FÍSICA da MATÉRIA CONDENSADA

Mestrado em Engenharia Física Tecnológica

Série 4a

1. Considere o funcional $S = \int dt d^3x \mathcal{L}(\phi_a, \frac{\partial \phi_a}{\partial t}, \frac{\partial \phi_a}{\partial \vec{x}})$ que depende dos campos $\phi_a(\vec{x}, t)$, $a = 1, \cdots, M$, e das suas primeiras derivadas espaciais e temporal. Mostre que, se os campos $\phi_a(\vec{x}, t)$ estiverem definidos na superfície fronteira da região de integração, a condição de estacionaridade deste funcional é dada por

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_a} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\frac{\partial \phi_a}{\partial t}} - \frac{\partial}{\partial x^i} \frac{\partial \mathcal{L}}{\frac{\partial \phi_a}{\partial x^i}} = 0$$

dentro dessa região, sujeito às condições fronteira na superfície.

2. Considere uma partícula em interacção com um campo electromagnético, de acordo com o Lagrangeano

$$\mathcal{L} = -mc^2 \sqrt{1 - \left(\frac{\vec{v}}{c}\right)^2} - e(V - \frac{\vec{v}}{c} \cdot \vec{A})$$

a) Mostre que, variando as coordenadas da partícula e definindo os campos

$$\vec{E} = -\nabla V - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A},$$

se obtém a equação de movimento $\frac{d\vec{\pi}}{dt} = \vec{F}$, em que $\vec{\pi} = \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1-\left(\frac{\vec{v}}{c}\right)^2}}$ é o momento da partícula e $\vec{F} = e(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B})$ é a força de Lorentz.

b) Obtenha o Hamiltoniano e verifique que o acoplamento da partícula ao campo electromagnético é do tipo acoplamento mínimo i.e. da forma $\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$ e $\mathcal{H} - eV$. Calcule os parêntesis de Poisson (ou, quanticamente, os comutadores) de $p_i - \frac{e}{c}A_i, i = x, y, z$, entre si e com $\mathcal{H} - eV$.

c) Como consequência da definição dos campos obtenha as equações de Maxwell sem fontes

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0.$$

Mostre que potenciais diferindo entre si de uma transformação de gauge i.e., relacionados entre si por

$$\vec{A}' = \vec{A} + \nabla\Lambda$$

$$V' = V - \frac{1}{c}\frac{\partial \Lambda}{\partial t}$$

definem os mesmos campos $\vec{E}$ e $\vec{B}$. A que indefinição do Lagrangeano está associada a invariância de gauge?

d) A densidade Lagrangeana do campo é dada por

$$\mathcal{L}_{EM} = -\frac{1}{16\pi} F_{\alpha\beta} F^{\alpha\beta} = \frac{1}{8\pi}\left(\vec{E}^2 - \vec{B}^2\right).$$

Mostre que variando os potenciais se obtêm as equações de Maxwell com fontes

$$\nabla \cdot \vec{E} = 4\pi\rho$$

$$\nabla \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c}\vec{J} + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

tendo definido $\rho(\vec{r}) = e\delta(\vec{r} - \vec{r}(t))$ e $\vec{J}(\vec{r}) = e\vec{v}(t)\delta(\vec{r} - \vec{r}(t))$. Verifique que $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0$.

e) Obtenha as equações de movimento dos potenciais e a forma que elas tomam nas gauges de Coulomb e de Lorentz, em que se tem $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ e $\frac{1}{c}\frac{\partial V}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{A} = 0$ respectivamente. Discuta a resolução destas equações nestas duas gauges e a separação dos potenciais e das correntes nas chamadas componentes transversais e longitudinal.

f) Discuta a introdução de um termo de escolha de gauge da forma $\delta\mathcal{L} = -\frac{\lambda}{8\pi}\left(\frac{\partial A^\alpha}{\partial x^\alpha}\right)^2$, bem como de um termo de massa do tipo $\delta\mathcal{L} = \frac{\mu^2}{8\pi}\left(A^\alpha A_\alpha\right)^2$. As gauges de Lorentz, Feynman e Landau são dadas por $\lambda = 0, 1, \infty$, respectivamente.

g) Obtenha a densidade Hamiltoniana.

