

# Álgebra de Grassmann em mecânica estatística: dos fundamentos à função de partição

Grassmann algebra in statistical mechanics: from the foundations to partition function

A. N. Ribeiro & C. A. Macedo

*Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe, 49100-000, São Cristóvão-Se, Brasil*

*anevesr@gmail.com*

---

Diversos métodos para o estudo de materiais foram desenvolvidos a partir do formalismo da mecânica quântica de muitas partículas em termos da álgebra de Grassmann. A teoria do campo médio dinâmico é um exemplo. Visando auxiliar estudantes de pós-graduação e pesquisadores em geral no estudo desses métodos nós elaboramos este trabalho, em que a estrutura conceitual e matemática da álgebra de Grassmann são apresentadas com dedução detalhada em um contexto físico. A função de grande partição escrita nesse formalismo é obtida usando as integrais de trajetórias de Feynman. Como um exemplo para um hamiltoniano específico nós escrevemos a função de grande partição em termos das variáveis de Grassmann para o modelo de Hubbard. A fim de tornar este trabalho mais auto-explicativo nós preparamos um apêndice onde são definidos os operadores fermiônicos de criação e destruição e deduzidas suas relações de anticomutação de uma maneira fisicamente intuitiva.

Palavras-chave: álgebra de Grassmann; função de grande partição; modelo de Hubbard

Several methods for the study of materials were developed from formalism of the quantum many-particle mechanic in terms of Grassmann algebra. The dynamical mean-field theory is an example. Taking aim to aid pos-graduation students and researches at general on the study of these methods we elaborated this work, where the conceptual and mathematical structure of the Grassmann algebra are presented with detailed deduction. The grand partition function in this formalism is obtained using the Feynman path integrals. As an example for a Hamiltonian specific we wrote the grand partition function in terms of Grassmann variables for the Hubbard model. In order to do this work more auto-explicated we prepare an appendix where the creation and annihilation operators are defined and their anticomutation relations are deduced of a manner physically intuitive.

Keywords: Grassmann algebra; grand partition function; Hubbard model

---

## 1. INTRODUÇÃO

Sistemas de elétrons fortemente correlacionados constituem um dos problemas teóricos mais desafiadores da física do estado sólido. A razão disso é que uma descrição adequada desses sistemas deve levar em conta tanto a característica de onda do elétron como a de partícula, isso significa que uma abordagem que vai além de teorias baseadas em perturbações na interação elétron-elétron é necessária. Uma técnica que atualmente tem atraído a atenção de grande número de pesquisadores é a teoria do campo médio dinâmico (DMFT) [1]. As equações básicas dessa teoria para o modelo de Hubbard foram primeiro obtidas por Georges e Kotliar em 1992 [2]. Analisando a função de Green de uma partícula no formalismo das variáveis de Grassmann eles mostraram que é possível um mapeamento exato do modelo de Hubbard em dimensões infinitas através do modelo de impureza simples de Anderson (ou do modelo de Wolff) sujeito a uma condição auto-consistente. Isso proporcionou uma representação de campo médio que torna-se exata no limite de dimensões infinitas. Até então não existia nenhuma teoria de campo médio para férmions fortemente correlacionados que tornava-se exata em algum limite [2].

Esse método de analisar um problema quântico de muitas partículas através de grandezas escritas no formalismo de variáveis de Grassmann mostrou-se bastante frutífero. Demonstrações matemáticas importantes, como por exemplo, a obtida por Georges e Kotliar [2], são mais facilmente “visualizadas” através dessa metodologia. A própria teoria da técnica de Monte

Carlo quântico teve uma de suas principais identidades matemáticas provada primeiro usando variáveis de Grassmann [3 e 4].

Visto que a formulação em álgebra de Grassmann da teoria quântica de muitas partículas em temperatura finita é uma ferramenta bastante poderosa e que permite desenvolver técnicas sofisticadas para análise de materiais nós procuramos apresentar a estrutura matemática da álgebra de Grassmann e a função de grande partição escrita nesse formalismo detalhadamente e com discussões que justificam de modo claro cada passo na construção dessa teoria. Na literatura encontramos diversos textos sobre o assunto [5 - 9], mas nenhum é mais simples e explicativo nas demonstrações do que este. O foco deste trabalho é auxiliar todos aqueles interessados em adquirir ferramentas teóricas para calcular propriedades termodinâmicas de materiais e que não sejam familiarizados com o formalismo das variáveis de Grassmann. A estrutura conceitual e matemática apresentadas aqui são acessíveis a alunos cursando o primeiro ano de pós-graduação.

A definição de estados coerentes para um sistema de partículas fermiônicas e de números de Grassmann, bem como a dedução da álgebra a que esses números obedecem (álgebra de Grassmann), são apresentados na seção 2. A seção 3 é dedicada ao cálculo do elemento de matriz e do traço de operadores. Na seção 4 a função de grande partição é escrita no formalismo de variáveis de Grassmann usando o método da integral de trajetórias de Feynman e na seção 5 a função de grande partição é obtida explicitamente para o hamiltoniano de Hubbard. As conclusões são expressas na seção 6. Um apêndice onde nós definimos os operadores fermiônicos de criação e destruição e deduzimos suas relações de anticomutação de uma maneira fisicamente intuitiva foi elaborado.

## 2. ESTADOS COERENTES E NÚMEROS DE GRASSMANN

A mecânica quântica descreve o estado de uma partícula por um vetor de estado que pertence ao espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$ . O espaço de Hilbert é um espaço vetorial de funções complexas de quadrado integrável definidas no espaço das configurações. Os vetores de estado de um sistema de  $N$  partículas idênticas pertencem ao espaço vetorial  $\mathcal{H}_N$ , que é simplesmente o produto tensorial dos espaços de Hilbert de cada partícula,  $\mathcal{H}_N = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}$ . As funções de onda de um sistema de  $N$  férmions idênticos são antisimétricas em relação à permutação de qualquer par de partículas, assim, elas pertencem a um subespaço de  $\mathcal{H}_N$  que chamaremos de  $\mathcal{F}_N$  [6].

Os operadores de criação e destruição de férmions transformam um vetor do espaço  $\mathcal{F}_N$  em um vetor do espaço  $\mathcal{F}_{N+1}$  e  $\mathcal{F}_{N-1}$ , respectivamente (ver apêndice A). Assim, é conveniente definir o espaço de Fock  $\mathcal{F}$  como a soma direta dos espaços de férmions,  $\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 \oplus \mathcal{F}_1 \oplus \dots \oplus \mathcal{F}_\infty$ . Um vetor de estado geral do espaço de Fock é uma combinação linear de estados com qualquer número de partículas. O espaço de Fock  $\mathcal{F}$  pode ser representado por uma base de determinantes de Slater, entretanto, uma base extremamente útil é a base de estados coerentes. Os estados coerentes são definidos como autoestados do operador de destruição, logo,

$$c_\alpha |\psi\rangle = \psi_\alpha |\psi\rangle, \quad (1)$$

em que  $c_\alpha$  é o operador de destruição de um férmion no estado  $\alpha$ , e  $|\psi\rangle$  é um estado coerente com autovalor  $\psi_\alpha$ .

A escolha do operador de destruição ao invés do operador de criação na definição dos estados coerentes é feita pela seguinte razão. Um estado qualquer  $|\phi\rangle$  do espaço de Fock  $\mathcal{F}$  pode ser expandido como uma combinação linear de estados com qualquer número de partículas, assim,  $|\phi\rangle$  tem necessariamente uma componente com um número mínimo de partículas, vamos supor  $N'$ , então, se um operador de criação for aplicado em  $|\phi\rangle$  o estado resultante tem o número mínimo de partículas igual a  $N'+1$ , logo, o estado resultante não pode ser (para nenhum valor de  $N'$ ) um múltiplo de  $|\phi\rangle$  e, portanto, o operador de criação não pode ter autoestados. Por outro lado, se um operador de destruição for aplicado em  $|\phi\rangle$  o número máximo de partículas nesse

estado é diminuído por um, mas, desde que  $|\phi\rangle$  pode conter componentes com qualquer número de partículas, *a priori*, não há impedimento do operador de destruição ter autoestados.

Quando dois operadores de destruição atuam no mesmo estado coerente tem-se

$$c_\beta c_\alpha |\psi\rangle = c_\beta \psi_\alpha |\psi\rangle = \begin{cases} \psi_\alpha c_\beta |\psi\rangle = \psi_\alpha \psi_\beta |\psi\rangle = \begin{cases} \psi_\beta \psi_\alpha |\psi\rangle = \psi_\beta c_\alpha |\psi\rangle = c_\alpha \psi_\beta |\psi\rangle = c_\alpha c_\beta |\psi\rangle \\ -\psi_\beta \psi_\alpha |\psi\rangle = -\psi_\beta c_\alpha |\psi\rangle = -c_\alpha \psi_\beta |\psi\rangle = -c_\alpha c_\beta |\psi\rangle \end{cases} \\ -\psi_\alpha c_\beta |\psi\rangle = -\psi_\alpha \psi_\beta |\psi\rangle = \begin{cases} -\psi_\beta \psi_\alpha |\psi\rangle = -\psi_\beta c_\alpha |\psi\rangle = c_\alpha \psi_\beta |\psi\rangle = c_\alpha c_\beta |\psi\rangle \\ \psi_\beta \psi_\alpha |\psi\rangle = \psi_\beta c_\alpha |\psi\rangle = -c_\alpha \psi_\beta |\psi\rangle = -c_\alpha c_\beta |\psi\rangle \end{cases} \end{cases}, \quad (2)$$

