

# Capítulo 18

## Partículas idênticas

Este capítulo trata de sistemas de partículas idênticas (indistinguíveis), uma das principais diferenças entre a mecânica clássica e a mecânica quântica. Três distinções, apresentadas aqui em ordem de abrangência, se destacam: (1) simetria de permutação do hamiltoniano que, como qualquer simetria, leva a degenerescência e regras de seleção; (2) simetria de permutação de todos os observáveis, que leva a uma regra de superseleção; (3) o postulado de simetrização, que restringe o estado de um tipo específico de partícula ser simétrico (bóson) ou anti-simétrico (férmion).

### 18.1 Simetria de permutação

Todos os elétrons, prótons, nêutrons etc. são idênticos em todas as suas propriedades. Duas situações físicas cuja única diferença é a troca de partículas idênticas são completamente indistinguíveis. Uma das consequências disso é que *todo hamiltoniano deve ser invariante perante as permutações de partículas idênticas*.

#### 18.1.1 Sistemas de duas partículas

Considere um sistema de duas partículas idênticas. Os vetores da base do espaço de estados devem ser construídos pelo produto de vetores de partículas individuais, como por exemplo  $|\alpha\rangle|\beta\rangle = |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$ . Nessa notação, a ordem dos fatores formalmente distingue as duas partículas. Um vetor arbitrário no espaço de estados de duas partículas é da forma:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha,\beta} C_{\alpha,\beta} |\alpha\rangle|\beta\rangle, \quad (18.1)$$

e uma função de estado no espaço de configuração de duas partículas será da forma:

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = (\langle \mathbf{x}_1 | \otimes \langle \mathbf{x}_2 |) | \Psi \rangle = \sum_{\alpha, \beta} C_{\alpha, \beta} \langle \mathbf{x}_1 | \alpha \rangle \langle \mathbf{x}_2 | \beta \rangle. \quad (18.2)$$

A seguir definimos um operador de permutação  $P_{12}$  que troca a ordem das partículas:

$$P_{12} |\alpha\rangle |\beta\rangle = |\beta\rangle |\alpha\rangle. \quad (18.3)$$

Esse operador satisfaz:

$$P_{12} = P_{12}^{-1}, \quad P_{12} = P_{12}^\dagger, \quad P_{12} P_{12}^\dagger = \mathbf{1}, \quad P_{12}^2 = \mathbf{1}, \quad (18.4)$$

ou seja, é inverso de si mesmo, unitário e hermitiano. Seu efeito em uma função de estado é dado por:

$$P_{12} \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1). \quad (18.5)$$

Devido à propriedade:  $P_{12}^2 = \mathbf{1}$  os autovalores de  $P_{12}$  são  $\pm 1$  e, portanto, suas autofunções podem ser simétricas ou antissimétricas:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) &= \Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1), & \text{simétrica,} \\ \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) &= -\Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1), & \text{antissimétrica.} \end{aligned} \quad (18.6)$$

Como  $H$  e  $P_{12}$  comutam, existe uma base de autovetores comuns a ambos. Sendo assim, devido à simetria das autofunções de  $P_{12}$ , as autofunções de  $H$  podem ser divididas em simétricas e antissimétricas.

### 18.1.2 Sistemas de três partículas

Para sistemas com mais de duas partículas, a análise fica mais complexa. Vejamos o exemplo de um sistemas de três partículas idênticas. O estado da base será dado por  $|\alpha\rangle |\beta\rangle |\gamma\rangle$ . Agora, em vez de um só, temos seis possibilidades de permutação dos elementos:

$$\begin{aligned} P_{12} |\alpha\rangle |\beta\rangle |\gamma\rangle &= |\beta\rangle |\alpha\rangle |\gamma\rangle, & P_{23} |\alpha\rangle |\beta\rangle |\gamma\rangle &= |\alpha\rangle |\gamma\rangle |\beta\rangle, \\ P_{31} |\alpha\rangle |\beta\rangle |\gamma\rangle &= |\gamma\rangle |\beta\rangle |\alpha\rangle, & P_{123} |\alpha\rangle |\beta\rangle |\gamma\rangle &= |\gamma\rangle |\alpha\rangle |\beta\rangle, \\ P_{123}^2 |\alpha\rangle |\beta\rangle |\gamma\rangle &= |\beta\rangle |\gamma\rangle |\alpha\rangle, & \mathbf{1} |\alpha\rangle |\beta\rangle |\gamma\rangle &= |\alpha\rangle |\beta\rangle |\gamma\rangle, \end{aligned} \quad (18.7)$$

onde o sexto e último operador de permutação é o operador identidade  $\mathbf{1}$ . Note que os operadores acima não comutam entre si, logo não é possível que cada autovetor de  $H$  seja simétrico ou antissimétrico por troca de partículas. Por isso é comum falarmos em **subespaços invariantes**, dentro dos quais

qualquer operação de permutação leva um vetor em outro pertencente ao mesmo subespaço.

