$Z_G = e^{-\beta \Omega} = \mathrm{Tr}\; e^{-\beta(H-\mu N)} \qquad (87)$$

H = Hamiltoniano do sistema ; $\beta \equiv \dfrac{1}{k_B T}$

N = operador de número total de partículas

Ω = potencial termodinâmico $= \Omega(T, V, \mu)$

Para um sistema de partículas livres

$$H = \sum_{\ell} \varepsilon_\ell a_\ell^{+} a_\ell \qquad \ell = 0, 1, \ldots$$

ε_ℓ os auto-estados do Hamiltoniano de partícula única $\{|\ell\rangle\} \equiv$ conj. completo de estados de partícula única.

A Função de Partição Z_G pode ser calculada facilmente na representação do número de ocupação dos estados de H

$$Z_G = \sum_{n_1 \cdots n_k \cdots} \langle n_1 \ldots n_k \ldots | e^{\sum_l \beta(\mu - \varepsilon_l) n_l} | n_1 \ldots n_k \ldots \rangle$$

n_k é o número de ocupação do k-ésimo estado de partícula única

Os valores permitidos são:

$$n_l = 0, 1 \quad (\text{férmions})$$

$$n_l = 0, 1, 2, \ldots \quad (\text{bósons})$$

$$Z_G = \prod_{l=0}^{\infty} \sum_{n_l} \langle n_l | e^{\beta(\mu - \varepsilon_l) n_l} | n_l \rangle ; \quad \Omega_G = \frac{-1}{\beta} \ln Z_G$$

$$Z_G^F = e^{-\beta \Omega_G^F} = \prod_{l=0}^{\infty} \sum_{n_l = 0,1} e^{\beta(\mu - \varepsilon_l) n_l} = \prod_{l=0}^{\infty} \left(1 + e^{\beta(\mu - \varepsilon_l)}\right)$$

$$\therefore \quad \Omega_G^F = -k_B T \sum_{l=0}^{\infty} \ln\left[1 + e^{\beta(\mu - \varepsilon_l)}\right] \quad (88) \quad (\text{férmions})$$

$$Z_G^B = e^{-\beta \Omega_G^B} = \prod_{l=0}^{\infty} \sum_{n_l = 0}^{\infty} e^{\beta(\mu - \varepsilon_l) n_l} = \prod_{l=0}^{\infty} \frac{1}{1 - e^{\beta(\mu - \varepsilon_l)}}$$

$$\sum_{n_l = 0}^{\infty} e^{\beta(\mu - \varepsilon_l) n_l} = 1 + e^{\beta(\mu - \varepsilon_l)} + e^{2\beta(\mu - \varepsilon_l)} + \ldots \equiv I$$

$$1 + e^{\beta(\mu - \varepsilon_l)} \underbrace{\left(1 + e^{\beta(\mu - \varepsilon_l)} + \ldots\right)}_{I} = I$$

$$1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon_\ell)} I = I \implies 1 = I\left(1 - e^{\beta(\mu-\varepsilon_\ell)}\right)$$

$$I = \frac{1}{1 - e^{\beta(\mu-\varepsilon_\ell)}}$$

$$\therefore \Omega_G^B = k_B T \sum_{\ell=0}^{\infty} \ln\left[1 - e^{\beta(\mu-\varepsilon_\ell)}\right] \quad (89) \text{ (bósons)}$$

A matriz densidade do ensemble estatístico é definida por:

$$\rho_G \equiv \frac{1}{Z_G} e^{-\beta \Omega_G} \qquad Tr\, \rho_G = 1 \qquad (90)$$

O número médio de partículas

$$\bar{N} = \langle N \rangle = Tr\, \rho N = \frac{Tr\, N e^{-\beta(H - \mu N)}}{Z_G} = \frac{1}{\beta} \frac{1}{Z_G} \frac{\partial Z_G}{\partial \mu}$$

$$= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu}(-\beta \Omega_G) = -\frac{\partial \Omega_G}{\partial \mu} \quad (91)$$

<u>férmions</u>

$$\bar{N} = -\frac{\partial \Omega_G^F}{\partial \mu} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{\ell=0}^{\infty} \ln\left[1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon_\ell)}\right]$$

$$= \frac{1}{\beta} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{\beta e^{\beta(\mu-\varepsilon_\ell)}}{1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon_\ell)}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon_\ell - \mu)}} \quad (92)$$