em que a primeira equação foi obtida assumindo que  $c_\beta \psi_\alpha = \psi_\alpha c_\beta$  e  $\psi_\alpha \psi_\beta = \psi_\beta \psi_\alpha$ , a segunda que  $c_\beta \psi_\alpha = \psi_\alpha c_\beta$  e  $\psi_\alpha \psi_\beta = -\psi_\beta \psi_\alpha$ , a terceira que  $c_\beta \psi_\alpha = -\psi_\alpha c_\beta$  e  $\psi_\alpha \psi_\beta = \psi_\beta \psi_\alpha$ , e a quarta que  $c_\beta \psi_\alpha = -\psi_\alpha c_\beta$  e  $\psi_\alpha \psi_\beta = -\psi_\beta \psi_\alpha$ . Como os operadores de destruição satisfazem a relação de anticomutação (A17) obtém-se  $c_\beta c_\alpha |\psi\rangle = -c_\alpha c_\beta |\psi\rangle$ , que comparando com as equações (2) conclui-se que  $c_\beta \psi_\alpha = \psi_\alpha c_\beta$  e  $\psi_\alpha \psi_\beta = -\psi_\beta \psi_\alpha$ , ou  $c_\beta \psi_\alpha = -\psi_\alpha c_\beta$  e  $\psi_\alpha \psi_\beta = -\psi_\beta \psi_\alpha$ . De qualquer modo vale a seguinte relação:

$$\psi_\alpha \psi_\beta + \psi_\beta \psi_\alpha = 0. \quad (3)$$

Isso significa que os  $\psi_\alpha$ 's não são números comuns (reais ou complexos). Números que satisfazem a relação de anticomutação (3) são conhecidos como números de Grassmann [5].

Como os autovalores dos estados coerentes não são números comuns é preciso estender o espaço de Fock  $\mathcal{F}$  para incluir números de Grassmann como coeficientes. Qualquer vetor  $|\phi\rangle$  do espaço de Fock estendido pode ser expandido como uma combinação linear de vetores do espaço  $\mathcal{F}$  com números de Grassmann como coeficientes, assim,

$$|\phi\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{\substack{n_1, \dots, n_\infty=0,1 \\ n_1+\dots+n_\infty=m}} \gamma_{n_1, \dots, n_\infty} |n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle, \quad (4)$$

em que  $\gamma_{n_1, \dots, n_\infty}$  é um número de Grassmann,  $\{|n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle\}$  é uma base completa de  $\mathcal{F}$ , e  $n_i$  denota o número de partículas no estado  $i$ . A restrição  $n_i = 0$  ou  $1$  é para satisfazer o princípio de Pauli, que exclui a possibilidade de haver mais de uma partícula no mesmo estado (ver apêndice A).

Vamos definir o estado coerente no espaço de Fock estendido como

$$|\psi\rangle = \prod_{\alpha} (1 - \psi_{\alpha} c_{\alpha}^+) |0\rangle, \quad (5)$$

em que  $|0\rangle$  é o estado sem partículas (vácuo). Considerando

$$\psi_{\alpha} c_{\beta}^+ + c_{\beta}^+ \psi_{\alpha} = 0, \quad (6)$$

e aplicando o operador de destruição em (5), tem-se

$$\begin{aligned}
 c_\beta |\psi\rangle &= c_\beta \prod_\alpha (1 - \psi_\alpha c_\alpha^+) |0\rangle = c_\beta \prod_{\alpha \neq \beta} (1 - \psi_\alpha c_\alpha^+) (1 - \psi_\beta c_\beta^+) |0\rangle \\
 &= \left\{ \begin{array}{l} \prod_{\alpha \neq \beta} (1 + \psi_\alpha c_\alpha^+) c_\beta (1 - \psi_\beta c_\beta^+) |0\rangle \\ \prod_{\alpha \neq \beta} (1 - \psi_\alpha c_\alpha^+) c_\beta (1 - \psi_\beta c_\beta^+) |0\rangle \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \prod_{\alpha \neq \beta} (1 + \psi_\alpha c_\alpha^+) (-\psi_\beta) |0\rangle \\ \prod_{\alpha \neq \beta} (1 - \psi_\alpha c_\alpha^+) \psi_\beta |0\rangle \end{array} \right\}, \quad (7) \\
 &= \left\{ \begin{array}{l} \prod_{\alpha \neq \beta} (1 + \psi_\alpha c_\alpha^+) (-\psi_\beta) (1 + \psi_\beta c_\beta^+) |0\rangle \\ \prod_{\alpha \neq \beta} (1 - \psi_\alpha c_\alpha^+) \psi_\beta (1 - \psi_\beta c_\beta^+) |0\rangle \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} -\psi_\beta \prod_\alpha (1 + \psi_\alpha c_\alpha^+) |0\rangle \\ \psi_\beta \prod_\alpha (1 - \psi_\alpha c_\alpha^+) |0\rangle \end{array} \right\} = \psi_\beta |\psi\rangle
 \end{aligned}$$

em que foram usadas as relações de anticomutação para operadores de criação e destruição fermiônicos (A17) e a propriedade

$$\psi_\alpha^2 = 0, \quad (8)$$

obtida da equação (3). A primeira equação em (7) foi obtida assumindo que  $c_\beta \psi_\alpha = \psi_\alpha c_\beta$ , e a segunda que  $c_\beta \psi_\alpha = -\psi_\alpha c_\beta$ , claramente a equação (7) torna-se a equação (1) apenas se

$$c_\beta \psi_\alpha + \psi_\alpha c_\beta = 0. \quad (9)$$

Expandindo qualquer função analítica  $f(\psi_\alpha)$ , em que a variável  $\psi_\alpha$  obedece a álgebra não comutativa (3) (variável de Grassmann), numa séria de Taylor encontra-se

$$f(\psi_\alpha) = f_0 + f_1 \psi_\alpha + f_2 \psi_\alpha^2 + f_3 \psi_\alpha^3 + \dots,$$

em que os coeficientes  $f_i$  ( $i = 0, 1, \dots$ ) são constantes (reais ou complexas). No entanto, por causa da propriedade (8),  $f(\psi_\alpha)$  torna-se simplesmente uma função linear

$$f(\psi_\alpha) = f_0 + f_1 \psi_\alpha. \quad (10)$$

A partir disso o estado coerente (5) torna-se

$$|\psi\rangle = \prod_\alpha (1 - \psi_\alpha c_\alpha^+) |0\rangle = \prod_\alpha e^{-\psi_\alpha c_\alpha^+} |0\rangle = \exp\left(-\sum_\alpha \psi_\alpha c_\alpha^+\right) |0\rangle. \quad (11)$$

As seguintes propriedades definem a conjugação na álgebra de Grassmann:

$$(\psi_\alpha)^+ = \psi_\alpha^*, \quad (12)$$

$$(\psi_\alpha^*)^+ = \psi_\alpha, \quad (13)$$

$$(\psi_\alpha \psi_\beta \dots \psi_\gamma)^+ = \psi_\gamma^* \dots \psi_\beta^* \psi_\alpha^* \quad (14)$$

e

$$(\lambda \psi_\alpha)^+ = \lambda^* \psi_\alpha^*, \quad (15)$$

em que  $\lambda$  é um número complexo e  $\lambda^*$  é seu conjugado complexo. A partir das relações (3) e (14) tem-se

$$(\psi_\alpha \psi_\beta)^+ = (-\psi_\beta \psi_\alpha)^+ \Rightarrow \psi_\beta^* \psi_\alpha^* = -\psi_\alpha^* \psi_\beta^*, \quad (16)$$

e conseqüentemente,

$$(\psi_\alpha^*)^2 = 0. \quad (17)$$

É natural e conveniente assumir que

$$(\tilde{c}_\beta \tilde{\psi}_\alpha)^+ = \tilde{\psi}_\alpha^* \tilde{c}_\beta^+, \quad (18)$$

em que  $\tilde{c}_\beta$  denota  $c_\beta$  ou  $c_\beta^+$ , e  $\tilde{\psi}_\alpha$  denota  $\psi_\alpha$  ou  $\psi_\alpha^*$ . É importante lembrar que  $(c_\beta^+)^+ = c_\beta$ , ou seja, o operador conjugado do operador de criação é o operador de destruição (ver apêndice A). Usando a relação (18) encontra-se que o conjugado da equação (6) é

$$(\psi_\alpha c_\beta^+ + c_\beta^+ \psi_\alpha)^+ = 0 \Rightarrow \psi_\alpha^* c_\beta + c_\beta \psi_\alpha^* = 0 \quad (19)$$

e da equação (9) é

$$(c_\beta \psi_\alpha + \psi_\alpha c_\beta)^+ = 0 \Rightarrow \psi_\alpha^* c_\beta^+ + c_\beta^+ \psi_\alpha^* = 0. \quad (20)$$

As relações (3) e (16), e as relações (6), (9), (19) e (20) podem ser sintetizadas, respectivamente, como:

$$[\tilde{\psi}_\alpha, \tilde{\psi}_\beta]_+ = \tilde{\psi}_\alpha \tilde{\psi}_\beta + \tilde{\psi}_\beta \tilde{\psi}_\alpha = 0, \quad (21)$$

e

$$[\tilde{\psi}_\alpha, \tilde{c}_\beta]_+ = \tilde{\psi}_\alpha \tilde{c}_\beta + \tilde{c}_\beta \tilde{\psi}_\alpha = 0. \quad (22)$$

Note que a relação (21) assume que  $\psi_\alpha^* \psi_\beta = -\psi_\beta \psi_\alpha^*$ , ou seja, é definido que uma variável de Grassmann anticomuta com a conjugada de uma variável de Grassmann.