Os vetores da base  $|\alpha\rangle|\beta\rangle|\gamma\rangle$  e as permutações (18.7) abrangem um espaço de dimensão seis. Esse espaço pode ser reduzido a quatro subespaços invariantes, gerados pelos vetores abaixo, todos eles mutuamente ortogonais:

Simétrico:

$$\frac{1}{\sqrt{6}}[|\alpha\rangle|\beta\rangle|\gamma\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle|\gamma\rangle + |\alpha\rangle|\gamma\rangle|\beta\rangle + |\gamma\rangle|\beta\rangle|\alpha\rangle + |\gamma\rangle|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\gamma\rangle|\alpha\rangle]$$

Antissimétrico:

$$\frac{1}{\sqrt{6}}[|\alpha\rangle|\beta\rangle|\gamma\rangle - |\beta\rangle|\alpha\rangle|\gamma\rangle - |\alpha\rangle|\gamma\rangle|\beta\rangle - |\gamma\rangle|\beta\rangle|\alpha\rangle + |\gamma\rangle|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\gamma\rangle|\alpha\rangle]$$

Parcialmente simétrico:

$$\frac{1}{\sqrt{12}}[2|\alpha\rangle|\beta\rangle|\gamma\rangle + 2|\beta\rangle|\alpha\rangle|\gamma\rangle - |\alpha\rangle|\gamma\rangle|\beta\rangle - |\gamma\rangle|\beta\rangle|\alpha\rangle - |\gamma\rangle|\alpha\rangle|\beta\rangle - |\beta\rangle|\gamma\rangle|\alpha\rangle]$$

$$\frac{1}{2}[0 + 0 - |\alpha\rangle|\gamma\rangle|\beta\rangle + |\gamma\rangle|\beta\rangle|\alpha\rangle + |\gamma\rangle|\alpha\rangle|\beta\rangle - |\beta\rangle|\gamma\rangle|\alpha\rangle]$$

Parcialmente simétrico:

$$\frac{1}{2}[0 + 0 - |\alpha\rangle|\gamma\rangle|\beta\rangle + |\gamma\rangle|\beta\rangle|\alpha\rangle - |\gamma\rangle|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\gamma\rangle|\alpha\rangle]$$

$$\frac{1}{\sqrt{12}}[2|\alpha\rangle|\beta\rangle|\gamma\rangle - 2|\beta\rangle|\alpha\rangle|\gamma\rangle + |\alpha\rangle|\gamma\rangle|\beta\rangle + |\gamma\rangle|\beta\rangle|\alpha\rangle - |\gamma\rangle|\alpha\rangle|\beta\rangle - |\beta\rangle|\gamma\rangle|\alpha\rangle]$$

O subespaço simétrico é invariante por todas as permutações da equação (18.7). O subespaço antissimétrico muda de sinal pelas trocas de pares ( $P_{12}$ ,  $P_{23}$  e  $P_{31}$ ) e é mantido o mesmo para as permutações  $P_{123}$  e  $P_{123}^2$ , pois estas podem ser obtidas por duas operações sucessivas de trocas de duas partículas. Já os estados “parcialmente simétricos” não são nem simétricos nem anti-simétricos sob todas as operações de permutação.

Como o hamiltoniano do sistema comuta com os operadores de permutação, é possível formar autovetores comuns a todos os operadores apenas nos subespaços invariantes (e não no espaço todo). Então os estados estacionários são classificados pelo seu tipo de simetria sob a operação de permutação. Indo além: essa simetria é mantida para qualquer interação invariante por permutação.

A generalização dos operadores de permutação em espaços com mais do que três partículas pode ser feita através da teoria de representação de grupos, ou teoria de grupos, usando-se o chamado **grupo de permutações**. A seis permutações possíveis de três elementos descrita aqui foi discutida no item “Grupos”, no capítulo de Introdução.

## 18.2 Indistinguibilidade de partículas

Se um conjunto de partículas é indistinguível, então o seu Hamiltoniano será invariante sob a permutação de partículas. Mas a recíproca não é verdadeira. Como exemplo, o hamiltoniano do positrônio:  $H = (P_e + P_p)^2/2M - e^2/r$  é invariante perante a troca de partículas, as conclusões da seção anterior se aplicam a ele mas, obviamente, o elétron e o pósitron não são partículas idênticas.

Disto têm-se o importante **princípio de indistinguibilidade**: *estados dinâmicos que diferem apenas pela permutação de partículas idênticas não podem ser distinguidos por nenhum processo de observação.*

Seja  $A$  um operador que representa uma variável dinâmica observável e  $|\Psi\rangle$  um estado do sistema de partículas idênticas, que é invariante sob a permutação de duas partículas  $i$  e  $j$ ,  $P_{ij}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$ . Temos que:

$$\langle\Psi|A|\Psi\rangle = (\langle\Psi|P_{ij}^\dagger)A(P_{ij}|\Psi\rangle), \quad (18.8)$$

e, conseqüentemente,  $A = P_{ij}^\dagger A P_{ij}$ . Considerando (18.4), podemos deduzir:

$$P_{ij}A = AP_{ij}. \quad (18.9)$$

Como  $A$  representa um observável arbitrário, então nós mostramos que todos os observáveis físicos devem ser invariantes sob permutação de partículas. Como o próprio hamiltoniano  $H$  é um observável e invariante por permutação, todas as discussões da seção anterior valem para ele. Mas, adicionalmente a todo o arcabouço teórico da seção 18.1, também há uma chamada **regra de superseleção**: *interferência entre estados de diferentes simetrias de permutação não são observáveis.*

