SISTEMAS DE MUITOS CORPOS

Curso de Engenharia Física Tecnológica

Série 3

1. Usando o cálculo das variações com fronteiras móveis mostre que a distância mais curta entre duas superfícies (diferenciáveis) é dada por:

a) um segmento de recta,

b) que intersecta ortogonalmente cada uma das duas superfícies.

2. A aproximação WKB à função de onda, em ordem mais baixa, reproduz os resultados clássicos para as densidades de probabilidade e de corrente.

a) Escreva a função de onda na forma $\psi(\vec{x},t) = A(\vec{x},t)e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{x},t)}$, com $A(\vec{x},t)$ e $S(\vec{x},t)$ reais, e separe a equação de Schrödinger em parte real e parte imaginária.

b) Mostre que uma das equações assim obtidas é a equação da continuidade de um fluído clássico, se definirmos $\rho = A^2$ e $\vec{v} = \frac{\nabla S}{m}$ e que a outra, no limite $\hbar \to 0$, é a equação de Hamilton-Jacobi.

c) Tome o gradiente da equação de Hamilton-Jacobi e obtenha a equação de movimento $\frac{dm\vec{v}}{dt} = -\nabla V$.

3. Interprete fisicamente a experiência de Bohm-Aharonov, usando a formulação da mecânica quântica não relativista de Feynman. Verifique que as quantidades fisicamente observáveis dependem apenas dos campos.

4. A função de onda de Klein-Gordon é invariante numa transformação de Lorentz. As energias relativista e não relativista de uma partícula estão relacionadas entre si por $E_r = mc^2 + E_{nr}$.

a) Mostre que as funções de onda de Klein-Gordon e de Schrödinger estão relacionadas entre si por $\psi_{KG} = e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2 t}\psi_S$.

b) A partir da lei de transformação do tempo numa transformação de Lorentz obtenha a lei de transformação da função de onda de Schrödinger numa transformação de Galileu.

5. Usando a formulação da mecânica quântica não relativista de Feynman i.e., estudando a lei de transformação da acção, obtenha:

a) a lei de transformação da função de onda numa transformação de gauge, $\vec{A}' = \vec{A} + \nabla\Lambda$, $\phi' = \phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t}$.

b) a lei de transformação da função de onda numa transformação de Galileu, $\vec{x}' = \vec{x} + \vec{V}t$, $t' = t$.

Verifique que a equação de Schrödinger, para uma partícula nos potenciais $\vec{A}, \phi$, é invariante numa transformação de gauge, e que a equação de Schrödinger, para uma partícula num potencial ϕ, é invariante numa transformação de Galileu.

6. A fórmula de Trotter consiste na expressão

$$e^{A+B} = \lim_{N\to\infty} \left(e^{\frac{A}{N}} e^{\frac{B}{N}} \right)^N$$

que por vezes é usada como ponto de partida para a construção do integral de caminho.

a) Dados dois operadores $\hat{A}$ e $\hat{B}$, mostre que

$$e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\lambda\hat{A}} e^{\lambda\hat{B}} + 0(\lambda^2).$$

Mais concretamente, escrevendo

$$e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\lambda\hat{A}} e^{\lambda\hat{B}} F_2(\lambda)$$

mostre que

$$F_2(\lambda) = e^{\frac{\lambda^2}{2}\hat{C}} F_3(\lambda)$$

sendo $F_3(\lambda) = \hat{1} + 0(\lambda^3)$, em que $\hat{C} = -[A, B]$. Sugestão: calcule $F_2'(\lambda)$, ou simplesmente expanda em série de potências.

b) Em aplicações numéricas, em que não se chega a tomar o limite $N \to \infty$ é preferível usar expressões mais simétricas como, por exemplo,

$$e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\lambda\frac{\hat{B}}{2}} e^{\lambda\hat{A}} e^{\lambda\frac{\hat{B}}{2}} + 0(\lambda^3).$$

Mostre que esta aproximação é, de facto, de ordem λ^3.

7. Integral de caminho e processos estocásticos.

Considere um movimento aleatório numa rede ou num espaço a d dimensões. Cada um dos passos, $\vec{r}_{k+1} - \vec{r}_k = \vec{\xi}_k$, de comprimento l, é uma variável aleatória que pode ser, com igual probabilidade, os $2d$ vectores $\pm l\vec{e_\alpha}$, $\alpha = 1, \cdots, d$ (modelo discreto) ou todos os pontos da esfera de raio l (modelo contínuo). A probabilidade de, no fim de n passos, se estar no ponto $\vec{r}_n$ é dada por

$$P(\vec{r}, n) =< \delta(\vec{r} - \vec{r}_n) >$$

sendo a média sobre as configurações que cada uma das variáveis aleatórias $\vec{\xi}_k$ pode tomar.

