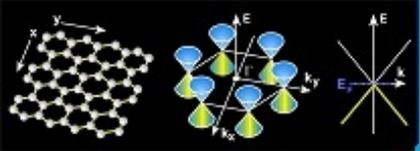


01 - INTRODUÇÃO

PROF. CÉSAR AUGUSTO DARTORA - UFPR

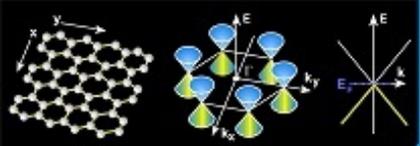
E-MAIL: CADARTORA@ELETRICA.UFPR.BR

CURITIBA-PR



Roteiro do Capítulo:

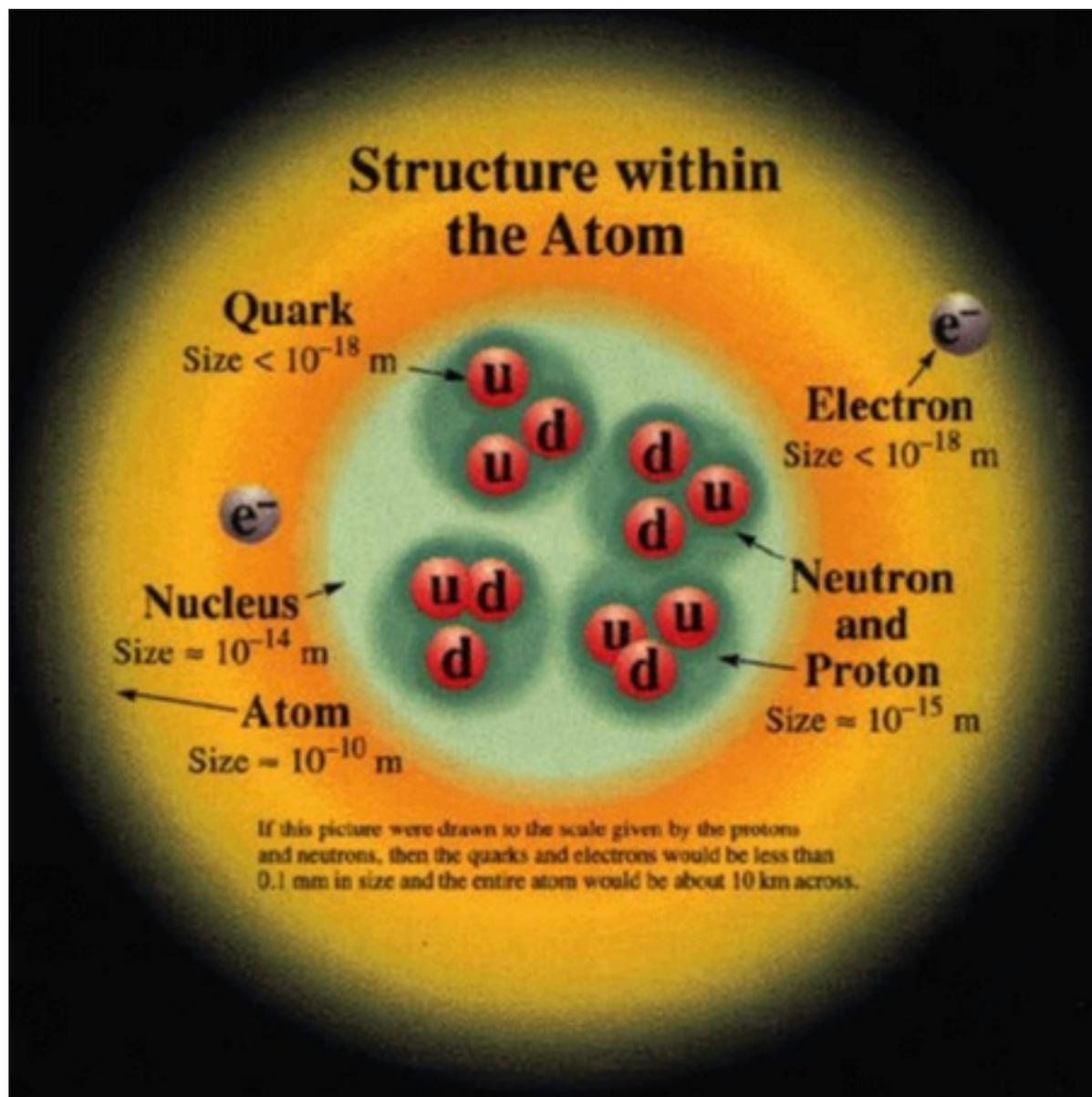
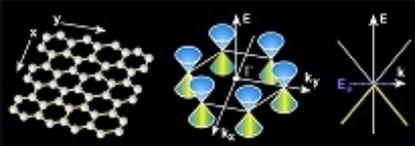
- Noções gerais da Física do Estado Sólido
- Ramos de estudos em Física do Estado Sólido
- Revisão de Mecânica Quântica

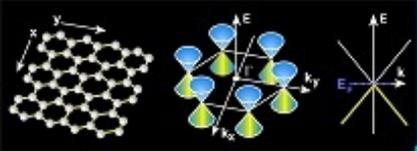


O que é a Física do Estado Sólido?

