FI-204

Aula 2.2

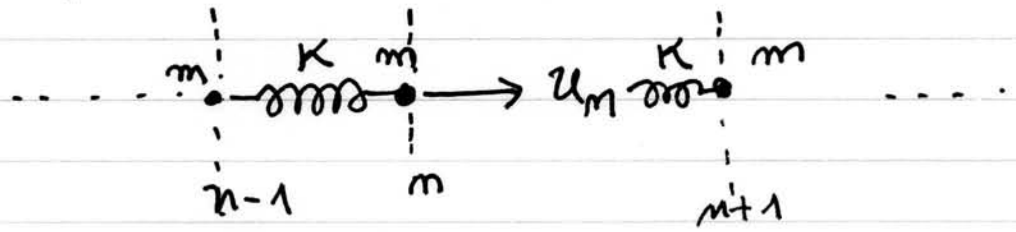
23/04/2021

§ Excitações Elementares num meio material

Consideramos um meio material 1-dim, com propriedades elásticas. Antes de construir a teoria de campos, é ilustrativo começar com um sistema discreto de partículas e depois passar para o limite da Mecânica contínua.

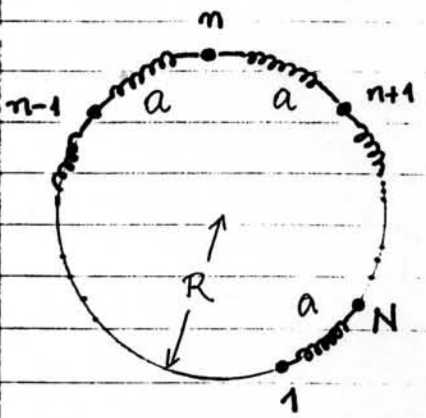
Seja então uma cadeia linear de N osciladores harmônicos idênticos arranjados numa configuração linear com acoplamentos a primeiros vizinhos. Seja 'm' a massa de cada oscilador e seja 'K' a constante das molas.

Usando condições periódicas de contorno, a cadeia pode ser pensada como um anel, onde a última partícula ($n = N$) está ligada à primeira ($n = 1$) por uma mola do mesmo tipo. Desvios da posição de equilíbrio só são permitidos ao longo da circunsferência, de maneira que o problema é sempre unidimensional



Seja então u_n o desvio do equilíbrio

da n-ésima partícula. A energia cinética do sistema



é

$$T = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N} m\,\dot{u}_n^2 , \qquad (1)$$

e a energia potencial é

$$V = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N} K\,(u_{n+1} - u_n)^2 , \qquad (2)$$

onde, sob condições periódicas de contorno, assumimos $u_{N+1} \equiv u_1$.

O Lagrangeano do sistema é então

$$L(u,\dot{u}) = T - V = \sum_{n=1}^{N} \frac{m}{2}\dot{u}_n^2 - \sum_{n=1}^{N}\frac{K}{2}(u_{n+1} - u_n)^2 , \qquad (3)$$

A integral

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt\; L(u,\dot{u}) \qquad (4)$$

é a ação, e as equações de Lagrange (Euler-Lagrange) podem ser obtidas a partir de um princípio variacional:

$$\delta S = \delta\int_{t_1}^{t_2} dt\; L(u,\dot{u}) = 0 , \qquad (5)$$

com as condições $\delta u_n(t_1) = \delta u_n(t_2) = 0, \quad n = 1,2\ldots,N$.

