FI-004 Mecânica Estatística I
Lista # 6

Prof. G. Cabrera
cabrera@ifi.unicamp.br

Novembro de 2016

1. **Condensação de Bose-Einstein numa armadilha harmônica**

   Considere um gás de Bose confinado numa armadilha harmônica anisotrópica, em d-dimensões. Obtenha a densidade de estados em função da dimensão e avalie a temperatura crítica da condensação para qualquer dimensão. Em particular, mostre que temos condensação a temperatura finita para $d = 2$, em contraste com o caso do gás livre (ver problema # 11 da lista #5). □

2. **Correlações quânticas para partículas idênticas** (Merzbacher 2a. ed., Cap. 20, p. 524)

   Considere duas partículas idênticas (bósons ou férmions) no estado

   $$\left|\Psi^{(2)}\right\rangle = A \sum_{i,j} c_i d_j \left(a_j^\dagger a_i^\dagger \left|0\right\rangle \right) \ , \tag{1}$$

   onde o estado $|0\rangle$ é o vácuo e $a_i^\dagger$ é o operador de criação de uma partícula. Para este estado, a única correlação que existe entre as partículas é através da estatística.

   (a) Suponha que
   $$\sum_i |c_i|^2 = \sum_i |d_i|^2 = 1 \ ,$$
   e calcule a constante de normalização A em (1) em termos da soma
   $$S = \sum_i c_i d_i^* \ .$$

   (b) Para este estado (1), encontre o valor esperado de um operador K de uma partícula em termos das amplitudes de uma partícula c_i e d_i e dos elementos de matriz $\langle i \,|K|\, j\rangle$ de K entre estados de uma partícula. Mostre que se $S = 0$, o valor esperado pode ser intrepretado como se as duas partículas de amplitudes c_i e d_i fossem distinguíveis;

(c) Calcule o valor esperado de um operador diagonal V de interação entre duas partículas, em termos das amplitudes de uma partícula c_i e d_i e dos elementos de matriz $\langle ij\,|V|\,ij\rangle$ de V entre os mesmos estados de duas partículas. Mostre que o resultado é o mesmo que para partículas distinguíveis, se os estados não se sobrepõem, isto é se $c_i d_i = 0,$ para todo i . $\square$

3. **Números de ocupação**

Sejam $\left(a_i, a_i^\dagger\right)$ os operadores de criação e destruição numa dada representação de bósons ou férmions. Mostre que os operadores número $N_i = a_i^\dagger a_i$ comutam entre si. Encontre também as relações de comutação entre $\left(a_i, a_i^\dagger\right)$ e o correspondente operador número $N_i = a_i^\dagger a_i$. Mostre que essas relações independem da estatística. $\square$

4. **Estados coerentes**

Sejam $(a^\dagger,\ a)$ os operadores de criação e destruição de um bóson (modo único). Definimos os **estados coerentes** como sendo auto-estados do operador de destruição, com autovalores complexos

$$a\,|z\rangle = z\,|z\rangle \ ,$$

com $\langle z|z\rangle = 1$ e z em geral complexo.

(a) Encontre a forma de $|z\rangle$ na base de estados $\{|n\rangle\}$, com

$$|n\rangle = \frac{\left(a^\dagger\right)^n}{\sqrt{n!}}\,|0\rangle \ .$$

Mostre, que exceto por uma fase, o estado tem a forma

$$|z\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}\,|z|^2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}\,|z|^2\right)\exp\left(za^\dagger\right)|0\rangle \ . \qquad (2)$$

(b) Encontre também a distribuição de probabilidade P_n de que o estado $|n\rangle$ esteja ocupado em $|z\rangle$.

(c) O estado $|z\rangle$ pode ser pensado também como o efeito de uma translação generalizada (no espaço de fase) sobre o vácuo, da forma:

$$D(z)\,|0\rangle = |z\rangle \ , \qquad (3)$$

com

$$D(z) = \exp\left(z\ a^\dagger - z^*\ a\right) \ .$$

Mostre que de fato, a expressão (3) é válida, comparando com (2).

