PGF5295 - Teoria Quântica de Muitos Corpos em Matéria Condensada

Lista de exercícios 1 - 1s/2015 (entrega em 17/09/2015)

1. Considere o oscilador harmônico quântico em 1D ($H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$) e os operadores $\hat{a}$ e $\hat{a}^\dagger$ definidos em termos de $\hat{x}$ e $\hat{p}$ como:

$$\begin{aligned}\hat{a} &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\tfrac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} + i\tfrac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\hat{p}\right)\\ \hat{a}^\dagger &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\tfrac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} - i\tfrac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\hat{p}\right)\end{aligned} .$$

(a) Mostre que $[\hat{a},\hat{a}^\dagger] = 1$ e que $[\hat{a},\hat{a}] = [\hat{a}^\dagger,\hat{a}^\dagger] = 0$.

(b) Mostre que $\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}$ comuta com H.

(c) Mostre que, se $\hat{N}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ então λ é um número inteiro positivo. Sugestão: mostre que $\hat{a}|\lambda\rangle$ também é autoestado de $\hat{N}$ e que $\hat{a}|0\rangle = 0$.

(d) Se $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$, mostre que $|n\rangle \propto (\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$ onde "$|0\rangle$"é tal que $\hat{a}|0\rangle = 0$.

(e) Mostre que:

$$\begin{aligned}\hat{a}|n\rangle &= \sqrt{n}\;|n-1\rangle\\ \hat{a}^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}\;|n+1\rangle .\end{aligned}$$

(f) Mostre que: $\hat{a}\hat{a}^\dagger\left(\hat{a}^\dagger\right)^{p-1}|0\rangle = p\left(\hat{a}^\dagger\right)^{p-1}|0\rangle$.

2. Considere uma partícula bosônica em 1D descrita pelo seguinte Hamiltoniano:

$$H = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_0\left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right) ,$$

onde $[\hat{a},\hat{a}^\dagger] = 1$ e ω e ω_0 são constantes positivas.

(a) Diagonalize H e encontre as auto-energias. Sugestão: introduza um operador $\hat{\alpha} = \hat{a} + \omega_0/\omega$

(b) Discuta a origem física do segundo termo de H, comparando com o oscilador harmônico simples.

3. Estados coerentes bosônicos são auto-estados de operadores de aniquilação bosônicos. O exemplo mais simples são os e.c. do oscilador harmônico.

Considere um estado escrito na base $\{|n\rangle\}$ de estados do oscilador harmônico na forma

$$|\phi\rangle = \sum_n \phi(n)|n\rangle .$$

(a) Mostre que, se $\hat{a}|\phi\rangle = \phi|\phi\rangle$, então

$$\phi(n) = \frac{\phi^n}{\sqrt{n!}}$$

(b) Mostre que $|\phi\rangle = e^{\phi\hat{a}^\dagger}|0\rangle$.

(c) Mostre que $\langle\phi|\phi'\rangle = e^{\phi^*\phi'}$ (ou seja, a base não é ortonormal).

(d) Mostre que a relação de completeza da base de estados coerentes é dada por:

$$\mathbf{1} = \frac{1}{\pi}\int d(\text{Re }(\phi))d(\text{Im }(\phi))e^{-\phi^*\phi}|\phi\rangle\langle\phi| .$$

(a base é "super-completa").

4. Modelos "solúveis": Considere o Hamiloniano:

$$H = \sum_{i,j}\hat{a}_i^\dagger h_{ij}\hat{a}_j ,$$

onde $\hat{a}_i^\dagger$ são operadores de criação bosônicos ou fermiônicos ($\hat{a}_i^\dagger|0\rangle = |i\rangle$) e $h_{ij} = \langle i|H|j\rangle$.

Mostre que *sempre* existe uma matriz unitária $\mathbf{U}$ tal que $\hat{b}_i = \sum_j U_{ij}\hat{a}_j$ de modo que

$$H = \sum_i \epsilon_i\hat{b}_i^\dagger\hat{b}_i ,$$

onde os $\{\epsilon_i\}$ são as auto-energias de H.