⇒ Partículas verdadeiramente elementares:

		Model of Elementary Particles																	
		Three Generations of Matter (Fermions)			Force Carriers (Gauge Bosons)														
		I	II	III	Range														
(Name)	Electric Charge																		
lifetime	Number of Color Charges																		
(Symbol)	Mass																		
Q u a r k s	Up	+2/3	Charm	+2/3	Top/ Truth	+2/3	Photon	0	Electro- magnetism										
	stable	3	variable	3	variable	3				γ	Infinite								
	\bar{u}	3	\bar{c}	3	\bar{t}	3						Gluon	8	Strong Interactions					
	1.5 - 4 Mev	1.15 - 1.35 Gev	~ 174 Gev	0	0	10^{-13} cm													
	Down	-1/3	Strange												-1/3	Bottom/ Beauty	-1/3	g	0
	variable	3	variable												3	variable	3		
\bar{d}	3	\bar{s}	3				\bar{b}	3	Z^0						91.19 Gev				
4 - 8 Mev	80 - 130 Mev	4.6 - 4.9 Gev	10^{-25} s				0	10^{-16} cm											
Electron	0	Muon								0	Tau	0	W plus minus	± 1					
Neutrino	0	Neutrino		0	Neutrino	0				W^\pm	80.4 Gev								
stable	< 3 ev	ν_μ		< 0.19 Mev	ν_τ	< 18 Mev						10^{-25} s				+			
ν_e	< 3 ev	ν_μ		< 0.19 Mev	ν_τ	< 18 Mev											-		
L e p t o n s	Electron	-1		Muon	-1	Tau			-1						+				
stable	0.511 Mev	2×10^{-6} s	105.6 Mev	3×10^{-13} s	1.777 Gev	-													
e^-	0.511 Mev	μ^-	105.6 Mev	τ^-	1.777 Gev		0												
								0											
									0										
										0									
											0								





Matéria ordinária: composta de **Prótons, Nêutrons e Elétrons** que se organizam para formar **Átomos** estruturados da seguinte maneira:

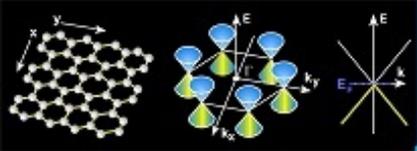
- **Núcleo:** tem tamanho $\sim 10^{-14}\text{m} \ll$ que do átomo todo $\sim 10^{-10}\text{m}$.

→ Prótons e nêutrons, formados de quarks: forças nucleares combinadas ao eletromagnetismo.

→ Contém quase toda massa: $m_p \approx m_n \approx 1800m_e$.

→ **Física Nuclear:** estudo da estrutura do núcleo.

↪ Nas situações ordinárias na matéria: núcleo é quase impenetrável e estará em seu estado fundamental.

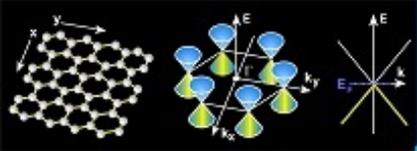


- **Eletrosfera:** onde encontram-se os elétrons em orbitais atômicos definidos pela solução da Equação de Schrödinger.

→ Define o tamanho do átomo. O volume atômico é praticamente espaço livre, esparsamente povoado por elétrons e com o núcleo aproximadamente no centro.

→ Número de massa A : soma do número de prótons e nêutrons. Define a massa do elemento e isótopos.

→ Número atômico Z : é o número de prótons cuja carga vale $q = +e$. Define a configuração eletrônica e as propriedades químicas essenciais.



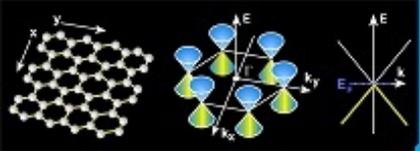
- Elétrons de órbitas mais baixas estão mais fortemente ligados ao núcleo do que aqueles mais externos, pois são mais atraídos pelo potencial coulombiano.

→ A energia coulombiana de um elétron a uma distância r_n do núcleo é dada por

$$U_{coul} = -\frac{(Z - Z')e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r}_n|}$$

onde Z' é o número efetivo de elétrons em órbitas mais próximas. $Z_{eff} = Z - Z'$ corresponde ao screening.

→ Usualmente não interagem com orbitais de outros átomos e são denominados **elétrons de caroço**.

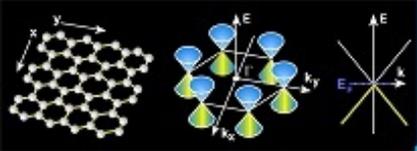


- Em primeiros princípios, as interações dos elétrons e núcleos carregados são de origem eletromagnética.

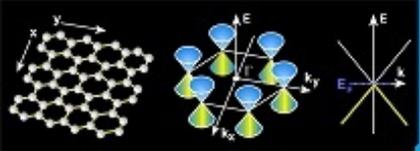
- Aqueles elétrons mais externos e portanto menos ligados estão mais aptos a interagir com os potenciais de átomos próximos.

- São denominados **elétrons de valência** e os orbitais mais externos do átomo dão origem às camadas de valência.

- Através das camadas de valência, átomos interagem para formar moléculas e compostos maiores.

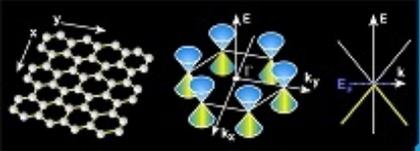


- A matéria estruturada pela interação entre átomos e moléculas que a compõe, através dos elétrons de valência, pode assumir vários estados físicos, dentre os quais:
 - Gasoso: sem ordenamento espacial, baixa interação entre os vínculos internos, tendência de expansão;
 - Líquido: sem grande ordenamento de curto e médio alcance, toma a forma do recipiente que o contém;
 - **Sólido:** Grande parte dos sólidos são arranjos ordenados denominados cristais. Outro conjunto de sólidos são amorfos, não preservando ordem de longo alcance. A energia de coesão no sólido é forte o suficiente para manter os átomos coesos.