(d) Mostre que o operador $D(z)$ é unitário.

(e) Mostre que a ação de $D(z)$ sobre o operador a é um deslocamento em z:

$$D(z)aD^\dagger(z) = a - z \ .$$

(f) Aplique a teoria para o Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \omega a^\dagger a + \lambda(a^\dagger + a) \quad , \tag{4}$$

com $(a,\ a^\dagger)$ sendo operadores de Bose. O Hamiltoniano (4) tem solução exata por uma transformação de deslocamento

$$b = a + C \ ,$$

$$b^\dagger = a^\dagger + C^* \ ,$$

escolhendo adequadamente a constante C para anular os termos lineares nos operadores de criação e destruição. Seja $|0>$ o *vácuo* dos operadores de bósons a. Seja $|\Phi_0>$ o estado fundamental do Hamiltoniano (4), e portanto o *vácuo* dos operadores b. Encontre a transformação T que leva um no outro

$$|\Phi_0\rangle = T\,|0\rangle$$

Mostre que o estado $|\Phi_0\rangle$ contém qualquer número de bósons do tipo a. □

5. **Representação de Heisenberg**

Considere a representação de Heisenberg para os operadores campo $(\Psi, \Psi^\dagger)$ de um sistema de partículas idênticas (bósons ou férmions).

(a) Encontre a equação de Heisenberg para Ψ, no caso de um sistema de partículas não interagentes, isto é de um sistema cujo Hamiltoniano é dado por:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_i \left[\frac{\vec{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + U(\vec{\mathbf{x}}_i)\right] \ ,$$

onde a soma é realizada sobre todas as partículas. Mostre que ela é formalmente idêntica à equação de Schrödinger para a funçaõ de onda de uma partícula e discuta a origem do nome de *Segunda Quantização* dado ao formalismo.

(b) Encontre agora a equação de Heisenberg para Ψ, no caso de um sistema de partículas interagentes segundo o Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} V\left(|\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{x}}_j|\right) \ .$$

Mostre que existem correlações entre as partículas que se manifestam através de efeitos *não-locais*. □

6. **Operadores campo na representação de momentum**

   (a) Definimos o operador de campo na representação de momentum por:

   $$\Phi(\vec{\mathbf{p}}) \equiv \int d\vec{\mathbf{x}} \ \langle \vec{\mathbf{p}} | \vec{\mathbf{x}} \rangle \ \Psi(\vec{\mathbf{x}}) \ .$$

   Derive as relações de comutação/anticomutação (segundo o caso) para $\Phi(\vec{\mathbf{p}})$ e $\Phi^\dagger(\vec{\mathbf{p}})$.

   (b) Mostre que para o comutador/anticomutador misto temos

   $$\left[\Phi(\vec{\mathbf{p}}), \Psi^\dagger(\vec{\mathbf{x}})\right]_\pm = \langle \vec{\mathbf{p}} | \vec{\mathbf{x}} \rangle \ .$$

   (c) Considere os seguintes observáveis de um sistema de partículas idênticas

   $$\begin{aligned} \vec{\mathbf{X}} &= \textstyle\sum_i \ \vec{\mathbf{x}}_i \ , \\ \vec{\mathbf{P}} &= \textstyle\sum_i \ \vec{\mathbf{p}}_i \ , \end{aligned} \tag{5}$$

   isto é, a soma das coordenadas e o momentum total. Forneça a representação em 2a. quantização dos operadores de (5) usando os operadores campo. Escolha a representação mais conveniente entre coordenadas e momentos. Mostre que o análogo de muitas partículas para o comutador canônico é

   $$\left[\vec{\mathbf{X}}, \vec{\mathbf{P}}\right] = i\hbar N \ \mathbf{1} \ ,$$

   onde N é o operador número e $\mathbf{1}$ é a identidade em três dimensões. □

7. **Transformação de Jordan-Wigner**

   Considere uma rede unidimensional de sítios, onde temos spins localizados $\mathbf{S}(m)$, onde m rotula o sítio. Note que para sítios diferentes, os operadores de spin comutam. Para spin $s = 1/2$, temos relações *mistas*, que não são nem de Bose, nem de Fermi.

