SISTEMAS DE MUITOS CORPOS
Curso de Engenharia Física Tecnológica
Série 2

1. 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.

2. 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.

3. Para um Hamiltoniano não perturbado da forma

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

sendo $\hat{a}^\dagger$, $\hat{a}$ operadores de criação e de destruição de bosões ou fermiões, obtenha os operadores $\hat{a}^\dagger_H(t)$, $\hat{a}_H(t)$, na representação de Heisenberg.

4. i) 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.

ii) Repita os cálculos para $T = 0°K$.

5. As funções de Green G, $G^>$, $G^<$, G^R, G^A (causal, "forward", "backward", retardada e avançada) são definidas, para bosões e fermiões por

$$G(t-t') = -i < T_t\hat{a}(t)\hat{a}^\dagger(t') >$$

$$G^{>}(t-t') = -i < \hat{a}(t)\hat{a}^\dagger(t') >$$
$$G^{<}(t-t') = -i\eta < \hat{a}^\dagger(t')\hat{a}(t) >$$
$$G^{R}(t-t') = -i\theta(t-t') < [\hat{a}(t), \hat{a}^\dagger(t')]_\eta >$$
$$G^{A}(t-t') = +i\theta(t-t') < [\hat{a}(t), \hat{a}^\dagger(t')]_\eta >$$

em que $\eta = +1$ para bosões e $\eta = -1$ para fermiões e em que o produto cronológico inclui um sinal menos para fermiões de acordo com

$$T_t\hat{a}(t)\hat{a}^\dagger(t') = \theta(t-t')\hat{a}(t)\hat{a}^\dagger(t') + \eta\theta(t'-t)\hat{a}^\dagger(t')\hat{a}(t)$$

A média é a média termodinâmica à temperatura T, definida pela matriz densidade

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z}e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}}-\mu\hat{N})}$$

e $[,]_\eta$ é o comutador no caso de bosões e o anticomutador no caso de fermiões.

Usando os resultados do problema anterior, calcule as funções indicadas e as suas transformadas de Fourier no tempo. Considere também o caso $T = 0°K$.

6. Considere um electrão num determinado estado acoplado a uma banda de condução de acordo com o Hamiltoniano

$$H = \Omega a^\dagger a + \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k + \sum_k (V_k a^\dagger b_k + V_k^* b_k^\dagger a)$$

Mostre que as funções de Green

$$G(\tau) = -< T_\tau a(\tau)a^\dagger(0) >$$

$$F_k(\tau) = -< T_\tau b_k(\tau)a^\dagger(0) >$$

satisfazem as equações de movimento

$$\left(\frac{\partial}{\partial\tau} + \Omega\right) G(\tau) = -\delta(\tau) - \sum_k V_k F_k(\tau)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial\tau} + \omega_k\right) F_k(\tau) = -V_k^* G(\tau)$$

Por transformação de Fourier resolva estas equações e mostre que

$$G(\omega) = \left(i\omega - \Omega - \sum \frac{|V_k|^2}{i\omega - \omega_k} \right)^{-1}$$

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

8. 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.

9. i) Calcule a função de partição, a magnetização $< \hat{S}_\alpha(t) >$ e as funções de correlação $< \hat{S}_\alpha(t)\hat{S}_{\overline{\beta}}(t') >$ para um spin quântico $\hat{\vec{S}}$, em presença de um campo magnético constante $\vec{H}$, e que se encontra em equilíbrio termodinâmico à temperatura T, sendo $\hat{S}_\alpha$, com $\alpha = 0, \pm 1$ e $\overline{\alpha} = -\alpha$ as componentes esféricas do spin numa base em que o campo magnético está na

direcção do eixo dos z. Exprima o resultado em função da magnetização M (função de Brillouin) e da susceptibilidade longitudinal $\chi_0 = \frac{\partial M}{\partial H}$.

ii) Calcule a susceptibilidade magnética, dada pela teoria da resposta linear por $\chi_{\alpha\beta}(t-t') = \frac{i}{\hbar}\theta(t-t') < [\hat{S}_\alpha(t), \hat{S}_{\overline{\beta}}(t')] >_{eq}$, e a sua transformada de Fourier.

iii) Repita este cálculo para a função de correlação ordenada no tempo $< T_t \hat{S}_\alpha(t)\hat{S}_{\overline{\beta}}(t') >_{eq}$.

iv) Considere o limite clássico, $\hbar \to 0$, $S \to \infty$. Verifique que se obtém a função de Langevin para a magnetização de um spin.