As equações de Euler-Lagrange são:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{u}_n}\right) - \frac{\partial L}{\partial u_n} = 0 \quad , \; n=1,2,\ldots,N \; , \qquad (6)$$

que no caso particular do Lagrangeano (3), fornecem

$$m\,\ddot{u}_n = K\,(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) \quad , \; n = 1,2,\ldots,N. \quad (7)$$

Para ir no limite onde a distribuição de massa é contínua, devemos considerar o caso quando a distância $\underline{\underline{a}}$ entre as posições de equilíbrio vai à zero, $a \to 0$, com $m \to 0$, mas com densidade finita de massa:

$$\rho \equiv \frac{m}{a}$$

A constante K da mola deve crescer em proporção inversa da constante da rede, de maneira que o módulo de Young seja finito

$$\epsilon = Ka \; .$$

Como o tamanho da cadeia não muda neste processo, o número de partículas N, e portanto o número de graus de liberdade tende a infinito. O índice discreto n, que rotula a posição, agora pode ser trocado por uma variável contínua. Escrevemos:

$$n \rightarrow x \quad , \quad a \rightarrow dx \quad ,$$

e o deslocamento $u_n(t)$ agora vira função de duas variáveis contínuas:

$$u_n(t) \longrightarrow u(x,t) \; .$$

A condição periódica de contorno agora é

$$u(x+2\pi R, t) = u(x,t) \, ,$$

e as diferenças viram derivadas parciais

$$\frac{u_n(t) - u_{n-1}(t)}{a} \longrightarrow \frac{\partial u}{\partial x}$$

$$\frac{(u_{n+1} - u_n) - (u_n - u_{n-1})}{a^2} \longrightarrow \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Multiplicamos convenientemente o conjunto de equações (7) por a^{-1}:

$$\frac{m}{a} \ddot{u}_n = ka \left(\frac{u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n}{a^2} \right)$$

e tomamos agora o limite contínuo:

$$\frac{m}{a}\ddot{u}_n \longrightarrow \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x,t)$$

$$Ka\frac{(u_{n+1}+u_{n-1}-2u_n)}{a^2} \longrightarrow \epsilon \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t) ,$$

obtendo uma equação à derivadas parciais para $u(x,t)$:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \left(\frac{\rho}{\varepsilon}\right)\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0 ,$$

que é uma equação de onda para $u(x,t)$, com ondas elásticas longitudinais com velocidade de propagação:

$$v = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\rho}}$$

Curiosamente, neste limite, ambas as variáveis (x,t) tem o mesmo status.

Tentemos agora encontrar o limite contínuo do Lagrangeano:

$$L = \sum_{n=1}^{N}\left[\frac{1}{2}\frac{m}{a}\dot{u}_n^2 - \frac{Ka}{2}\frac{(u_{n+1}-u_n)^2}{a^2}\right]a$$

No limite contínuo $\displaystyle\sum_{n=1}^{N} a \longrightarrow \int dx$

$$L = \int dx \left[\frac{1}{2} \rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{2} \epsilon \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right] \equiv \int dx \mathcal{L}(u, u_t, u_x) ,$$

onde temos definido uma densidade Lagrangeana

$$\mathcal{L}(u, u_t, u_x) \equiv \frac{1}{2} \rho \; u_t^2 - \frac{1}{2} \epsilon \, u_x^2 \; ,$$

com $\quad u_t \equiv \frac{\partial u}{\partial t} \quad$ e $\quad u_x \equiv \frac{\partial u}{\partial x}$.

O Princípio variacional pode agora ser formulado em termos da densidade Lagrangeana $\mathcal{L} = \mathcal{L}(u, u_t, u_x)$.

Existe a seguinte analogia com a mecânica discreta

$$L(u_n, \dot{u}_n; t) \longleftrightarrow \mathcal{L}(u, u_t, u_x)$$

$$t \longleftrightarrow u \; .$$

Sendo que agora as variáveis (x, t) estão no mesmo pé.