   (a) Seja o operador de spin para o sítio m com componentes $S_x(m)$, $S_y(m)$ e $S_z(m)$. Definimos como de costume os operadores de *subida* e *descida* do spin por

   $$\begin{aligned} a_m &\doteq S_x(m) - iS_y(m) \ , \\ a_m^\dagger &\doteq S_x(m) + iS_y(m) \ . \end{aligned} \tag{6}$$

   Mostre que se verificam as seguintes relações de comutação:

i) tipo Bose para sítios diferentes $[a_i^\dagger,\ a_j] = [a_i^\dagger,\ a_j^\dagger] = [a_i,\ a_j] = 0$,para $i \neq j$;

ii) tipo Fermi para o mesmo sítio com

$$\left\{a_i,\ a_i^\dagger\right\} = 1 \quad \text{,e} \quad a_i^2 = (a_i^\dagger)^2 = 0. \tag{7}$$

(b) Considere agora uma cadeia com condições periódicas de contorno. Mostre que em este caso é possível definir operadores de Fermi pelas relações

$$\begin{aligned} C_i &\doteq \exp\left\{i\pi \sum_{j=1}^{i-1} a_j^\dagger a_j\right\} a_i \quad , \\ C_i^\dagger &\doteq a_i^\dagger \exp\left\{-i\pi \sum_{j=1}^{i-1} a_j^\dagger a_j\right\} \quad . \end{aligned} \tag{8}$$

Encontre a transformação inversa e mostre que temos

$$\begin{aligned} C_i^\dagger C_i &= a_i^\dagger a_i \quad , \\ C_i^\dagger C_{i+1} &= a_i^\dagger a_{i+1} \quad . \end{aligned} \tag{9}$$

Em seguida, transforme o Hamiltoniano de spin de Heisenberg (abaixo) em um Hamiltoniano de fermions. Dê uma interpretação física do resultado:

$$\mathcal{H} = J \sum_{m=1}^{N} \left\{S_x(m)S_x(m+1) + S_y(m)S_y(m+1) + S_z(m)S_z(m+1)\right\} \qquad \square$$

8. **Matriz Densidade Reduzida**

Considere um sistema de muitas partículas com o número de partículas fixo e igual a N. Seja ρ sua matriz densidade (operador estatístico). Definimos um conjunto de matrizes reduzidas $\{\rho_1, \rho_2, \rho_3, ...\}$ por

$$Tr\,(\rho) = 1,$$

$$\langle i\,|\rho_1|\,j\rangle \equiv Tr\left(a_i \rho a_j^\dagger\right),$$

$$\langle kl\,|\rho_2|\,ij\rangle \equiv Tr\left(a_k a_l \rho a_j^\dagger a_i^\dagger\right),$$

$$etc.,$$

onde $(i, j, ...)$ representam estados de uma partícula e $(a_i^\dagger,\ a_j)$ são os operadores de criação e destruição para esses estados (bósons ou férmions). Falamos que ρ_1 é a matriz densidade de 1-partícula, ρ_2 é a matriz densidade de duas partículas, etc... Mostre que temos

$$Tr\,(\rho_1) = N,$$

$$Tr\,(\rho_2) = N\,(N-1)\,,$$

$$Tr\,(\rho_3) = N\,(N-1)\,(N-2)\,,$$

$$etc...$$

□

9. **Matriz densidade de 1-partícula e Hartree-Fock para férmions**

Seja um conjunto completo de orbitais de 1-partícula $\{\varphi_i\}$, com $<\vec{\mathbf{x}}|\lambda_i>=\varphi_i(\vec{\mathbf{x}})$. Definimos a matriz densidade de 1-partícula associada com um estado $|\psi>$ por

$$\rho_{ij}^{(1)} =<\lambda_i|\rho^{(1)}|\lambda_j> \equiv <\psi|c_i^\dagger c_j|\psi> \;,$$

onde $(c_i^\dagger,\ c_i)$ são os operadores de criação e destruição de uma partícula no estado $|\lambda_i>$.

