2021-1, "STATPHYS", AULA 19

OBJETIVOS: DISCUTIR A REPRESENTAÇÃO DE NÚMEROS DE OCUPAÇÃO.

A CONSTRUÇÃO DA FÍSICA DE MUITOS CORPOS SEGUE UM ROTEIRO TORTUOSO. O DESEJO SERIA OBTER A SOLUÇÃO DA EQ. DE SCHRÖDINGER INDEPENDENTE DO TEMPO,

$$\boxed{H|\psi\rangle = E|\psi\rangle}\ .$$

MAS ISSO É IMPOSSÍVEL NO CASO DE MUITOS CORPOS SEM SIMPLIFICAÇÕES. EXPLICITAMENTE, H ENVOLVE INTERAÇÕES ARBITRÁRIAS ENTRE AS PARTÍCULAS E A FUNÇÃO DE ONDA ESTACIONÁRIA É COMPLEXA,

$$\boxed{\psi(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N) = \langle \vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N|\psi\rangle}\ .$$

A ABORDAGEM NATURAL É DE NATUREZA TENSORIAL. A LINEARIDADE DA EQ. DE SCHRÖDINGER "PEDE" QUE $|\psi\rangle$ SEJA UM VETOR DO ESPAÇO

$$\mathcal{H}^{\otimes N} = \underbrace{\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}}_{\text{N FATORES}} ,$$

ONDE $\mathcal{H}$ É O ESPAÇO DE HILBERT DE UMA ÚNICA PARTÍCULA ($|\psi\rangle$ É UM TENSOR EM RELAÇÃO A $\mathcal{H}$). CONTUDO, EMBORA AS COLEÇÕES DE PARTÍCULAS QUÂNTICAS REQUEIRAM AINDA AS NOÇÕES TENSORIAIS DE SIMETRIZAÇÃO OU ANTISSIMETRIZAÇÃO, A INDISTINGUIBILIDADE DAS PARTÍCULAS LEVA A UMA REPRESENTAÇÃO DE NÚMEROS DE OCUPAÇÃO QUE NÃO APENAS OCULTA, MAS INIBE INTERPRETAÇÕES TENSORIAIS!

* ESTADOS DE PARTÍCULA ÚNICA (SINGLE-PARTICLE STATES)

VAMOS IMAGINAR QUE O HAMILTONIANO DO SISTEMA DE MUITOS CORPOS (OU PELO MENOS SUA PARCELA QUE NÃO ENVOLVE INTERAÇÕES) SEJA A SOMA DE N HAMILTONIANOS DE UM CORPO,

$$\boxed{H = \sum_{j=1}^{N} H_j^{(1)} \,,}$$

CADA UM DOS QUAIS SATISFAZENDO

$$\boxed{H^{(1)}|n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle}$$

$$\langle m|n\rangle = \delta_{m,n}$$

OU

$$\boxed{H^{(1)}\phi_n(\vec{r}) = \varepsilon_n \phi_n(\vec{r})}$$

SE $\langle \vec{r}|n\rangle = \phi_n(\vec{r})$.

$$\int d^3r\, \phi_m^*(\vec{r})\phi_n(\vec{r}) = \delta_{m,n}$$

SE QUER VER O ÍNDICE DA PARTÍCULA,

$$\boxed{H_j^{(1)}\phi_n(\vec{r}_j) = \varepsilon_n \phi_n(\vec{r}_j)}\,.$$

EM BREVE, PRECISAREMOS EXPLICITAR $H^{(1)}$ E O PAR (ϕ_n, ε_n), MAS, POR ENQUANTO, ELES SÃO IRRELEVANTES PARA A ESTRUTURA FORMAL QUE VAMOS CONSTRUIR. A <u>QUANTIDADE</u> DE AUTOESTADOS DE PARTÍCULA ÚNICA (OU SEJA, A DIMENSÃO DO ESPAÇO DE HILBERT $\mathcal{H}$) SERÁ INFINITA MESMO EM CONTEXTOS FÍSICOS SIMPLES, MAS, POR RAZÕES DIDÁTICAS, SERÁ DENOTADA PELO INTEIRO POSITIVO r.

* DUAS PARTÍCULAS

SE TIVERMOS UM SISTEMA DE DUAS PARTÍCULAS, SUAS FUNÇÕES DE ONDA CONSTITUEM UM OUTRO ESPAÇO DE HILBERT, NÃO $\mathcal{H}$. QUAL? COM QUE BASE "NATURAL"?

