Sexta Série de Exercícios
Mecânica Estatística - IFUSP - 30/10/2017
mecânica estatística quântica

1- As vibrações elásticas de um sólido harmônico unidimensional, com um único tipo de átomo por célula primitiva, podem ser descritas pelas energias cinética e potencial,

$$E_{cin} = \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{2} m \left(\frac{du_j}{dt}\right)^2 \qquad \text{e} \qquad E_{pot} = \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{2} k \left(u_{j+1} - u_j\right)^2,$$

em que m e k são constantes positivas, u_j é um deslocamento em relação à posição de equilíbrio do j-ésimo átomo da cadeia, e nós vamos adotar condições periódicas de contorno, $u_{N+1} = u_1$.

(i) Mostre que, na representação (discreta) de Fourier, com N par, é possível escrever

$$u_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \hat{u}_q \exp\left(iqj\right),$$

com o número de onda q na primeira zona de Brillouin,

$$q = 0,\, \pm\frac{2\pi}{N},\, \pm 2\frac{2\pi}{N},\, \pm 3\frac{2\pi}{N}, ..., \pi.$$

Note que há N valores de q. Obtenha explicitamente esses valores para $N = 6$, por exemplo. Note que seria igualmente possível trabalhar com N ímpar.

(ii) Levando em conta que u_j é real, e usando as condições de ortogonalização,

$$\sum_{j=1}^{N} \exp\left[i\left(q_1 + q_2\right) j\right] = N \delta_{q_1, -q_2},$$

mostre que a energia desse sistema pode ser escrita na forma

$$\mathcal{H} = \sum_q 2\, m\, \omega_q^2\, a_q\, a_q^*,$$

em que

$$\hat{u}_q = a_q \exp\left(i\omega_q t\right) + a_{-q}^* \exp\left(-i\omega_q t\right),$$

com

$$\omega_q^2 = \frac{2k}{m}\left(1 - \cos q\right).$$

Esboce um gráfico de ω_q contra q na primeira zona de Brillouin $(-\pi < q < +\pi)$. Verifique a forma de ω_q para valores muito pequenos de q.

(iii) Introduzindo as transformações

$$Q_q = \alpha\left[a_q \exp\left(i\omega_q t\right) + a_q^* \exp\left(-i\omega_q t\right)\right], \qquad P_q = \frac{d}{dt}Q_q,$$

e fazendo uma escolha conveniente da constante real α, mostre que é possível escrever um hamiltoniano clássico,

$$\mathcal{H} = \sum_q \left[\frac{1}{2}P_q^2 + \frac{1}{2}\omega_q^2 Q_q^2\right].$$

(iv) Supondo que esse sistema esteja em contato com um reservatório térmico a temperatura T, obtenha a energia interna e o calor específico a volume constante.

(v) Trate agora as variáveis canonicamente conjugadas Q_q e P_q como operadores quânticos e introduza as transformações

$$a_q = \alpha_1 Q_q + i\alpha_2 P_q; \qquad a_q^\dagger = \alpha_1 Q_q - i\alpha_2 P_q,$$

em que α_1 e α_2 são reais e dependem apenas do módulo de q. Com uma escolha adequada dessas constantes, mostre que a_q e $a_q^\dagger$ são operadores bosônicos, e que o operador hamiltoniano pode ser escrito na forma

$$\hat{H} = \sum_q \left[\hbar\omega_q a_q^\dagger a_q + \frac{1}{2}\hbar\omega_q\right].$$

(vi) Utilize o formalismo quântico para analisar o calor específico a volume contante c_V. Qual o valor da temperatura de Debye, T_D, desse sistema? Obtenha o resultado assintótico $c_V \sim AT^c$ no regime de baixas temperaturas $(T << T_D)$. Qual o valor das constantes A e c?

2- O hamiltoniano de um modelo de Heisenberg ferromagnético de spin S, numa rede hipercúbica de dimensão d, é dado pela expressão

$$\hat{\mathcal{H}} = -J\sum_{(j,k)} \overrightarrow{S}_j \cdot \overrightarrow{S}_k - g\mu_B H \sum_{j=1}^{N} S_j^z,$$

em que o parâmetro de troca é positivo, $J > 0$, a primeira soma deve ser feita sobre pares de vizinhos mais próximos da rede, H é o campo magnético aplicado, e os operadores de spin obedecem as regras usuais de comutação dos operadores de momento angular.