A equação de Euler-Lagrange é

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_t} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_x} = 0$$

que fornece :

$$\rho \, u_{tt} - \epsilon \, u_{xx} = 0$$

As equações de Lagrange podem ser obtidas pelo Princípio Variacional

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L\, dt = 0 ,$$

sujeito às condições $\delta u(x,t_1) = \delta u(x,t_2) = 0$. Em termos da densidade Lagrangeana

$$\iint \delta \mathcal{L}\, dt\, dx = 0 .$$

Temos:

$$\delta \mathcal{L} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} \delta u + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}} \delta \dot{u} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_x} \delta u_x + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \delta t ,$$

com

$$\delta \dot{u} = \frac{\partial}{\partial t} \delta u , \qquad \delta u_x = \delta \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \delta u .$$

Então o termo $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}} \delta \dot{u}$ pode ser integrado por partes:

$$\int_{t_1}^{t_2} dt\, \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}} \delta \dot{u} = \int_{t_1}^{t_2} dt\, \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}} \frac{\partial}{\partial t}(\delta u)$$

$$= \underbrace{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}} \delta u \Big|_{t_1}^{t_2}}_{0} - \int_{t_1}^{t_2} dt\, \delta u \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}} \right) \right]$$

O outro termo também pode ser integrado por partes:

$$\int dx\, \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_x} \delta u_x = \int dx\, \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_x} \frac{\partial}{\partial x}(\delta u) =$$

$$= \underbrace{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_x}\,\delta u\,\Big|_{x_1}^{x_2}}_{0} - \int dx\,\delta u\,\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_x}\right) ,$$

e o primeiro termo se anula pela condição periódica. Assim temos:

$$0 = \int_{t_1}^{t_2} dt \int dx\,\delta\mathcal{L} = \int_{t_1}^{t_2} dt \int dx\,\delta u \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_t}\right) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_x}\right) \right],$$

e como as variações δu são arbitrárias obtemos:

$$0 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_t}\right) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_x}\right) ,$$

que é a equação de Euler-Lagrange. No caso particular considerado:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} = 0 \quad , \quad \boxed{0 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} u - \left(\frac{\rho}{\epsilon}\right) \frac{\partial^2}{\partial t^2} u} \; .$$

Para a formulação Hamiltoniana, definimos a densidade de momentum π por:

$$\pi \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_t} ,$$

e a densidade Hamiltoniana se obtem como:

$$\mathcal{H} = \pi u_t - \mathcal{L} \quad , \quad \mathcal{L} = \frac{1}{2}\rho u_t^2 - \frac{1}{2}\varepsilon u_x^2$$

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_t} = \rho u_t \Rightarrow u_t = \frac{1}{\rho}\pi$$

$\Rightarrow$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{\rho}\pi^2 - \frac{1}{2}\rho\frac{\pi^2}{\rho^2} + \frac{1}{2}\varepsilon u_x^2$$

$$\boxed{\mathcal{H} = \frac{1}{2\rho}\pi^2 + \frac{1}{2}\varepsilon u_x^2}$$

A definição do momentum conjugado como limite do resultado discreto. Consideremos uma cela de volume Δx. Temos:

$$(\Delta x)\pi = p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial(\Delta x\, \mathcal{L})}{\partial \dot{q}}$$

§ Quantização do Campo

Para partículas, temos a quantização canônica

$$[q_r, p_s] = i\hbar\delta_{rs} .$$

Para o caso contínuo, tomamos uma cela $(\Delta x)_s$

$$q_r \longrightarrow u(r)$$

$$p_s \longrightarrow (\Delta x)_s \, \Pi(s)$$

$$[q_r, p_s] = i\hbar\, \delta_{rs} \longrightarrow [u(r), \Pi(s)] = i\hbar \frac{\delta_{rs}}{(\Delta x)_s}$$

e para $(\Delta x) \to 0$, temos a relação canônica:

$$\boxed{[u(x), \Pi(x')] = i\hbar\, \delta(x-x')}$$

Escrevemos os campos nas suas componentes de Fourier

$$u(x) = \frac{1}{L^{1/2}} \sum_k Q_k \, e^{ikx}$$

A hermiticidade implica:

$$u^+(x) = u(x) = \frac{1}{L^{1/2}} \sum_k Q_k^+ \, e^{-ikx}$$

$$= \frac{1}{L^{1/2}} \sum_{k'} Q_{-k'}^+ \, e^{ik'x}$$

igualando componentes de Fourier:

$$Q_{-k}^+ = Q_k$$

Os números de onda $\underline{k}$ são obtidos usando a condição periódica:

$$u(x+L) = u(x) = \frac{1}{L^{1/2}} \sum_k Q_k \, e^{ikx} \, e^{ikL}$$

$$= \frac{1}{L^{1/2}} \sum_k Q_k \, e^{ikx}$$

ou

$$e^{ikL} = 1 \quad , \quad k = \left(\frac{2\pi}{L}\right) n \;, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2 ..$$