FORMALMENTE, VAMOS CONSTRUIR UM VETOR DESSE NOVO ESPAÇO COMO O PRODUTO TENSORIAL

$$\boxed{|m\rangle \otimes |n\rangle = |m\rangle |n\rangle = |m,n\rangle},$$

CARACTERIZADO POR

$$\boxed{\begin{aligned}\langle k,l|m,n\rangle &= \langle k|m\rangle . \langle l|n\rangle \\ &= \delta_{k,m} . \delta_{l,n}\end{aligned}}$$

E POR

$$\boxed{\begin{aligned}\langle \vec{r}_1,\vec{r}_2|m,n\rangle &= \langle \vec{r}_1|m\rangle \langle \vec{r}_2|n\rangle \\ &= \phi_m(\vec{r}_1) . \phi_n(\vec{r}_2)\end{aligned}}.$$

É POSSÍVEL MOSTRAR QUE $\{|m,n\rangle\}$ É UMA BASE DO NOVO ESPAÇO, DE MODO QUE QUALQUER $\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ É EXPRESSA COMO

$$\boxed{\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \sum_{m,n} c_{m,n} \phi_m(\vec{r}_1)\phi_n(\vec{r}_2)}$$

OU $\boxed{|\Psi\rangle = \sum_{m,n} c_{m,n}|m,n\rangle}$

O ESPAÇO ASSIM GERADO É

$$\boxed{\mathcal{H}^{\otimes 2} = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}},$$

O PRODUTO TENSORIAL DE $\mathcal{H}$ POR SI MESMO. CONTUDO, AS EVIDÊNCIAS EMPÍRICAS DEIXAM CLARO QUE "A NATUREZA" NÃO EXPLORA "TODO O POTENCIAL" DE $\mathcal{H}^{\otimes 2}$ E NÃO PENSAMOS APENAS NA NORMALIZAÇÃO OU EM FASES GLOBAIS, COMO JÁ FAZÍAMOS EM $\mathcal{H}$.

SE TEMOS DOIS BÓSONS, PARTÍCULAS DE SPIN INTEIRO COMO FÓTONS, FÔNONS OU ÁTOMOS ^4He, DEVE VALER

$$\boxed{\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)},$$

ENQUANTO PARA FÉRMIONS, PARTÍCULAS DE SPIN SEMI-INTEIRO COMO PRÓTON, ELÉTRONS E ÁTOMOS ^3He,

$$\boxed{\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = -\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}.$$

OBSERVANDO ELEMENTOS DA BASE COMO "KETS" DE DIRAC, O ESTADO $|m,n\rangle$ SÓ É POSSÍVEL PARA BÓSONS SE $m=n$, POIS, SE $m \neq n$, $|m,n\rangle \neq |n,m\rangle$. MAS

$$\boxed{|m,n\rangle_S \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{|m,n\rangle + |n,m\rangle\right\}}$$

SATISFAZ O REQUISITO! NOTE QUE $|m,n\rangle_S = |n,m\rangle_S$, NÃO IMPORTA QUAL BÓSON OCUPA O ESTADO m E QUAL OCUPA n, ELES FORAM "IMPLEMENTADOS" COMO INDISTINGUÍVEIS PELA SIMETRIZAÇÃO.

QUANTOS SÃO OS VETORES $|m,n\rangle_S$, SE $\dim \mathcal{H} = r$? BASTA DIVIDIR OS 2 BÓSONS NOS r POSSÍVEIS ESTADOS E O NÚMERO DE POSSIBILIDADES É A QUANTIDADE DE SOLUÇÕES INTEIRAS NÃO

NEGATIVAS DE

$$x_1 + x_2 + \ldots + x_r = 2 ,$$

QUE É

$$\binom{2+(r-1)}{2} = \binom{r+1}{2} = \frac{(r+1)r}{2} .$$

ESSA É A DIMENSÃO DO <u>SUBESPAÇO SIMÉTRICO</u> $\boxed{\mathrm{Sym}^2 \mathcal{H}}$ DE $\mathcal{H}^{\otimes 2}$, QUE TEM DIMENSÃO r^2. EVIDENTEMENTE, ESTADOS GERAIS SÃO SIMETRIZADOS COMO

$$\boxed{\psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \right\}} .$$

ESTADOS DE PARES DE FÉRMIONS, POR OUTRO LADO, DEVEM SER ANTISSIMETRIZADOS COMO

$$\boxed{\psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \right\}}$$

E, ALÉM DE $|m,n\rangle$ NÃO SER UM ESTADO POSSÍVEL QUANDO $m \neq n$, COMO JÁ OCORRIA COM BÓSONS,

VETOR NULO

$$|n,n\rangle = -|n,n\rangle \Rightarrow |n,n\rangle = 0$$

MAS NÃO $|0,0\rangle$!!!

