FÍSICA da MATÉRIA CONDENSADA

Mestrado em Engenharia Física Tecnológica

Série 1

1. Considere uma partícula livre sob a acção de um campo magnético uniforme orientado segundo o eixo dos z. Resolva a equação de Schrödinger considerando (a) a gauge de Landau

$$\vec{A} = (-By, 0, 0)$$

e (b) a gauge simétrica

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r}.$$

2. Escreva a equação de evolução dos estados $|\psi(t)>$, dum operador genérico $\hat{A}(t)$ e da matriz densidade $\hat{\rho}(t)$, nas representações de Schrödinger, de Heisenberg e da interacção. Obtenha igualmente a equação de evolução da média $<\hat{A}> = Tr\hat{\rho}(t)\hat{A}(t)$ e verifique a sua invariância da representação usada.

3. Prove a identidade:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{\mathcal{H}}_0+\hat{\mathcal{H}}_{int})(t-t_i)} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}_0(t-t_i)}T_t e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t}\hat{\mathcal{H}}^I_{int}(t')dt'}$$

em que T_t é o símbolo do ordenamento cronológico e

$$\hat{\mathcal{H}}^I_{int} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}_0(t-t_i)}\hat{\mathcal{H}}_{int}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}_0(t-t_i)}$$

é o Hamiltoniano da interacção na representação da interacção.

4. a) Para um Hamiltoniano não perturbado da forma

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2\hat{x}^2,$$

obtenha os operadores $\hat{x}_I(t)$ e $\hat{p}_I(t)$, na representação da interacção. Calcule o comutador $[\hat{x}_I(t), \hat{p}_I(t')]$.

b) Para um Hamiltoniano não perturbado da forma

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \hbar\omega_0\hat{a}^\dagger\hat{a},$$

sendo $\hat{a}^\dagger$, $\hat{a}$ operadores de criação e de destruição de bosões ou fermiões, obtenha os operadores $\hat{a}_I^\dagger(t)$, $\hat{a}_I(t)$, na representação da interacção. Calcule o comutador $[\hat{a}_I(t), \hat{a}_I^\dagger(t')]$.

5. a) Calcule a função de partição e as funções de correlação $< \hat{a}(t)\hat{a}^\dagger(t') >$ e $< \hat{a}^\dagger(t')\hat{a}(t) >$ para um sistema bosónico ou fermiónico, de um grau de liberdade, descrito pelo Hamiltoniano

$$\hat{\mathcal{H}} = \hbar\omega_0 \hat{a}^\dagger \hat{a}$$

e que se encontra em equilíbrio termodinâmico à temperatura T.

b) Repita os cálculos para $T = 0°K$.

6. As matrizes de Pauli satisfazem a identidade

$$(\vec{a}.\vec{\sigma})\left(\vec{b}.\vec{\sigma}\right) = \vec{a}.\vec{b} + i\left(\vec{a} \times \vec{b}\right).\vec{\sigma}$$

se todas as componentes de $\vec{a}$ e $\vec{b}$ comutarem com as componentes de $\vec{\sigma}$. Se as componentes de $\vec{a}$ comutarem entre si então $\vec{a} \times \vec{a} = 0$. Como as componentes de $\vec{p}$ comutam, é possível na ausência de um campo magnético escrever a energia cinética de uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ na forma $(\vec{\sigma}.\vec{p})^2/2m$. No entanto, na presença de um campo as componentes de $\vec{p} - e\vec{A}/c$ não comutam entre si. Mostre que

$$\frac{1}{2m}\left[\vec{\sigma}.\left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c}\right)\right]^2 = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c}\right)^2 - \frac{e}{mc}\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}.\vec{H},$$

que dá portanto as contribuições de spin e orbital numa forma compacta (obtendo-se $g_0 = 2$).

7. Considere os operadores $J_+ = J_x + iJ_y$ e $J_- = J_x - iJ_y$, onde J_x, J_y, J_z são as componentes do operador momento angular e $|jm_j>$ os vectores próprios de J^2, J_z.

a) Prove que satisfazem às relações de comutação $[J^2, J_+] = 0$, $[J^2, J_-] = 0$, $[J_z, J_+] = \hbar J_+$, $[J_z, J_-] = -\hbar J_-$, $[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$.

b) Obtenha as equações que exprimem a acção de J_+ e J_- em $|jm_j>$.

8. No efeito de Zeeman a interação de um átomo com um campo magnético $\vec{h}$ é descrita pelo Hamiltoneano

$$\Delta H = -\frac{e}{2mc}\vec{h} \cdot (\vec{L} + 2\vec{S})$$

sendo a alteração dos níveis de energia dada por $\Delta E = -Mg\mu_B h$, em que $M = -J, -J+1, \cdots, +J$, $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$ e g é o factor de Landé.

Obtenha a expressão

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}.$$

para o factor de Landé.