3. Considere a densidade Lagrangeana

$$
\begin{aligned}
\mathcal{L} &= \frac{i\hbar}{2}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right) - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi - eV\psi^*\psi \\
&= \frac{1}{2}\left(\psi^*\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - eV\right)\psi + \left(\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - eV\right)\psi\right)^*\psi\right) - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi
\end{aligned}
$$

a) Mostre que variando os campos $\psi^*(\vec{x},t)$ e $\psi(\vec{x},t)$ se obtém a equação de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi$$

e o seu complexo conjugado.

b) A equação de Schrödinger não linear ou de Gross-Pitaevskii pode ser obtida juntando ao Lagrangeano um termo de interacção da forma $\mathcal{L}_{int} = \frac{g}{2}(\psi^*\psi)^2$. Obtenha esta equação.

4. A função de onda de Klein-Gordon é invariante numa transformação de Lorentz. As energias relativista e não relativista de uma partícula estão relacionadas entre si por $E_r = mc^2 + E_{nr}$.

a) Mostre que as funções de onda de Klein-Gordon e de Schrödinger estão relacionadas entre si por $\psi_{KG} = e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t}\psi_S$.

b) A partir da lei de transformação do tempo numa transformação de Lorentz obtenha a lei de transformação da função de onda de Schrödinger numa transformação de Galileu.

c) Verifique explicitamente que a equação de Schrödinger, para uma partícula num potencial ϕ, é invariante numa transformação de Galileu, em que $\vec{x}' = \vec{x} + \vec{V}t$, $t' = t$.

5. a) Considere a equação de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2\psi + eV\psi$$

na presença dos potenciais escalar V e vector $\vec{A}$.

a) Escreva a função de onda na forma $\psi(\vec{x},t) = |\psi(\vec{x},t)|e^{i\varphi(\vec{x},t)}$, com $|\psi(\vec{x},t)|$ e $\varphi(\vec{x},t)$ reais, e separe a equação de Schrödinger em parte real e parte imaginária.

b) Mostre que a equação relativa à parte imaginária é a equação da continuidade de um fluido em que $\rho = |\psi|^2$ e $m\vec{v} = \hbar\nabla\varphi - \frac{e}{c}\vec{A}$. Mostre que $\vec{p} = m\vec{v} + \frac{e}{c}\vec{A}$ é irrotacional, ou seja, satisfaz $\nabla \times \vec{p} = 0$. Mostre que a vorticidade do fluido $\vec{\omega} = \nabla \times \vec{v}$ satisfaz $m\nabla \times \vec{v} + \frac{e}{c}\vec{B} = \vec{0}$.

c) Mostre que a equação relativa à parte real se pode escrever na forma

$$\frac{1}{2}m\vec{v}^2 + eV_{eff} + \hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = 0,$$

em que $eV_{eff} = eV + V_Q$. Determine V_Q. Compare com a equação de Hamilton-Jacobi da Mecânica Analítica, em que se faz $\varphi = \frac{S}{\hbar}$. Interprete fisicamente. Esta reescrita da equação de Schrödinger está na base da formulação de de Broglie e de Bohm da Mecânica Quântica.

c) Tome o gradiente da equação de Hamilton-Jacobi e use a identidade $\nabla\left(\frac{1}{2}\vec{v}^2\right) = \vec{v} \times (\nabla \times \vec{v}) + (\vec{v} \cdot \nabla)\vec{v}$ para obter a equação de movimento $m\frac{d\vec{v}}{dt} = e\left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B}\right)$, em que $\vec{E} = -\nabla V - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}$ e $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$.