a) Para estarmos no ponto $\vec{r}_n$ no fim de n passos é preciso termos atingido o ponto $\vec{r}'$, no fim de $n-1$ passos, e daí passar ao ponto final no último passo, ou seja, devemos ter

$$P(\vec{r}, n) = \int d^d r' P(\vec{r} - \vec{r}', 1) P(\vec{r}', n-1).$$

Mais geralmente, para estarmos no ponto $\vec{r}_{n_1+n_2}$ no fim de $n_1 + n_2$ passos é preciso termos atingido o ponto $\vec{r}'$, no fim de n_1 passos, e daí passar ao ponto final nos últimos n_2 passos, ou seja, devemos ter

$$P(\vec{r}, n_1 + n_2) = \int d^d r' P(\vec{r} - \vec{r}', n_2) P(\vec{r}', n_1).$$

Obtenha esta propriedade a partir das definições dadas (propriedade Markoffiana).

a) Qual a consequência desta relação para a transformada de Fourier $P(\vec{q}, n)$ de $P(\vec{r}, n)$?

b) Obtenha $P(\vec{q}, n)$ e, por inversão da transformada de Fourier, obtenha uma expressão para $P(\vec{r}, n)$, sabendo que inicialmente se partiu do ponto $\vec{r}_0$.

c) Admitindo que $n \gg 1$, $|\vec{r}| \gg l$, verifique que $P(\vec{r}, n)$ satisfaz assimptoticamente a equação de difusão

$$\frac{\partial P(\vec{r}, L)}{\partial L} = D \nabla^2 P(\vec{r}, L)$$

sendo $L = nl$. Determine D.

d) Mostre que $P(\vec{q}, n)$ no limite $n \gg 1$, $|\vec{r}| \gg l$, é dada assimptoticamente por

$$P(\vec{q}, n) = e^{-\frac{nl^2}{2d} q^2}.$$

Calcule $P(\vec{r}, L)$ e verifique que satisfaz a equação diferencial da alínea anterior.

e) Itere a expressão para a propriedade Markoffiana no espaço de configuração. Mostre que no limite $n \gg 1$, $|\vec{r}| \gg l$, no qual se pode usar a expressão assimptótica para $P(\vec{r}, L)$, se obtém o integral de caminho

$$P(\vec{r}, L) = \int \mathcal{D}x e^{-\frac{d}{2l}\int_0^L ds \dot{x}^2(s)},$$

com as condições fronteira $\vec{r}(0) = \vec{r}_0$ e $\vec{r}(L) = \vec{r}$. Defina $\mathcal{D}x$ usando a aproximação discreta do integral funcional.

8. Integral de caminho e polímeros.

Um modelo simplificado para polímeros é o modelo de articulação livre em que se considera um polímero como sendo uma sucessão de N monómeros $\vec{r}_i$, de comprimento fixo l, sem qualquer restrição no modo como estão articulados. A distância entre as extremidades do polímero é $\vec{R} = \sum_{i=1}^{N} \vec{r}_n$.

Nestas condições a configuração do polímero pode ser comparada a um movimento aleatório, considerado no problema anterior.

a) Calcule a transformada de Laplace $P(\vec{q}, L)$. Mostre que

$$P(\vec{q}, s) = \frac{1}{\vec{q}^2 + m^2}$$

indicando a expressão de m^2. Esta expressão sugere uma analogia com o problema das transições de fase no qual $m^2 \propto T - T_C$, ou seja m^2 é proporcional ao desvio da temperatura do seu valor crítico. Qual a variável que corresponde à temperatura no caso dos polímeros?

b) Nos polímeros reais, é importante considerar o chamado efeito do volume excluído que traduz o facto de o polímero não poder passar duas vezes pelo mesmo ponto. Como alterar o integral funcional para tomar em consideração este facto ? A propriedade Markoffiana continua a ser válida ?

9. Integrais estocásticos de Itô e de Stratonovich. Regra de Barrow.

Partindo de

$$f(b) - f(a) = \sum_{k=0}^{N-1} f(x_{k+1}) - f(x_k)$$

sendo x_k, com $k = 0, 1, \cdots, N$, os pontos de uma partição do intervalo $[a, b]$, com $x_0 = a, x_N = b$, e dada, por exemplo, por $x_k = a + k\frac{b-a}{N}$ mostre que, em segunda ordem em $\Delta x_k = x_{k+1} - x_k$, se tem

$$f(b) - f(a) \simeq \sum_{k=0}^{N-1} f'(\overline{x}_k)\Delta x_k + \frac{1}{2}\sum_{k=0}^{N-1} f''(\overline{x}_k)(1-2\theta_k)(\Delta x_k)^2$$

sendo $\overline{x}_k = x_k + \theta_k(x_{k+1} - x_k)$, com $0 \leq \theta_k \leq 1$, um ponto do intervalo $[x_k, x_{k+1}]$. Usualmente, no limite $N \to \infty$, em que o maior $\Delta x_k \propto \frac{1}{N}$, o segundo termo tende para zero e o integral

$$\int_a^b f'(x)dx = \lim_{N\to\infty} \sum_{k=0}^{N-1} f'(\overline{x}_k)\Delta x_k$$

não depende do valor de θ_k usado, tendo-se então

$$\int_a^b f'(x)dx = f(b) - f(a)$$

No entanto, quando x_k são variáveis aleatórias, tendo-se $< (\delta x_k)^2 >\simeq \frac{i\hbar\Delta t}{m}$, como acontece no caso do integral de caminho, a segunda parcela dará uma contribuição não nula, da forma

$$\frac{1}{2}(1-2\theta)\frac{i\hbar}{m}\int_{t_i}^{t_f} f''(x)dt$$

tendo admitindo que $\theta_k = \theta$, independente de k.

