Folha 2
Operadores de segunda quantificação

1. Considere o Hamiltoniano do oscilador harmónico unidimensional e os operadores de aniquilação e de criação

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}, \qquad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}.$$

a) Mostre que $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ comuta com $\hat{H}$.
b) Mostre que $\langle n|\,\hat{a}\,|n\rangle = \langle n|\,\hat{a}^\dagger\,|n\rangle = 0$.
c) Exprima $\hat{x}$ e $\hat{p}$ à custa de $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$. Operando com estas expressões calcule $\langle n|\,\hat{x}^4\,|n\rangle$.
d) Mostre que

$$\begin{aligned}
\langle n_1|\,\hat{x}\,|n_2\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n_2+1}\,\delta_{n_1,n_2+1} + \sqrt{n_2}\,\delta_{n_1,n_2-1}\right), \\
\langle n_1|\,\hat{p}\,|n_2\rangle &= i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\sqrt{n_2+1}\,\delta_{n_1,n_2+1} - \sqrt{n_2}\,\delta_{n_1,n_2-1}\right).
\end{aligned}$$

e) Exprima $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$sob forma matricial (tomando $\{|n\rangle\}$ como base) e obtenha a relação $\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] = 1$.

2. O átomo de Li tem, no estado fundamental, a configuração $1S^2 2S^1$.
a) Escreva a forma de função de onda adequada à descrição do estado deste átomo com $S_z = \frac{1}{2}$.
b) Como representa esse estado em notação de segunda quantificação?

3. O Hamiltoniano de um sistema de partículas independentes (massa m) é

$$\hat{H}_0 = \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k.$$

a) Para o caso de bosões, calcule $\left[\hat{a}_k^\dagger, \hat{H}_0\right]$ e escreve a equação de Heisenberg para $\hat{a}_k^\dagger(t)$.
b) Idem para fermiões.

4. Suponha um sistema de dois electrões não interactuantes, móveis a 2 dimensões dentro de um quadrado de lado L.
a) Escreva as funções de onda do estado fundamental e do 1° estado excitado. Indique os valores das energias do estado fundamental e do 1° estado excitado, referindo às respectivas degenerescências.
b) Indique as regras de comutação ou anticomutação a que obedecem os operadores $\hat{a}_\alpha$, $\hat{a}_\beta^\dagger$ apropriados à descrição do sistema anterior, precisando o significado dos índices α, β.

c) Escreva o operador de spin total $\hat{S}_z$ em notação da segunda quantificação.

5. Considere um sistema fermiónico na base dos dois estados de uma partícula φ_0 e φ_1.

a) Escreva sob forma matricial os operadores fermiónicos $\hat{a}_0$, $\hat{a}_0^\dagger$, $\hat{a}_1$, $\hat{a}_1^\dagger$. Verifique que satisfazem as relações de anticomutação apropriadas.

b) Generaliza as relações de anticomutação de modo a incluir o spin S.

6. Seja um sistema fermiónico (massa m, carga e) ocupando um volume V, com interacção electrostática dada por

$$V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\mathrm{e}^{-\mu|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|}}{|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|},$$

com $\mu > 0$. Mostre que o Hamiltoniano do sistema se pode escrever (em 2ª quantificação) como

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma}\frac{\hbar^2k^2}{2m}\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{e^2}{2V\varepsilon_0}\sum_{\mathbf{k},\sigma,\mathbf{k}',\sigma',\mathbf{q}}\frac{1}{q^2+\mu^2}\hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger\hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger\hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}.$$

7. Designe por $\hat{b}_{\mathbf{k},\sigma}$ ($\hat{b}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$) os operadores de aniquilação (criação) de electrões num estado $\mathbf{k}$ com spin σ. Na teoria de B.C.S. de supercondutividade surgem os operadores

$$\hat{c}_{\mathbf{k}} = \hat{b}_{-\mathbf{k},\downarrow}\hat{b}_{\mathbf{k},\uparrow} \quad \text{e} \quad \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger = \hat{b}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger\hat{b}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger$$

que destroem ou criam um par dos electrões correlacionados (par de Cooper). Obtenha as respectivas leis de comutação, investigando se se trata de operadores bosónicos.

8. Considere uma cadeia linear (espaçamento a) de N osciladores harmónicos (idênticos) acoplados

$$H = \sum_l\left[\frac{\hat{p}_l^2}{2m} + \frac{K}{2}(\hat{u}_l - \hat{u}_{l+1})^2\right].$$

a) Definindo $\hat{U}_k = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_l \mathrm{e}^{-ikal}\hat{u}_l$ e $\hat{P}_k = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_l \mathrm{e}^{-ikal}\hat{p}_l$ (condições fronteira periódicas), mostre que $\left[\hat{U}_k, \hat{P}_{k'}\right] = i\hbar\delta_{k,k'}$, $\hat{U}_k^\dagger = \hat{U}_{-k}$, $\hat{P}_k^\dagger = \hat{P}_{-k}$.

b) Definindo

$$\hat{a}_k = \frac{\hat{P}_k - im\omega_k\hat{U}_k}{\sqrt{2m\hbar\omega_k}} \qquad \text{com} \qquad \omega_k = \sqrt{\frac{2K(1-\cos ka)}{m}},$$

verifique que

$$\begin{aligned}\left[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger\right] &= 1, \qquad [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}] = \left[\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_{k'}^\dagger\right] = 0,\\ H &= \frac{1}{2}\sum_k\hbar\omega_k\left(\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k + \hat{a}_k\hat{a}_k^\dagger\right).\end{aligned}$$