5. Transformação de Bogoliubov para Férmions Considere o Hamiltoniano:

$$H = E_0\left(\hat{c}^\dagger\hat{c} + \hat{d}^\dagger\hat{d}\right) + E_1\left(\hat{c}^\dagger\hat{d}^\dagger + \hat{d}\hat{c}\right) ,$$

onde c e d são operadores fermiônicos. Para resolver problemas desse tipo, introduzimos a chamada *transformação de Bogoliubov*:

$$\begin{aligned}\hat{c} &= u\hat{f} - v\hat{g}^\dagger\\ \hat{d} &= u\hat{g} + v\hat{f}^\dagger ,\end{aligned}$$

onde $\hat{f}$ e $\hat{g}$ também são operadores fermiônicos e u,v são números reais.

(a) Mostre que $u^2 + v^2 = 1$. Sugestão: use as relações de anti-comutação dos operadores.

(b) Mostre que, impondo $E_1\left(u^2 - v^2\right) - 2uvE_0 = 0$, o Hamiltoniano será escrito na forma diagonal

$$H = \sqrt{E_0^2 + E_1^2}\left(\hat{f}^\dagger\hat{f} + \hat{g}^\dagger\hat{g}\right) + \text{const.}$$

6. Modelo de tight-binding: Considere o modelo de tight-binding em 1D para "spinful electrons":

$$H = \sum_{i=1,N;\sigma=\pm 1} \epsilon_i \hat{n}_{i,\sigma} + t\left(\hat{c}^\dagger_{i,\sigma}\hat{c}_{i+1,\sigma} + \text{H.c.}\right)$$

onde $\hat{c}^\dagger_{i,\sigma}$ cria um elétron no sítio i com projeção de spin na direção z igual a $\frac{\hbar}{2}\sigma$ e $\hat{n}_{i,\sigma} \equiv \hat{c}^\dagger_{i,\sigma}\hat{c}_{i,\sigma}$.

Obs: "H.c." significa "Hermitian conjugate" do operador anterior e é bastante usado para simplificar o Hamiltoniano. No caso, representa o termo $\hat{c}^\dagger_{i+1,\sigma}\hat{c}_{i,\sigma}$.

(a) Considere o caso de apenas *um* sítio ($N = 1$). Escreva os estados possíveis na base de números de ocupação. Importante: deixe clara a sua escolha do ordenamento dos operadores fermiônicos!

(b) Escreva as matrizes $C^\dagger_\uparrow$ e $C^\dagger_\downarrow$ que representam os operadores $\hat{c}^\dagger_{1,+1}$ (cria um elétron de spin $\uparrow$) e $\hat{c}^\dagger_{1,-1}$ (cria um elétron de spin $\downarrow$) nesta base.

(c) Determine também a matriz $C_\uparrow$ relativa ao operador $\hat{c}_{1,+1}$ nesta base.

(d) Calcule os anti-comutadores das matrizes calculadas nos dois ítems anteriores e discuta os resultados.

(e) Definimos os operadores locais de carga e spin:

$$\begin{aligned} \hat{n}_i|\ldots n_{i,\sigma}\ldots\rangle &= (n_{i,+1} + n_{i,-1})|\ldots n_{i,\sigma}\ldots\rangle \\ (\hat{s}_z)_i|\ldots n_{i,\sigma}\ldots\rangle &= \tfrac{1}{2}(n_{i,+1} - n_{i,-1})|\ldots n_{i,\sigma}\ldots\rangle \end{aligned}$$

Definimos também os operadores carga total e spin total: $\hat{n} = \sum_i \hat{n}_i$ e $\hat{S}_z = \sum_i (\hat{s}_z)_i$.

Mostre que os estados da base podem ser representados em termos de autovalores de $\hat{n}$ e $\hat{S}_z$. Ou seja, cada estado é definido por apenas dois números, na forma $|n, S_z\rangle$.

(f) Considere agora o caso de *dois* sítios ($N = 2$). Escreva os estados possíveis na base de números de ocupação (novamente, deixe clara a sua escolha de ordenamento dos operadores) e agrupe-os na forma $|n, S_z\rangle$.

(g) Mostre que o Hamiltoniano de tight-binding comuta com $\hat{n}$ e $\hat{S}_z$

(h) Por fim, escreva o Hamilnoniano de tight-binding para $N = 2$ na base $|n, S_z\rangle$ e calcule os autovalores. Dica: use o resultado do ítem anterior para facilitar a sua vida.