Para provar isso, considere dois estados,  $|s\rangle$  para um vetor simétrico e  $|a\rangle$  para um vetor antissimétrico. Para qualquer observável  $A$  temos:

$$\langle s|P_{ij}A|a\rangle = \langle s|AP_{ij}|a\rangle \Rightarrow \langle s|A|a\rangle = -\langle s|A|a\rangle, \quad (18.10)$$

que é possível se, e somente se,  $\langle s|A|a\rangle = 0$ . O mesmo resultado vale se o estado for uma superposição  $|\Psi\rangle = |s\rangle + c|a\rangle$ , para o qual teremos:

$$\langle\Psi|A|\Psi\rangle = \langle s|A|s\rangle + \langle a|A|a\rangle, \quad (18.11)$$

que é independente de fase pois  $\langle s|A|a\rangle = 0$ . Mesmo nesse caso, onde há uma superposição de estados simétricos e antissimétricos, não haveria qualquer interferência a ser observada. Messiah e Greenberg [77] usaram a teoria de grupos para generalizar esses resultados a qualquer tipo de simetria de permutação, incluindo as simetrias parciais.

## 18.3 O postulado de simetrização

O postulado de indistinguibilidade que mencionamos na seção anterior é um resultado paralelo aos postulados da M.Q., não sendo possível demonstrá-lo a partir dos mesmos. Nessa seção demonstraremos um resultado ainda mais forte, o **postulado da simetrização**:

- (a) Partículas cujo spin é um múltiplo inteiro de  $\hbar$  têm apenas estados simétricos (essas partículas são chamadas de **bósons**).
- (b) Partículas cujo spin é um múltiplo semi-inteiro ímpar de  $\hbar$  têm apenas estados antissimétricos (essas partículas são chamadas de **férmions**).
- (c) Estados parcialmente simétricos não existem.

É justamente o último item desse postulado que invalida a interferência entre estados de tipos diferentes de simetria. Nenhuma dessas três afirmações do postulado de simetrização podem ser deduzidas dos outros postulados da M.Q. (§2.1).

Uma consequência importante do postulado da simetrização fica evidente quando consideramos, por exemplo, a função antissimétrica de três partículas do exemplo 18.1.2:

$$\Psi_{\alpha\beta\gamma} = \frac{1}{\sqrt{6}}[|\alpha\rangle|\beta\rangle|\gamma\rangle - |\beta\rangle|\alpha\rangle|\gamma\rangle - |\alpha\rangle|\gamma\rangle|\beta\rangle - |\gamma\rangle|\beta\rangle|\alpha\rangle + |\gamma\rangle|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\gamma\rangle|\alpha\rangle],$$

façamos  $\alpha = \beta$  e, nesse caso,  $\Psi_{\beta\beta\gamma} = 0$ . Esse resultado vale para qualquer estado antissimétrico e é a essência do **princípio de exclusão de Pauli**, que diz que em um sistema de férmions, não pode existir duas partículas com os mesmos números quânticos. Esse princípio de exclusão é a base da teoria de estrutura atômica e espectros atômicos, uma forte evidência empírica do caráter fermiônico dos elétrons.

Uma outra evidência que sustenta o postulado de simetrização é o processo de **espalhamento de partículas idênticas**. Os dois processos de espalhamento da figura 18.1 são indistinguíveis se as partículas são idênticas e, portanto, a seção de choque de espalhamento real será uma combinação de ambos processos.

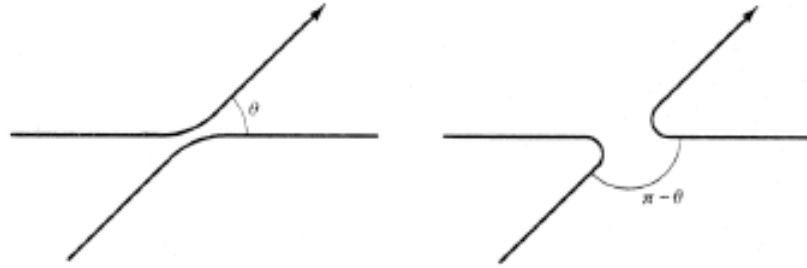


Figura 18.1: Processo de espalhamento de duas partículas idênticas. Extraído de [2].

A função de onda usual para um processo de espalhamento possui a seguinte forma assintótica:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}, \quad (18.12)$$

em que  $r$  é a coordenada relativa das duas partículas. A seção de choque de espalhamento diferencial é definida por  $\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2$ . Porém, se as duas partículas forem idênticas, é necessário que a função de onda espacial seja simétrica ou antissimétrica perante a troca de partículas e, após fazermos essa simetrização, teremos:

$$\begin{aligned} \sigma(\theta) &= |f(\theta) \pm f(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 \pm 2\Re[f^*(\theta)f(\pi - \theta)]. \end{aligned} \quad (18.13)$$

O sinal  $+$  se aplica a partículas de spin  $1/2$  num estado de singlete e o sinal  $-$  se aplica a partículas de spin  $1/2$  num estado de tripleto. Os dois primeiros termos são as seções de choque diferenciais se as partículas fossem distinguíveis, enquanto que o último termo é uma consequência do postulado de simetrização.