O estado adjunto  $\langle \psi |$  do estado coerente (11) é dado, de acordo com a relação (18), por

$$\begin{aligned} \langle \psi | = |\psi \rangle^+ &= \left[ \exp\left(-\sum_\alpha \psi_\alpha c_\alpha^+\right) |0\rangle \right]^+ = \langle 0 | \exp\left(-\sum_\alpha (\psi_\alpha c_\alpha^+)^+\right) \\ &= \langle 0 | \exp\left(-\sum_\alpha c_\alpha \psi_\alpha^*\right) = \langle 0 | \prod_\alpha (1 + \psi_\alpha^* c_\alpha) \end{aligned} \quad (23)$$

em que na última igualdade foram usadas as relações (17) e (22). Logo, usando a equação (1),

$$\langle \psi | c_\alpha^+ = (c_\alpha | \psi \rangle)^+ = (\psi_\alpha | \psi \rangle)^+ = \langle \psi | \psi_\alpha^*. \quad (24)$$

A ação do operador de criação em  $|\psi \rangle$  é calculado da seguinte forma:

$$\begin{aligned} c_\alpha^+ |\psi \rangle &= c_\alpha^+ (1 - \psi_\alpha c_\alpha^+) \prod_{\beta \neq \alpha} (1 - \psi_\beta c_\beta^+) |0\rangle = c_\alpha^+ \prod_{\beta \neq \alpha} (1 - \psi_\beta c_\beta^+) |0\rangle \\ &= -\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} (1 - \psi_\alpha c_\alpha^+) \prod_{\beta \neq \alpha} (1 - \psi_\beta c_\beta^+) |0\rangle = -\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} |\psi \rangle \end{aligned} \quad (25)$$

em que na segunda igualdade foi utilizado  $(c_\alpha^+)^2 = 0$  (equação (A.17)). De modo análogo encontra-se

$$\langle \psi | c_\alpha = \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha^*} \langle \psi |. \quad (26)$$

A derivada em relação a uma variável de Grassmann, que aparece nas equações (25) e (26), é definida como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tilde{\psi}_{\alpha_m}} (a \tilde{\psi}_{\alpha_1} \tilde{\psi}_{\alpha_2} \cdots \tilde{\psi}_{\alpha_m} \cdots \tilde{\psi}_{\alpha_n}) &= (-1)^{m-1} a \frac{\partial}{\partial \tilde{\psi}_{\alpha_m}} (\tilde{\psi}_{\alpha_m} \tilde{\psi}_{\alpha_1} \cdots \tilde{\psi}_{\alpha_{m-1}} \tilde{\psi}_{\alpha_{m+1}} \cdots \tilde{\psi}_{\alpha_n}) \\ &= (-1)^{m-1} a \tilde{\psi}_{\alpha_1} \cdots \tilde{\psi}_{\alpha_{m-1}} \tilde{\psi}_{\alpha_{m+1}} \cdots \tilde{\psi}_{\alpha_n} \end{aligned} \quad (27)$$

Ou seja, a variável a ser derivada deve ser permutada, de acordo com a relação (21), até encostar no operador, e então realiza-se a derivação como no caso de uma variável real. A letra  $a$  denota uma constante (real ou complexa). A partir dessa definição obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{\psi}_\alpha} \frac{\partial}{\partial \tilde{\psi}_\beta} (\tilde{\psi}_\alpha \tilde{\psi}_\beta) = -\frac{\partial}{\partial \tilde{\psi}_\alpha} (\tilde{\psi}_\alpha) = -\frac{\partial}{\partial \tilde{\psi}_\beta} \frac{\partial}{\partial \tilde{\psi}_\alpha} (\tilde{\psi}_\alpha \tilde{\psi}_\beta) \Rightarrow \frac{\partial}{\partial \tilde{\psi}_\alpha} \frac{\partial}{\partial \tilde{\psi}_\beta} = -\frac{\partial}{\partial \tilde{\psi}_\beta} \frac{\partial}{\partial \tilde{\psi}_\alpha} \quad (28)$$

### 3. ELEMENTO DE MATRIZ E TRAÇO DE OPERADORES

A superposição de dois estados coerentes é dada por

$$\begin{aligned}
\langle \psi | \psi' \rangle &= \langle 0 | \prod_{\alpha} (1 + \psi_{\alpha}^* c_{\alpha}) \prod_{\beta} (1 - \psi'_{\beta} c_{\beta}^+) | 0 \rangle = \langle 0 | \prod_{\alpha} (1 + \psi_{\alpha}^* c_{\alpha}) (1 - \psi'_{\alpha} c_{\alpha}^+) | 0 \rangle \\
&= \langle 0 | (1 + \psi_1^* c_1) (1 - \psi'_1 c_1^+) \cdots (1 + \psi_n^* c_n) (1 - \psi'_n c_n^+) | 0 \rangle \\
&= \langle 0 | (1 - \psi'_1 c_1^+ + \psi_1^* c_1 - \psi_1^* c_1 \psi'_1 c_1^+) \cdots (1 + \psi_n^* c_n) (1 - \psi'_n c_n^+) | 0 \rangle \\
&= \langle 0 | (1 + c_1^+ \psi'_1 + \psi_1^* c_1 + \psi_1^* \psi'_1 - c_1^+ \psi_1^* \psi'_1 c_1) \cdots (1 + \psi_n^* c_n) (1 - \psi'_n c_n^+) | 0 \rangle \\
&= \langle 0 | (1 + \psi_1^* \psi'_1) \cdots (1 + \psi_n^* c_n) (1 - \psi'_n c_n^+) | 0 \rangle + \langle 0 | \psi_1^* c_1 \cdots (1 + \psi_n^* c_n) (1 - \psi'_n c_n^+) | 0 \rangle \\
&\quad + \langle 0 | (c_1^+ \psi'_1 - c_1^+ \psi_1^* \psi'_1 c_1) \cdots (1 + \psi_n^* c_n) (1 - \psi'_n c_n^+) | 0 \rangle \\
&= (1 + \psi_1^* \psi'_1) \langle 0 | (1 + \psi_2^* c_2) (1 - \psi'_2 c_2^+) \cdots (1 + \psi_n^* c_n) (1 - \psi'_n c_n^+) | 0 \rangle + \\
&\quad + \langle 0 | (1 + \psi_2^* c_2) (1 - \psi'_2 c_2^+) \cdots (1 + \psi_n^* c_n) (1 - \psi'_n c_n^+) \psi_1^* c_1 | 0 \rangle \\
&= (1 + \psi_1^* \psi'_1) \langle 0 | (1 + \psi_2^* c_2) (1 - \psi'_2 c_2^+) \cdots (1 + \psi_n^* c_n) (1 - \psi'_n c_n^+) | 0 \rangle \\
&= \prod_{\alpha} (1 + \psi_{\alpha}^* \psi'_{\alpha}) = \exp \left( \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi'_{\alpha} \right), \tag{29}
\end{aligned}$$

em que foram usadas as relações (A17), (21) e (22), e a definição (A4) com seu conjugado

$$(c_s | 0 \rangle)^+ = \langle 0 | c_s^+ = 0. \tag{30}$$

O elemento de matriz de um operador normal ordenado  $O(c_{\alpha}^+, c_{\alpha})$ , isto é, um operador ordenado de tal maneira que os operadores de destruição estão todos localizados à direita e os operadores de criação à esquerda, na base dos estados coerentes é obtido diretamente com o uso das equações (1), (24) e (29), como

$$\langle \psi | O(c_{\alpha}^+, c_{\alpha}) | \psi' \rangle = \langle \psi | O(\psi_{\alpha}^*, \psi'_{\alpha}) | \psi' \rangle = \langle \psi | \psi' \rangle O(\psi_{\alpha}^*, \psi'_{\alpha}) = \exp \left( \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi'_{\alpha} \right) O(\psi_{\alpha}^*, \psi'_{\alpha}). \tag{31}$$

Através dessa equação, operadores são representados apenas por variáveis de Grassmann.

Para calcular o traço de operadores é útil introduzir uma integral definida, em termos de  $\tilde{\psi}_{\alpha}$ .

Como  $\psi_{\alpha}^2 = 0$  (equação (8)) e  $\psi_{\alpha}^{*2} = 0$  (equação (17)) é suficiente definir apenas  $\int d\tilde{\psi}_{\alpha} 1$  e  $\int d\tilde{\psi}_{\alpha} \tilde{\psi}_{\alpha}$ . A integração sobre variáveis de Grassmann não tem um análogo à soma de Riemann para variáveis reais, assim, ela é definida para satisfazer a propriedade fundamental de integrais usuais de  $-\infty$  a  $+\infty$  sobre funções que desaparecem no infinito, que a integral de uma diferencial exata é zero. Assim, usando (27),

$$\int d\tilde{\psi}_{\alpha} 1 = \int d\tilde{\psi}_{\alpha} \frac{\partial}{\partial \tilde{\psi}_{\alpha}} (\tilde{\psi}_{\alpha}) = 0. \tag{32}$$