As componentes de Fourier são obtidas como:

$$Q_k = \frac{1}{L^{1/2}} \int_0^L dx \; u(x) \, e^{-ikx}$$

$$= \frac{1}{L} \sum_{k'} \int_0^L dx \; Q_{k'} \, e^{ik'x} \, e^{-ikx}$$

$$= \sum_{k'} Q_{k'} \; \frac{1}{L} \int_0^L dx \; e^{i(k'-k)x} \quad = \quad Q_k$$

com a integral $\displaystyle \frac{1}{L} \int_0^L dx \; e^{i(k'-k)x} = \delta_{kk'}$

Fazemos mesma coisa para a densidade de momentum:

$$\pi(x) = \frac{1}{L^{1/2}} \sum_k P_k \, e^{-ikx} ,$$

com

$$P_{-k} = P_k^{\dagger}$$

$$P_k = \frac{1}{L^{1/2}} \int_0^L dx \, \pi(x) \, e^{ikx} .$$

Os novos operados (Q_k, P_k) são canônicos porque

$$[Q_k, P_{k'}] = \frac{1}{L} \int_0^L dx \int_0^L dx' \, \underbrace{[u(x), \pi(x')]}_{i\hbar\,\delta(x-x')} \, e^{-ikx} \, e^{ik'x'}$$

$$= i\hbar \frac{1}{L} \int_0^L dx \, e^{i(k'-k)x} = \delta_{kk'} \, i\hbar .$$

Re-escrevemos o Hamiltoniano nas novas variáveis:

$$\int_0^L dx \, \pi^2 = \frac{1}{L} \sum_{kk'} P_k P_{k'} \underbrace{\int_0^L dx \, e^{-i(k+k')x}}_{L\,\delta_{k',-k}}$$

$$= \sum_k P_k P_{-k} .$$

Da mesma maneira, a energia potencial:

$$\int_0^L dx \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 = \frac{1}{L} \int_0^L dx \sum_{kk'} (-kk') Q_k Q_{k'} \, e^{i(k+k')x}$$

$$= \sum_{kk'} (-kk') Q_k Q_{k'} \, \delta_{k',-k} = \sum_k k^2 Q_k Q_{-k} \, ,$$

e finalmente:

$$\mathcal{H} = \int_0^L dx \, \mathcal{H}(x) = \sum_k \left(\frac{1}{2\rho} P_k P_{-k} + \frac{1}{2} \epsilon k^2 Q_k Q_{-k} \right),$$

manifestamente Hermiteano:

$$\mathcal{H}^+ = \sum_k \left(\frac{1}{2\rho} P_{-k}^+ P_k^+ + \frac{1}{2} \epsilon k^2 Q_{-k}^+ Q_k^+ \right)$$

$$= \sum_k \left(\frac{1}{2\rho} P_k P_{-k} + \frac{1}{2} \epsilon k^2 Q_k Q_{-k} \right) = \mathcal{H}$$

Este Hamiltoniano pode ser completamente diagonalizado usando a transformação:

$$\begin{cases} a_k = i(2\rho\hbar\omega_k)^{-1/2} P_{-k} + \left(\dfrac{\epsilon}{2\omega_k\hbar}\right)^{1/2} |k| \, Q_k \, , \\ a_k^+ = -i(2\rho\omega_k\hbar)^{-1/2} P_k + \left(\dfrac{\epsilon}{2\omega_k\hbar}\right)^{1/2} |k| \, Q_{-k} \, , \end{cases}$$

onde

$$\omega_k = \left(\frac{\epsilon}{\rho}\right)^{1/2} |k| = v|k| \quad , \text{ ("fônons").}$$