(a) Mostre que esta matriz densidade está normalizada como

$$Tr\ \rho^{(1)} = \sum_i \rho_{ii}^{(1)} = \bar{N}\ ,$$

onde $\bar{N}$ é valor médio do número de partículas no estado $|\psi>$. Se o estado tiver um número de partículas fixo N, então $Tr\ \rho^{(1)} = N$. Não confundir esta matriz densidade com o operador estatístico ρ. Para ver como ela se relaciona com ρ, remetemos ao problema anterior desta lista, sendo que neste caso o ensemble representado por ρ é puro, com $\rho = |\psi><\psi|$.

(b) O estado 'teste' de Hartree-Fock para um sistema de férmions é um determinante de Slater composto de N orbitais de 1-partícula ortonormais $\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, ...\}$ escrito na forma de uma produtória

$$|\psi>= c_1^\dagger c_2^\dagger c_3^\dagger ... c_i^\dagger ... |0>= \prod_i c_i^\dagger\ |0>\ .$$

Mostre que $\rho^{(1)}$ pode ser escrito na forma

$$\rho^{(1)} = \sum_i n_i |\lambda_i><\lambda_i|\ , \tag{10}$$

onde n_i é o número de ocupação para férmions, $n_i = 0, 1$. Portanto $\rho^{(1)}$ é uma matriz hermitiana de traço N.

(c) A partir de (10), mostre que a matriz densidade de 1-partícula satisfaz a relação

$$(\rho^{(1)})^2 = \rho^{(1)} \ , \tag{11}$$

de onde obtemos que todos seus autovalores são 0 ou 1. En seguida, mostre que a relação (11) é uma condição *necessária e suficiente* para que o estado completamente antisimétrico $|\psi>$ seja um determinante de Slater (estado completamente antisimétrico). □

10. **Condensação de Bose-Einstein**

Um estado 'condensado de bósons' $|\Phi_N>$, que descreve um sistema de N bósons todos ocupando o mesmo orbital λ_0, pode ser pensado como um estado coerente com

$$a_0|\Phi_N> = \sqrt{N}|\Phi_N> \ . \tag{12}$$

(a) Mostre que a matriz densidade reduzida de 1-partícula (ver problema # 8 acima) associada com o estado (12) pode ser escrita como

$$\rho^{(1)} = N \ |\lambda_0><\lambda_0| \tag{13}$$

e satisfaz a condição

$$(\rho^{(1)})^2 = N \ \rho^{(1)} \ . \tag{14}$$

(b) Mostre que a relação (14) é uma condição necessária e suficiente para que o estado completamente simétrico $|\Phi>$ associado com $\rho^{(1)}$, seja um condensado de bósons. □

11. **Campo médio para bósons**

Considere bósons sem spin e um estado teste $|\Phi>$ que representa um condensado:

$$|\Phi> = \frac{\left(a_\lambda^\dagger\right)^N}{\sqrt{N!}} \, |0\rangle \ ,$$

onde $|0\rangle$ é o vácuo dos bósons e o orbital $|\lambda> = a_\lambda^\dagger \ |0\rangle$ ainda está indeterminado.