(i) Mostre que o estado fundamental desse sistema é dado pela função de onda

$$\Psi_0 = \prod_j |S\rangle_j \,,$$

em que a produtória representa um produto direto, cada íon está num estado em que $S^z = +S$, e a energia é dada pela expressão

$$E_0 = -JdNS^2 - g\mu_B HS.$$

(ii) A transformação de Holstein-Primakoff, dada por

$$S_j^+ = (2S)^{1/2}\left[1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right]^{1/2} a_j, \qquad S_j^- = (2S)^{1/2}\, a_j^\dagger \left[1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right]^{1/2},$$

em que a_j e $a_j^\dagger$ são operadores bosônicos de criação e aniquilação, é um dos recursos conhecidos para transformar operadores de momento angular em operadores bosônicos, que obedecem regras canônicas de comutação.

Vamos restringir o problema a campo nulo ($H = 0$) e utilizar uma forma linear da transformação de Holstein-Primakoff,

$$S_j^+ = (2S)^{1/2}\left[1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right]^{1/2} a_j \Longrightarrow (2S)^{1/2}\, a_j,$$

$$S_j^- = (2S)^{1/2}\, a_j^\dagger \left[1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right]^{1/2} \Longrightarrow (2S)^{1/2}\, a_j^\dagger.$$

Nesse limite linear, a campo nulo, mostre que o hamiltoniano de Heisenberg assume a forma

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2} J \sum_{R,\delta} \left[S^2 - S\left(a_R^\dagger a_R + a_{R+\delta}^\dagger a_{R+\delta}\right) + S\left(a_R a_{R+\delta}^\dagger + a_R^\dagger a_{R+\delta}\right)\right],$$

em que R designa um sítio da rede cristalina e δ é um vizinho desse sítio R (e estamos omitindo a notação vetorial). Em particular, verifique o resultado

$$S_j^z = \frac{1}{2}\left[S_j^+, S_j^-\right] = S - a_j^\dagger a_j,$$

que confere uma interpretação sugestiva para o operador "número de excitações", $a_j^\dagger a_j$.

(iii) Introduzindo uma transformação de Fourier,

$$b_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R a_R \exp(iqR), \qquad b_q^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R a_R^\dagger \exp(-iqR),$$

com condições periódicas de contorno, mostre que o hamiltoniano dessa aproximação linear, na ausência de campo aplicado, é dado por

$$\hat{\mathcal{H}} = -JdNS^2 + \sum_q \epsilon_q b_q^\dagger b_q,$$

em que a soma é sobre a primeira zona de Brillouin, e

$$\epsilon_q = 2JSd - 2JS(\cos q_1 + ... + \cos q_d) \approx JSq^2 + O\left(q^4\right).$$

(iv) Nesse limite linear, mostre que a magnetização espontânea do sistema é dada por

$$M_z = \sum_R \langle S_R \rangle = NS - \sum_q \left\langle b_q^\dagger b_q \right\rangle,$$

em que as médias são canônicas e a soma é sobre a primeira zona de Brillouin. Utilize esse resultado para obter uma forma assintótica da magnetização espontânea no limite de baixas temperaturas,

$$\frac{1}{N} M_z = S - AT^\omega + ...$$

Obtenha o prefator A e o expoente ω. Compare o valor de ω com resultados experimentais para compostos ferromagnéticos.

3- Considere um gás de Bose diluído, a baixas temperaturas, incluindo apenas colisões binárias com pequenas transferências de momento. Na representação de Fock, o hamiltoniano pode ser escrito na forma

$$\mathcal{H} = \sum_k \epsilon_k^o \, a_k^\dagger \, a_k + \frac{g}{2V} \sum_{k_1,k_2,k_3,k_4} a_{k_1}^\dagger \, a_{k_2}^\dagger \, a_{k_3} \, a_{k_4} \, \delta_{k_1+k_2,k_3+k_4},$$

em que a constante g desempenha o papel de um pseudopotencial (e estamos omitindo a notação vetorial).