E REVELA-SE O PRINCÍPIO DE EXCLUSÃO DE PAULI, PELO QUAL NUNCA PODE HAVER DOIS FÉRMIONS NO MESMO ESTADO QUÂNTICO.

ESTADOS ANTISSIMÉTRICOS CONSTITUEM O SUBESPAÇO ANTISSIMÉTRICO $\boxed{\Lambda^2 \mathcal{H}} \subset \mathcal{H}^{\otimes 2}$, DE DIMENSÃO $\binom{r}{2} = \dfrac{r(r-1)}{2}$.

SÓ BÓSONS

BÓSONS E FÉRMIONS

$$\begin{array}{c|cccc} & |1\rangle & |2\rangle & \cdots & |r\rangle \\ \hline |1\rangle & |1\rangle|1\rangle & |1,2\rangle & \cdots & |1,r\rangle \\ |2\rangle & |2\rangle|1\rangle & |2,2\rangle & & |2,r\rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |r\rangle & |r,1\rangle & |r,2\rangle & \cdots & |r,r\rangle \end{array}$$

REDUNDANTES

JÁ PODEMOS INTRODUZIR A <u>REPRESENTAÇÃO POR NÚMEROS DE OCUPAÇÃO</u>! POR CLAREZA, DIGAMOS QUE HÁ 3 ESTADOS DE PARTÍCULA ÚNICA, $r=3$, INDEXADOS POR 1, 2 OU 3. O PAR DE BÓSONS NO ESTADO $|3,1\rangle_S$ TAMBÉM PODE <u>INEQUIVOCAMENTE</u> SER REPRESENTADO COMO

$|1,0,1\rangle$!!!

BIUNÍVOCA!

$$|3,1\rangle_S \longleftrightarrow |1,0,1\rangle$$

UMA PARTÍCULA NO ESTADO 3

→ PARTÍCULA 2 NO ESTADO 1

→ PARTÍCULA 1 NO ESTADO 3

$$\binom{r+1}{2} \xrightarrow{r=3} \binom{4}{2} = 6 \text{ ESTADOS } \underline{\text{NA}}\ \underline{\text{BASE}} \text{ DE}$$
d_{sym}^{2}

$|1,1\rangle_S = |1,1\rangle \longleftrightarrow |2,0,0\rangle$

$|1,2\rangle_S = |2,1\rangle_S \longleftrightarrow |1,1,0\rangle$

$|1,3\rangle_S = |3,1\rangle_S \longleftrightarrow |1,0,1\rangle$

$|2,2\rangle_S = |2,2\rangle \longleftrightarrow |0,2,0\rangle$

$|2,3\rangle_S = |3,2\rangle_S \longleftrightarrow |0,1,1\rangle$

$|3,3\rangle_S = |3,3\rangle \longleftrightarrow |0,0,2\rangle$

PARA DOIS FÉRMIONS E 3 ESTADOS DE PARTÍCULA ÚNICA, HÁ $\binom{r}{2} \to \binom{3}{2} = 3$ ESTADOS NA BASE DE $\Lambda^2 \mathcal{H}$:

$$\boxed{|m,n\rangle_A \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\{|m,n\rangle - |n,m\rangle\}}$$

$$|1,2\rangle_A \leftrightarrow |1,1,0\rangle$$
$$|1,3\rangle_A \leftrightarrow |1,0,1\rangle$$
$$|2,3\rangle_A \leftrightarrow |0,1,1\rangle$$

NA REPRESENTAÇÃO DE NÚMEROS DE OCUPAÇÃO, CADA ELEMENTO DA BASE DE UM ESPAÇO DE N PARTÍCULAS INDISTINGUÍVEIS PODE SER REPRESENTADO POR UM VETOR $|n_1, \ldots, n_r\rangle$ ONDE

$$\sum_{i=1}^{r} n_i = N$$

E n_i É O NÚMERO DE OCUPAÇÃO DO i-ÉSIMO ESTADO DE PARTÍCULA ÚNICA.

NO CASO DE BÓSONS, $|n_1, \ldots, n_r\rangle$ É SIMÉTRICO POR CONSTRUÇÃO E $n_i = 0, 1, 2, \ldots$

NO CASO DE FERMIONS, $|n_1, \ldots, n_r\rangle$ É ANTISSIMÉTRICO E $n_i \in \{0, 1\}$.

* N PARTÍCULAS

EMBORA DESNECESSÁRIO PARA NOSSO ESTUDO DE GASES QUÂNTICOS IDEAIS, VAMOS COMENTAR A CONSTRUÇÃO DAS SIMETRIAS PARA N PARTÍCULAS.