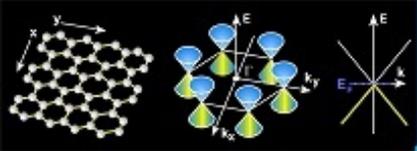
⇒ Os principais ramos de estudo no estado sólido são os seguintes:

- i) Propriedades Térmicas e Mecânicas dos Materiais ;
- ii) Propriedades Elétricas e Magnéticas dos Materiais;
- iii) Propriedades Ópticas dos Materiais;
- iv) Sistemas altamente correlacionados e Supercondutividade;
- v) Física Mesoscópica: estudo de propriedades da matéria em escala nanométrica, nanoestruturas, efeito de dimensionalidade, transporte em regime quântico;
- vi) Transições de Fase: um exemplo é a transição de um material do estado normal para o supercondutor.



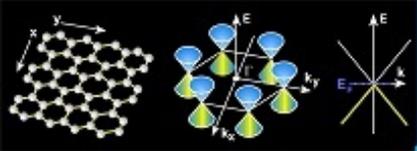
⇒ O problema da Física do Estado Sólido:

Explicar a partir de primeiros princípios ou através de modelos fenomenológicos as propriedades da matéria no estado sólido observadas experimentalmente.



⇒ Um programa introdutório da teoria do estado sólido tem como tópicos relevantes:

- i) Átomos, Moléculas e Ligações Químicas;
- ii) Simetrias e Grupos Cristalinos;
- iii) Teorema de Bloch e estruturas de bandas;
- iv) Excitações Elementares nos sólidos: fônons, mágnons, polarons, plasmons, etc;
- v) Propriedades Elétricas e Magnéticas da Matéria: Condutores, Isolantes e Semicondutores, Dia, Para e Ferromagnetismo, Supercondutividade;
- vi) Transições de Fase.

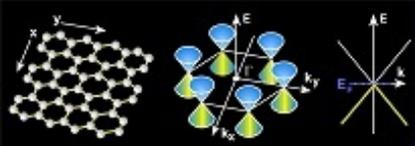


Por exemplo, podemos grosseiramente classificar os sólidos quanto às suas propriedades elétricas em:

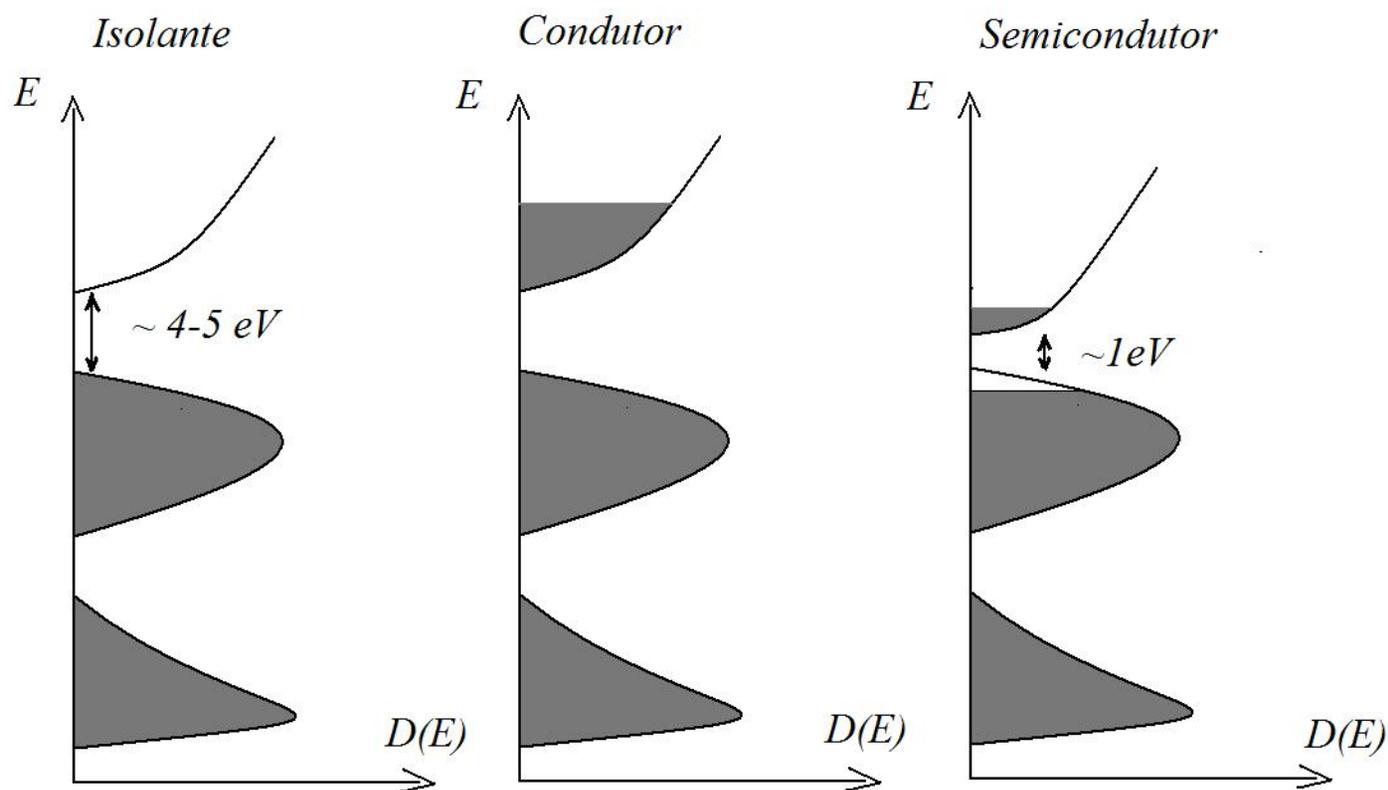
- Isolantes;
- Condutores;
- Semicondutores.