Distribuição de Fermi

bósons

$$\overline{N} = -\frac{\partial \Omega_G^B}{\partial \mu} = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial \mu}\sum_{l=0}^{\infty} \ln\left[1 - e^{\beta(\mu-\varepsilon_l)}\right]$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{e^{\beta(\mu-\varepsilon_l)}}{1-e^{\beta(\mu-\varepsilon_l)}} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_l-\mu)}-1} \quad (93)$$

Distribuição de Bose bósons

Gás de Fermi Ideal

$$H = \sum_{l} \varepsilon_l a_l^{+} a_l = \sum_{\vec{p},s} \frac{p^2}{2m} a_{\vec{p}s}^{+} a_{\vec{p}s} \equiv \sum_{\vec{p},s} \epsilon_p N_{\vec{p}s}$$

$$\langle N_{\vec{p}s} \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_p-\mu)}+1} \quad (94)$$

$$\lim_{\substack{T\to 0 \\ (\beta\to\infty)}} \langle N_{\vec{p}s} \rangle = 0 \quad \epsilon_p > \mu \qquad (94')$$
$$= 1 \quad \epsilon_p < \mu$$

assim todos os estados de partícula única com energia $\epsilon_p < \mu$ são ocupados por 1 partícula e todos os estados $\epsilon_p > \mu$ estão vazios. O potencial químico à $T=0$ é chamado de energia de Fermi ϵ_F, p_F para o qual $\frac{p_F^2}{2m} = \epsilon_F$ é o momento de Fermi.

O valor de p_F é determinado do lim $T \to 0$

$$n = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p} s} \langle N_{\vec{p}s} \rangle = \frac{2J+1}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{p^2 dp}{\left(e^{\beta(\epsilon_p - \mu)} + 1\right)}$$

J é o spin das partículas e $n \equiv \bar{N}/V$ a densidade média. A medida que $T \to 0$ ($\beta \to \infty$) a integral se aproxima do limite $\frac{1}{3} p_F^3$

Quando T está levemente acima de zero, estados excitados para partículas que estavam abaixo mas perto da superfície de Fermi são promovidos para cima da superfície ficam estatisticamente significantes. A medida que a temperatura cresce a distribuição fica cada vez mais diferente de (94'). De fato a (94) se aproxima da temperaturas muito elevadas $\beta\mu << 1$ e distribuição de Maxwell $e^{-\beta \epsilon_p}$

Agora podemos voltar as 2 distribuições mais simples para um gás de Fermi: a distribuição de partícula única e a distribuição de pares. Começamos com a distribuição de partícula única

$$\langle \vec{x}' s' | W_1 | \vec{x} s \rangle = Tr\, \rho\, \psi_s^+(\vec{x})\, \psi_{s'}(\vec{x}')$$
$$= \langle \psi_s^+(\vec{x})\, \psi_{s'}(\vec{x}') \rangle$$

Vimos que nessas circunstâncias: $s = s'$ e só pode ser função de $|\vec{x} - \vec{x}'| \equiv R$ (inv. por rotação e translação espacial)

$$\langle \vec{x}' s' | W_1 | \vec{x} s \rangle = \delta_{ss'} \, g(R) = Tr \, \psi_s^{+}(\vec{x}) \psi_{s'}(\vec{x}) \frac{e^{-\beta(H_p - \mu N_p)}}{Z_G}$$

$$= Tr \, \psi_s^{+}(|\vec{x}-\vec{x}'|) \psi_{s'}(0) \frac{e^{-\beta(H_p-\mu N_p)}}{Z_G}$$

$$g(R) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{R}} \langle N_{\vec{p}s} \rangle$$

$$= \frac{1}{V} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} V \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{R}}}{1+e^{\beta(\epsilon_p-\mu)}} = \frac{1}{V} \int_0^{\infty}\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} \frac{e^{-ipR\cos\theta} \, d(\cos\theta)}{1+e^{\beta(\epsilon_p-\mu)}} p^2 dp$$

$$= \frac{1}{2\pi^2 R} \int_0^{\infty} p \, dp \frac{\sin pR}{1+e^{\beta(\epsilon_p-\mu)}} \qquad (95)$$

$$j_1(x) = \sin x - x\cos x$$

$$\lim_{T\to 0} g(R) = \frac{n}{2J+1} \frac{3 j_1(p_F R)}{p_F R} \equiv \frac{2}{2J+1} G_m(|\vec{x}-\vec{x}'|)$$

onde $j_1(p_F R)$ é a função de Bessel esférica

essa é p/ $J = 1/2$ exatamente a função que obtivemos na última aula.