Consequentemente a única integral não nula é a de  $\tilde{\psi}_{\alpha}$ , pois,  $\tilde{\psi}_{\alpha}$  não é o resultado de uma derivada. A integral definida de  $\tilde{\psi}_{\alpha}$  pode ser tomada como uma constante, e por conveniência essa constante será a unidade. Logo,

$$\int d\tilde{\psi}_{\alpha} \tilde{\psi}_{\alpha} = 1 \tag{33}$$

A integral de um produto de variáveis de Grassmann é dada por

$$\int d\tilde{\psi}_{\alpha_m} (a\tilde{\psi}_{\alpha_1}\tilde{\psi}_{\alpha_2}\cdots\tilde{\psi}_{\alpha_m}\cdots\tilde{\psi}_{\alpha_n}) = (-1)^{m-1} a \int d\tilde{\psi}_{\alpha_m}\tilde{\psi}_{\alpha_m}\tilde{\psi}_{\alpha_1}\cdots\tilde{\psi}_{\alpha_{m-1}}\tilde{\psi}_{\alpha_{m+1}}\cdots\tilde{\psi}_{\alpha_n} \tag{34}$$

$$= (-1)^{m-1} a\tilde{\psi}_{\alpha_1}\cdots\tilde{\psi}_{\alpha_{m-1}}\tilde{\psi}_{\alpha_{m+1}}\cdots\tilde{\psi}_{\alpha_n}$$

Consequentemente,

$$\int d\tilde{\psi}_{\alpha} d\tilde{\psi}_{\beta}\tilde{\psi}_{\alpha}\tilde{\psi}_{\beta} = -\int d\tilde{\psi}_{\alpha}\tilde{\psi}_{\alpha} = -\int d\tilde{\psi}_{\beta} d\tilde{\psi}_{\alpha}\tilde{\psi}_{\alpha}\tilde{\psi}_{\beta} \Rightarrow d\tilde{\psi}_{\alpha} d\tilde{\psi}_{\beta} = -d\tilde{\psi}_{\beta} d\tilde{\psi}_{\alpha}. \tag{35}$$

A operação da integral de Grassmann (34) se dá de modo análogo à derivada (equação (27)), isto é, a variável a ser integrada deve primeiro ser permutada, de acordo com a relação (21), até encostar no operador, para então ser utilizada a definição (33). De fato, na álgebra de Grassmann, a integração é uma operação idêntica à derivação (ver equações (27) e (34)).

A relação de completza para uma base de estados coerentes é dada por

$$\int \prod_{\alpha} d\psi_{\alpha}^* d\psi_{\alpha} \exp\left(-\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha}\right) |\psi\rangle\langle\psi| = 1. \tag{36}$$

Uma demonstração dessa relação para um caso simples pode ser encontrada em [8]. A demonstração geral segue o mesmo princípio usado lá, no entanto, por ela ser extensa preferimos omiti-la. Através da relação (36) é possível calcular o traço de um operador A da seguinte forma:

$$\begin{aligned} Tr\{A\} &= \sum_n \langle n|A|n\rangle = \sum_{n_1, \dots, n_{\infty}=0,1} \langle n_{\infty} \cdots n_1 |A| n_1 \cdots n_{\infty} \rangle \\ &= \sum_n \langle n | \left[ \int \prod_{\alpha} d\psi_{\alpha}^* d\psi_{\alpha} \exp\left(-\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha}\right) |\psi\rangle\langle\psi| \right] A |n\rangle. \tag{37} \\ &= \int \prod_{\alpha} d\psi_{\alpha}^* d\psi_{\alpha} \exp\left(-\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha}\right) \sum_n \langle n | \psi\rangle\langle\psi | A |n\rangle \end{aligned}$$

A partir da definição (5) tem-se

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \prod_{\alpha=1}^{\infty} (1 - \psi_{\alpha} c_{\alpha}^+) |0\rangle = (1 - \psi_1 c_1^+) (1 - \psi_2 c_2^+) \cdots (1 - \psi_{\infty} c_{\infty}^+) |0\rangle \\ &= |0\rangle - \sum_{\alpha=1}^{\infty} \psi_{\alpha} c_{\alpha}^+ |0\rangle + \sum_{\substack{\alpha, \beta=1 \\ \alpha < \beta}}^{\infty} \psi_{\alpha} c_{\alpha}^+ \psi_{\beta} c_{\beta}^+ |0\rangle + \cdots \\ &\quad + (-1)^m \sum_{\substack{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m=1 \\ \alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_m}}^{\infty} \psi_{\alpha_1} c_{\alpha_1}^+ \psi_{\alpha_2} c_{\alpha_2}^+ \cdots \psi_{\alpha_m} c_{\alpha_m}^+ |0\rangle + \cdots \\ &= |0\rangle - \sum_{\alpha=1}^{\infty} \psi_{\alpha} c_{\alpha}^+ |0\rangle + \sum_{\substack{\alpha, \beta=1 \\ \alpha < \beta}}^{\infty} \psi_{\beta} \psi_{\alpha} c_{\alpha}^+ c_{\beta}^+ |0\rangle + \cdots \\ &\quad + (-1)^m \sum_{\substack{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m=1 \\ \alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_m}}^{\infty} \psi_{\alpha_m} \cdots \psi_{\alpha_2} \psi_{\alpha_1} c_{\alpha_1}^+ c_{\alpha_2}^+ \cdots c_{\alpha_m}^+ |0\rangle + \cdots \\ &= |0\rangle - \sum_{\alpha=1}^{\infty} \psi_{\alpha} |n_{\alpha}\rangle + \sum_{\substack{\alpha, \beta=1 \\ \alpha < \beta}}^{\infty} \psi_{\beta} \psi_{\alpha} |n_{\alpha} n_{\beta}\rangle + \cdots \\ &\quad + (-1)^m \sum_{\substack{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m=1 \\ \alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_m}}^{\infty} \psi_{\alpha_m} \cdots \psi_{\alpha_2} \psi_{\alpha_1} |n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} \cdots n_{\alpha_m}\rangle + \cdots \end{aligned}$$

Logo, como (equação (A18))

$$|n\rangle = |n_1 n_2 \cdots n_\infty\rangle = (c_1^+)^{n_1} (c_2^+)^{n_2} \cdots (c_\infty^+)^{n_\infty} |0\rangle$$

$$\Rightarrow \langle n| = (|n\rangle)^\dagger = ((c_1^+)^{n_1} (c_2^+)^{n_2} \cdots (c_\infty^+)^{n_\infty} |0\rangle)^\dagger = \langle 0| (c_\infty^-)^{n_\infty} \cdots (c_2^-)^{n_2} (c_1^-)^{n_1} = \langle n_\infty \cdots n_2 n_1|$$

obtém-se

$$\begin{aligned} \langle n_{\beta_m} \cdots n_{\beta_2} n_{\beta_1} | \psi \rangle &= \langle 0 | c_{\beta_m} \cdots c_{\beta_2} c_{\beta_1} (-1)^m \sum_{\substack{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m=1 \\ \alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_m}} \psi_{\alpha_m} \cdots \psi_{\alpha_2} \psi_{\alpha_1} | n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} \cdots n_{\alpha_m} \rangle \\ &= (-1)^m [(-1)^m]^m \sum_{\substack{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m=1 \\ \alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_m}} \psi_{\alpha_m} \cdots \psi_{\alpha_2} \psi_{\alpha_1} \langle 0 | c_{\beta_m} \cdots c_{\beta_2} c_{\beta_1} | n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} \cdots n_{\alpha_m} \rangle \\ &= (-1)^{m(m+1)} \sum_{\substack{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m=1 \\ \alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_m}} \psi_{\alpha_m} \cdots \psi_{\alpha_2} \psi_{\alpha_1} \langle n_{\beta_m} \cdots n_{\beta_2} n_{\beta_1} | n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} \cdots n_{\alpha_m} \rangle \\ &= \sum_{\substack{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m=1 \\ \alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_m}} \psi_{\alpha_m} \cdots \psi_{\alpha_2} \psi_{\alpha_1} \delta_{\alpha_1, \beta_1} \delta_{\alpha_2, \beta_2} \cdots \delta_{\alpha_m, \beta_m} = \psi_{\beta_m} \cdots \psi_{\beta_2} \psi_{\beta_1} \end{aligned} \tag{38}$$

em que foi usada a relação de ortonormalidade

$$\langle n_\gamma \cdots n_{\beta'} n_{\alpha'} | n_\alpha n_\beta \cdots n_\gamma \rangle = \delta_{\alpha, \alpha'} \delta_{\beta, \beta'} \cdots \delta_{\gamma, \gamma'} \tag{39}$$

e por definição  $\beta_1 < \beta_2 < \dots < \beta_m$ . Calculando o conjugado da equação (38) encontra-se

$$\langle n_{\beta_m} \cdots n_{\beta_2} n_{\beta_1} | \psi \rangle^\dagger = \langle \psi | n_{\beta_1} n_{\beta_2} \cdots n_{\beta_m} \rangle = (\psi_{\beta_m} \cdots \psi_{\beta_2} \psi_{\beta_1})^\dagger = \psi_{\beta_1}^* \psi_{\beta_2}^* \cdots \psi_{\beta_m}^* \tag{40}$$

Assim, com as equações (38) e (40), tem-se

$$\begin{aligned} \langle n_{\beta_m} \cdots n_{\beta_2} n_{\beta_1} | \psi \rangle \langle \psi | n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} \cdots n_{\alpha_m} \rangle &= \psi_{\beta_m} \cdots \psi_{\beta_2} \psi_{\beta_1} \psi_{\alpha_1}^* \psi_{\alpha_2}^* \cdots \psi_{\alpha_m}^* \\ &= \psi_{\beta_m} \cdots \psi_{\beta_2} [-\psi_{\alpha_1}^* \psi_{\beta_1}] \psi_{\alpha_2}^* \cdots \psi_{\alpha_m}^* \\ &= [-\psi_{\alpha_1}^* \psi_{\beta_1}] \psi_{\beta_m} \cdots \psi_{\beta_3} \psi_{\beta_2} \psi_{\alpha_2}^* \psi_{\alpha_3}^* \cdots \psi_{\alpha_m}^* \\ &= [-\psi_{\alpha_1}^* \psi_{\beta_1}] [-\psi_{\alpha_2}^* \psi_{\beta_2}] \cdots [-\psi_{\alpha_m}^* \psi_{\beta_m}] \tag{41} \\ &= (-\psi_{\alpha_1}^*) [-\psi_{\alpha_2}^* \psi_{\beta_2}] \cdots [-\psi_{\alpha_m}^* \psi_{\beta_m}] \psi_{\beta_1} \\ &= (-\psi_{\alpha_1}^*) (-\psi_{\alpha_2}^*) \cdots (-\psi_{\alpha_m}^*) \psi_{\beta_m} \cdots \psi_{\beta_2} \psi_{\beta_1} \\ &= \langle -\psi | n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} \cdots n_{\alpha_m} \rangle \langle n_{\beta_m} \cdots n_{\beta_2} n_{\beta_1} | \psi \rangle \end{aligned}$$