- BÓSONS

PARA QUALQUER PAR i, j,

$$\boxed{\Psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_j, \ldots, \vec{r}_i, \ldots, \vec{r}_N) = \Psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_i, \ldots, \vec{r}_j, \ldots, \vec{r}_N)}$$

$$\parallel$$

$$\underbrace{P_{ij}}_{\text{OPERADOR DE TRANSPOSIÇÃO}} \Psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_i, \ldots, \vec{r}_j, \ldots, \vec{r}_N)$$

$$\boxed{\psi_S(\vec{r}_1,\dots,\vec{r}_N) \propto \sum_{\pi\in S_N} \psi(\vec{r}_{\pi(1)},\dots,\vec{r}_{\pi(N)})}$$

S_N: GRUPO SIMÉTRICO DAS PERMUTAÇÕES, BIJEÇÕES $\pi:\{1,2,\dots,N\}\to\{1,2,\dots,N\}$.

$$\boxed{\tau_{ij}\in S_N: \quad \begin{array}{l} \tau_{ij}(k)=k, \text{ SE } k\neq i, k\neq j \\ \tau_{ij}(i)=j, \quad \tau_{ij}(j)=i \end{array}}$$

$$P_{ij}\psi(\vec{r}_1,\dots,\vec{r}_N) = \psi(\vec{r}_{\tau_{ij}(1)},\dots,\vec{r}_{\tau_{ij}(N)})$$

- FÉRMIONS

$$\boxed{P_{ij}\psi = -\psi}$$

$$\psi_A \propto \sum_{\pi\in S_N} \underbrace{(-1)^\pi}_{=\begin{cases}+1, & \#\text{PAR } \tau_{ij}\\ -1, & \#\text{ÍMPAR } \tau_{ij}\end{cases}} \psi(\vec{r}_{\pi(1)},\dots,\vec{r}_{\pi(N)})$$

π É COMPOSIÇÃO DE VÁRIOS τ_{ij}.
A PARIDADE É ÚNICA.

SÓ ISSO? NÃO! MESMO QUE N SEJA CONSTANTE, É MUITO CONVENIENTE <u>EXPANDIR</u> PARA O ESPAÇO DE FOCK

$$\boxed{\mathcal{F}^S = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathrm{Sym}^n \mathcal{H}}$$

SIMÉTRICO, PARA BÓSONS, OU

$$\boxed{\mathcal{F}^A = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \Lambda^n \mathcal{H}},$$

PARA FÉRMIONS, POIS VÁRIOS PROCESSOS/OPERADORES FÍSICOS SÃO NATURALMENTE EXPRESSOS EM TERMOS DE OPERADORES DE CRIAÇÃO OU DESTRUIÇÃO QUE MUDAM A QUANTIDADE DE PARTÍCULAS!

NOVAMENTE, FAÇAMOS $r=3$ E IMAGINEMOS $\boxed{\mathcal{F}^A = \sum_{n=0}^{2} \Lambda^n \mathcal{H}}$.

$\Lambda^0 \mathcal{H} \equiv \mathbb{C}$ É O CORPO DOS ESCALARES COMPLEXOS, UM ESPAÇO VETORIAL UNIDIMENSIONAL COM O ESTADO DE VÁCUO

$$|0,0,0\rangle .$$

A BASE DE $\Lambda^1 \mathcal{H} = \mathcal{H}$ É COMPOSTA POR

$$|1,0,0\rangle ,\quad |0,1,0\rangle \quad \text{E} \quad |0,0,1\rangle .$$

JÁ VIMOS QUE A BASE DE $\Lambda^2 \mathcal{H}$ É

$$|1,1,0\rangle ,\quad |1,0,1\rangle \quad \text{E} \quad |0,1,1\rangle .$$

ESSES 7 VETORES CONSTITUEM A BASE DE $\mathcal{F}^A$ E, EM COORDENADAS,

$|0,0,0\rangle \leftrightarrow (1,0,0,0,0,0,0)$

$|1,0,0\rangle \leftrightarrow (0,1,0,0,0,0,0)$

$|0,1,0\rangle \leftrightarrow (0,0,1,0,0,0,0)$

$|0,0,1\rangle \leftrightarrow (0,0,0,1,0,0,0)$

$|1,1,0\rangle \leftrightarrow (0,0,0,0,1,0,0)$

$|1,0,1\rangle \leftrightarrow (0,0,0,0,0,1,0)$

$|0,1,1\rangle \leftrightarrow (0,0,0,0,0,0,1)$