FI-002 Mecânica Quântica II
Prova # 2

Prof. G. Cabrera

Data: 20 de maio de 2020
Entrega até as 23:59 hrs

1. **Férmions numa rede "cristalina" unidimensional**

   Considere uma rede unidimensional de N sítios, sendo a a constante da rede. O tamanho do cristal é $L = Na$ e temos um mesmo orbital por sítio (para simplificar as coisas, podemos pensar que se trata de um orbital s, esfericamente simétrico). O operador de criação $C_n^\dagger$ cria um férmion sem spin no orbital do sítio n (**neste problema desconsidere o spin do elétron**). Em uma realização física, podemos pensar que temos íons fixos nos sítios da rede, com um orbital livre que poderá ser ocupado no máximo, por um elétron (férmion).

   Supomos condições periódicas de contorno, isto é:

   $$C_{N+1} \equiv C_1 \ .$$

   O Hamiltoniano do sistema é dado por:

   $$\mathcal{H} = -t \sum_{n=1}^{N} \left(C_{n+1}^\dagger C_n + C_n^\dagger C_{n+1} \right) \ , \tag{1}$$

   que representa elétrons saltando de um sítio para seu vizinho, com amplitude $(-t)$, chamada amplitude de *hopping*.

   (a) Seja um operador **unitário** T de translação, definido por:

   $$T C_n T^\dagger \equiv C_{n+1} \ .$$

   Mostre que T comuta com o Hamiltoniano,

   $$[T, \mathcal{H}] = 0 \ .$$

   O operador T é a versão discreta das translações espaciais que, no caso contínuo, têm o momentum linear como gerador infinitesimal.

(b) Definimos novos operadores fermiônicos por uma expansão do tipo Fourier

$$C_k \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^{N} \mathrm{e}^{-ikan}\, C_n \quad .$$

A notação é a seguinte, usamos índice $(l, m, n, ...)$ para os sítios da rede e os índices $(k, q, ...)$ para vetores de onda. Os possíveis valores de k são obtidos pelas condições periódicas e são dados por

$$ka = \left(\frac{2\pi}{N}\right)\nu, \qquad -\frac{N}{2} \leq \nu < \frac{N}{2} \ , \tag{2}$$

onde ν é um número inteiro (supondo N par). Sua variação em (2) define a chamada *1a. Zona de Brillouin*.

Mostre que os operadores C_k e $C_k^\dagger$ satisfazem as relações de anti-comutação de férmions e que eles deixam o Hamiltoniano (1) na forma diagonal. Encontre os autovalores da energia $E_k = f(k)$, em função de k. Mostre que eles fatisfazem $f(-k) = f(k)$, ou seja que $(k, -k)$ correspondem a um mesmo valor da energia E.

(c) Mostre que os estados de uma partícula definidos por

$$|k > \equiv C_k^\dagger |0>$$

diagonalizam o operador T e encontre os autovalores (suponha que o vácuo é único e use que $T|0>=|0>$). Os kets $|k>$ são chamados estados de Bloch.

(d) Considere o caso de *meia banda cheia*, isto é de $N/2$ elétrons (sem spin) na rede unidimensional. No limite $N >> 1$, o espectro forma um quase-contínuo. Nesta situação, podemos aproximar somas sobre k por integrais, na forma

$$\sum_k \ \rightarrow \frac{L}{2\pi}\int dk \ \rightarrow \frac{L}{2\pi}\int dE \ \frac{2}{\left|\dfrac{dE}{dk}\right|} \ .$$

O fator $\dfrac{L}{2\pi}$ vem das condições periódicas de contorno e a última integração é sobre a energia, com densidade de estados $D(E) = L/\left(\pi\left|\dfrac{dE}{dk}\right|\right)$. Temos considerado com um fator 2, que os dois estados $(k, -k)$ correspondem a um mesmo valor da energia E. Esta última expressão é válida em $1-$dim. Encontre k_F (número de onda de Fermi) e E_F (energia de Fermi) do sistema. Sempre no limite $N >> 1$, avalie a energia do estado fundamental de $N/2$ férmions, que é finita e proporcional a N. ■