FÍSICA da MATÉRIA CONDENSADA
Mestrado em Engenharia Física Tecnológica
Série 1a

1. A matriz densidade ρ de um sistema quântico é um operador hermítico, de traço $Tr\rho = 1$ e $Tr\rho^2 \leq 1$, verificando-se a igualdade no caso de o sistema se encontrar num estado quântico puro, i.e. de termos $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$.

Mostre que no caso de um sistema de dois níveis (spin $\frac{1}{2}$ ou qubit em informação e informação quânticas)a matriz densidade é dada por $\rho = \frac{1}{2}(1 + \vec{r}\cdot\vec{\sigma})$, em que $\vec{r}$ é um vector real, com $|\vec{r}| \leq 1$ (esfera de Bloch), verificando-se a igualdade no caso de um estado puro.

Calcule $\vec{m} = Tr\rho\frac{\vec{\sigma}}{2}$.

Formulário: $\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}I + i\epsilon_{ijk}\sigma_k$, $TrI = 2$, $Tr\sigma_i = 0$.

2. Considere um sistema de N partículas, descritas pelo grau de liberdade ϕ_j, $j = 0, 1, \cdots, N-1$, com condições fronteira periódicas, i.e. $\phi_{j+N} = \phi_j$. As partículas estão afastadas entre si de uma distância a, pelo que a coordenada da partícula j é $x_j = ja$. Defina $L = Na$.

a) Defina a transformada de Fourier

$$\phi_j = \frac{1}{N}\sum_k e^{ikj}\tilde{\phi}_k$$

indicando os possíveis valores do momento k. Obtenha a fórmula de inversão desta transformada e indique a(s) relaçõe(s) de ortogonalidade (ou de conjunto completo) envolvida(s).

b) Considere os limites i) $N \to \infty, a$ fixo, ii) $a \to 0, N \to \infty$, com L fixo, iii) $a \to 0, L \to \infty$, e obtenha as expressões da transformação de Fourier directa e inversa. Dê exemplos de aplicação de cada um dos casos obtidos.

Indique também a forma que as relações de ortogonalidade ou de conjunto completo tomam, nos diferentes casos, obtendo expressões para as séries ou integrais de Fourier do símbolo de Kronecker ou da função delta de Dirac (ou do pente de Dirac).

c) Ao escrever um programa em FORTRAN como implementa a enumeração de $0, 1, \cdots, N-1$ ou, mais geralmente, uma enumeração que não seja de 1 a N?

3. Considere um sistema de N partículas, que poderão ser spins J ou fermiões com ou sem spin, com condições periódicas fronteira.

a) Quais são os valores possíveis do momento? Indique quais são as funções próprias do operador das translações e discuta a divisão do espaço de Hilbert em conjuntos irredutíveis.

b) Admitindo que o Hamiltoniano é invariante para translações e que N ou S_z também são conservados, indique uma base conveniente de funções de onda.

4. No estudo do momento angular é conveniente definir as componentes esféricas $S^{\pm} = S^x \pm iS^y$ e $S^0 = S^z$ de um vector $\vec{S}$.

a) Verifique que se tem $S^x = \frac{1}{2}(S^- + S^+), S^y = \frac{i}{2}(S^- - S^+)$, de onde resulta que $\vec{S} = \sum_\alpha S^\alpha \vec{e}_{\bar{\alpha}} = S^+\vec{e}_- + S^-\vec{e}_+ + S^0\vec{e}_0$, em que se definiu $\vec{e}_{\pm} = \frac{1}{2}(\vec{e}_x \pm i\vec{e}_y), \vec{e}_0 = \vec{e}_z$ e usou a notação $\bar{\alpha} = -\alpha$, com $\alpha = 0, \pm 1$.

b) Verifique que estes vectores satisfazem $\vec{e}_0^{\,2} = 1, \vec{e}_o \cdot \vec{e}_{\pm} = 0, \vec{e}_{\pm}^{\,2} = 0$ e $\vec{e}_+ \cdot \vec{e}_- = \frac{1}{2}$, tendo-se portanto $S^{\pm} = 2\vec{e}_{\pm} \cdot \vec{S}$ e $S^0 = \vec{e}_0 \cdot \vec{S}$.

Verifique também que $\vec{e}_- \times \vec{e}_+ = \frac{i}{2}\vec{e}_0$ e $\vec{e}_{\pm} \times \vec{e}_0 = \pm i\vec{e}_{\pm}$. Esta última relação mostra que os vectores $\vec{e}_{\pm}$ são vectores próprios do operador $i\vec{e}_0\times$, com valores próprios ± 1, o que está de acordo com o exercício sobre as rotações a três dimensões. O outro vector próprio é o próprio vector $\vec{e}_0$, com valor próprio 0.

c) Verifique que os produtos interno e externo de dois vectores $\vec{a}$ e $\vec{b}$ são dados respectivamente por

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \frac{1}{2}(a^+b^- + a^-b^+) + a^0b^0$$

e

$$\vec{a} \times \vec{b} = i \begin{vmatrix} \frac{1}{2}\vec{e}_0 & \vec{e}_+ & \vec{e}_- \\ a^0 & a^+ & a^- \\ b^0 & b^+ & b^- \end{vmatrix}$$

d) Verifique que os factores 2 das fórmulas anteriores seriam evitados usando vectores e componentes normalizados $\frac{S^{\pm}}{\sqrt{2}}$ e $\sqrt{2}\vec{e}_{\pm}$. Em particular, as fórmulas para os produtos interno e externo podem reescrever-se como

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \frac{a^+}{\sqrt{2}}\frac{b^-}{\sqrt{2}} + \frac{a^-}{\sqrt{2}}\frac{b^+}{\sqrt{2}} + a^0b^0$$

e

$$\vec{a} \times \vec{b} = i \begin{vmatrix} \vec{e}_0 & \sqrt{2}\vec{e}_+ & \sqrt{2}\vec{e}_- \\ a^0 & \frac{a^+}{\sqrt{2}} & \frac{a^-}{\sqrt{2}} \\ b^0 & \frac{b^+}{\sqrt{2}} & \frac{b^-}{\sqrt{2}} \end{vmatrix}$$

e) Escreva a equação de precessão de um spin $\vec{S}$ num campo magnético $\vec{H}$

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \vec{S} \times \vec{H}$$

na base esférica.