No limite ~~de~~ temperaturas altas (95) também pode ser calculado, $T \to \infty$ obtemos

$$\lim_{T\to\infty} g(R) = \frac{n}{2J+1} e^{-\frac{1}{2} R^2/mk_B T} \quad ; \quad k_B T \gg \epsilon_F$$

A matriz de distribuição de duas partículas

$$\langle \vec{x}_1 m_1 \vec{x}_2 m_2 | W_2 | \vec{x}_1' m_1' \vec{x}_2' m_2' \rangle$$

pode ser calculado transformando para a representação de momentos. Como a representação que diagonaliza ρ tem números de ocupação $\{n_p\}$ bem definidos, os operadores de criação $a^+_{p_1}$ e $a^+_{p_2}$ devem restaurar partículas removidas por $a_{p_1'}$ e $a_{p_2'}$. É possível mostrar que

$$\langle \vec{x}_1 m_1 \vec{x}_2 m_2 | W_2 | \vec{x}_1{}' m_1' \vec{x}_2{}' m_2' \rangle$$

(Mostre!)

$$= \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'}\, g(|\vec{x}_1 - \vec{x}_1{}'|)\, g(|\vec{x}_2 - \vec{x}_2{}'|)$$

$$- \delta_{m_1 m_2'} \delta_{m_2 m_1'}\, g(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2{}'|)\, g(|\vec{x}_2 - \vec{x}_1{}'|)$$

A generalização desse resultado para matriz de distribuição de n-partículas é um determinante cujos elementos são funções g. Como poderia ser esperado, em um sistema não interagente as correlações de ordem mais alta são completamente determinadas pela matriz de distribuição de partícula única.

$$\langle \vec{x}_1 m_1 \vec{x}_2 m_2 | W_2 | \vec{x}_1 m_1 \vec{x}_2 m_2 \rangle$$

$$= \left\{ \left(\frac{n}{2J+1}\right)^2 - \delta_{m_1 m_2} \left[g(R) \right]^2 \right\} \quad (96)$$

que como já vimos é proporcional a densidade de probabilidade de encontrar uma partícula em $\vec{x}_1$ com projeção de spin m_1 quando existe uma partícula em $\vec{x}_2$ com projeção de spin m_2.

(96) é mais um resultado peculiar de teoria quântica de partículas indistinguíveis. Na mec. estatística clássica não há correlação quando não há forças entre os constituintes do sistema. Mas (96) nos diz que a probabilidade de encontrar 2 partículas com projeção de spin iguais é menor que o resultado aleatório $\forall$ a separação entre elas e é zero quando a distância entre as partículas vai para zero! Essa correlação é a expressão do Princípio de Exclusão de Pauli no espaço de configuração.

(96) mostra que não há correlação na posição entre as partículas se $m_1 \neq m_2$. Se $m_1 = m_2$ há uma variação com T se $k_B T \ll \epsilon_F$ obtemos o resultado da aula passada, isto é,

$$\underbrace{\langle \vec{x}_1 m\, \vec{x}_2 m | W_2 | \vec{x}_1 m\, \vec{x}_2 m \rangle}_{} = \overbrace{\left(\frac{n}{2J+1}\right)^2 \left(1 - \left[\frac{3 j_1(p_F R)}{p_F R}\right]^2\right)}^{G_{mm}(|\vec{x}-\vec{x}'|)\ \equiv}$$

e logo se $p_F R >> 1$ a função distribuição de pares se aproxima do resultado aleatório.

No limite de Boltzmann $(k_B T >> \epsilon_F)$

$$\langle \vec{x}_1 m\, \vec{x}_2 m | W_2 | \vec{x}_1 m\, \vec{x}_2 m \rangle = \left(\frac{n}{2J+1}\right)^2 \left(1 - e^{-R^2/m k_B T}\right)$$

a apenas p/ distâncias pequenas o resultado é diferente do aleatório $\Rightarrow$ estatística clássica funciona no limite de alta temperaturas p/ $R > \lambda = \frac{1}{\sqrt{m k_B T}}$