9. Um sistema quântico magnético é perturbado acoplando-o a um campo magnético externo, de acordo com o Hamiltoneano

$$\delta H = -h\vec{(t)} \cdot \vec{S}$$

Mostre que a alteração da magnetização é dada, na chamada resposta linear, por

$$\delta m\vec{(t)} = \delta < \vec{S_H}(t) >= \frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t} dt' < [S_H(t), \vec{S}_H(t') \cdot \vec{h}(t')] >$$

em que $< \cdots >$ representa a média com a matriz densidade. Obtenha a expressão da susceptibilidade.

10. Considere um spin em interacção com um campo magnético dado por $\vec{h} = (h_1 \cos\omega t, h_1 \sin\omega t, h_0)$. Dado que o efeito de um campo magnético sobre um spin é uma precessão em torno desse campo, é possível tratar exactamente este problema passando para um referencial que roda em torno do eixo dos z com velocidade angular ω.

Obtenha a expressão do spinor em função do tempo. Admitindo que estava inicialmente no estado $|+>$, vector próprio de S_z, determine a probabilidade de transição para o estado $|->$ e determine quando é que essa probabilidade é máxima (condição de ressonância em ressonância magnética nuclear).

11. a) Numa rotação infinitesimal um vector $\vec{A}$ transforma-se de acordo com $\delta\vec{A} = \delta\phi\vec{n} \times \vec{A}$ em que $\delta\phi$ é o ângulo infinitesimal de rotação e $\vec{n}$ o eixo

da rotação. Mostre que os geradores L^i das rotações, em coordenadas cartesianas, são portanto representados pelas matrizes $L^i_{jk} = -i\epsilon^{ijk}$. Verifique que estas matrizes constituem uma representação de momento angular com $l = 1$, verificando que as relações de comutação $[L^i, L^j] = i\epsilon^{ijk}L^k$ e a relação $\vec{L}^2 = 2$, são satisfeitas, e verificando que esta é a forma que os operadores $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ tomam na base $\psi_i(\vec{r}) = x^i$.

12. Considere dois spins $\frac{1}{2}$.

a) Mostre que os estados de spin total $S = 1$, com $m = -1, 0, 1$ são simétricos para a permutação dos dois spins e que o estado de spin total $S = 0$, com $m = 0$, é anti-simétrico.

b) Expresse o operator de troca em termos do operador $\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2$.

13. a) Mostre que as representações de spin $\frac{1}{2}$ das rotações podem ser escritas da forma

$$e^{-i\frac{\phi}{2}\vec{n}.\vec{\sigma}} = \cos\frac{\phi}{2} - i\vec{n}.\vec{\sigma}\sin\frac{\phi}{2}$$

em que $\vec{\sigma}$ são as matrizes de Pauli e o vector $\vec{n}$ é unitário, $|\vec{n}|^2 = 1$, usando $(\vec{a}.\vec{\sigma})^2 = |\vec{a}|^2$.

b) Mostre que as representações de spin 1 das rotações podem ser escritas da forma

$$e^{-i\phi\vec{n}.\vec{L}} = \delta^{||} + \cos\phi\delta^{\perp} - i\sin\phi\vec{n}.\vec{L}$$

em que as componentes de $\vec{L}$ são dadas por $L^i_{lm} = -i\epsilon_{ilm}$ e o vector $\vec{n}$ é unitário, $|\vec{n}|^2 = 1$. As matrizes $\delta^{||}, \delta^{\perp}$ são definidas por $\delta^{||}_{lm} = n_l n_m$ e $\delta^{\perp}_{lm} = \delta_{lm} - \delta^{||}_{lm}$. Verifique que $(\vec{n}.\vec{L})^2 = \delta^{\perp}$ e que $(\vec{n}.\vec{L})\delta^{\perp} = \vec{n}.\vec{L}$.

Particularize para uma rotação em torno do eixo dos z.

c) Mostre, usando o resultado da alínea b), que o operador momento angular $\vec{J}$ na representação J tem, em virtude de ser um operador vectorial, de satisfazer a

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{n}.\vec{J}\phi\right)\vec{J}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{n}.\vec{J}\phi\right) = \vec{n}(\vec{n}.\vec{J}) - \vec{n} \times (\vec{n} \times \vec{J})\cos\phi + \vec{n} \times \vec{J}\sin\phi$$

verificando que o lado direito da equação é o vector obtido rodando $\vec{J}$ em torno de $\vec{n}$ por um ângulo ϕ.

Verifique explicitamente esta relação para spin $\frac{1}{2}$ usando os resultados da alínea a).

14. Mostre as seguintes relações:

a)

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]}$$

se se verificar

$$[[A,B],A] = [[A,B],B] = 0$$

b)

$$a^\dagger f(N) = f(N-1)a^\dagger$$

$$af(N-1) = f(N)a$$

em que $a, a^\dagger$ são operadores de destruição e de criação bosónicos ou fermiónicos e $N = a^\dagger a$.

c)

$$J_+ f(J_z) = f(J_z - 1)J_+$$

$$J_- f(J_z - 1) = f(J_z)J_-$$

em que $J_\pm, J_z$ são operadores de momentum angular.