## 18.4 Operadores de criação e aniquilação

O postulado de simetrização restringe os estados das espécies de partículas a possuírem um tipo único de simetria, seja simétrico ou antissimétrico. Isso simplifica bastante a teoria de estados de muitas partículas e nos permite desenvolver um formalismo elegante envolvendo os operadores de criação e aniquilação.

A base de vetores ortonormais do espaço de estados (usualmente chamado de espaço de Fock) consiste de: o estado de vácuo,  $|0\rangle$ ; um conjunto completo de vetores de estado de uma partícula,  $\{|\phi_\alpha\rangle : (\alpha = 1, 2, 3 \dots)\}$  em que  $\alpha$  não é senão uma abreviação para todos os números quânticos necessários para especificar o estado; um conjunto completo de vetores de estado de duas partículas, etc. Há algumas diferenças técnicas em tratar estados fermiônicos e bosônicos e, por isso, iremos tratá-los separadamente.

### 18.4.1 Férmions

Definimos o operador criação como sendo dado por:

$$C_\alpha^\dagger|0\rangle = |\alpha\rangle = |\phi_\alpha\rangle, \quad (18.14)$$

$$C_\alpha^\dagger|\beta\rangle = C_\alpha^\dagger C_\beta^\dagger|0\rangle = |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle = |\alpha\beta\rangle = -|\beta\alpha\rangle \quad (18.15)$$

$$C_\alpha^\dagger|\beta\gamma\rangle = C_\alpha^\dagger C_\beta^\dagger C_\gamma^\dagger|0\rangle = |\alpha\beta\gamma\rangle, \quad (18.16)$$

e assim sucessivamente. Em (18.15) explicitamos o produto  $\otimes$  para deixar claro o ordenamento dos estados criados pelas operações sucessivas do operador  $C^\dagger$ . Esse estados são definidos como sendo antissimétricos para qualquer troca de argumentos adjacentes. O exemplo de três partículas que apresentamos na subseção 18.1.2 corresponde ao estado  $|\alpha\beta\gamma\rangle$ . A sequência infinita de equações (18.14)-(18.16) pode ser resumida por:

$$C_\alpha^\dagger|\dots\rangle = |\alpha\rangle \otimes |\dots\rangle = |\alpha\dots\rangle, \quad (18.17)$$

em que os três pontos indicam exatamente o mesmo conjunto de parâmetros de ambos lados. Na representação de coordenadas:

$$\langle \mathbf{x}|\alpha\rangle = \phi_\alpha(\mathbf{x}) \quad \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2|\alpha\beta\rangle = \frac{\phi_\alpha(\mathbf{x}_1)\phi_\beta(\mathbf{x}_2) - \phi_\beta(\mathbf{x}_1)\phi_\alpha(\mathbf{x}_2)}{\sqrt{2}}. \quad (18.18)$$

Um resultado importante a partir da relação geral (18.17) é:

$$C_\alpha^\dagger|\alpha\dots\rangle = 0, \quad (18.19)$$

que não é senão o princípio de exclusão de Pauli. Podemos escrever relações gerais para o operador criação,  $C_\alpha^\dagger$ , da seguinte forma:

$$\langle \alpha\dots|C_\alpha^\dagger|\dots(\sim\alpha)\rangle = 1, \quad (18.20)$$

$$\langle \psi|C_\alpha^\dagger|\dots(\sim\alpha)\rangle = 0, \quad \text{se} \quad \langle \psi|\alpha\dots\rangle = 0, \quad (18.21)$$

onde a escrita  $\sim \alpha$  significa que  $\alpha$  não está ocupado. Definido o operador  $C_\alpha^\dagger$  podemos definir o seu dual,  $C_\alpha$ , da seguinte forma:

$$\langle \alpha \cdots | C_\alpha = 0, \quad (18.22)$$

de forma a satisfazer o princípio de exclusão também. Além disso, ele também satisfaz:

$$\langle (\sim \alpha) \cdots | C_\alpha^\dagger | \alpha \cdots \rangle = 1, \quad \langle (\sim \alpha) \cdots | C_\alpha^\dagger | \psi \rangle = 0, \quad (18.23)$$

de forma análoga ao caso para o operador criação. Disto podemos deduzir que:

$$C_\alpha | 0 \rangle = 0, \quad (18.24)$$

ou seja,  $C_\alpha$  é de fato um operador aniquilação para férmions<sup>1</sup>. Então, para esse operador, é válido que:

$$C_\alpha | \alpha \cdots \rangle = | \cdots (\sim \alpha) \rangle, \quad (18.25)$$

e também:

$$C_\alpha | \cdots (\sim \alpha) \rangle = 0. \quad (18.26)$$

Para resumir: o operador  $C_\alpha$  esvazia um orbital  $\alpha$  se estiver ocupado ou o destrói o vetor se o orbital  $\alpha$  estiver vazio; o operador  $C_\alpha^\dagger$  cria um orbital  $\alpha$  se estiver vazio ou o destrói o vetor se o orbital  $\alpha$  estiver ocupado.