Qualquer operador  $A$  de um observável físico conserva o número total de partículas do sistema, daí conclui-se que  $|n'\rangle = A|n\rangle$  e  $|n\rangle$  possuem a mesma dimensão, isto é, pertencem ao mesmo subespaço do espaço de Fock  $\mathcal{F}$ , exatamente como na equação (41). Assim, a partir dessa equação, obtém-se

$$\langle n | \psi \rangle \langle \psi | A | n \rangle = \langle n | \psi \rangle \langle \psi | n' \rangle = \langle -\psi | n' \rangle \langle n | \psi \rangle = \langle -\psi | A | n \rangle \langle n | \psi \rangle. \tag{42}$$

Utilizando o resultado (42), a equação (37) torna-se:

$$\begin{aligned}
 Tr\{A\} &= \int \prod_{\alpha} d\psi_{\alpha}^* d\psi_{\alpha} \exp\left(-\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha}\right) \sum_n \langle n|\psi\rangle \langle \psi|A|n\rangle \\
 &= \int \prod_{\alpha} d\psi_{\alpha}^* d\psi_{\alpha} \exp\left(-\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha}\right) \sum_n \langle -\psi|A|n\rangle \langle n|\psi\rangle \\
 &= \int \prod_{\alpha} d\psi_{\alpha}^* d\psi_{\alpha} \exp\left(-\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha}\right) \langle -\psi|A\left[\sum_n |n\rangle \langle n|\right]|\psi\rangle, \\
 &= \int \prod_{\alpha} d\psi_{\alpha}^* d\psi_{\alpha} \exp\left(-\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha}\right) \langle -\psi|A|\psi\rangle
 \end{aligned} \tag{43}$$

em que foi usada a relação de completudeza

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_{\infty}} |n_{\infty} \dots n_2 n_1\rangle \langle n_1 n_2 \dots n_{\infty}| = 1. \tag{44}$$

#### 4. FUNÇÃO DE GRANDE PARTIÇÃO E INTEGRAL DE TRAJETÓRIAS

Vamos analisar agora a função de grande partição na base de estados coerentes. A partir da equação (43) a função de grande partição é descrita por

$$Z = Tr\{e^{-\beta K}\} = \int \prod_{\alpha} d\psi_{\alpha}^* d\psi_{\alpha} \exp\left(-\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha}\right) \langle -\psi|e^{-\beta K}|\psi\rangle, \tag{45}$$

em que  $K = H - \mu N$  é o hamiltoniano estendido, com  $H$ ,  $\mu$  e  $N$  denotando o operador hamiltoniano, o potencial químico e o operador número total de partículas, respectivamente;  $\beta = 1/k_B T$ , em que  $k_B$  denota a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura absoluta, respectivamente. Como o operador  $e^{-\beta K}$  é uma soma de produtos de todas as ordens do operador  $K$  (expansão de Taylor), é uma tarefa impraticável ordenar normalmente cada um destes termos para então utilizarmos as equações (1) e (24). É preciso então adotar outra estratégia para calcular a equação (45), utilizaremos o método conhecido como integral de trajetórias de Feynman. Iniciamos dividindo o operador  $e^{-\beta K}$  em  $M$  partes,

$$e^{-\beta K} = e^{M\left(-\frac{\beta}{M}K\right)} = e^{-\frac{\beta}{M}K} e^{-\frac{\beta}{M}K} \dots e^{-\frac{\beta}{M}K} = e^{-\frac{\beta}{M}K} e^{-\frac{\beta}{M}K} \dots e^{-\frac{\beta}{M}K} = \prod_{l=1}^M e^{-\frac{\beta}{M}K}. \tag{46}$$

Substituindo a equação (46) no elemento de matriz  $\langle -\psi|e^{-\beta K}|\psi\rangle$ , e inserindo a relação de completudeza (36) entre as partes do produto, tem-se

$$\begin{aligned}
 \langle -\psi | e^{-\beta K} | \psi \rangle &= \langle -\psi | e^{\frac{\beta}{M}K} \left[ \int \prod_{\alpha} d\psi_{\alpha}^* d\psi_{\alpha} \exp\left(-\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha}\right) | \psi \rangle \langle \psi | \right] \\
 &\quad \times e^{\frac{\beta}{M}K} \left[ \int \prod_{\alpha} d\psi_{\alpha}^* d\psi_{\alpha} \exp\left(-\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha}\right) | \psi \rangle \langle \psi | \right] \\
 &\quad \cdots \times \left[ \int \prod_{\alpha} d\psi_{\alpha}^* d\psi_{\alpha} \exp\left(-\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha}\right) | \psi \rangle \langle \psi | \right] e^{\frac{\beta}{M}K} | \psi \rangle \\
 &= \int \left[ \prod_{\alpha} d\psi_{\alpha}^{*(M-1)} d\psi_{\alpha}^{(M-1)} \right] \left[ \prod_{\alpha} d\psi_{\alpha}^{*(M-2)} d\psi_{\alpha}^{(M-2)} \right] \cdots \left[ \prod_{\alpha} d\psi_{\alpha}^{*(1)} d\psi_{\alpha}^{(1)} \right] \\
 &\quad \times \langle -\psi | e^{\frac{\beta}{M}K} | \psi^{(M-1)} \rangle \exp\left(-\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^{*(M-1)} \psi_{\alpha}^{(M-1)}\right) \langle \psi^{(M-1)} | e^{\frac{\beta}{M}K} | \psi^{(M-2)} \rangle \\
 &\quad \times \exp\left(-\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^{*(M-2)} \psi_{\alpha}^{(M-2)}\right) \cdots \exp\left(-\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^{*(1)} \psi_{\alpha}^{(1)}\right) \langle \psi^{(1)} | e^{\frac{\beta}{M}K} | \psi \rangle
 \end{aligned} \tag{47}$$

em que a segunda igualdade é obtida considerando que o produto  $d\tilde{\psi}_{\alpha}d\tilde{\psi}_{\beta}$  comuta com variáveis de Grassmann e suas conjugadas, com isso definimos

$$[d\tilde{\psi}_{\alpha}, \tilde{\psi}_{\beta}]_{+} = d\tilde{\psi}_{\alpha}\tilde{\psi}_{\beta} + \tilde{\psi}_{\beta}d\tilde{\psi}_{\alpha} = 0. \tag{48}$$

Utilizando a equação (47) e a notação

$$\begin{cases} \psi^{(0)} \equiv \psi \\ \psi^{(M)} \equiv -\psi \end{cases}, \tag{49}$$

que implica na conhecida condição de contorno anti-periódica para férmions [6]

$$\psi^{(M)} = -\psi^{(0)}, \tag{50}$$

a equação (45) torna-se

$$Tr\{e^{-\beta K}\} = \int \left[ \prod_{l=0}^M \prod_{\alpha} d\psi_{\alpha}^{*(l)} d\psi_{\alpha}^{(l)} \right] \left[ \prod_{l=1}^M \exp\left(-\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^{*(l)} \psi_{\alpha}^{(l)}\right) \langle \psi^{(l)} | e^{\frac{\beta}{M}K} | \psi^{(l-1)} \rangle \right], \tag{51}$$

em que o produtório no segundo colchete deve ser realizado no sentido decrescente do índice conforme a equação (47). (Os produtórios no primeiro colchete não têm essa característica porque de acordo com a equação (35) dois pares do tipo  $d\tilde{\psi}_{\alpha}d\tilde{\psi}_{\beta}$  comutam entre si.)

