FI-002 Mecânica Quântica II
Lista # 2

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

Data de entrega: 20 de maio de 2020
Entregar apenas os exercícios destacados com *

1. **Números de ocupação**

   Sejam $(a_i, a_i^\dagger)$ operadores de destruição e criação para uma dada representação de partículas (bósons ou férmions). Mostre que os operadores número $N_i = a_i^\dagger a_i$ comutam entre si e também comutam com o operador número total N. Eles formam portanto um conjunto completo de observáveis. Encontre a base de estados que os diagonaliza. $\blacksquare$

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. 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

$$S = \sum_i c_i d_i^* .$$

   (a) Para este ket (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;

(b) Calcule o valor esperado de um operador diagonal 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

$$c_i d_i = 0, \text{ para todo } i \ . \qquad \blacksquare$$

3. **Uma transformação canônica interessante**

Considere o Hamiltoniano $\mathcal{H}$ e a transformação canônica definida por

$$\tilde{\mathcal{H}} = e^{-S}\ \mathcal{H}\ e^{S} = \mathcal{H} + [\mathcal{H},\ S] + \frac{1}{2}[[\mathcal{H},\ S],\ S] + ... \tag{2}$$

(a) Seja o Hamiltoniano do tipo

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda\mathcal{V} \quad ,$$

com uma perturbação proporcional a λ. Encontre uma transformação S tal que o termo linear em λ seja nulo para o Hamiltoniano transformado $\tilde{\mathcal{H}}$ de (2). Mostre que tal transformação satisfaz

$$\lambda\mathcal{V} + [\mathcal{H}_0,\ S] = 0 \quad ,$$

e numa representação na qual $\mathcal{H}_0$ é diagonal, temos

$$< n|S|m >= \lambda\frac{< n|\mathcal{V}|m >}{E_m - E_n} \quad ,$$

sempre que $E_m \neq E_n$.

(b) Usando a solução acima mostre que o Hamiltoniano transformado se escreve como

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_0 + \frac{1}{2}[\lambda\mathcal{V},\ S] + o(\lambda^3) \quad ,$$

e aplique a teoria para o Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \omega a^\dagger a + \lambda(a^\dagger + a) \quad , \tag{3}$$

que aparece na transformação polarônica, com $(a,\ a^\dagger)$ sendo operadores de Bose. Mostre que em este caso temos

$$< n|\tilde{\mathcal{H}}|n >= n\omega - \frac{\lambda^2}{\omega} \quad ,$$

onde n é o autovalor de número no sistema não perturbado.

(c) O Hamiltoniano (3) tem solução exata por uma transformação de deslocamento

$$b = a + C \ ,$$

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

Seja $|0>$ o *vácuo* para os operadores de bósons a. Seja $|\Phi_0>$ o estado fundamental do Hamiltoniano (3), 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. ■

4. **Transformação de Jordan-Wigner**

Considere uma rede unidimensional de sítios, onde temos spins localizados $\mathbf{S}(m)$, onde m rotula o sítio. Os operadores de spin, para spin $s = 1/2$, têm relações de comutação *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 $S_z(m)$. Os spins se acoplam segundo um Hamiltoniano de Heisenberg

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= J \sum_{m=1}^{N} \ \{S_x(m)S_x(m+1) + S_y(m)S_y(m+1) + S_z(m)S_z(m+1)\} \\ &= J \sum_{m=1}^{N} \ \vec{\mathbf{S}}(m)\cdot\vec{\mathbf{S}}(m+1) \ , \end{aligned} \tag{4}$$

onde consideramos condições periódicas de contorno, $\vec{\mathbf{S}}(N+1) \equiv \vec{\mathbf{S}}(1)$.
Definimos, como de costume, os operadores de *subida* e *descida* do spin por

$$\begin{aligned} a_m &\doteq S_x(m) - iS_y(m) \quad , \\ a_m^\dagger &\doteq S_x(m) + iS_y(m) \quad . \end{aligned} \tag{5}$$

Mostre que se verificam as seguintes relações de comutação:

a) tipo Bose para sítios diferentes

$$[a_i^\dagger,\ a_j] = [a_i^\dagger,\ a_j^\dagger] = [a_i,\ a_j] = 0 \ \ , \text{ para } i \neq j \ \ ; \tag{6}$$

b) tipo Fermi para o mesmo sítio com

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

(b) Com condições periódicas de contorno, mostre que em este caso é possível definir operadores de Fermi $(C_i, C_i^\dagger)$ 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 (4) num Hamiltoniano de férmions. Dê uma interpretação física do resultado. ■

5. **Representação de Schwinger**

No exercício anterior, representamos os operadores de spin por operadores de férmions. Existe uma representação alternativa para o momentum angular em termos de operadores de bósons (ver Sakurai, 'MQM', §3.8). Considere que temos dois tipos de bósons, com operadores associados $(a_+, a_+^\dagger)$ e $(a_-, a_-^\dagger)$. Eles satisfazem as relações de comutação para bósons, sendo que operadores de bósons diferentes comutam. Representamos os operadores de momentum angular pelas relações abaixo:

$$
\begin{aligned}
J_z &= \frac{\hbar}{2}\left(a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_- \right) \; , \\
J_+ &= \hbar \; a_+^\dagger a_- \; , \\
J_- &= \hbar \; a_-^\dagger a_+ \; .
\end{aligned}
\tag{10}
$$

≡

(a) Mostre que os operadores definidos em (10) satisfazem as relações de momentum angular.