15. Demonstre as seguintes identidades, válidas para quaisquer operadores:

$$[A, BC] = [A, B]C - B[C, A]$$

$$[A, BC] = \{A, B\}C - B\{C, A\}$$

$$[AB, C] = A[B, C] - [C, A]B$$

$$[AB, C] = A\{B, C\} - \{C, A\}B$$

$$[AB, CD] = A[B, C]D - [C, A]BD + CA[B, D] - C[D, A]B$$

$$[AB, CD] = A\{B, C\}D - \{C, A\}BD + CA\{B, D\} - C\{D, A\}B$$

$$[AB, CD] = A[B, C]D - AC[D, B] + [A, C]DB - C[D, A]B$$

$$[AB, CD] = A\{B, C\}D - AC\{D, B\} + \{A, C\}DB - C\{D, A\}B$$

16. a) Mostre que o operador número $N = \sum_{is} a_{is}^{\dagger} a_{is}$ comuta com os operadores que tenham igual número de operadores de criação e de destruição.

b) Mostre que o operador S_z comuta com os operadores que tenham igual número de operadores de subida S_+ e de descida S_-.

17. As relações de Kramers-Krönig, traduzindo o princípio da causalidade, relacionam a parte real e a parte imaginária da susceptibilidade de acordo com:

$$\chi^R(\omega) = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi^I(\omega')}{\omega' - \omega} \frac{d\omega'}{\pi}$$

$$\chi^I(\omega) = -P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi^R(\omega')}{\omega' - \omega} \frac{d\omega'}{\pi}$$

Utilize a primeira destas relações para calcular a parte real da susceptibilidade sabendo que a parte imaginária é dada por:

a) $\chi^I(\omega) = \alpha\delta(\omega - \omega_0)$,

b) $\chi^I(\omega) = \lambda[\theta(\omega - \omega_1) - \theta(\omega - \omega_2)]$ com $\omega_1 < \omega_2$ e sendo $\theta(\omega) = 0$, se $\omega < 0$ e $\theta(\omega) = 1$, se $\omega > 0$.

c) $\chi^I(\omega) = \frac{\lambda\gamma\omega}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \gamma^2\omega^2}$.

18. a) Mostre que a fórmula de inversão da transformada

$$\tilde{f}(\omega) = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(\omega')}{\omega' - \omega} \frac{d\omega'}{\pi}$$

é dada por

$$f(\omega) = -P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{f}(\omega')}{\omega' - \omega} \frac{d\omega'}{\pi}$$

b) Por transformação de Fourier escreva estas relações no domínio do tempo.

19. No método de Lanczos parte-se de um dado estado $|0>$ e aplica-se repetidamente o Hamiltoniano, gerando a sequência de estados

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}|0> &= \epsilon_0|0> + \alpha_1|1> & (1)\\
\mathcal{H}|1> &= \alpha_1^*|0> + \epsilon_1|1> + \alpha_2|2> & (2)\\
\mathcal{H}|2> &= \alpha_2^*|1> + \epsilon_2|2> + \alpha_3|3> & (3)
\end{aligned}$$

etc, que eventualmente é truncada, fazendo-se a diagonalização da matriz tridiagonal assim obtida, existindo, para isso, métodos especiais. No caso de haver degenerescência de estados, será necessário recomeçar usando um estado ortogonal ao anteriormente usado.

No método de Lanczos modificado trunca-se logo no segundo estado, ficando-se assim com a matriz

$$\mathcal{H}_{eff} = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & \alpha_1 \\ \alpha_1^* & \epsilon_1 \end{pmatrix}$$

na base dos estados $|0>, |1>$. Diagonalizando-se esta matriz obtêm-se os estados $|0>', |1>'$. O processo é iterado tomando agora o estado $|0>'$ como o novo estado $|0>$.

Obtenha as equações necessárias para escrever um programa de computador para calcular o estado fundamental e a sua energia, usando o método de Lanczos modificado. A grande vantagem computacional deste método é o facto de ser preciso guardar em memória três vectores apenas.

20. Demonstre que, se o Hamiltoniano $H(t)$ depender de um parâmetro λ, se verifica:

$$\frac{\partial \hat{U}(t,t_i)}{\partial \lambda} = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t} dt' \hat{U}(t,t')\frac{\partial \hat{H}(t')}{\partial \lambda}\hat{U}(t',t_i)$$

em que $U(t,t')$ é o operador de evolução relativo ao Hamiltoniano $\hat{H}(t)$.

21. Demonstre as seguintes identidades, válidas para dois operadores quaisquer A e B:

$$B(\lambda) = e^{\lambda A} B e^{-\lambda A}$$

$$
\begin{aligned}
&= B + \int_0^{\lambda} d\lambda' [A, B(\lambda')] \\
&= B + \lambda[A, B] + \frac{\lambda^2}{2!}[A, [A, B]] + \frac{\lambda^3}{3!}[A, [A, [A, B]]] + \cdots
\end{aligned}
$$

$$
[B, e^{-\lambda A}] = \int_0^{\lambda} d\lambda' e^{-(\lambda - \lambda')A}[A, B]e^{-\lambda' A}
$$

Como exemplo, calcule

$$
[J_z, e^{-\alpha J_{\pm}}] = \mp \alpha J_{\pm} e^{-\alpha J_{\pm}}
$$