FÍSICA da MATÉRIA CONDENSADA

Mestrado em Engenharia Física Tecnológica

Série 3a

1. a) O raio de Bohr a_0 é o comprimento característico em física atómica (quântica e não relativista), no qual a energia cinética de uma partícula é da ordem de grandeza da energia potencial de Coulomb (mas de sinal oposto). A unidade de energia natural E_0, em que a constante de proporcionalidade é $\frac{1}{2}$ (de acordo com o teorema do virial e do teorema de Euler para as funções homogéneas, aplicado ao potencial de Coulomb), é o Rydberg, tendo-se portanto

$$E_0 = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{a_0}\right)^2 = \frac{1}{2}\frac{e^2}{a_0}$$

Qual é a expressão para o raio de Bohr a_0?

b) Procedendo de uma forma análoga, obtenha as expressões do comprimento de onda de Compton e do raio clássico do electrão. Verifique que cada um destes comprimentos é independente de uma das constantes $c, \hbar, e$ e diferem uns dos outros por um factor de $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$, a constante de estrutura fina.

c) Mostre que a lei do radiamento do corpo negro de Planck, tal como já anteriormente a lei de Wien, depende de três constantes fundamentais $c, k_B, \hbar$, ao contrário da lei de Rayleigh-Jeans, que só depende de duas. Interprete a lei de deslocamento de Wien como envolvendo a comparação de duas energias, térmica, k_BT, e de radiação, $\hbar\omega$, requerendo portanto uma nova constante fundamental, além da constante de Boltzmann (introduzida por Planck e inicialmente definida por $k_B = \frac{R}{N_A}$, em que R é a constante dos gases ideais e N_A o número de Avogadro).

d) Discuta o sistema de unidades de Planck, em que se faz $k_B = c = \hbar = G = 1$, sendo G a constante da gravitação universal.

2. a) O raio de Wigner-Seitz r_0 é definido como o raio efectivo da esfera ocupada por cada um dos electrões de um sistema electrónico com densidade $n = \frac{N}{V}$, em que N é o número de electrões e V o volume, e normalmente é expresso em termos do raio de Bohr pelo parâmetro adimensional $r_s = \frac{r_0}{a_0}$. Obtenha uma expressão para o raio de Wigner-Seitz.

b) Exprima o vector de onda de Fermi em termos do raio de Wigner-Seitz e conclua que são da mesma ordem de grandeza.

3. Considere um sistema d-dimensional de electrões livres. Calcule a densidade de estados $\mathcal{D}(\epsilon)$, em função da energia. De que modo essa densidade de estados depende da dimensão? Faça o gráfico da variação com a energia para $d = 1, 2, 3$.

4. Correlações e princípio de exclusão de Pauli.

Considere um gás de electrões livres à temperatura $T = 0$.

a) Defina, usando o formalismo da segunda quantificação, o estado fundamental de Fermi $|\Phi_F\rangle$, em termos do vácuo $|0\rangle$ sem partículas.

b) Calcule a função de correlação

$$G^1_s(\vec{r} - \vec{r}') = \langle \Phi_F | \psi^\dagger_s(\vec{r}) \psi_s(\vec{r}') | \Phi_F \rangle$$

que dá amplitude de remover uma partícula no ponto $\vec{r}'$ com spin s e de criar uma partícula no ponto $\vec{r}$ com spin s no estado fundamental de Fermi, e em que $\psi_s(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} a_{\vec{k}s}$.

Qual o valor desta função quando $\vec{r}' = \vec{r}$?

c) Calcule a função de correlação

$$G^2_{ss'}(\vec{r} - \vec{r}') = \langle \Phi_F | \psi^\dagger_s(\vec{r}) \psi^\dagger_{s'}(\vec{r}') \psi_{s'}(\vec{r}') \psi_s(\vec{r}) | \Phi_F \rangle$$

para spins $s \neq s'$ e para spins $s = s'$. Relacione-a com a função da alínea anterior.