5. Mostre que o operador $S_n = \vec{n} \cdot \vec{S} = \vec{n} \cdot \frac{\vec{\sigma}}{2}$, componente do operador $\vec{S} = \frac{\vec{\sigma}}{2}$, de spin $\frac{1}{2}$, segundo o vector $\vec{n} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$, é dado por

$$S_n = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

Determine os valores e vectores próprios deste operador.

6. Para um espaço vectorial de dimensão n, definem-se os símbolos completamente anti-simétricos $\epsilon_{i_1 \ldots i_n} = \epsilon^{i_1 \cdots i_n}$, iguais a 1, se $i_1 \cdots i_n$ for uma permutação par de $1, 2, \cdots, n$, iguais a -1, se for uma permutação ímpar, e iguais a 0, se houver índices repetidos.

Analogamente, definem-se os delta generalizados de Kronecker, $\delta^{i_1 \cdots i_m}_{j_1 \cdots j_m}$, com $m \leq n$, completamente anti-simétricos nos seus índices, iguais a 1, se $i_1 \cdots i_m$ for uma permutação par de $j_1 \cdots j_m$, iguais a -1, se for uma permutação ímpar, e iguais a 0, nos outros casos.

a) Mostre que

$$\epsilon^{i_1 \ldots i_n} \epsilon_{j_1 \cdots j_n} = \delta^{i_1 \cdots i_n}_{j_1 \cdots j_n}$$

$$\delta^{i_1 \cdots i_m}_{j_1 \cdots j_m} = \begin{pmatrix} \delta^{i_1}_{j_1} & \cdots & \delta^{i_1}_{j_m} \\ \cdots & \cdot & \cdot \\ \delta^{i_m}_{j_1} & \cdots & \delta^{i_m}_{j_m} \end{pmatrix}$$

com $m \leq n$.

b) Mostre que, partindo de $\delta^{i_1 \cdots i_n}_{j_1 \cdots j_n}$ e contraindo sucessivamente um índice, iremos obtendo $1, 2, \cdots, n$ vezes o delta generalizado seguinte, obtendo-se no final $\delta^{i_1 \cdots i_n}_{i_1 \cdots i_n} = n!$

c) Particularize para $n = 3$ e obtenha

$$\epsilon^{ijk} \epsilon_{abc} = \delta^{ijk}_{abc} = \begin{pmatrix} \delta^i_a & \delta^i_b & \delta^i_c \\ \delta^j_a & \delta^j_b & \delta^j_c \\ \delta^k_a & \delta^k_b & \delta^k_c \end{pmatrix}$$

$$\delta^{ij}_{ab} = \begin{pmatrix} \delta^i_a & \delta^i_b \\ \delta^j_a & \delta^j_b \end{pmatrix}$$

$$\delta^{ijp}_{abp} = \delta^{ij}_{ab}$$

$$\delta^{ip}_{ap} = 2\delta^i_a$$

$$\delta^p_p = 3$$

$$\epsilon^{ijk}\epsilon_{ijk} = \delta^{ijk}_{ijk} = 3!$$

Referência: I. S. Sokolnikoff, Tensor Analysis, John Wiley & Sons, Inc.

7. Mostre que se, na transformada discreta de Fourier,

$$\tilde{f}_k = \frac{1}{N}\sum_{l=0}^{N-1} e^{-i\frac{2\pi}{N}kl} f_l$$

em que $l, k \;=, 0, 1, \cdots, N-1$, o número de pontos, N, for par, se pode escrever

$$\tilde{f}_k = \frac{1}{N}\sum_{l=0}^{\frac{N}{2}-1} e^{-i\frac{2\pi}{\frac{N}{2}}kl} f_{2l} + e^{-i\frac{2\pi}{N}k}\frac{1}{N}\sum_{l=0}^{\frac{N}{2}-1} e^{-i\frac{2\pi}{\frac{N}{2}}kl} f_{2l+1},$$

separando as somas nos pontos pares e ímpares.

A transformada de Fourier fica assim decomposta na soma de duas transformadas de Fourier para um sistema com metade do tamanho (e multiplicação por uma fase), reduzindo a complexidade do seu cálculo. A Fast Fourier Transform baseia-se nesta ideia.

Referência: W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky and W. T. Vetterling, Numerical Recipes, The Art of Scientific Computing, Cambridge University Press, 1988.

8. Considere um oscilador harmónico forçado, com o Hamiltoniano dado por

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 - f(t)x.$$

a) Resolva as equações de movimento, com as condições iniciais $x(t_i) = x_i$ e $p(t_i) = p_i$.

b) Calcule os comutadores $[x(t), x(t')]$ e $[x(t), p(t')]$. Verifique que, por derivação do primeiro comutador em ordem a t', se obtem o segundo.

c) Se a força externa $f(t')$ for variada, qual é a variação da coordenada $x(t)$? Relacione com o comutador $[x(t), x(t')]$ e com a teoria da resposta linear.