Para a operação dupla do mesmo operador, pelo princípio de exclusão, deve valer:

$$C_\alpha^\dagger C_\alpha^\dagger = 0, \quad (18.27)$$

e para o adjunto:

$$C_\alpha C_\alpha = 0. \quad (18.28)$$

Para a combinação de operadores  $C_\alpha^\dagger C_\beta^\dagger + C_\beta^\dagger C_\alpha^\dagger = \{C_\alpha^\dagger, C_\beta^\dagger\}$ , chamado de anticomutador, vale que:

$$(C_\alpha^\dagger C_\beta^\dagger + C_\beta^\dagger C_\alpha^\dagger) | \psi \rangle = | \alpha \beta \psi \rangle + | \beta \alpha \psi \rangle = | \alpha \beta \psi \rangle - | \alpha \beta \psi \rangle = 0, \quad (18.29)$$

logo:  $\{C_\alpha^\dagger, C_\beta^\dagger\} = 0$  e, conseqüentemente,  $\{C_\alpha, C_\beta\} = 0$ .

Considerando, agora, o anticomutador de um operador criação e um operador aniquilação, precisamos considerar o efeito em um vetor de estado

---

<sup>1</sup>Note que não devemos confundir os operadores criação e aniquilação fermiônicos definidos nessa seção com aqueles que definimos para resolver o oscilador harmônico no capítulo 6. Estes serão análogos aos operadores de criação e destruição de bósons, que veremos em §18.4.3.



da forma  $|\alpha \cdots (\sim \beta)\rangle$  para o caso  $\alpha \neq \beta$ , e o efeito para o caso  $\alpha = \beta$ , onde devemos considerar os casos em que  $\alpha$  está ocupado ou não. Com isso é possível mostrar que:

$$C_\alpha C_\beta^\dagger + C_\beta^\dagger C_\alpha = \delta_{\alpha\beta} \mathbf{1}. \quad (18.30)$$

Todos os vetores da base de Fock são autovetores do operador  $C_\alpha^\dagger C_\alpha$  e, por isso,  $C_\alpha^\dagger C_\alpha$  é o operador número para o orbital  $\alpha$ , com autovalores iguais a 1 (ocupado) ou 0 (desocupado). O operador número total é dado por:

$$N = \sum_\alpha C_\alpha^\dagger C_\alpha. \quad (18.31)$$

### 18.4.2 Mudanças de base

Os operadores de criação e aniquilação foram definidos com respeito a uma base particular,  $C_\alpha^\dagger|0\rangle = |\alpha\rangle$ , correspondendo à função  $\phi_\alpha(\mathbf{x})$ . Podemos ter outra base onde  $b_j^\dagger|0\rangle = |j\rangle$ , correspondendo à função  $f_j(\mathbf{x})$ . Os dois conjuntos de funções são completos e ortogonais. Uma base pode ser escrita como uma transformação linear da outra, na seguinte forma:

$$f_j(\mathbf{x}) = \sum_\alpha \phi_\alpha(\mathbf{x}) \langle \alpha | j \rangle, \quad (18.32)$$

e para os operadores criação e aniquilação teremos:

$$b_j^\dagger = \sum_\alpha C_\alpha^\dagger \langle \alpha | j \rangle, \quad b_j = \sum_\alpha \langle j | \alpha \rangle C_\alpha. \quad (18.33)$$

Para ilustrar essa mudança de base, considere a família de operadores que criam autovetores de posição:

$$\Psi^\dagger(\mathbf{x})|0\rangle = |\mathbf{x}\rangle. \quad (18.34)$$

Usando a relação (18.33) encontramos:

$$\Psi^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_\alpha C_\alpha^\dagger \langle \alpha | \mathbf{x} \rangle, \quad \Psi(\mathbf{x}) = \sum_\alpha \langle \mathbf{x} | \alpha \rangle C_\alpha. \quad (18.35)$$

Agora,  $\langle \mathbf{x} | \alpha \rangle = \phi_\alpha(\mathbf{x})$  não é senão a base original na representação de coordenadas, então:

$$\Psi^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_\alpha [\phi_\alpha(\mathbf{x})]^* C_\alpha^\dagger, \quad \Psi(\mathbf{x}) = \sum_\alpha \phi_\alpha(\mathbf{x}) C_\alpha. \quad (18.36)$$

Esses dois novos operadores, definidos na equação (18.36), que criam e aniquilam em um ponto do espaço são chamados operadores de campo. E

o produto  $\Psi^\dagger(\mathbf{x})\Psi(\mathbf{x})$  é o operador densidade número<sup>2</sup> e o operador número total é dado por:

$$N = \int \Psi^\dagger(\mathbf{x})\Psi(\mathbf{x})d^3x. \quad (18.37)$$

Embora tenhamos empregado o nome “campo”, isso não significa que fizemos uma transição da M.Q. para a Teoria Quântica de Campos (que é uma transição muito mais sutil e complicada em alguns casos). Essa construção, entretanto, fornece uma analogia matemática entre a mecânica quântica de partículas e a teoria quântica de campos.