(a) Encontre o funcional da energia $E[\Phi]$ do estado teste $|\Phi>$, para o Hamiltoniano que inclui as interações entre bósons

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} t_{ij} a_i^\dagger a_j \ + \ \frac{1}{2} \sum_{ijkl} < ij|V|kl > a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \ .$$

Os elementos de matriz são

$$t_{ij} = \int d\vec{\mathbf{x}} \ \varphi_i^*(\vec{\mathbf{x}}) \{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{\mathbf{x}}) \} \varphi_j(\vec{\mathbf{x}})$$

para o hamiltoniano de um corpo e

$$< ij|V|kl >= \int d\vec{\mathbf{x}} \int d\vec{\mathbf{z}}\ \varphi_i^*(\vec{\mathbf{x}})\varphi_j^*(\vec{\mathbf{z}})V(\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{z}})\varphi_k(\vec{\mathbf{x}})\varphi_l(\vec{\mathbf{z}})$$

para o de dois corpos, onde $V(|\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{z}}|)$ é o potencial de interação entre bósons. Suponha que este potencial é um potencial de contato, da forma

$$V(\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{z}}) = \mathbf{G}\ \delta^{(3)}(\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{z}})\ ,$$

onde $\mathbf{G}$ é a constante de acoplamento e $\delta^{(3)}$ é a função delta de Dirac.

(b) A minimização do funcional $E[\Phi]$ conduz a uma equação para determinar o orbital $< \vec{\mathbf{x}}|\lambda >= \varphi_\lambda(\vec{\mathbf{x}})$ do condensado. Esta minimização está condicionada pela normalização do estado

$$\int d\vec{\mathbf{x}}\ \varphi_\lambda^*(\vec{\mathbf{x}})\varphi_\lambda(\vec{\mathbf{x}}) = 1\ .$$

Escreva o correspondente multiplicador de Lagrange como $N\mu$. Definimos a 'função de onda do condensado' por

$$\Psi\,(\vec{\mathbf{x}}\ ) \equiv \sqrt{N}\varphi_\lambda(\vec{\mathbf{x}})\ ,$$

onde $\Psi\,(\vec{\mathbf{x}}\ )$ é normalizada para o número de partículas. Encontre a equação de Euler-Lagrange para $\Psi\,(\vec{\mathbf{x}}\ )$ e interprete fisicamente seu resultado. $\Box$

12. **Modelo de um cristal unidimensional: quantização de suas oscilações**

Considere uma cadeia linear de N átomos, onde d é a distância interatômica, com acoplamento harmônico entre os átomos na forma do Hamiltoniano abaixo:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{j=1}^{N}\frac{p_j^2}{2m} + \frac{1}{4}m\omega_0^2\sum_{j=1}^{N}(\eta_{j+1}-\eta_j)^2 \qquad (15) \\ &= \sum_{j=1}^{N}\left[\frac{p_j^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega_0^2\eta_j^2\right] - \frac{1}{2}m\omega_0^2\sum_{j=1}^{N}\eta_j\eta_{j+1}\ . \end{aligned}$$

Em (15), (p_j,η_j) são o momentum e o deslocamento do átomo do sítio j. Consideramos condições periódicas de contorno, para as quais

$$\eta_{N+1} \equiv \eta_1 \qquad (16)$$

e o número N é grande, mas finito. Neste problema usamos unidades com $\hbar \equiv 1$. Passamos agora para a representação dos números de ocupação, da maneira como usualmente é feito para o oscilador harmônico (ver Sakurai 'MQM', p. 90), definindo operadores de criação e destruição de bósons $(b_j, b_j^\dagger)$, da forma

$$\begin{aligned} \eta_j &= \sqrt{\frac{1}{2m\omega_0}}\left(b_j + b_j^\dagger\right) \ , \\ p_j &= \frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\omega_0}{2}}\left(b_j - b_j^\dagger\right) \ . \end{aligned} \tag{17}$$

Escreva o Hamiltoniano (15) em termos dos operadores auxiliares $\left(b_j, b_j^\dagger\right)$. Como o problema é periódico, é conveniente passar para a representação de Fourier (que é uma transformação unitária), com

$$\begin{aligned} b_j &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k b_k \ \exp\left(ikjd\right) \ , \\ b_j^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k b_k^\dagger \ \exp\left(-ikjd\right) \ . \end{aligned} \tag{18}$$