O que conclui sobre a probabilidade de encontrar um electrão no ponto $\vec{r}'$ se soubermos que existe outro no ponto $\vec{r}$?

5. Aproximação de Thomas-Fermi e teoria de funcional de densidade.

Na teoria de funcional de densidade, a energia de um sistema de electrões em interacção é dada por um funcional da densidade, cuja forma é necessário determinar. A aproximação de Thomas-Fermi é considerada como precursora da teoria do funcional de densidade. Para temperatura nula, o termo de energia cinética é então dado por

$$T = C \int n^\alpha(\vec{r}) d^3r.$$

a) Determine, de uma forma descritiva apenas, o expoente α. Para isso, considere um gás homogéneo de electrões, a $T = 0$, e relacione a energia cinética por unidade de volume com o número de electrões por unidade de volume e admita que essa relação continua a ser válida para um gás não homogéneo.

b) Determine a constante de proporcionalidade C.

6. Função de Lindhard e blindagem de Debye.

Em teoria da resposta linear, a resposta de um gás de electrões a um potencial externo é:

$$V(\vec{q},\omega) = \frac{V^{ext}(\vec{q},\omega)}{\epsilon(\vec{q},\omega)}$$

sendo a constante dieléctrica dada por $\epsilon(\vec{q},\omega) = 1 - \frac{4\pi}{q^2}\chi(\vec{q},\omega)$, em que $\chi(\vec{q},\omega)$ é dada pela função de Lindhard:

$$\chi(\vec{q},\omega) = \frac{e^2}{V}\sum_{\vec{k}} \frac{f(\epsilon(\vec{k}+\vec{q})) - f(\epsilon(\vec{k}))}{\epsilon(\vec{k}+\vec{q}) - \epsilon(\vec{k}) - \hbar(\omega - i\delta)}.$$

a) Mostre que no limite estático $\omega = 0$ e para valores pequenos de $\vec{q}$, se obtem o resultado de Thomas-Fermi

$$\chi(\vec{q},0) = -e^2\frac{\partial n}{\partial \mu}$$

em que n é o número médio de electrões e μ o potencial químico.

b) Mostre que o potencial devido a uma carga externa é dado pelo potencial de Coulomb blindado

$$V(q) = \frac{4\pi}{q^2 + k_0^2}.$$

Interprete fisicamente. Qual é a expressão de k_0?

c) Admita que se trata de um gás livre de electrões à temperatura $T = 0$. Complete o cálculo de k_0 e exprima k_0 em função do momento de Fermi k_F e do raio de Bohr $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$.

7. Considere a a teoria de Stoner do magnetismo itinerante, usando o modelo de Hubbard.

a) Na aproximação das fases aleatórias a susceptibilidade transversal, envolvendo uma média do produto dos operadores S^+S^- é dada por

$$\chi^{+-}(k,\omega) = \frac{\chi_0^{+-}(k,\omega)}{1 - U\chi_0^{+-}(k,\omega)}$$

em que $\chi_0^{+-}(k,\omega)$ é a susceptibilidade dos electrões, na presença do campo efectivo.

Em teoria da resposta linear, a função de Lindhard para esta susceptibilidade é dada por:

$$\chi_0^{+-}(k,\omega) = -\frac{1}{V}\sum_q \frac{f_{q+k\downarrow} - f_{q\uparrow}}{\tilde{\epsilon}_{q+k\downarrow} - \tilde{\epsilon}_{q\uparrow} - (\omega - i\delta)}.$$

Tomando $k = 0$, determine $\chi_0^{+-}(0,\omega)$. Faça $\omega = 0$ e interprete o resultado obtido, geometrica ou matematicamente. Qual o limite de $\chi_0^{+-}(0,0)$ quando $\Delta \to 0$?

b) Determine $\chi^{+-}(0,\omega)$. Mostre que, na ausência de campo externo h, diverge quando $\omega \to 0$, na fase ferromagnética. Explique a razão desta divergência da susceptibilidade transversal.