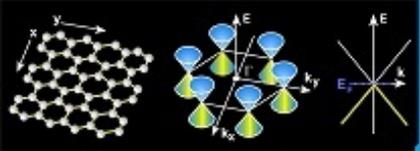
Dependem essencialmente da estrutura de bandas e seu preenchimento pelos elétrons disponíveis, sendo função de conjunto de fatores como:

- Estrutura cristalina;
- Tipo de átomo que compõe a rede cristalina e grau de pureza;
- Tipos de interações admissíveis entre os átomos desse sólido.



Estrutura de Bandas Simplificada dos Materiais:



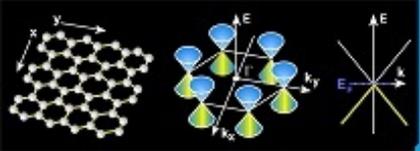


Breve Revisão de Mecânica Quântica

Postulados da Mecânica Quântica

1º Postulado: Todo e qualquer sistema físico é descrito por uma função de estado correspondente a um vetor no espaço de Hilbert.

- i) Espaço de Hilbert: é um espaço vetorial normado (com produto interno) complexo de dimensão N . A dimensão pode ser infinita e/ou ser parcialmente discreta e parcialmente contínua, dependendo dos graus de liberdade de interesse do sistema.
- ii) Apenas a direção dos vetores no espaço de Hilbert são relevantes devem ser normalizados. Para representar esses vetores vamos utilizar a notação de Dirac de bras e kets.



- Espaço dos **Kets**: Kets são vetores coluna com a seguinte notação:

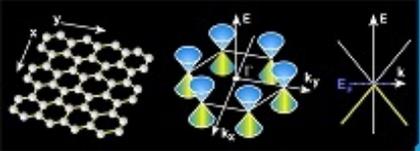
$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ a_N \end{pmatrix}$$

Se o espaço de Hilbert possui dimensão N há N vetores da forma acima.

- Espaço dos **Bras**: são vetores duais aos kets, ou seja, são vetores linha com a seguinte notação:

$$\langle a| = (|a\rangle)^\dagger = (a_1^* \ a_2^* \ \dots \ a_N^*)$$

O símbolo \dagger corresponde à transposição e conjugação complexa enquanto que $*$ corresponde à conjugação complexa.



• **Produto interno:** é dado por uma expressão denominada bra(c)ket. Dados dois vetores a e b , o produto interno é expresso na forma:

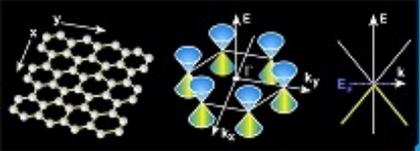
$$(a, b) = \langle a | \cdot | b \rangle = \langle a | b \rangle .$$

\Rightarrow No espaço de Hilbert define-se base ortonormal cumprindo a **relação de completudeza**. Considere uma base $\{|\alpha\rangle\} = (|1\rangle, |2\rangle \dots |N\rangle)$ num espaço de Hilbert de dimensão N , então:

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1, & \alpha = \beta \\ 0, & \alpha \neq \beta \end{cases} , \quad (1)$$

$$\sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha| = \mathbf{1}_{N \times N} , \quad (2)$$

onde $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ pertencem à mesma base ortonormalizada, $\delta_{\alpha\beta}$ é função delta de Kronecker e a segunda relação é a completudeza.



Um estado físico $|\psi\rangle$ de um sistema pode ser expandido em termos dos kets de uma base completa que cumpre (1) e (2):

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\alpha\rangle, \quad (3)$$

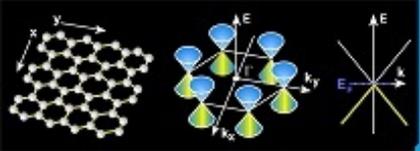
onde c_{α} são coeficientes complexos.

Operadores de projeção ou projetores: P_{β} projeta o estado $|\beta\rangle$ dado o estado físico $|\psi\rangle$

$$P_{\beta} = |\beta\rangle\langle\beta|, \quad (4)$$

tal que:

$$P_{\beta}|\psi\rangle = |\beta\rangle\langle\beta| \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\alpha\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\beta\rangle\langle\beta|\alpha\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\beta\rangle \delta_{\alpha\beta} = c_{\beta} |\beta\rangle.$$



2º Postulado: Interpretação Probabilística (Max Born)

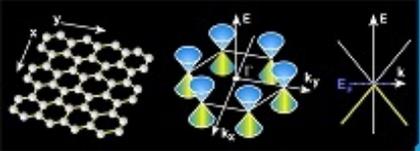
Dado um estado físico na forma (3) a probabilidade de que o sistema seja encontrado em um estado $|\alpha\rangle$ será dada por:

$$P = |\langle\alpha|\psi\rangle|^2 = |c_\alpha|^2 . \quad (5)$$

Da teoria das probabilidades, $0 \leq P \leq 1$. Nesse caso a probabilidade de encontrar o sistema no estado $|\psi\rangle$ dado que o sistema encontra-se no estado $|\psi\rangle$ deve ser unitária, ou seja:

$$|\langle\psi|\psi\rangle|^2 = 1 \quad (6)$$

que corresponde à normalização do ket $|\psi\rangle$.