(b) Mostre que um estado $|jm>$, para j fixo mas arbitrário (inteiro ou semi-inteiro), pode ser representado nos espaços dos números de ocupação dos bósons, com a condição

$$n_+ + n_- = 2j \; ,$$

isto é, o número total de bósons é $2j$. ■

6. * **Osciladores harmônicos acoplados**

Consideramos dois osciladores harmônicos $1-$dim idênticos de freqüência ω acoplados. O Hamiltoniano do sistema tem a forma:

$$\mathcal{H}(p_{1,}p_2, x_1, x_2) = h(p_1, x_{1)} + h(p_2, x_2) + \lambda x_1 x_2 \ , \tag{11}$$

onde $h(p,x) = p^2/2m + m\omega^2 x^2/2$ é o Hamiltoniano usual de um oscilador $1-$ dim. As coordenadas dos osciladores estão acopladas, com constante λ.

(a) Escreva o Hamiltoniano (11) em termos dos operadores de criação e destruição de excitações dos osciladores. Este problema é de dimensão 4, porque todos os operadores de destruição e criação $(a_1, a_1^\dagger, a_2, a_2^\dagger)$ dos dois osciladores estão acoplados. O objetivo do problema é diagonalizar o Hamiltoniano encontrando as novas excitações induzidas pelo acoplamento. O Hamiltoniano é dito diagonal, quando tem a forma:

$$\mathcal{H} = \sum_i \ \varepsilon_i A_i^\dagger A_i \ + cte. \ , \tag{12}$$

onde $(A_i^\dagger, A_i)$ são respectivamente os operadores de criação e destruição das quase-partículas. O problema proposto por (11) tem solução exata. Note que os operadores $(a_1, a_1^\dagger, a_2, a_2^\dagger)$ satisfazem relações de comutação de bósons e essas relações serão preservadas pelos novos operadores $(A_i^\dagger, A_i)$.

(b) A solução segue um método proposto por Bogoliubov e estudado de forma geral no próximo problema. Procedemos calculando as equações de movimento dos operadores. Note que para um Hamiltoniano diagonal, como em (12) , a equação de movimento tem a forma:

$$[\mathcal{H}, A_i] = -\varepsilon_i A_i \ . \tag{13}$$

Como todos os operadores originais estão acoplados, a proposta de Bogoliubov é escrever os novos operadores A_i como combinação linear dos $(a_1, a_1^\dagger, a_2, a_2^\dagger)$ e transformar as equações (13) em um conjunto de equações lineares homogêneas para os coeficientes. A solução não trivial fornece a equação secular para os autovalores ε_i. Neste caso, o problema quadridimensional pode ser reduzido a dois problemas bidimensionais desacoplados, usando os operadores auxiliares definidos abaixo:

$$\begin{aligned} A &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\,(a_1 + a_2) \ , \\ B &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\,(a_1 - a_2)\,. \end{aligned} \tag{14}$$

Mostre que os operadores definidos em (14) satisfazem as relações de comutação de bósons. Escreva as equações de movimento para A e B e mostre que somente se acoplan com seu respectivos adjuntos.

(c) A solução final é obtida via a transformação de Bogoliubov, escrevendo os operadores de quase-partículas na forma

$$
\begin{aligned}
\eta &= u\ A + v\ A^\dagger\ , \\
\eta^\dagger &= v^* A + u^* A^\dagger\ , \\
\\
\xi &= r\ B + s\ B^\dagger\ , \\
\xi^\dagger &= s^* B + r^* B^\dagger,
\end{aligned}
\tag{15}
$$

com coeficientes (u, v, r, s) em geral, complexos. Encontre condições nos coeficientes, para que os operadores (η, ξ) representem bósons. A transformação (15) é uma transformação canônica porque preserva as relações de comutação, mas em geral não é unitária (é uma transformação *simplética*, como as transformações canônicas da Mecânica Clássica). Impondo equações de movimento do tipo (13) para η e ξ, encontre os autovalores da energia dos novos modos normais e suas freqüências de oscilação.