(i) A baixas temperaturas quase todas as partículas pertencem ao condensado. Vamos então supor que $N - N_o << N$, em que N é o número total de partículas e N_o é o número de partículas no condensado. Nessas condições torna-se razoável substituir os operadores $a_o^\dagger$ e a_o pelo número $\sqrt{N_0}$. Mantendo apenas os termos dominantes, e descartando as interações que não envolvem o condensado, mostre que o termo de interação desse hamiltoniano é dado por

$$\mathcal{H}_{int} = \frac{g}{2V}\left\{N_o^2 + 2N_o\sum_{k\neq 0}\left(a_k^\dagger a_k + a_{-k}^\dagger a_{-k}\right) + N_o\sum_{k\neq 0}\left(a_k a_{-k} + a_k^\dagger a_{-k}^\dagger\right)\right\}.$$

(ii) Nessa aproximação o operador N_{op} associado ao número de partículas pode ser escrito como

$$N_{op} = \sum_k a_k^\dagger a_k \approx N_o + \frac{1}{2}\sum_{k\neq 0}\left(a_k^\dagger a_k + a_{-k}^\dagger a_{-k}\right).$$

Portando, dado o número N de partículas, é possível eliminar N_o do hamiltoniano. Descartando termos de ordem superior, mostre que obtemos o "hamiltoniano de Bogoliubov",

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}Vgn^2 + \frac{1}{2}\sum_{k\neq 0}\left\{(\epsilon_k^o + ng)\left(a_k^\dagger a_k + a_{-k}^\dagger a_{-k}\right) + ng\left(a_k a_{-k} + a_k^\dagger a_{-k}^\dagger\right)\right\},$$

onde $n = N/V$ e ϵ_k^o é o espectro de energia de quase partículas livres.

(iii) Diagonalize o hamiltoniano de Bogoliubov através da transformação

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

e

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

onde u_k e v_k são funções reais e esfericamente simétricas do vetor k. Impondo a condição

$$u_k^2 - v_k^2 = 1,$$

mostre que essa transformação é canônica, isto é, que preserva as regras de comutação de bósons. Obtenha o hamiltoniano diagonalizado,

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}Vgn^2 - \frac{1}{2}\sum_{k\neq 0}(\epsilon_k^o + ng - E_k) + \frac{1}{2}\sum_{k\neq 0}E_k\left(\alpha_k^\dagger\alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger\alpha_{-k}\right),$$

com o espectro de quase-partículas

$$E_k = \left[\left(\epsilon_k^o + ng \right)^2 - (ng)^2 \right]^{1/2}.$$

(iv) Supondo que $\epsilon_k^o = \hbar^2 k^2 / 2m$, esboce um gráfico de E_k em termos do momento k. Mostre que $E_k \sim k$ para $k \to 0$ e que $E_k \sim k^2$ para $k \to \infty$. Qual o significado físico dessas formas assintóticas?

(v) Vamos agora discutir uma situação ligeiramente mais complicada, supondo que o pseudopotencial g seja uma função esfericamente simétrica do vetor de onda k. Os cálculos podem ser facilmente refeitos, levando ao mesmo resultado para E_k, com a substituição de g por $g(k)$. Vamos ainda supor que $g(k)$ tenda a um valor constante nos limites $k \to 0$ e $k \to \infty$. Encontre uma forma de $g(k)$ para que o espectro E_k tenha um mínimo em $k_0 \neq 0$, como é observado experimentalmente, e que foi associado à existência de quase-partículas denominadas rótons. Escreva uma expansão de E_k nas vizinhanças de k_o, até termos de segunda ordem, e calcule a contribuição dos rótons para a entropia e o calor específico desse sistema (como foi feito em trabalho pioneiro de Landau!!).

O espectro de energia do hélio II (superfluido) pode ser obtido através de experiências de difração de nêutrons. Veja o trabalho clássico de D. G. Henshaw e A. D. B. Woods, “Modes of Atomic Motions in Liquid Helium by Inelastic Scattering of Neutrons, Phys. Rev. **121**, 1266 (1961), em particular a figura 4.