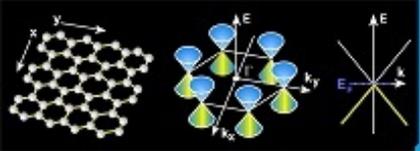


Da definição (6) veja que:

$$|\langle \Psi | \Psi \rangle|^2 = \left(\sum_{\beta} \langle \beta | c_{\beta}^* \right) \left(\sum_{\alpha} c_{\alpha} | \alpha \rangle \right) = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} c_{\beta}^* c_{\alpha} \langle \beta | \alpha \rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha}^* c_{\alpha} = 1 ,$$

ou seja, uma vez que $c_{\alpha}^* c_{\alpha} = |c_{\alpha}|^2$

$$\sum_{\alpha} |c_{\alpha}|^2 = 1 . \tag{7}$$



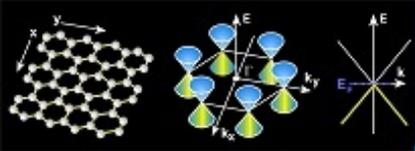
3º Postulado: Dos Observáveis Físicos

- A todo observável físico corresponde um operador hermitiano cujos autovalores são reais. Um operador pode ser representado por uma matriz.

São observáveis a posição \mathbf{x} , o tempo t , a energia E , momento linear \mathbf{p} e momento angular \mathbf{J} , dentre outros.

- Mecânica Clássica: a cada observável físico corresponde um número, um vetor ou uma função que podem assumir valores contínuos.

- Mecânica Quântica: cada grandeza física observável é representada por um operador matricial, cujos autovalores poderão ser observados em uma medida.



- Para um observável \hat{A} cumpre-se a relação

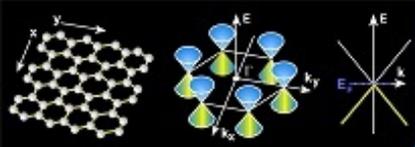
$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger . \quad (8)$$

A relação acima implica que os autovalores de \hat{A} são reais.

- Já que \hat{A} é uma matriz, podemos determinar todos os autovetores e autovalores de \hat{A} . Na base de autovetores de \hat{A} temos

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle , \quad (9)$$

sendo a um autovalor e $|a\rangle$ um autovetor da matriz \hat{A} .



Qualquer operador pode ser expandido em uma base completa:

$$\hat{A} = \mathbf{1}\hat{A}\mathbf{1} = \sum_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{A}\sum_{\beta} |\beta\rangle\langle\beta| = \sum_{\alpha,\beta} |\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle\langle\beta| .$$

Utilizando as propriedades de produtos matriciais, temos

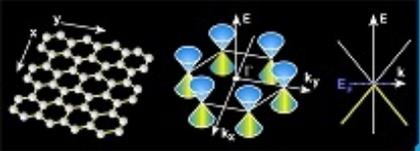
$$\hat{A} = \sum_{\alpha,\beta} |\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle\langle\beta| = \sum_{\alpha,\beta} |\alpha\rangle(\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle)\langle\beta| .$$

Note que $\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle$ é um escalar e nesse caso:

$$\hat{A} = \sum_{\alpha,\beta} \langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle |\alpha\rangle\langle\beta| = \sum_{\alpha,\beta} A_{\alpha\beta} |\alpha\rangle\langle\beta| , \quad (10)$$

ou seja, o elemento $A_{\alpha\beta}$ da matriz \hat{A} na base especificada é dado por:

$$A_{\alpha\beta} = \langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle .$$

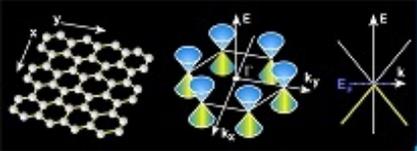


4º Postulado: A equação de Schrödinger

Dado o operador hamiltoniano \hat{H} a evolução temporal de um estado físico qualquer $|\psi\rangle$ será dada pela equação de Schrödinger:

$$\hat{H}|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle, \quad (11)$$

onde \hbar é a constante de Planck.



- Se $|\psi\rangle$ é um auto-estado de \hat{H} , tal que

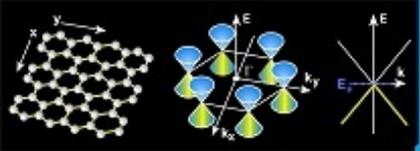
$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} |\psi(0)\rangle , \quad (12)$$

então

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle , \quad (13)$$

onde E é a energia correspondente ao estado $|\psi\rangle$.

\Rightarrow Para um autoestado de \hat{H} a evolução temporal apenas acrescenta uma fase à função $|\psi\rangle$ inicial, preservando a probabilidade de encontrar o sistema no estado $|\psi\rangle$.



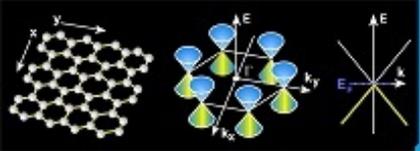
5º Postulado: Colapso da Função de Ondas

Dado o estado físico $|\psi\rangle$, que pode ser expandido na base que diagonaliza o operador \hat{A} , na primeira medida, $|\psi\rangle$ colapsa para um dos estados $|a\rangle$ com probabilidade $|c_a|^2$.

$$|\psi\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle \rightarrow \hat{A}|\psi\rangle \rightarrow |a\rangle \text{ com Prob. } |c_a|^2$$

- Uma vez realizada a medida, nas próximas medidas do operador \hat{A} , o sistema já estará em um auto-estado de \hat{A} . Nesse caso, esse auto-estado apenas será confirmado com 100% de probabilidade.