### 18.4.3 Bósons

A construção da base do espaço de Fock para bósons é similar àquela que fizemos para férmions, com a diferença de que os estados de muitos bósons são simétricos sob permutação de duas partículas. Desta forma, o princípio de exclusão de Pauli não se aplica, a ocupação múltipla em um mesmo estado quântico é permitida, e é necessário especificar o grau de ocupação de cada orbital. Se uma partícula única possui vetores da base como o conjunto de orbitais  $\{|\phi_\alpha\rangle : (\alpha = 1, 2, 3 \dots)\}$ , denotaremos o vetor de estado de muitos bósons por  $|n_1, n_2, n_3 \dots\rangle$ , em que o inteiro não negativo  $n_\alpha$  denota o grau de ocupação do orbital  $\phi_\alpha$ .

Defini-se o operador criação da seguinte forma:

$$\begin{aligned} a_\alpha^\dagger|0\rangle &= |\phi_\alpha\rangle = |0, 0, \dots, n_\alpha = 1, 0, \dots\rangle \\ a_\alpha^\dagger|n_1, n_2, \dots, n_\alpha, \dots\rangle &= \sqrt{n_\alpha + 1}|n_1, n_2, \dots, n_\alpha + 1, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (18.38)$$

Para o operador aniquilação, podemos seguir passos semelhantes aos da subseção §18.4.1 e encontra-se:

$$\begin{aligned} a_\alpha|\phi_\alpha\rangle &= |0\rangle, \\ a_\alpha|n_1, n_2, \dots, n_\alpha, \dots\rangle &= \sqrt{n_\alpha}|n_1, n_2, \dots, n_\alpha - 1, \dots\rangle, (n_\alpha > 0) \end{aligned} \quad (18.39)$$

$$a_\alpha|n_1, n_2, \dots, n_\alpha = 0, \dots\rangle = 0. \quad (18.40)$$

As constantes de proporcionalidade  $\sqrt{n_\alpha + 1}$  para  $a_\alpha^\dagger$  e  $\sqrt{n_\alpha}$  para  $a_\alpha$  são obtidas algebricamente tomando valores esperados com o estado dual das equações (18.38) e (18.39). Diferentemente dos férmions, os bósons satisfazem a uma relação de comutação:

$$a_\alpha a_\beta^\dagger - a_\beta^\dagger a_\alpha = \delta_{\alpha\beta} \mathbf{1}. \quad (18.41)$$

<sup>2</sup>Não confundir com o operador de estado  $\rho$ .

Note que os operadores criação e aniquilação para os bósons são isomórficos aos operadores criação e aniquilação que definimos para o oscilador harmônico, no capítulo 6. O fônon, quantum de excitação vibracional, é uma quase-partícula que carrega apenas momento linear, seu spin é nulo, e portanto são bósons.

#### 18.4.4 Representação de operadores - segunda quantização

Os processos de mudança de base, equação (18.33), podem ser utilizados para descrever variáveis dinâmicas do sistema em função dos operadores criação e aniquilação. Como muito do formalismo de férmions e bósons é similar, apresentaremos a representação de operadores nessa seção apenas para férmions, pois nesse caso temos que ter um cuidado adicional com os sinais de mais e menos que aparecem devido às relações de anti-comutação. Tratamentos análogos para bósons podem ser feitos de forma até mais simples, por não haver a preocupação com o sinal.

As variáveis dinâmicas mais simples possíveis neste contexto são aquelas que são aditivas para uma única partícula. Alguns exemplos de operadores aditivos de uma partícula são:

$$\text{Momento: } \sum_{i=1}^n \mathbf{P}_i, \quad (18.42)$$

$$\text{Energia cinética: } \sum_{i=1}^n -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_i^2, \quad (18.43)$$

$$\text{Potencial externo: } \sum_{i=1}^n W(x_i), \quad (18.44)$$

$$\text{Forma geral: } R = \sum_{i=1}^n R_i. \quad (18.45)$$

Em cada um destes casos, a ação do operador criação ou aniquilação seria adicionar ou remover uma partícula com: momento  $\mathbf{P}_i$  (18.42); uma dada energia cinética (18.43); uma dada de energia potencial (18.44); uma propriedade qualquer  $R_i$  (18.45).

A forma convencional de tais operadores é uma soma de operadores, cada um deles atuando num espaço de partículas individuais. Porém, essas partículas são indistinguíveis e qualquer rótulo que dermos a elas será ausente de qualquer significado. Por isso, a representação de operadores de partícula única em termos de operadores criação e aniquilação será:

$$R = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \langle \phi_{\alpha} | R_1 | \phi_{\beta} \rangle C_{\alpha}^{\dagger} C_{\beta}. \quad (18.46)$$

Este formalismo onde os estados são representados em bases dos estados de Fock e os operadores (variáveis dinâmicas) são descritos em função dos operadores de criação e aniquilação é chamado de **segunda quantização**<sup>3</sup>. Nesse formalismo os operadores são independentes do número de partículas.