(d) Finalmente, escreva o Hamiltoniano do sistema em termos dos operadores de quase-partículas (η, ξ). ■

7. **Transformação de Bogoliubov para Bósons**

Considere operadores $(a_i^\dagger,\ a_j)$ que satisfazem as relações de comutação de bósons. Definimos outro conjunto de operadores $(b_i^\dagger,\ b_j)$ por

$$
\begin{aligned}
b_j &\equiv e^{i\theta_j} \cosh\lambda_j\ a_j + e^{i\phi_j} \sinh\lambda_j\ a_j^\dagger\ , \\
b_j^\dagger &\equiv e^{-i\phi_j} \sinh\lambda_j\ a_j + e^{-i\theta_j} \cosh\lambda_j\ a_j^\dagger\ ,
\end{aligned}
\tag{16}
$$

com $(\lambda_j, \theta_j, \phi_j)$ reais.

(a) Obtenha as relações de comutação para os operadores $(b_i^\dagger,\ b_j)$ e mostre que a transformação (16) é canônica.

(b) Mostre que, se o conjunto de operadores $\{a_j\}$ for finito $(j = 1, 2, ..., n)$, existe uma transformação unitária

$$U = e^{iT}$$

tal que

$$U a_j U^\dagger = b_j\ .$$

Construa explicitamente o operador T em termos dos operadores $(a_i^\dagger,\ a_j)$. ■

8. **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.

(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.* ■

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

Definimos o operador de campo na representação de momentum por:

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{X}} &= \textstyle\sum_i \; \vec{\mathbf{x}}_i , \\ \vec{\mathbf{P}} &= \textstyle\sum_i \; \vec{\mathbf{p}}_i , \end{aligned} \tag{17}$$

isto é, a soma das coordenadas e o momentum total. Forneça a representação em 2a. quantização dos operadores de (17) 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. ■

10. **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

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

(b) De maneira equivalente, mostre que temos

$$|z\rangle = \exp\left(za^\dagger - z^*a\right)|0\rangle \equiv D(z)\,|0\rangle \, ,$$

onde $D(z)$ é um operador unitário.

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

(d) Calcule os valores médios de $N = a^\dagger a$ e $N^2 = \left(a^\dagger a\right)^2$ usando as relações de comutação de N com $\left(a^\dagger, a\right)$. ■

11. **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

$$\rho^{(1)}_{ij} \equiv <\psi|c_i^\dagger c_j|\psi> \;, \tag{18}$$

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

(a) Mostre que esta matriz densidade está normalizada como

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

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 (mas ela sim se relaciona com ρ).

(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 $\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, ...\}$ (não determinados) 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

$$\rho^{(1)} = \sum_i n_i |\lambda_i >< \lambda_i| \ , \tag{19}$$

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 (19), mostre que a matriz densidade de 1-partícula satisfaz a relação

$$(\rho^{(1)})^2 = \rho^{(1)} \ , \tag{20}$$

de onde obtemos que todos seus autovalores são 0 ou 1. En seguida, mostre que a relação (20) é uma condição *necessária e suficiente* para que o estado completamente antisimétrico $|\psi >$ seja um determinante de Slater. ■

12. **Condensação de Bose-Einstein**

Um estado ‘condensado de bósons’ $|\Phi_N >$, que descreve um sistema de N bósons todos ocupando o mesmo orbital λ, é escrito como

$$|\Phi_N >= \frac{(a_\lambda^\dagger)^N}{\sqrt{N!}} |0 > \ . \tag{21}$$

(a) Mostre que a matriz densidade de 1-partícula (ver definição em (18)) associada com o estado (21) pode ser escrita como

$$\rho^{(1)} = N \ |\lambda >< \lambda| \tag{22}$$

e satisfaz a condição

$$(\rho^{(1)})^2 = N \ \rho^{(1)} \ . \tag{23}$$

(b) Mostre que a relação (23) é uma condição necessária e suficiente para que o estado completamente simétrico $|\Phi >$ associado com $\rho^{(1)}$, seja um condensado de bósons. ■

13. **Modelo para a Molécula Homopolar de dois elétrons**

Consideremos uma molécula homopolar de dois centros (sítios) e dois elétrons (seria um bom modelo para uma molécula de hidrogênio). Para cada sítio consideramos exclusivamente um **orbital** que pode acomodar os dois estados do spin $(\uparrow, \downarrow)$. Chamamos de

$$(C_{i\sigma}, C_{i\sigma}^\dagger)$$

os operadores usuais de destruição e criação de elétrons de spin σ centrados no sítio $i = 1, 2$. Eles satisfazem relações de anti-comutação de Fermi-Dirac. Temos em total quatro orbitais de um elétron:

$$\begin{aligned} C_{1\uparrow}^{\dagger}|0> &= |1\uparrow>, \\ C_{1\downarrow}^{\dagger}|0> &= |1\downarrow>, \\ C_{2\uparrow}^{\dagger}|0> &= |2\uparrow>, \\ C_{2\downarrow}^{\dagger}|0> &= |2\downarrow>, \end{aligned}$$

e seis estados de duas partículas:

$$\begin{aligned} C_{1\uparrow}^{\dagger}C_{2\uparrow}^{\dagger}|0> &= |1\uparrow, 2\uparrow>, \\ C_{1\downarrow}^{\dagger}C_{2\downarrow}^{\dagger}|0> &= |1\downarrow, 2\downarrow>, \\ C_{1\uparrow}^{\dagger}C_{1\downarrow}^{\dagger}|0> &= |1\uparrow, 1\downarrow>, \\ C_{2\uparrow}^{\dagger}C_{2\downarrow}^{\dagger}|0> &= |2\uparrow, 2\downarrow>, \\ C_{1\uparrow}^{\dagger}C_{2\downarrow}^{\dagger}|0> &= |1\uparrow, 2\downarrow>, \\ C_{1\downarrow}^{\dagger}C_{2\uparrow}^{\dagger}|0> &= |1\downarrow, 2\uparrow>, \end{aligned} \tag{24}$$

onde temos considerado o Princípio de Exclusão de Pauli. Os operadores de número se definem da maneira usual

$$n_{i\sigma} = C_{i\sigma}^{\dagger}C_{i\sigma} \quad , \qquad i = 1, 2, \qquad \sigma = \uparrow, \downarrow \; .$$

O Hamiltoniano deste problema consta de três termos:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_d + \mathcal{H}_{cin} + \mathcal{H}_{int} \; ,$$

que são respectivamente o termo diagonal, o termo cinético e o termo da interação elétron-elétron. Estes são dados por:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_d &= \alpha \textstyle\sum_{i,\sigma} \; C_{i\sigma}^{\dagger}C_{i\sigma} \quad , \\ \mathcal{H}_{cin} &= -t \textstyle\sum_{i \neq j,\sigma} \; C_{i\sigma}^{\dagger}C_{j\sigma} \quad , \\ \mathcal{H}_{int} &= U \; \textstyle\sum_{i} \; n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \; + \dfrac{K}{2} \textstyle\sum_{i \neq j,\sigma,\rho} \; n_{i\sigma}n_{j\rho} \end{aligned} \tag{25}$$

onde t, U e K são positivos. Este Hamiltoniano é conhecido na literatura como *Modelo de Hubbard*. O parâmetro t é o *hopping* eletrônico (amplitude de probabilidade de que o elétron pule de um sítio para o outro), U é a repulsão eletrônica para um mesmo sítio (intrasítio), e K é a repulsão eletrônica entre sítios vizinhos (intersítio).

(a) Mostre, usando identidades para o operador número total, que o Hamiltoniano acima (3) depende de apenas um parâmetro não trivial que pode ser escrito como

$$\lambda = \frac{U - K}{t}.$$

Use que $N = 2 = \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma}$ e que $N^2 = 4$, para o número total de elétrons.

(b) Diagonalize o Hamiltoniano para a base dos seis estados de duas partículas (24). Encontre o estado fundamental em função de λ. Note que agora λ pode ser tanto positivo como negativo.

(c) Definimos a função de correlação

$$\rho_C = 1 - 2 \sum_{i=1,2} \langle\ n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle \ , \tag{26}$$

onde $< ... >$ é a média sobre um estado quântico. Ela é definida de maneira que $\rho_C = 0$ para estados sem nenhuma correlação; $\rho_C > 0$ se os elétrons se mantém separados; e $\rho_C < 0$ se os elétrons se mantém juntos. Calcule ρ_C para o estado fundamental em função de λ e interprete fisicamente o resultado.

(d) As aproximações mais comumente usadas para o problema incluem a de Orbitais Moleculares (MO) e a chamada de Heitler-London (HL). Para MO, a função de onda é dada por

$$|MO>= \frac{1}{2} \left(|1\uparrow, 1\downarrow> + |1\uparrow, 2\downarrow> + |2\uparrow, 1\downarrow> + |2\uparrow, 2\downarrow>\right) \ , \tag{27}$$

enquanto que os estados HL são divididos em neutros

$$|HLN1>= |1\uparrow, 2\downarrow>, \qquad |HLN2>= |2\uparrow, 1\downarrow> \ , \tag{28}$$

e polares

$$|HLP1>= |1\uparrow, 1\downarrow>, \qquad |HLP2>= |2\uparrow, 2\downarrow> \ . \tag{29}$$

Calcule a função de correlação ρ_C para todos estes estados acima, compare com o caso exato e comente sobre a validez das aproximações. Faça um gráfico incluindo todos os casos. ■