Vamos a diagonalizar explicitamente o Hamiltoniano, pois a técnica envolvida é de caráter geral. As equações de movimento para Q_k e P_k são:

$$\dot{Q}_k = \frac{1}{i\hbar}[Q_k, \mathcal{H}] = \frac{1}{i\hbar}\sum_{k'}\frac{1}{2\rho}[Q_k, P_{k'}P_{-k'}]$$

$$= \frac{i\hbar}{\rho}P_{-k}\frac{1}{i\hbar} = \frac{1}{\rho}P_{-k},$$

ou $[Q_k, \mathcal{H}] = \frac{i\hbar}{\rho}P_{-k}$.

$$\dot{P}_k = \frac{1}{i\hbar}[P_k, \mathcal{H}] = \frac{1}{i\hbar}(-i\hbar)\epsilon k^2 Q_{-k}$$

$$= -\epsilon k^2 Q_{-k},$$

ou $[P_k, \mathcal{H}] = -i\hbar\epsilon k^2 Q_{-k}$. É claro então que se misturam os modos $(k,-k)$ para as componentes de Fourier. Tentamos agora uma transformação do tipo

$$\begin{cases} a_k = u_k Q_k + v_k P_{-k}, \\ a_k^\dagger = u_k^* Q_{-k} + v_k^* P_k, \end{cases}$$

onde temos usado a propriedade $Q_k^\dagger = Q_{-k}$, $P_k^\dagger = P_{-k}$. Temos que determinar os coeficientes (u_k, v_k) da transformação. Se a transformação é a correta para os modos normais deverá levar o Hamiltoniano à forma diagonal:

$$\mathcal{H} = \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{2} \left(a_k^\dagger a_k + a_k a_k^\dagger \right)$$

$$= \sum_k \hbar\omega_k \left(a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2} \right) ,$$

com $[a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'}$. Testemos a relação de comutação:

$$[a_k, a_{k'}^\dagger] = [u_k Q_k + v_k P_{-k}, u_{k'}^* Q_{-k'} + v_{k'}^* P_{+k'}]$$

$$= u_k u_{k'}^* [\underbrace{Q_k, Q_{-k'}}_{0}] + v_k v_{k'}^* [\underbrace{P_{-k}, P_{+k'}}_{0}] +$$

$$+ u_k v_{k'}^* [Q_k, P_{+k'}] + v_k u_{k'}^* [P_{-k}, Q_{-k'}]$$

$$= i\hbar\, \delta_{k,k'}\, u_k v_{+k}^* - i\hbar\, \delta_{kk'}\, v_k u_k^*$$

$$= i\hbar \left(u_k v_k^* - v_k u_k^* \right) \delta_{kk'}$$

Condição:

$$i\hbar \left(u_k v_k^* - v_k u_k^* \right) = 1$$

$$2\hbar \left(\frac{u_k^* v_k - (u_k^* v_k)^*}{2i} \right) = 1$$

$$2\hbar \; \mathrm{Im}(u_k^* v_k) = 1$$

$$\boxed{\mathcal{I}m\left(u_k^* v_k\right) = \frac{1}{2\hbar}}$$

Vamos a obter o espectro (técnica da Equação de Movimento):

$$[a_k, \mathcal{H}] = \sum_{k'} \hbar\omega_{k'} \, [a_k, a_{k'}^+ a_{k'}]$$

$$= \sum_{k'} \hbar\omega_{k'} \underbrace{[a_k, a_{k'}^+]}_{\delta_{kk'}} a_{k'} = \hbar\omega_k \, a_k$$

$$= u_k [Q_k, \mathcal{H}] + v_k [P_{-k}, \mathcal{H}] = \hbar\omega_k \left(u_k Q_k + v_k P_{-k} \right)$$

$$= u_k \frac{i\hbar}{\rho} P_{-k} - v_k \, i\hbar \epsilon k^2 Q_k ,$$

obtendo-se as equações homôgeneas:

$$\left(\hbar\omega_k u_k + i\hbar\epsilon k^2 v_k\right) Q_k + \left(\hbar\omega_k v_k - \frac{i\hbar}{\rho} u_k\right) P_{-k} = 0$$

ou

$$\begin{cases} \hbar\omega_k u_k + i\hbar\epsilon k^2 v_k = 0 , \\ -\frac{i\hbar}{\rho} u_k + \hbar\omega_k v_k = 0 . \end{cases}$$