A equivalência entre (18.45) e (18.46) pode ser demonstrada através de um procedimento de mudança de base (18.33), escolhendo-se uma base  $\{f_k\}$  que diagonaliza o operador  $R_1|f_k\rangle = r_k|f_k\rangle$ , demonstrando que neste caso  $R = \sum_k r_k b_k^\dagger b_k$ . O operador  $R$  é então descrito por uma matriz diagonal com seus elementos dados por  $r_k n_k$ , onde  $n_k$  é a ocupação do orbital  $f_k$ , e o número total de partículas é  $n = \sum_k n_k$ .

Em sequência de simplicidade, o próximo tipo de operadores são os que adicionam partículas aos pares. O mais importante exemplo desse tipo de operadores são os potenciais de interação entre duas partículas. Estes operadores têm a forma:

$$V = \sum_{i < j} v(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j), \quad (18.47)$$

onde assumimos que não há auto-interação ( $i \neq j$ ). A representação desses operadores em segunda quantização é:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \sum_{\gamma} \sum_{\delta} v_{\alpha\beta,\gamma\delta} C_{\alpha}^{\dagger} C_{\beta}^{\dagger} C_{\delta} C_{\gamma}. \quad (18.48)$$

A ordem dos dois últimos operadores está trocada em relação aos elementos de matriz devido à relação de anti-comutação (ou  $|\alpha\beta\rangle = -|\beta\alpha\rangle$ ). O elemento de matriz é calculado da seguinte forma:

$$v_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \int \int \phi_{\alpha}^*(\mathbf{x}_1) \phi_{\beta}^*(\mathbf{x}_2) v(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \phi_{\gamma}(\mathbf{x}_1) \phi_{\delta}(\mathbf{x}_2) d^3x_1 d^3x_2. \quad (18.49)$$

É possível reescrever a equação (18.48) em uma forma simetrizada escolhendo uma base diagonal com  $\alpha = \gamma$  e  $\beta = \delta$ , de forma que:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \sum_{\beta \neq \gamma} \sum_{\delta} \langle \alpha\beta | v | \alpha\beta \rangle C_{\alpha}^{\dagger} C_{\beta}^{\dagger} C_{\beta} C_{\alpha}, \quad (18.50)$$

onde utilizamos a relação de anti-simetria:

$$\langle \alpha\beta | v(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) | \gamma\delta \rangle = v_{\alpha\beta,\gamma\delta} - v_{\alpha\beta,\delta\gamma}. \quad (18.51)$$

<sup>3</sup>O nome tem raízes históricas e é enganoso. Não se está quantizando algo pela segunda vez. O processo de segunda quantização quantiza campos antes considerados classicamente, como o caso do campo eletromagnético tratado no capítulo 15. O tratamento da interação luz-matéria sem segunda quantização é dito semiclássico, enquanto o tratamento com segunda quantização é dito completamente quântico.

**Exemplo 29** Um exemplo interessante da interação em pares é aquele que depende apenas da posição relativa entre duas partículas:  $v(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = v(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)$ . A invariância de translação da interação faz que seja conveniente a escolha de autofunções de momento como vetores da base,  $\phi_\alpha(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-3/2} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$ . Antes da interação os momentos das partículas, em unidades de  $\hbar$ , são  $\mathbf{k}_\gamma$  e  $\mathbf{k}_\delta$ , e após a interação são  $\mathbf{k}_\alpha$  e  $\mathbf{k}_\beta$ . Usando as coordenadas relativas e do centro de massa:  $\mathbf{R} = (\mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_1)/2$  e  $\mathbf{r} = \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1$  os elementos de matriz da equação (18.49) serão dados por:

$$\begin{aligned} v_{\alpha\beta,\gamma\delta} &= (2\pi)^{-6} \int \int \exp\left\{i\left[-\mathbf{k}_\alpha \cdot \left(\mathbf{R} - \frac{1}{2}\mathbf{r}\right) - \mathbf{k}_\beta \cdot \left(\mathbf{R} + \frac{1}{2}\mathbf{r}\right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \mathbf{k}_\gamma \cdot \left(\mathbf{R} - \frac{1}{2}\mathbf{r}\right) + \mathbf{k}_\delta \cdot \left(\mathbf{R} + \frac{1}{2}\mathbf{r}\right)\right]\right\} d^3r d^3R \\ &= (2\pi)^{-3} \int \exp[-i\mathbf{R} \cdot (\mathbf{k}_\alpha + \mathbf{k}_\beta - \mathbf{k}_\gamma - \mathbf{k}_\delta)] d^3R \\ &\quad \times (2\pi)^{-3} \int \exp\left[-i\frac{1}{2}\mathbf{r} \cdot (\mathbf{k}_\gamma - \mathbf{k}_\alpha + \mathbf{k}_\beta - \mathbf{k}_\delta)\right] d^3r \\ &= \delta(\mathbf{k}_\alpha + \mathbf{k}_\beta - \mathbf{k}_\gamma - \mathbf{k}_\delta) \tilde{v}(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (18.52)$$

onde a função  $\delta$  implica em conservação de momento linear total na interação, e  $\mathbf{q} = \mathbf{k}_\gamma - \mathbf{k}_\alpha = \mathbf{k}_\beta - \mathbf{k}_\delta$  é o momento linear trocado entre as partículas na interação. O termo  $\tilde{v}(\mathbf{q}) = (2\pi)^{-3} \int \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) v(r) d^3r$  é a transformada de Fourier de  $v(r)$ .