Na definição de Itô, $\theta_k = 0$ e na de Stratonovich, $\theta_k = \frac{1}{2}$. Neste último caso a regra de Barrow do cálculo integral permanece válida, pois esta contribuição anula-se. Analise o integral de caminho de Feynman para uma partícula na presença de um potencial vector, usando estes resultados.

10. A partir do integral de caminho no espaço de fase, usando as equações de Dyson-Schwinger:

a) obtenha as equações de movimento $< \frac{dx}{dt} >=< \frac{p}{m} >$ e $< \frac{dp}{dt} >=< -\frac{\partial V}{\partial x} >$,

b) obtenha o comutador $< [x,p] >= i\hbar$.

11. Estude as implicações da eq. (2.11.4) para as seguintes simetrias: invariância para translações no espaço e no tempo, invariância para rotações, invariância numa transformação de Galileu, de Lorentz e invariância de gauge.

12. Verifique as eqs. (2.15.8), (2.15.12).

13. Calcule o prefactor $A(t_f, t_i)$ para o oscilador harmónico, usando a propriedade de grupo da eq. (2.15.13).

14. Usando a eq. (2.6.2) e os resultados obtidos para a partícula livre e para o oscilador harmónico, obtenha $\varphi(x,t)$ para uma partícula livre e para o oscilador harmónico, admitindo que inicialmente se tinha:
a) $\varphi(x,t) = \delta(x - x_0)$ (partícula localizada)
b) $\varphi(x,t) = e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x}$ (onda plana)
c) $e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-x_0)^2+\frac{i}{\hbar}p_0 x}$ (gaussiana)
Analise os resultados obtidos.

15. Usando a eq. (2.16.1) ou (2.16.5) e os resultados obtidos para o oscilador harmónico, obtenha as funções próprias para o oscilador harmónico.

16. Calcule $\overline{K}(x_f, x_i, E) =< x_f|\frac{1}{E-\hat{\mathcal{H}}}|x_i >$ para a partícula livre.

17. a) Derive as identidades das eqs. (2.15.42) e (2.17.16) Sugestão : Dado um polinómio $P_n(x)$ de grau n e raízes x_k com $k = 1, \cdots, n$, temos

$$P_n(x) = a_n \prod_{k=1}^{n}(x - x_k)$$

sendo a_n o coeficiente em x^n, e portanto

$$\frac{P_n(x)}{P_n(0)} = \prod_{k=1}^{n}\left(1 - \frac{x}{x_k}\right)$$

Tome como ponto de partida os polinómios $P_{2N}(x) = x^{2N} - 1$ e $P_N(x) = x^N - 1$ e derive as referidas identidades.

b) No caso de estarmos interessados no produto infinito de uma função é, em geral, preferível usar, por razões de convergência, a expressão

$$P_n(x) = P_n(0)e^{\frac{P_n'(0)}{P_n(0)}}\prod_{k=1}^{n}\left(1 - \frac{x}{x_k}\right)e^{\frac{x}{x_k}}$$

Derive esta expressão.

18. Em Mecânica Estatística é costume usar o modelo de Ising para modelizar vários problemas. Considere o modelo de Ising a uma dimensão,

com interacções de primeiros vizinhos apenas, em que N spins de Ising i.e. variáveis clássicas $\sigma_i = \pm 1$, interactuam entre si de acordo com o Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - H \sum_i \sigma_i$$

a) Defina a matriz de transferência V de um ponto para o seu vizinho, com elementos $V_{i,i+1} = e^{\beta\left(J\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{H}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1})\right)}$. Exprima a função de partição $Z = Tre^{-\beta\mathcal{H}}$ em termos da matriz de transferência. Considere o caso de haver ou não condições fronteira periódicas.

Este resultado ilustra a equivalência entre um problema quântico a d dimensões e um problema clássico a $d+1$ dimensões, de que a construção do integral de caminho é um exemplo.

b) Por diagonalização da matriz de transferência calcule a função de partição Z, a magnetização $M = \frac{1}{N} < \sum_i \sigma_i >$ e a função de correlação $\chi_{ij} =< \sigma_i \sigma_j >$. Considere condições fronteira periódicas e faça $H = 0$, numa primeira fase. Considere o limite termodinâmico, $N \to \infty$.