Temos a equação secular (para a solução não trivial de (u_k, v_k)):

$$\begin{Vmatrix} \hbar\omega_k & i\hbar\epsilon k^2 \\ -\dfrac{i\hbar}{\rho} & \hbar\omega_k \end{Vmatrix} = 0,$$

ou

$$\hbar^2\omega_k^2 - \frac{\hbar^2}{\rho}\epsilon k^2 = 0$$

Solução :

$$\omega_k^2 = \left(\frac{\epsilon}{\rho}\right)k^2 = v^2 k^2$$

$a_k^\dagger$ deve representar excitações do campo $\Rightarrow$ energia positiva $\Rightarrow$ $\omega_k > 0$. Solução física:

$$\boxed{\omega_k = \left(\frac{\epsilon}{\rho}\right)^{1/2} |k| = v\,|k|} \quad > 0$$

Temos então a relação de dispersão para as excitações. Precisamos calcular agora a transformação completa.

$$\mathcal{H} = \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{2}\left(a_k^\dagger a_k + a_k a_k^\dagger\right)$$

$$= \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{2}\Big\{\left(u_k^* Q_{-k} + v_k^* P_k\right)\left(u_k Q_k + v_k P_{-k}\right) + $$

$$+ \left(u_k Q_k + v_k P_{-k}\right)\left(u_k^* Q_{-k} + v_k^* P_k\right)\Big\}$$

$$= \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{2}\Big(|u_k|^2 Q_{-k}Q_k + |v_k|^2 P_k P_{-k} + u_k^* v_k Q_{-k}P_{-k} + v_k^* u_k P_k Q_k + \text{h.c.}\Big)$$

$$= \sum_k \hbar\omega_k \left(|u_k|^2 Q_k Q_{-k} + |v_k|^2 P_k P_{-k} \right) +$$

$$+ \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{2} \left(u_k^* v_k + u_k v_k^* \right) Q_k P_k$$

$$+ \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{2} \left(v_k^* u_k + u_k^* v_{-k} \right) P_k Q_k$$

$$= \sum_k \left(\frac{1}{2\rho} P_k P_{-k} + \frac{1}{2} \epsilon k^2 Q_k Q_{-k} \right)$$

Temos as condições:

$$\begin{cases} \hbar\omega_k |u_k|^2 = \frac{1}{2}\epsilon k^2 \\ \hbar\omega_k |v_k|^2 = \frac{1}{2\rho} \end{cases}$$

$$u_k v_k^* + u_k^* v_{-k} = 0$$

Assumindo que os coeficientes são funções de $|k|$, isto é

$$\begin{cases} u_{-k} = u_k \,, \\ v_{-k} = v_k \,, \end{cases}$$

a última condição diz que:

$$Re\left(u_k v_k^* \right) = 0 \,,$$

isto é $u_k v_k^*$ (ou $u_k^* v_k$) é imaginário puro.
Das outras equações obtemos:

$$|u_k|^2 = \frac{\epsilon k^2}{2\hbar\omega_k}$$

$$|v_k|^2 = \frac{1}{2\rho\hbar\omega_k}$$

ou

$$\begin{cases} |u_k| = \left(\dfrac{\epsilon}{2\hbar\omega_k}\right)^{1/2} |k| \\[2ex] |v_k| = \left(\dfrac{1}{2\rho\hbar\omega_k}\right)^{1/2} \end{cases}$$

com

$$|u_k|^2 |v_k|^2 = \frac{1}{4\hbar^2}\left(\frac{\epsilon k^2}{\rho}\right)\frac{1}{\omega_k^2} = \frac{1}{4\hbar^2} ,$$

