Sistemas de Muitos Corpos (Bosons e Fermions) - Completo

Samuel Keullen Sales

October 12, 2025

1. Definição

Um **sistema de muitos corpos** é um sistema quântico composto por muitas partículas idênticas que interagem, como átomos em um sólido, elétrons em um metal ou átomos em um condensado de Bose-Einstein.

- **Bosons:** partículas de spin inteiro $(0, 1, 2, \ldots)$, obedecem à estatística de Bose-Einstein (ex.: fótons, hélio-4).
- **Fermions:** partículas de spin semi-inteiro $(1/2, 3/2, \ldots)$, obedecem à estatística de Fermi-Dirac e ao princípio de exclusão de Pauli (ex.: elétrons, prótons).

2. História e Descobridores

- **Fermi e Dirac (1926):** Estatística para férmions.
- **Bose (1924) e Einstein (1924-25):** Estatística para bosons.
- **Heisenberg, Pauli, Bloch:** Teoria de elétrons em sólidos e simetrias de muitas partículas.
- **Schwinger, Dyson, Feynman:** Desenvolvimento de propagadores e diagramas de Feynman para sistemas interativos.

3. Formalismo Matemático Básico

3.1 Função de Onda Total

Fermions (antisimétrica):

$$\Psi_F(x_1, \ldots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \ldots & \psi_N(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(x_N) & \ldots & \psi_N(x_N) \end{vmatrix}$$

Bosons (simétrica):

$$\Psi_B(x_1, \ldots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\text{perms } P} \psi_{p_1}(x_1) \cdots \psi_{p_N}(x_N)$$

Legenda: x_i = posição da i-ésima partícula, $\psi_j(x_i)$ = função de onda j-ésima, P = permutações das partículas, $N!$ = fator de normalização.

3.2 Hamiltoniano de N Partículas

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{h}_i + \sum_{i<j} V(x_i - x_j), \quad \hat{h}_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 + U(x_i)$$

Para o exemplo, consideramos $V = 0$ (não interagente).

3.3 Exemplo Detalhado: 2 Fermions em 1D

Funções de onda individuais:

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{\pi x}{L}, \quad \psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{2\pi x}{L}$$

Função de onda total (antisimétrica):

$$\Psi_F(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_2(x_1) \\ \psi_1(x_2) & \psi_2(x_2) \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_1(x_1)\psi_2(x_2) - \psi_2(x_1)\psi_1(x_2)\right]$$

Passo a passo multiplicativo:

1. Substituindo funções de onda:

$$\Psi_F = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{\pi x_1}{L}) \cdot (\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{2\pi x_2}{L}) - (\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{2\pi x_1}{L}) \cdot (\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{\pi x_2}{L})\Big]$$

2. Multiplicando os fatores de normalização:

$$\sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sqrt{\frac{2}{L}} = \frac{2}{L}$$

$$\Psi_F = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{2}{L}\left[\sin\frac{\pi x_1}{L} \sin\frac{2\pi x_2}{L} - \sin\frac{2\pi x_1}{L} \sin\frac{\pi x_2}{L}\right]$$

3. Simplificando o fator:

$$\Psi_F = \frac{\sqrt{2}}{L}\left[\sin\frac{\pi x_1}{L} \sin\frac{2\pi x_2}{L} - \sin\frac{2\pi x_1}{L} \sin\frac{\pi x_2}{L}\right]$$

3.4 Energia do Sistema (não interagente)

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 2$$

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}, \quad E_2 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

$$E_{\text{total}} = E_1 + E_2 = \frac{5\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

3.5 Exemplo Numérico 2 Partículas

Assumindo: $L = 1$, $\hbar = 1$, $m = 1$

$$E_1 = \frac{\pi^2}{2} \approx 4.9348, \quad E_2 = 2\pi^2 \approx 19.7392$$

$$E_{\text{total}} = 4.9348 + 19.7392 = 24.674$$

3.6 Exemplo Detalhado: 3 Fermions em 1D

Funções de onda individuais:

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L}, \quad \psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{2\pi x}{L}, \quad \psi_3(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{3\pi x}{L}$$

Função de onda total (determinante 3x3):

$$\Psi_F(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_2(x_1) & \psi_3(x_1) \\ \psi_1(x_2) & \psi_2(x_2) & \psi_3(x_2) \\ \psi_1(x_3) & \psi_2(x_3) & \psi_3(x_3) \end{vmatrix}$$

Determinante expandido (6 termos):

$$\begin{aligned} \Psi_F = \frac{1}{\sqrt{6}} \Big[&\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)\psi_3(x_3) + \psi_2(x_1)\psi_3(x_2)\psi_1(x_3) + \psi_3(x_1)\psi_1(x_2)\psi_2(x_3) \\ &- \psi_3(x_1)\psi_2(x_2)\psi_1(x_3) - \psi_2(x_1)\psi_1(x_2)\psi_3(x_3) - \psi_1(x_1)\psi_3(x_2)\psi_2(x_3) \Big] \end{aligned}$$

Substituindo os fatores de normalização: Cada termo tem $(\sqrt{2/L})^3 = 2\sqrt{2}/L^{3/2}$

3.7 Energia do Sistema 3 Partículas

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 2, 3$$

$$E_1 = \frac{\pi^2}{2} \approx 4.9348, \quad E_2 = 2\pi^2 \approx 19.7392, \quad E_3 = \frac{9\pi^2}{2} \approx 44.4132$$

$$E_{\text{total}} = 4.9348 + 19.7392 + 44.4132 = 69.0872$$

4. Ordem de Aplicação

1. Escolher o tipo de partículas (bosons ou fermions)
2. Escolher base de funções de onda individuais
3. Construir a função de onda total detalhando cada multiplicação e determinante
4. Montar o Hamiltoniano
5. Calcular energia e observáveis passo a passo
6. Se houver interação, aplicar técnicas aproximadas (Hartree-Fock, diagramas de Feynman)