O passo fundamental é considerar  $M$  muito grande, pois

$$\begin{aligned}
 \lim_{M \rightarrow \infty} \langle \psi^{(l)} | e^{\frac{\beta}{M}K} | \psi^{(l-1)} \rangle &= \lim_{M \rightarrow \infty} \langle \psi^{(l)} | \left( 1 - \frac{\beta}{M} K(c_{\alpha}^+, c_{\alpha}) \right) | \psi^{(l-1)} \rangle \\
 &= \lim_{M \rightarrow \infty} \exp\left(\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^{*(l)} \psi_{\alpha}^{(l-1)}\right) \left( 1 - \frac{\beta}{M} K(\psi_{\alpha}^{*(l)}, \psi_{\alpha}^{(l-1)}) \right), \tag{52} \\
 &= \lim_{M \rightarrow \infty} \exp\left(\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^{*(l)} \psi_{\alpha}^{(l-1)}\right) \exp\left(-\frac{\beta}{M} K(\psi_{\alpha}^{*(l)}, \psi_{\alpha}^{(l-1)})\right)
 \end{aligned}$$

em que o operador  $K$  foi considerado normal ordenado, e foi utilizada a equação (31). Percebendo que, para duas grandezas não comutativas quaisquer  $A$  e  $B$ ,

$$\begin{aligned}
 \lim_{M \rightarrow \infty} \left( e^{\frac{A}{M}} e^{\frac{B}{M}} \right) &= \lim_{M \rightarrow \infty} \left[ \left( 1 + \frac{A}{M} + \frac{A^2}{2M^2} + O(M^{-3}) \right) \left( 1 + \frac{B}{M} + \frac{B^2}{2M^2} + O(M^{-3}) \right) \right] \\
 &= \lim_{M \rightarrow \infty} \left[ 1 + \frac{A}{M} + \frac{B}{M} + \frac{A^2}{2M^2} + \frac{AB}{M^2} + \frac{B^2}{2M^2} + O(M^{-3}) \right] \\
 &= \lim_{M \rightarrow \infty} \left[ 1 + \frac{1}{M}(A+B) + \frac{1}{2M^2}(A^2 + AB + BA + B^2) + \frac{AB}{2M^2} - \frac{BA}{2M^2} + O(M^{-3}) \right], \\
 &= \lim_{M \rightarrow \infty} \left[ 1 + \frac{1}{M}(A+B) + \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{M^2}(A+B)^2 \right] + \frac{1}{2M^2}(AB - BA) + O(M^{-3}) \right] \\
 &= \lim_{M \rightarrow \infty} \left[ 1 + \frac{1}{M}(A+B) \right] = \lim_{M \rightarrow \infty} e^{\frac{1}{M}(A+B)}
 \end{aligned}$$

e utilizando a equação (52) na equação (51), obtém-se

$$\begin{aligned}
 Tr\{e^{-\beta K}\} &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \left[ \prod_{l=0}^M \prod_{\alpha} d\psi_{\alpha}^{*(l)} d\psi_{\alpha}^{(l)} \right] \exp \left\{ - \sum_{l=1}^M \left[ \left( \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^{*(l)} (\psi_{\alpha}^{(l)} - \psi_{\alpha}^{(l-1)}) \right) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \frac{\beta}{M} K(\psi_{\alpha}^{*(l)}, \psi_{\alpha}^{(l-1)}) \right) \right] \}. \quad (53)
 \end{aligned}$$

Observe que o produtório decrescente no segundo colchete de (51) torna-se o somatório que aparece dentro das chaves nessa equação, que obviamente, por ser uma soma, pode ser realizada do modo normal.

Definindo um tempo imaginário como  $\tau = \beta\hbar$ , e uma fatia desse tempo como  $\Delta\tau = \beta\hbar / M$ , e repassando o índice  $l$  por  $\tau_l = (\beta\hbar / M)l$ , chega-se a

$$\begin{aligned}
 Tr\{e^{-\beta K}\} &= \lim_{\substack{M \rightarrow \infty \\ \Delta\tau \rightarrow 0}} \int \left[ \prod_{l=0}^M \prod_{\alpha} d\psi_{\alpha}^*(\tau_l) d\psi_{\alpha}(\tau_l) \right] \times \\
 &\quad \exp \left\{ - \sum_{l=1}^M \Delta\tau \left[ \sum_{\alpha} \left( \psi_{\alpha}^*(\tau_l) \frac{(\psi_{\alpha}(\tau_l) - \psi_{\alpha}(\tau_{l-1}))}{\Delta\tau} \right) + \frac{1}{\hbar} K(\psi_{\alpha}^*(\tau_l), \psi_{\alpha}(\tau_{l-1})) \right] \right\}. \quad (54)
 \end{aligned}$$

Introduzindo a notação

$$\lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \psi_{\alpha}^*(\tau_l) \frac{(\psi_{\alpha}(\tau_l) - \psi_{\alpha}(\tau_{l-1}))}{\Delta\tau} \equiv \psi_{\alpha}^*(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \psi_{\alpha}(\tau), \quad (55)$$

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{l=0}^M d\psi_{\alpha}^*(\tau_l) d\psi_{\alpha}(\tau_l) \equiv D\psi_{\alpha}^*(\tau) D\psi_{\alpha}(\tau) \quad (56)$$

e

$$\begin{aligned}
 &\lim_{\substack{M \rightarrow \infty \\ \Delta\tau \rightarrow 0}} \sum_{l=1}^M \Delta\tau \cdot K[\psi_{\alpha}^*(\tau_l), \psi_{\alpha}(\tau_{l-1})] \\
 &= \lim_{\substack{M \rightarrow \infty \\ \Delta\tau \rightarrow 0}} \sum_{l=1}^M \Delta\tau \cdot K[\psi_{\alpha}^*(l\beta\hbar / M), \psi_{\alpha}((l\beta\hbar / M) - (\beta\hbar / M))] \\
 &= \int_0^{\beta\hbar} d\tau \cdot K[\psi_{\alpha}^*(\tau), \psi_{\alpha}(\tau)], \quad (57)
 \end{aligned}$$

a equação (54) pode ser reescrita simbolicamente como

$$Z = Tr\{e^{-\beta K}\} = \int \prod_{\alpha} D\psi_{\alpha}^*(\tau) D\psi_{\alpha}(\tau) e^{-S}, \quad (58a)$$

com a ação  $S$  dada por

$$S = \frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[ \sum_{\alpha} \left( \hbar \psi_{\alpha}^*(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \psi_{\alpha}(\tau) \right) + K(\psi_{\alpha}^*(\tau), \psi_{\alpha}(\tau)) \right], \quad (58b)$$

sujeita a condição  $\psi_{\alpha}(\beta\hbar) = -\psi_{\alpha}(0)$ , de acordo com a equação (50).

A equação (58) é o ponto de partida para diversas aproximações em problemas de mecânica estatística. Com esse formalismo é possível obter a função de Green e realizar a expansão perturbativa diagramática de modo totalmente equivalente ao método tradicional [10]. O teorema de Wick, por exemplo, é mais facilmente demonstrável usando o formalismo das variáveis de Grassmann do que usando o formalismo tradicional [6].

## 5. FUNÇÃO DE GRANDE PARTIÇÃO DO MODELO DE HUBBARD

Como demonstração vamos escrever a função de grande partição (58) para o hamiltoniano de Hubbard [11],

$$H_{Hub} = \sum_{i,j} \sum_{\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}. \quad (59)$$

Esse hamiltoniano descreve o tunelamento dos elétrons entre os sítios da rede, de acordo com a amplitude  $t_{ij}$ , e atribui um aumento de energia ao sistema, de valor  $U > 0$ , para cada sítio duplamente ocupado, isto é, um sítio ocupado por dois elétrons (o princípio de Pauli obriga que esses elétrons tenham spins opostos). Nesse caso, o hamiltoniano estendido é dado por,

$$K = H_{Hub} - \mu N. \quad (60)$$

O operador número total de partículas é dado por,

$$N = \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma}. \quad (61)$$

Ordenando normalmente  $K$  tem-se,

$$K = \sum_{i,j} \sum_{\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + U \sum_i c_{i,\uparrow}^+ c_{i,\downarrow}^+ c_{i,\downarrow} c_{i,\uparrow} - \mu \sum_{i,\sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{i,\sigma}. \quad (62)$$

Portanto, a função de grande partição escrita no formalismo de integrais de trajetórias para o modelo de Hubbard é dada, segundo a equação (58), por

$$Z = \int \prod_{i,\sigma} D\psi_{i,\sigma}^*(\tau) D\psi_{i,\sigma}(\tau) e^{-S}, \quad (63a)$$

com a ação

$$S = \frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left\{ \sum_{i,j} \sum_{\sigma} \psi_{i,\sigma}^*(\tau) \left[ \left( \frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) \delta_{i,j} + t_{ij} \right] \psi_{j,\sigma}(\tau) + \frac{U}{\hbar} \sum_i \psi_{i,\uparrow}^*(\tau) \psi_{i,\downarrow}^*(\tau) \psi_{i,\downarrow}(\tau) \psi_{i,\uparrow}(\tau) \right\}. \quad (63b)$$

Por conta da antiperiodicidade de  $\psi_{\alpha}(\tau)$  ( $\psi_{\alpha}(\beta\hbar) = -\psi_{\alpha}(0)$ ) é possível realizar a expansão em série de Fourier

$$\psi_{\alpha}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta\hbar}} \sum_n e^{-i\omega_n \tau} \psi_{\alpha}(\omega_n). \quad (64)$$

Assim,

$$\begin{aligned} \psi_{\alpha}(\beta\hbar) = -\psi_{\alpha}(0) &\Rightarrow \frac{1}{\sqrt{\beta\hbar}} \sum_n e^{-i\omega_n \beta\hbar} \psi_{\alpha}(\omega_n) = -\frac{1}{\sqrt{\beta\hbar}} \sum_n \psi_{\alpha}(\omega_n) \Rightarrow \\ &\Rightarrow \sum_n (e^{-i\omega_n \beta\hbar} + 1) \psi_{\alpha}(\omega_n) = 0 \Rightarrow e^{-i\omega_n \beta\hbar} = -1 \\ &\therefore \omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta\hbar}, \end{aligned} \quad (65)$$

com  $n$  denotando um número inteiro. A frequência  $\omega_n$  é chamada de frequência de Matsubara. A partir da equação (64) tem-se

$$\psi_\alpha^*(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta\hbar}} \sum_n e^{i\omega_n\tau} \psi_\alpha^*(\omega_n). \quad (66)$$