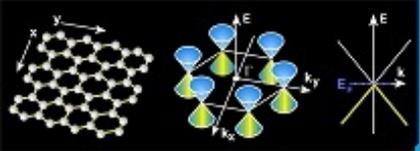
\Rightarrow Esse procedimento também denomina-se **preparação de um estado**.



- O valor médio das medidas do observável A sobre muitos ensembles preparados no mesmo estado inicial $|\psi\rangle$ será dada por:

$$\langle A \rangle_{\psi} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle , \quad (14)$$

entretanto uma medida específica de \hat{A} somente fornece um dos autovalores de \hat{A} .



Operadores Compatíveis

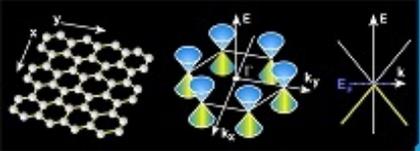
\hat{A} e \hat{B} são compatíveis se têm uma base comum de diagonalização. Dada a base que diagonaliza o operador \hat{A} , então

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \quad e \quad \hat{B}|a\rangle = b_a|a\rangle$$

onde b_a corresponde ao autovalor do operador \hat{B} correspondente ao autoestado $|a\rangle$.

Nesse caso é fácil mostrar que:

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$$



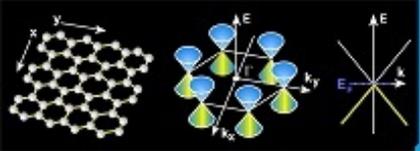
Definições:

- Comutador de de \hat{A} e \hat{B}

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} , \quad (15)$$

- Anti-Comutador de de \hat{A} e \hat{B}

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} . \quad (16)$$



Para dois observáveis compatíveis:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

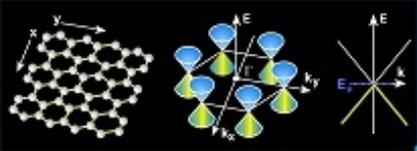
enquanto que observáveis incompatíveis não comutam, ou seja:

$$[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$$

- Todos os autoestados de um sistema evoluem de acordo com a equação de Schrödinger dependente do tempo. Serão conservadas todas as grandezas que comutam com o Hamiltoniano do sistema:

$$[\hat{A}, \hat{H}] = 0 .$$

⇒ O operador \hat{A} pode ser associado ao gerador de alguma simetria do hamiltoniano \hat{H} .



O Princípio de Incerteza

Dados dois operadores \hat{A} e \hat{B} o desvio da média é dado por:

$$\Delta A = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle , \quad (17)$$

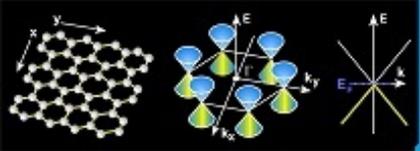
$$\Delta B = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle . \quad (18)$$

Observe que $\langle \Delta \hat{A} \rangle = 0$ mas $\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle \neq 0$.

É possível ainda escrever a seguinte relação:

$$\hat{A}\hat{B} = \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2}\{\hat{A}, \hat{B}\} , \quad (19)$$

onde usamos o comutador e anti-comutador dos operadores.



Vale lembrar ainda que $|\langle \hat{A}^2 \rangle| \geq |\langle \hat{A} \rangle|^2$ e além disso:

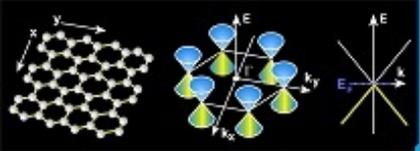
$$\Delta \hat{A} \cdot \Delta \hat{B} = \frac{1}{2} [\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}] + \frac{1}{2} \{ \Delta \hat{A}, \Delta \hat{B} \} = \frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2} \{ \Delta \hat{A}, \Delta \hat{B} \} . \quad (20)$$

Utilizando a desigualdade de Schwarz dos valores médios, temos:

$$\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle \cdot \langle (\Delta \hat{B})^2 \rangle \geq |\langle \Delta \hat{A} \cdot \Delta \hat{B} \rangle|^2$$

de onde não é muito difícil mostrar que:

$$\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle \cdot \langle (\Delta \hat{B})^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2 . \quad (21)$$



⇒ As seguintes relações são denominadas relações de comutação canônicas:

$$[x_i, x_j] = 0, \quad (22)$$

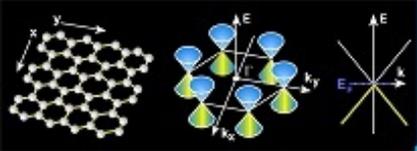
$$[p_i, p_j] = 0, \quad (23)$$

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad (24)$$

onde x_i e $p_i = -i\hbar\partial/\partial x_i$ são operadores de posição e momento, respectivamente, δ_{ij} é a função delta de Kronecker.

Utilizando (21) obtém-se:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}.$$



A Equação de Schroedinger Não-Relativística

Dada a função hamiltoniana de uma partícula livre não-relativística:

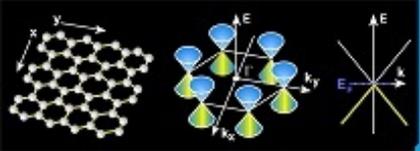
$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} ,$$

a prescrição da mecânica quântica diz para substituir \mathbf{p} pelo operador diferencial abaixo:

$$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$$

Utilizando $\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$ temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} , \quad (25)$$



A solução é uma onda plana uniforme da forma:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi_0 e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} . \quad (26)$$

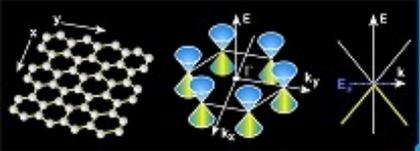
$\Rightarrow \hbar\omega = E$ é a energia da partícula, o que nos permite escrever a equação de Schroedinger independente do tempo:

$$H\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\psi(\mathbf{x}) .$$

Desta última obtemos a relação energia-momento para uma partícula NR livre:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} , \quad k = |\mathbf{k}| \quad (27)$$

- A relação de dispersão de uma partícula NR livre é parabólica.