Referências:

H. Goldstein, Classical mechanics, Addison-Wesley Pub. Co., 1980.

D. F. Styer, M. S. Balkin, K. M. Becker, M. R. Burns, C. E. Dudley, S. T. Forth, J. S. Gaumer, M. A. Kramer, D. C. Oertel, L. H. Park, M. T. Rinkoski, C. T. Smith and T. D. Wotherspoon, Nine formulations of quantum mechanics, Am. J. Phys. 70, 288 (2002).

Feynman, Leighton and Sands, The Feynman Lectures on Physics, vol III, capítulo 21: "The Schrödinger Equation in a Classical Context: A Seminar on Superconductivity", Addison-Wesley Pub. Co.

6. Considere um semicondutor no semi-espaço $x \geq 0$. A energia livre de Ginzburg-Landau é dada por

$$\mathcal{F} = \frac{1}{2m^*}|\frac{\hbar}{i}\nabla\psi|^2 + a|\psi|^2 + \frac{1}{2}b|\psi|^2$$

satisfazendo portanto o parâmetro de ordem a equação

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi}{dx^2} + a\psi + b|\psi|^2\psi = 0$$

a) Admita que ψ é real que só depende da coordenada x. Introduza o parâmetro de ordem adimensional

$$f(x) = \frac{\psi(x)}{\psi_\infty}$$

em que $\psi_\infty = \left(\frac{|a|}{b}\right)^{\frac{1}{2}}$. Reescreva a equação de estacionaridade da energia livre na forma

$$-\frac{d^2 f}{du^2} - f + f^3 = 0$$

em que $u = \frac{x}{\xi}$, com o comprimento de coerência de Ginzburg-Landau dado por $\xi = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*|a|}\right)^{\frac{1}{2}}$.

b) Reescreva a energia livre na forma

$$\bar{\mathcal{F}} = \frac{\mathcal{F}}{\frac{a^2}{b}} = \left(\frac{df}{du}\right)^2 - f^2 + \frac{1}{2}f^4.$$

Referências

Fetter A. L. and J. D. Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems, McGraw-Hill, 1971.

7. Determine o perfil da interface do problema anterior, resolvendo a equação de estacionaridade

$$-\frac{d^2 f}{du^2} - f + f^3 = 0.$$

a) Multiplique esta equação por $\frac{df}{du}$, obtendo o primeiro integral

$$\left(\frac{df}{du}\right)^2 = \frac{1}{2}(1 - f^2)^2,$$

tendo usado $f' \to 0$ quando $f^2 \to 1$.

b) Integre a equação assim obtida, verificando que a solução é dada por

$$f(x) = \tanh(\frac{u}{\sqrt{2}})$$

Referências

Fetter A. L. and J. D. Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems, McGraw-Hill, 1971

8. Calcule a energia da interface dos problemas anteriores, dada pelo integral da diferença entre as densidades das energias livres de Ginzburg-Landau da interface e da do semi-espaço em que o parâmetro de ordem cairia abruptamente a zero, dada por

$$\Delta\bar{\mathcal{F}} = \left(\frac{df}{du}\right)^2 - f^2 + \frac{1}{2}f^4 + \frac{1}{2}.$$

a) Primitive o termo da derivada por partes e use a equação de estacionaridade e o primeiro integral obtido, juntamente com a condição fronteira na origem para obter

$$\begin{aligned} \Delta\bar{F} = \int_0^\infty \Delta\bar{\mathcal{F}}(u)du &= \frac{1}{2}\int_0^\infty (1-f^4)du && (1) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\int_0^1 (1+f^2)df && (2) \\ &= \frac{2\sqrt{2}}{3} && (3) \end{aligned}$$

Referências

Fetter A. L. and J. D. Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems, McGraw-Hill, 1971

9. Considere um oscilador harmónico, com massa m e frequência característica ω_0, em equilíbrio termodinâmico à temperatura T, mas em que, no instante de tempo $t = 0$, a frequência característica passa a ser ω_1.

Calcule a função de correlação $\langle x(t)x(t')\rangle$.