Com as expansões (64) e (66) obtém-se

$$\begin{aligned} & \int_0^{\beta\hbar} d\tau \sum_i \left( \hbar \psi_{i,\sigma}^*(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \psi_{i,\sigma}(\tau) \right) \\ &= \int_0^{\beta\hbar} d\tau \sum_i \left( \hbar \left[ \frac{1}{\sqrt{\beta\hbar}} \sum_{n'} e^{i\omega_{n'}\tau} \psi_{i,\sigma}^*(\omega_{n'}) \right] \frac{\partial}{\partial \tau} \left[ \frac{1}{\sqrt{\beta\hbar}} \sum_n e^{-i\omega_n\tau} \psi_{i,\sigma}(\omega_n) \right] \right) \\ &= \sum_{n',n} \sum_i \hbar \psi_{i,\sigma}^*(\omega_{n'}) (-i\omega_n) \psi_{i,\sigma}(\omega_n) \frac{1}{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} e^{i(\omega_{n'}-\omega_n)\tau} d\tau, \\ &= \sum_{n',n} \sum_i \hbar \psi_{i,\sigma}^*(\omega_{n'}) (-i\omega_n) \psi_{i,\sigma}(\omega_n) \delta_{n',n} \\ &= \sum_n (-i\hbar\omega_n) \sum_i \psi_{i,\sigma}^*(\omega_n) \psi_{i,\sigma}(\omega_n) \end{aligned} \quad (67)$$

em que, usando a equação (65),

$$\frac{1}{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} e^{i(\omega_{n'}-\omega_n)\tau} d\tau = \begin{cases} \frac{1}{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau = 1, & \text{se } n' = n \\ \frac{1}{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} e^{i\frac{2\pi}{\beta\hbar}(n'-n)\tau} d\tau = -\frac{e^{i2\pi(n'-n)} - 1}{i2\pi(n'-n)} = 0, & \text{se } n' \neq n \end{cases} = \delta_{n',n} \quad (68)$$

Com as expansões (64) e (66), e a equação (67), a função de grande partição (63) torna-se

$$Z = \int \prod_{i,\sigma} D\psi_{i,\sigma}^*(\omega_n) D\psi_{i,\sigma}(\omega_n) e^{-S}, \quad (69a)$$

com a ação

$$\begin{aligned} S = \sum_n \left\{ - \sum_{i,j} \sum_\sigma \psi_{i,\sigma}^*(\omega_n) [i\omega_n \delta_{i,j} - \hbar^{-1}(t_{ij} - \mu\delta_{i,j})] \psi_{j,\sigma}(\omega_n) \right. \\ \left. + \frac{U}{\hbar} \sum_i \psi_{i,\uparrow}^*(\omega_n) \psi_{i,\downarrow}^*(\omega_n) \psi_{i,\downarrow}(\omega_n) \psi_{i,\uparrow}(\omega_n) \right\}. \end{aligned} \quad (69b)$$

Essa equação (ou, equivalentemente, a equação (63)) é o ponto para realizar a aproximação do campo médio dinâmico (DMFA) para o hamiltoniano de Hubbard. Em essência, a DMFA reduz (ou mapeia) um problema de rede de muitas partículas, como por exemplo o descrito pelo hamiltoniano de Hubbard, a um problema de sítio simples, como por exemplo o descrito pelo hamiltoniano de impureza de Anderson, com parâmetros efetivos determinados autoconsistentemente. Na DMFA as flutuações espaciais são desprezadas, mas as flutuações temporais de um sítio simples entre os quatro estados possíveis ( $|\uparrow\downarrow\rangle$ ,  $|\uparrow\rangle$ ,  $|\downarrow\rangle$  e  $|\downarrow\uparrow\rangle$ , que referem-se a um estado desocupado, um estado ocupado por um elétron com spin *up*, um estado ocupado por um elétron com spin *down* e um estado duplamente ocupado, respectivamente) são consideradas totalmente [12].

## 6. CONCLUSÃO

A formulação da teoria quântica de muitas partículas em termos da álgebra de Grassmann é uma ferramenta bastante poderosa e permite desenvolver diversas técnicas sofisticadas para a análise de materiais. A teoria do campo médio dinâmico, por exemplo, que hoje é uma das técnicas mais importantes no estudo de sistemas de elétrons fortemente correlacionados, foi desenvolvida a partir da análise da função de Green de uma partícula escrita no formalismo das variáveis de Grassmann. Este trabalho tem a finalidade de auxiliar estudantes de pós-graduação e pesquisadores em geral, que não sejam familiarizados com a álgebra de Grassmann, no estudo dessas técnicas. Nós obtivemos a função de grande partição no formalismo das variáveis de Grassmann de um modo mais didático e muito detalhado.

Nós iniciamos definindo estados quânticos coerentes, apresentamos os números de Grassmann como sendo os autovalores do operador de destruição nos estados coerentes e encontramos a álgebra desses números e de seus conjugados, calculamos a expansão de Taylor de uma função de variável de Grassmann e definimos a derivada e a integral dessas variáveis. Calculamos o elemento de matriz e o traço de operadores na base dos estados coerentes e por fim obtivemos a função de grande partição usando método das integrais de trajetórias de Feynman. Como demonstração para um caso específico escrevemos a função de grande partição para o hamiltoniano de Hubbard. A estrutura conceitual e matemática apresentadas aqui são acessíveis a alunos cursando o primeiro ano de pós-graduação.

## 7. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao CNPq e a CAPES pelo suporte financeiro.

- 
1. GEORGES, A.; KOTLIAR, G.; KRAUTH, W.; ROZENBERG, M.J. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion system and the limit of infinite dimensions. *Reviews of Modern Physics*, 68 (1): 13-125 (1996).
  2. GEORGES, A.; KOTLIAR, G. Hubbard model in infinite dimensions. *Physical Review B*, 45 (12): 6479-6483 (1992).
  3. BLANKENBECLER, R.; SCALAPINO, D.J.; SUGAR, R.L. Monte Carlo calculations of coupled boson-fermion systems. I. *Physical Review D*, 24 (8): 2278-2286 (1981).
  4. HIRSCH, J.E. Two-dimensional Hubbard model: Numerical simulation study. *Physical Review B*, 31 (7): 4403-4419 (1985).
  5. BEREZIN, F.A. *The Method of Second Quantization*. New York: Academic Press, 1966.
  6. NEGELE, J.W.; ORLAND, H. *Quantum Many-Particle Systems*. New York: Westview Press, 1988.
  7. MUNDIM, K.C.; MUNDIM, M.S.P. Álgebra de Grassmann e a Teoria Quântica. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 19 (2): 209-233 (1997).
  8. IMADA, M.; FUJIMORE, A.; TOKURA, Y. Metal-insulator transitions. *Reviews of Modern Physics*, 70 (4): 1039-1263 (1998).
  9. CARNEIRO, C.E.I.; THOMAZ, M.T. A Álgebra dos Férmions. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 22 (4): 474-488 (2000).
  10. FETTER, A.L.; WALECKA, J.D. *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. New York: McGraw-Hill, 1971.
  11. HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands. *Proceedings of the Royal Society A*, 276 (1365): 238-257 (1963).
  12. RIBEIRO, A.N. *Propriedades magnéticas do modelo de Hubbard e um novo modelo para nanotubos de carbono*. Tese de Doutorado do Núcleo de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Sergipe, São Cristóvão, 2010.
-

### APÊNDICE: OPERADORES FERMIÔNICOS DE CRIAÇÃO E DESTRUIÇÃO

Seja  $\{|n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle\}$  uma base completa de vetores que descrevem o número de partículas ocupando cada estado quântico. Um vetor  $|n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle$  denota que  $n_1$  partículas ocupam o estado 1,  $n_2$  partículas ocupam o estado 2 etc. Agora seja  $\hat{n}_s$  o operador que, nessa base, possui como autovalor o número de partículas que ocupam o estado  $s$  ( $n_s$ ), assim,

$$\hat{n}_s |n_1 \dots n_s \dots n_\infty\rangle = n_s |n_1 \dots n_s \dots n_\infty\rangle. \tag{A1}$$

Esse operador é chamado de operador número de partículas e deve ser descrito por uma matriz diagonal com seus autovalores ocupando a diagonal principal. Como os férmions obedecem ao princípio de Pauli os autovalores de  $\hat{n}_s$  só pode ser 0 ou 1. Considerando apenas o estado  $|n_s\rangle$  tem-se

$$\hat{n}_s = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{A2}$$

com as autofunções correspondentes dos autovalores 0 e 1 dadas por

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{A3}$$

respectivamente. Assim, o vetor  $|0\rangle$  denota o estado  $|n_s\rangle$  vazio, e o vetor  $|1\rangle$  denota o estado  $|n_s\rangle$  ocupado por uma partícula.