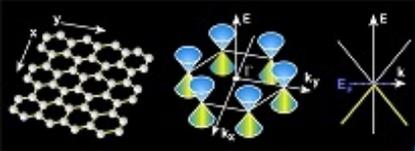
- Supondo acoplamento mínimo da partícula de carga q na presença de potenciais eletromagnéticos (ϕ, \mathbf{A}) podemos escrever:

$$\hat{H}\psi = \left[\frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\phi \right] \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (28)$$

sempre lembrando que $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ e em geral $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} \neq \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$, a menos que $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$.

\Rightarrow Negligenciando os efeitos de \mathbf{A} e do spin, para uma partícula de carga q , massa m na presença do potencial elétrico ϕ temos:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + q\phi \right] \psi = E\psi. \quad (29)$$



- Para átomos de número atômico Z com um único elétron temos

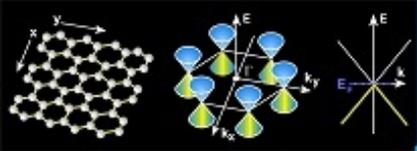
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \psi = E\psi . \quad (30)$$

- Para orbitais ligados deve-se considerar a condição

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi(r) \rightarrow 0$$

e obtém-se um conjunto de soluções exatas denominadas orbitais atômicos.

- A inclusão de todos os elétrons do átomo seguirá o princípio de exclusão. A solução será aproximada por métodos perturbativos, tendo como base os orbitais atômicos do átomo com um único elétron.



Simetrias e a Teoria do Momento Angular

⇒ Na MQ uma transformação de simetria, expressa na forma:

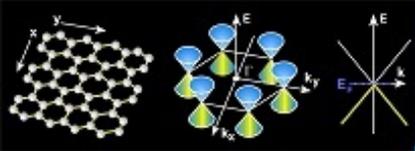
$$|\psi'\rangle = \hat{S}|\psi\rangle, \quad (31)$$

é aquela que preserva a probabilidade de certos eventos e/ou a invariância de forma de um determinado operador. Em geral, esse operador é o Hamiltoniano. Supondo que:

$$|\langle\psi'|\psi'\rangle|^2 = 1 = |\langle\psi|\hat{S}^\dagger\hat{S}|\psi\rangle|^2.$$

o estado $|\psi\rangle$ e o estado transformado $|\psi'\rangle$ correspondem ao mesmo estado físico sob pontos de vista diferentes, ou que impõe a unitariedade de \hat{S} :

$$\hat{S}^\dagger\hat{S} = \hat{S}\hat{S}^\dagger = \mathbf{1}. \quad (32)$$



⇒ Não vamos discutir aqui uma outra possibilidade que são os operadores anti-unitários.

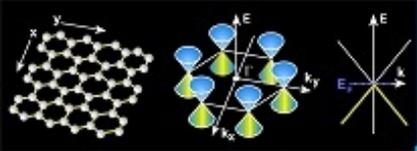
⇒ Geralmente as simetrias são representadas por transformações unitárias, exceção feita à simetria de reversão temporal, representada por operadores anti-unitários.

Observe ainda que, dada a equação de Schrödinger independente do tempo:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle ,$$

podemos fazer uma transformação \hat{S} :

$$\hat{S}\hat{H}|\psi\rangle = E\hat{S}|\psi\rangle ,$$



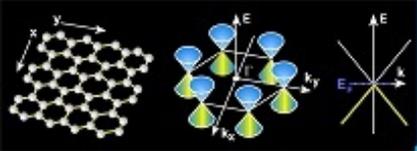
Utilizando as equações (31) e (32) temos:

$$\hat{S}\hat{H}|\psi\rangle = \hat{S}\hat{H}\hat{S}^\dagger\hat{S}|\psi\rangle = E\hat{S}|\psi\rangle ,$$

ou ainda:

$$(\hat{S}\hat{H}\hat{S}^\dagger)|\psi'\rangle = E|\psi'\rangle .$$

\Rightarrow Se \hat{S} é uma transformação de simetria do Hamiltoniano então $|\psi'\rangle$ e $|\psi\rangle$ correspondem a estados físicos com a mesma energia. Estados físicos de mesma energia são ditos degenerados.



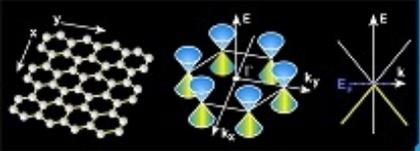
- Podemos escrever ainda:

$$\hat{S}\hat{H}\hat{S}^\dagger = \hat{H}$$

ou equivalentemente:

$$[\hat{S}, \hat{H}] = 0 . \quad (33)$$

\Rightarrow As operações de simetria de \hat{H} comutam com \hat{H} e portanto correspondem a operadores conservados.



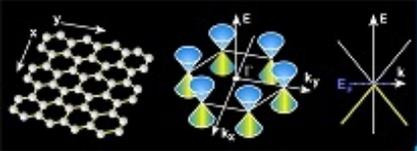
- Para cada simetria deve corresponder uma degenerescência dos níveis de energia, já que existe uma transformação de simetria \hat{S} que conecta dois estados quaisquer $|\psi'\rangle$ e $|\psi\rangle$ com o mesmo autovalor E .