Mostre que a Transformação de Fourier preserva as relações de comutação para os operadores $\left(b_k, b_k^\dagger\right)$ e portanto, eles também representam bósons. Os vetores de onda k são determinados usando a condição de contorno (16). A pesar do nome, a variável k não representa momentum. Todos os graus de liberdade do sistema são descritos por estados k dentro da Zona de Brillouin

$$-\frac{\pi}{d} \leq k < \frac{\pi}{d} \ .$$

Escreva finalmente o Hamiltoniano nos modos k, simetrizando em $(k, -k)$.

Resultado:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} \ = \ & \frac{\omega_0}{2}\sum_k \left(b_k^\dagger b_k + b_{-k}^\dagger b_{-k} + 1\right) - \\ & -\frac{\omega_0}{4}\sum_k \cos\left(kd\right)\left(b_k + b_{-k}^\dagger\right)\left(b_{-k} + b_k^\dagger\right) \end{aligned} \tag{19}$$

Na forma final (19), esse Hamiltoniano é semelhante àquele estudado em aula para bósons interagentes, com acoplamentos não diagonais entre os modos $(k, -k)$. Faça a diagonalização completa usando uma Transformação de Bogoliubov, com operadores de quase-partículas $\left(\alpha_k, \alpha_k^\dagger\right)$

$$b_k = u_k \alpha_k - v_k \alpha_{-k}^\dagger \ ,$$

$$b_{-k}^\dagger = u_k \alpha_{-k}^\dagger - v_k \alpha_k \ .$$

Mostre que o espectro de excitações do sistema tem a forma

$$E_k = \omega_0 \sqrt{1 - \cos(kd)} \ , \tag{20}$$

onde a energia máxima tem o valor $\omega_0\sqrt{2}$ nas bordas da zona. Os modos cuja energia é dada por (20), são chamados de fônons (unidimensionais) e descrevem oscilações quantizadas da rede cristalina. Note que para baixas energias (k pequeno) a relação (20) pode ser aproximada por uma relação linear em k. O número de onda k é uma coordenada interna e não está diretamente ligado ao momentum do sistema, exceto para o modo $k = 0$. Neste caso, usando (17) e (18), mostre que o momentum total está ligado ao modo $k = 0$ e portanto este modo representa uma translação uniforme do sistema.

O número de fônons não é conservado, pois eles representam excitações elementares (podemos proceder de maneira semelhante ao caso dos fótons, onde o potencial químico nulo representa a condição de equilíbrio). Porém, o limite termodinâmico deste sistema unidimensional apresenta alguns problemas. Tente calcular o número de fônons no limite termodinâmico e mostre que ele diverge para toda temperatura. A divergência é causada pelo comportamento da densidade de estados na vizinhança de $k \approx 0$. Dê uma interpretação física desse fato levando em conta a dimensionalidade do sistema. $\square$

13. **Capacidade calórica de fônons e rótons**

Use o espectro de excitações do He líquido superfluido, incluindo fônons e rótons e calcule as contribuições para a capacidade calórica a baixas temperaturas. Note que a temperatura do He superfluido tipicamente está por baixo de 2^oK. O gap dos rotons é da ordem de 10^oK, de maneira que a contribuição dos rotons pode ser calculada com a distribução de Maxwell-Boltzmann. Considere o espectro como constando de dois ramos da forma:

$$\varepsilon(p) = \begin{cases} v_s p \ , \ \text{para } p \lesssim p_0 \text{ (fônons)}, \\ \\ \Delta + \dfrac{(p-p_0)^2}{2m^*}, \ \text{para } p \gtrsim p_0 \text{ (rótons)}, \end{cases}$$

onde v_s é a velocidade do som e Δ o gap dos rotons.

Dica. Consulte o livro de Landau, *Statistical Physics, Part 2.* $\square$