Definido o operador de destruição ou aniquilação  $c_s$  como o operador cuja ação diminui o número de partículas no estado  $s$  por 1, tem-se

$$c_s |0\rangle = 0 \quad \text{e} \quad c_s |1\rangle = |0\rangle, \tag{A4}$$

logo,

$$c_s |n_s\rangle = n_s |n_s - 1\rangle. \tag{A5}$$

Usando os vetores (A3) nas definições (A4) calcula-se

$$\begin{cases} c_s |0\rangle = 0 \Rightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} a_{11} = 0 \\ a_{21} = 0 \end{cases} \\ c_s |1\rangle = |0\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} a_{12} = 1 \\ a_{22} = 0 \end{cases} \end{cases} \quad \therefore \quad c_s = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{A6}$$

O operador adjunto de  $c_s$ ,  $c_s^+$ , é dado pela transposta complexo conjugada da matriz (A6), assim,

$$c_s^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{A7}$$

Aplicando esse operador nos vetores base (A3) tem-se

$$\begin{cases} c_s^+ |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |1\rangle \\ c_s^+ |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \end{cases}. \tag{A8}$$

Logo,  $c_s^+$  satisfaz

$$c_s^+ |n_s\rangle = (1 - n_s) |n_s + 1\rangle, \tag{A9}$$

o que mostra que esse operador atua aumentando o número de partículas no estado  $s$  por 1, por essa razão, ele é chamado de operador de criação. Através das equações (A6) e (A7) chega-se a

$$c_s^+ c_s = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A10})$$

Comparando com a equação (A2) obtém-se

$$\hat{n}_s = c_s^+ c_s. \quad (\text{A11})$$

Calculando o produto  $c_s c_s^+$  através de (A6) e (A7) tem-se

$$c_s c_s^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A12})$$

As equações (A10) e (A12) revelam que

$$c_s c_s^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1-1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = -c_s^+ c_s + 1, \quad (\text{A13})$$

ou seja, os operadores  $c_s$  e  $c_s^+$  não comutam ( $c_s c_s^+ \neq c_s^+ c_s$ ) e diferem da anticomutação ( $c_s c_s^+ = -c_s^+ c_s$ ) pela matriz identidade. Além disso,

$$(c_s)^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{A14})$$

e

$$(c_s^+)^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = 0. \quad (\text{A15})$$

As propriedades (A13)-(A15) são conseqüências do princípio de Pauli. Pelo princípio de Pauli  $n_s = 0$  ou 1 e como o operador  $c_s$  ( $c_s^+$ ) destrói (cria) uma partícula no estado  $|n_s\rangle$  a aplicação de  $c_s c_s$  ( $c_s^+ c_s^+$ ) gera um estado  $|n_s - 2\rangle$  ( $|n_s + 2\rangle$ ) que obviamente não tem sentido físico. No caso  $|n_s\rangle = |0\rangle$  o operador  $c_s c_s^+$  não altera este estado pois ele cria e depois destrói uma partícula em um estado que originalmente estava vazio, por outro lado o operador  $c_s^+ c_s$  destrói e depois cria uma partícula, mas não é possível destruir uma partícula no estado  $|0\rangle$ , conseqüentemente  $c_s^+ c_s |0\rangle = 0$ . Entretanto, no caso  $|n_s\rangle = |1\rangle$  as ações destes operadores se invertem, isto é, agora é a ação do operador  $c_s c_s^+$  que é igual a zero ( $c_s c_s^+ |1\rangle = 0$ ), pois este cria uma partícula num estado já ocupado, enquanto o operador  $c_s^+ c_s$  não altera este estado pois ele destrói, mas depois cria uma partícula. É por conta dessa inversão de resultados que os operadores  $c_s c_s^+$  e  $c_s^+ c_s$  são relacionados entre si por um operador identidade.

As equações (A13)-(A15) podem ser escritas da seguinte forma:

$$[c_s, c_s^+]_+ = 1, \quad [c_s, c_s]_+ = 0 \quad \text{e} \quad [c_s^+, c_s^+]_+ = 0, \quad (\text{A16})$$

em que  $[A, B]_+ = AB + BA$  é o anticomutador dos operadores arbitrários  $A$  e  $B$ . Esses anticomutadores definem completamente a ação dos operadores de criação e destruição em um estado quântico representado na base dos números de ocupação, no entanto, não definem a ação desses operadores quando aplicados em estados diferentes. Como o princípio de Pauli não impõe restrições quando duas partículas são destruídas ou criadas, ou uma criada e outra destruída, em estados distintos, isso indica que  $c_s c_l \neq 0$ ,  $c_s^+ c_l^+ \neq 0$  e que  $c_s c_l^+$  não é relacionado com  $c_l^+ c_s$  pelo operador identidade, e como esse mesmo princípio implica que a função de onda de um sistema de partículas fermiônicas deve ser antisimétrica, pois as partículas são indistinguíveis, tem-se  $c_s c_l = -c_l c_s$ ,  $c_s^+ c_l^+ = -c_l^+ c_s^+$  e  $c_s c_l^+ = -c_l^+ c_s$ , logo,

$$[c_s, c_l^+]_+ = \delta_{s,l}, \quad [c_s, c_l]_+ = 0 \quad \text{e} \quad [c_s^+, c_l^+]_+ = 0. \quad (\text{A17})$$

Observando a primeira linha da equação (A8) nota-se que é possível escrever um estado quântico ocupado por uma partícula como o operador de criação aplicado nesse estado vazio. Assim,

$$\begin{aligned}
 |n_1 \cdots n_s \cdots n_\infty\rangle &= |n_1\rangle \otimes \cdots \otimes |n_s\rangle \otimes \cdots \otimes |n_\infty\rangle \\
 &= (c_1^+)^{n_1} |0\rangle \otimes \cdots \otimes (c_s^+)^{n_s} |0\rangle \otimes \cdots \otimes (c_\infty^+)^{n_\infty} |0\rangle \\
 &= (c_1^+)^{n_1} \cdots (c_s^+)^{n_s} \cdots (c_\infty^+)^{n_\infty} |0 \cdots 0 \cdots 0\rangle \\
 &= (c_1^+)^{n_1} \cdots (c_s^+)^{n_s} \cdots (c_\infty^+)^{n_\infty} |\mathbf{0}\rangle
 \end{aligned} \tag{A18}$$

em que o vetor  $|\mathbf{0}\rangle = |0 \cdots 0 \cdots 0\rangle$  é chamado de vácuo e denota a situação em que todos os estados possíveis para as partículas estão vazios. A ação dos operadores  $c_s$  e  $c_s^+$  em um vetor de estado de um sistema de partículas  $|n_1 \cdots n_s \cdots n_\infty\rangle$  é dado por

$$\begin{aligned}
 c_s |n_1 \cdots n_s \cdots n_\infty\rangle &= c_s (c_1^+)^{n_1} \cdots (c_s^+)^{n_s} \cdots (c_\infty^+)^{n_\infty} |\mathbf{0}\rangle \\
 &= (-1)^{n_1} (c_1^+)^{n_1} c_s \cdots (c_s^+)^{n_s} \cdots (c_\infty^+)^{n_\infty} |\mathbf{0}\rangle \\
 &= \begin{cases} (-1)^{n_1+\cdots+n_\infty} (c_1^+)^{n_1} \cdots (c_s^+)^{n_s} \cdots (c_\infty^+)^{n_\infty} c_s |\mathbf{0}\rangle, & se \quad n_s = 0 \\ (-1)^{n_1+\cdots+n_{s-1}} (c_1^+)^{n_1} \cdots (1 - c_s^+ c_s) \cdots (c_\infty^+)^{n_\infty} |\mathbf{0}\rangle, & se \quad n_s = 1 \end{cases} \\
 &= \begin{cases} 0, & se \quad n_s = 0 \\ (-1)^{n_1+\cdots+n_{s-1}} (c_1^+)^{n_1} \cdots (c_{s-1}^+)^{n_{s-1}} (c_{s+1}^+)^{n_{s+1}} \cdots (c_\infty^+)^{n_\infty} |\mathbf{0}\rangle \\ + (-1)^{n_1+\cdots+n_\infty} (c_1^+)^{n_1} \cdots c_s^+ \cdots (c_\infty^+)^{n_\infty} c_s |\mathbf{0}\rangle, & se \quad n_s = 1 \end{cases} \\
 &= \begin{cases} 0, & se \quad n_s = 0 \\ (-1)^{n_1+\cdots+n_{s-1}} (c_1^+)^{n_1} \cdots (c_{s-1}^+)^{n_{s-1}} (c_{s+1}^+)^{n_{s+1}} \cdots (c_\infty^+)^{n_\infty} |\mathbf{0}\rangle, & se \quad n_s = 1 \end{cases}
 \end{aligned} \tag{A19}$$

e

$$\begin{aligned}
 c_s^+ |n_1 \cdots n_s \cdots n_\infty\rangle &= c_s^+ (c_1^+)^{n_1} \cdots (c_s^+)^{n_s} \cdots (c_\infty^+)^{n_\infty} |\mathbf{0}\rangle \\
 &= (-1)^{n_1} (c_1^+)^{n_1} c_s^+ \cdots (c_s^+)^{n_s} \cdots (c_\infty^+)^{n_\infty} |\mathbf{0}\rangle \\
 &= \begin{cases} (-1)^{n_1+\cdots+n_{s-1}} (c_1^+)^{n_1} \cdots c_s^+ \cdots (c_\infty^+)^{n_\infty} c_s |\mathbf{0}\rangle, & se \quad n_s = 0 \\ (-1)^{n_1+\cdots+n_{s-1}} (c_1^+)^{n_1} \cdots (c_s^+)^2 \cdots (c_\infty^+)^{n_\infty} |\mathbf{0}\rangle, & se \quad n_s = 1 \end{cases} \\
 &= \begin{cases} (-1)^{n_1+\cdots+n_{s-1}} (c_1^+)^{n_1} \cdots c_s^+ \cdots (c_\infty^+)^{n_\infty} c_s |\mathbf{0}\rangle, & se \quad n_s = 0 \\ 0, & se \quad n_s = 1 \end{cases}
 \end{aligned} \tag{A20}$$

em que foram usadas as relações (A17), a primeira equação em (A4) e a equação (A15). As equações (A19) e (A20) podem ser escritas de forma sucinta como

$$c_s |n_1 \cdots n_s \cdots n_\infty\rangle = (-1)^{S_s} n_s |n_1 \cdots n_{s-1} (n_s - 1) n_{s+1} \cdots n_\infty\rangle \tag{A21}$$

e

$$c_s^+ |n_1 \cdots n_s \cdots n_\infty\rangle = (-1)^{S_s} (1 - n_s) |n_1 \cdots n_{s-1} (n_s + 1) n_{s+1} \cdots n_\infty\rangle, \tag{A22}$$

com  $S_s = \sum_{i=1}^{s-1} n_i$ .