como deve ser. Escolhendo u_k real $\Rightarrow$ v_k é imaginário puro:

$$u_k = \left(\frac{\epsilon}{2\hbar\omega_k}\right)^{1/2} |k| , \quad v_k = i\left(\frac{1}{2\rho\hbar\omega_k}\right)^{1/2}$$

e a transformação completa é:

$$\begin{cases} a_k = \left(\dfrac{\epsilon}{2\hbar\omega_k}\right)^{1/2} |k|\, Q_k + i\left(\dfrac{1}{2\rho\hbar\omega_k}\right)^{1/2} P_{-k} , \\[2ex] a_k^{+} = \left(\dfrac{\epsilon}{2\hbar\omega_k}\right)^{1/2} |k|\, Q_{-k} - i\left(\dfrac{1}{2\rho\hbar\omega_k}\right)^{1/2} P_k . \end{cases}$$

A transformação 'canônica' efetuada é uma extensão do formalismo do Oscilador Harmônico, escrito com operadores de criação e destruição. O Hamiltoniano final tem a forma:

$$\mathcal{H} = \sum_k \hbar\omega_k \left(a_k^\dagger a_k + 1/2\right),$$

com a relação de dispersão

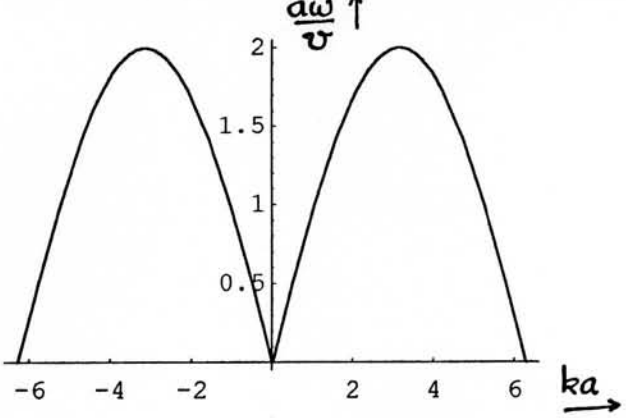
$$\hbar\omega_k = \hbar\left(\frac{\varepsilon}{\rho}\right)^{1/2} k = \hbar v k, \quad (*)$$

onde $v = \left(\frac{\varepsilon}{\rho}\right)^{1/2}$ é a velocidade do som no meio material. Por analogia com a equação de Klein-Gordon, trata-se de um campo escalar (1-dim) com partículas de massa nula. Elas são chamadas de 'fônons' e a relação de dispersão acima (*) descreve 'um ramo acústico'. Fisicamente, esperamos que exista um "cut-off" para freqüências altas. De fato, um cálculo para a rede discreta periódica fornece a relação de dispersão:

$$\hbar\omega_k = \hbar v \frac{\left[2(1-\cos ka)\right]^{1/2}}{a},$$

onde 'a' é a constante da rede. Para $|ka| \ll 1$, obtemos (*) e a freqüência máxima é

$$\omega_{max} = \frac{2v}{a}.$$



Para 3-dim, aparecem outros ramos com um gap no espectro. São chamados de "ramos ópticos" pois eles podem interagir com luz. O ramo óptico pode aparecer também em 1-dim, colocando uma cela com dois ou mais átomos diferentes.

Comparar com o SHO:

$$a = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} x + \frac{ip}{\sqrt{2\hbar m\omega}}, \quad a^\dagger = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} x - \frac{ip}{(2\hbar m\omega)^{1/2}}$$

Nosso caso da cadeia:

$$a_k = \left(\frac{\rho\omega_k}{2\hbar}\right)^{1/2} Q_k + \frac{i P_{-k}}{(2\hbar\rho\omega_k)^{1/2}}$$

mudança : $m \rightarrow \rho$ $\quad [Q_k] = L^{3/2}$

$\omega \rightarrow \omega_k$