A interação com a transferência de momento  $\mathbf{q}$  entre as partículas está representada na figura 18.2. Em segunda quantização, o processo é descrito pela destruição das partículas de momento  $\mathbf{k}_\gamma$  e  $\mathbf{k}_\delta$  e a criação de partículas com momentos  $\mathbf{k}_\alpha$  e  $\mathbf{k}_\beta$ .

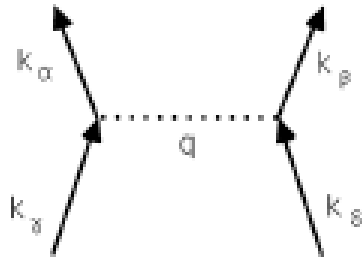


Figura 18.2: Gráfico que representa a interação de duas partículas. Extraído de [2].

### 18.4.5 Teorema de Wick

Como no exemplo de interação de duas partículas descritas na seção anterior, o ordenamento dos operadores de criação e destruição é importante na correta descrição do processo. É comum que o ordenamento de interesse siga o chamado **produto normal** de operadores, operação em que todos os operadores criação são ordenados à esquerda de todos os operadores aniquilação. Se os operadores forem fermiônicos, a operação de ordenamento normal acarreta em um fator  $(-1)$  que multiplica o produto a cada permuta de dois operadores. Para bósons esse sinal é desnecessário. Denotando a operação produto normal por  $N$ , temos:

$$N(a_\alpha a_\alpha^\dagger) = a_\alpha^\dagger a_\alpha, \quad (\text{bósons}), \quad N(C_\alpha C_\alpha^\dagger) = -C_\alpha^\dagger C_\alpha, \quad (\text{férmions}). \quad (18.53)$$

Como veremos a seguir, o produto de operadores pode ser escrito em função de produtos normais e das chamadas **contrações** de operadores, definidas como sendo o valor esperado de vácuo:

$$\langle AB \rangle_0 = \langle 0|AB|0 \rangle. \quad (18.54)$$

É trivial perceber que a única construção não nula é aquela de ordenamento antinormal:

$$\langle C_\alpha C_\alpha^\dagger \rangle_0 = \langle 0|C_\alpha C_\alpha^\dagger|0 \rangle \neq 0, \quad (18.55)$$

e o mesmo vale para bósons.

Com isso estamos em condição de enunciar o seguinte teorema:

**Teorema 17 (Teorema de Wick)** *Um produto ordinário de um número finito de operadores criação e aniquilação é igual à soma de todos os produtos normais para os quais  $0, 1, 2, \dots$ , contrações foram removidas em todas as maneiras possíveis.*

Para tornar esse enunciado mais compreensível, apresentamos alguns exemplos a seguir. A demonstração será omitida e poderá ser encontrada em [2]. Para dois operadores, o teorema de Wick é da forma:

$$AB = N(AB) + \langle AB \rangle_0. \quad (18.56)$$

O leitor é convidado a provar que esta fórmula vale para qualquer combinação de  $A$  e  $B$  como operadores de criação ou aniquilação.

Para quatro operadores fermiônicos, o teorema de Wick fica dado por:

$$\begin{aligned} ABCD &= N(ABCD) + N(AB)\langle CD \rangle_0 - N(AC)\langle BD \rangle_0 + N(BC)\langle AD \rangle_0 \\ &\quad + N(AD)\langle BC \rangle_0 - N(BD)\langle AC \rangle_0 + N(CD)\langle AB \rangle_0 \\ &= \langle AB \rangle_0 - \langle AC \rangle_0 \langle BD \rangle_0 + \langle AD \rangle_0 \langle BC \rangle_0. \end{aligned} \quad (18.57)$$

Como já explicitado, os sinais de menos que aparecem são devidos a permutações dos operadores que são necessárias para simplificar a expressão. Uma expressão similar, mas com todos os sinais de mais vale para operadores bosônicos.

O teorema de Wick permite simplificar expressões que inicialmente seriam mais complicadas. É sempre melhor expressar produtos de  $n$  operadores em produtos de operadores de apenas dois termos. Além disso, se estamos interessados em calcular valor esperados de vácuo de um produto grande de operadores, o teorema de Wick é ainda mais simplificado (pois  $\langle N(ABC \dots) \rangle_0 = 0$ , por definição).

Além dos operadores de criação/aniquilação de fônons do capítulo 6, os fótons construídos no capítulo 15 através da quantização do campo eletromagnético são exemplo de quanta de excitação criadas por operadores bosônicos. Fótons possuem spin 1. No capítulo 19 veremos aplicações de operadores criação e aniquilação fermiônicos.

## 18.5 Exercícios

**Exercício 18.1** *Demonstre que a equação (18.56) é válida para qualquer combinação de  $A$  e  $B$  como operadores de criação ou aniquilação.*

**Exercício 18.2** *Resolva os exercícios do livro do Ballentine, [2].*