10. A transformação de Holstein-Primakoff estabelece uma correspondência entre os primeiros $2S+1$ estados, $n = 0, \cdots, 2S$, do oscilador harmónico e os estados de um spin S, $m = -S, \cdots, S$. Essa correspondência pode ser feita de forma descendente ou ascendente, conforme se faça $m = S - n$ ou $m = n - S$. No primeiro caso, a correspondência entre operadores é $\hat{S}_- = \hat{a}^\dagger\sqrt{2S-N}$, $\hat{S}_+ = \sqrt{2S-N}\hat{a}$ e $\hat{S}_z = S - \hat{N}$, em que $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$.

i) Verifique que são verificadas as relações de comutação dos operadores de spin

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_\pm] = \pm\hat{S}_\pm$$

$$[\hat{S}_+, \hat{S}_-] = 2\hat{S}_z$$

bem como a relação

$$\hat{\vec{S}}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{1}{2}(\hat{S}_+\hat{S}_- + \hat{S}_-\hat{S}_+) + \hat{S}_z^2 = S(S+1)$$

ii) No limite $S \to \infty$ temos $\frac{\hat{S}_-}{\sqrt{2S}} \to \hat{a}^\dagger$, $\frac{\hat{S}_+}{\sqrt{2S}} \to \hat{a}$, podendo-se tomar $\frac{\hat{S}_z}{S} \to 1$ ou $S - \hat{S}_z = \hat{N}$, conforme for mais conveniente ou interessante.

iii) Verifique que neste limite as relações de comutação e a relação atrás indicada conduzem a relações características dos operadores bosónicos.

iv) Considere um spin em equilíbrio termodinâmico à temperatura T, na presença de um campo magnético $\vec{H}$. Verifique que no limite $S \to \infty$ definido em ii) a função de partição, a magnetização e as funções de correlação do spin quântico S tendem para quantidades análogas do oscilador harmónico.

v) Estabeleça a relação entre os operadores de spin e os do oscilador harmónico para a correspondência ascendente $m = n - S$. Parta das expressões usuais para a acção dos operadores S_+, S_- e S_z nos estados $|Sm>$ e implemente esta correspondência.

vi) Considere o Hamiltoniano de Heisenberg

$$\hat{\mathcal{H}} = J \sum_{j=1}^{N} \hat{\vec{S}}_j \cdot \hat{\vec{S}}_{j+1} - H \sum_{j=1} \hat{S^z}_j$$

para uma cadeia de spins a uma dimensão. Reescreva o Hamiltoniano usando a transformação de Holstein-Primakoff. Considere o limite $S \to \infty$ e obtenha a aproximação quadrática para o Hamiltoniano. Por transformação de Fourier obtenha a relação de dispersão das ondas de spin. De que modo é que a magnetização, a baixas temperaturas, tende para o valor de saturação (lei de Bloch)? Qual é, a baixas temperaturas, a contribuição dos magnões para o calor específico?

11. Tal como se viu no problema anterior os grupos $SU(2)$ e $O(3)$ tendem, no limite $S \to \infty$, para o grupo de Weyl, caracterizado pelos operadores $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$, obedecendo a $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$. É um exemplo de "group contraction". Outro exemplo é o grupo de Lorentz que tende para o grupo de Galileu no limite $c \to \infty$. Indique os geradores do grupo de Lorentz e obtenha as suas relações de comutação. Mostre que no limite $c \to \infty$ se obtém o grupo de Galileu.

12. 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 $\hat{H}(t)$.