⇒ **Teorema de Noether:** diz que *para cada simetria existe uma grandeza física conservada*. São exemplos:

→ translação temporal \Leftrightarrow conservação de energia E ;

→ translação espacial \Leftrightarrow conservação do momento linear \mathbf{p} ;

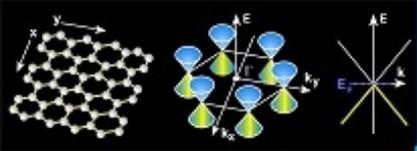
→ simetria de rotação \Leftrightarrow conservação do momento angular \mathbf{J} .



Simetria de rotação: Uma rotação é equivalente a um tipo de transformação de coordenadas do sistema físico. Existem dois pontos de vista igualmente válidos quando nos referimos a transformações de coordenadas:

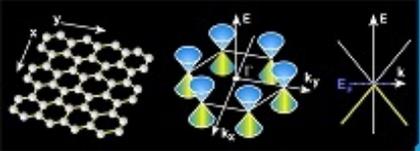
- transformar as coordenadas e manter intacto o objeto: para rotações dá-se o nome de rotações passivas;
- alterar a posição do objeto e manter o sistema de coordenadas original: para rotações dá-se o nome de rotações ativas.

Adotaremos o ponto de vista das rotações ativas.

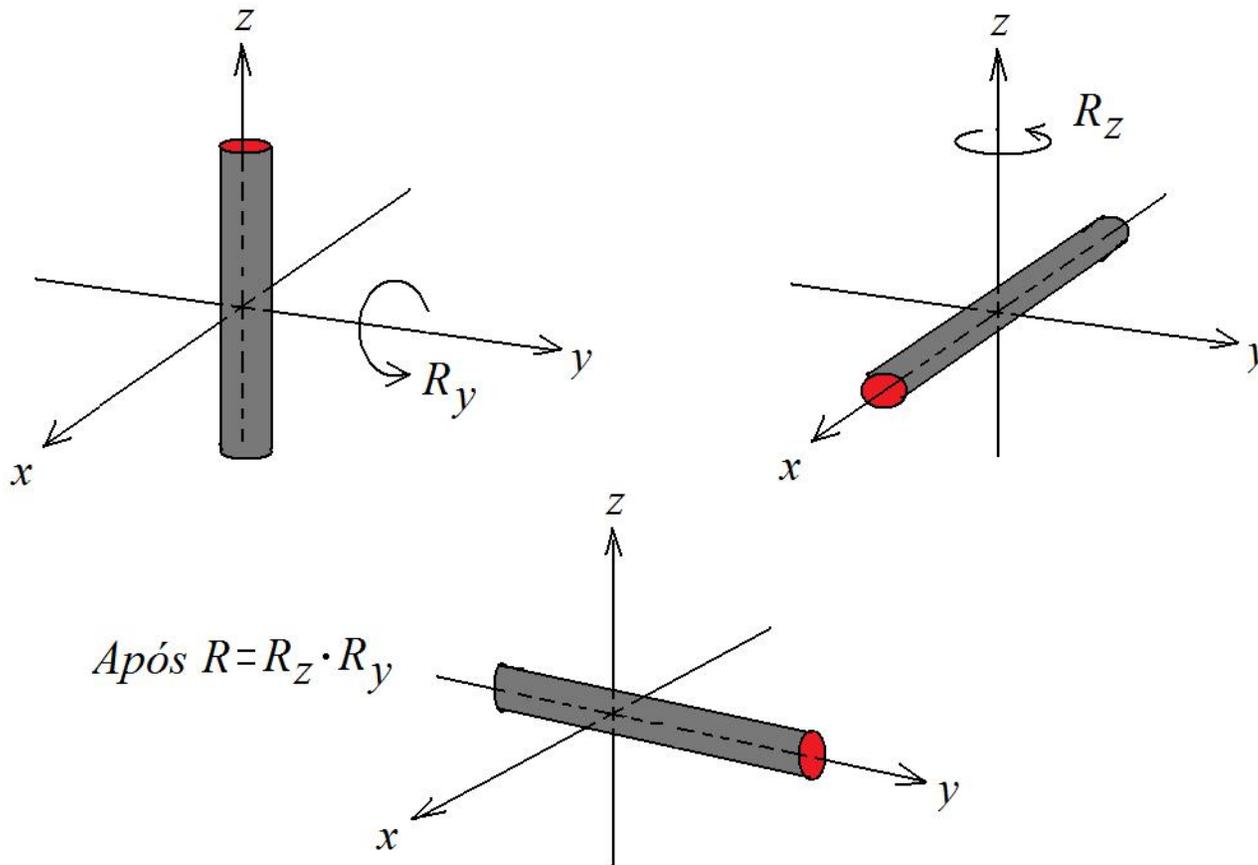


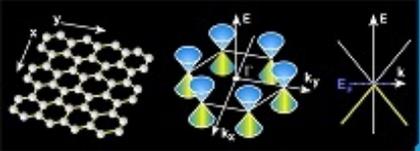
Alguns aspectos das rotações são fundamentais no entendimento do que segue:

- i) Rotações sucessivas em torno de um mesmo eixo comutam, ou seja, podem ser realizadas em qualquer ordem, preservando o resultado;
- ii) Rotações sucessivas em torno de eixos distintos não comutam, ou seja, levam a resultados diferentes, de acordo com a ordem em que são aplicadas;
- iii) Como consequência da propriedade ii) acima, as rotações devem ser representadas por operações matriciais.

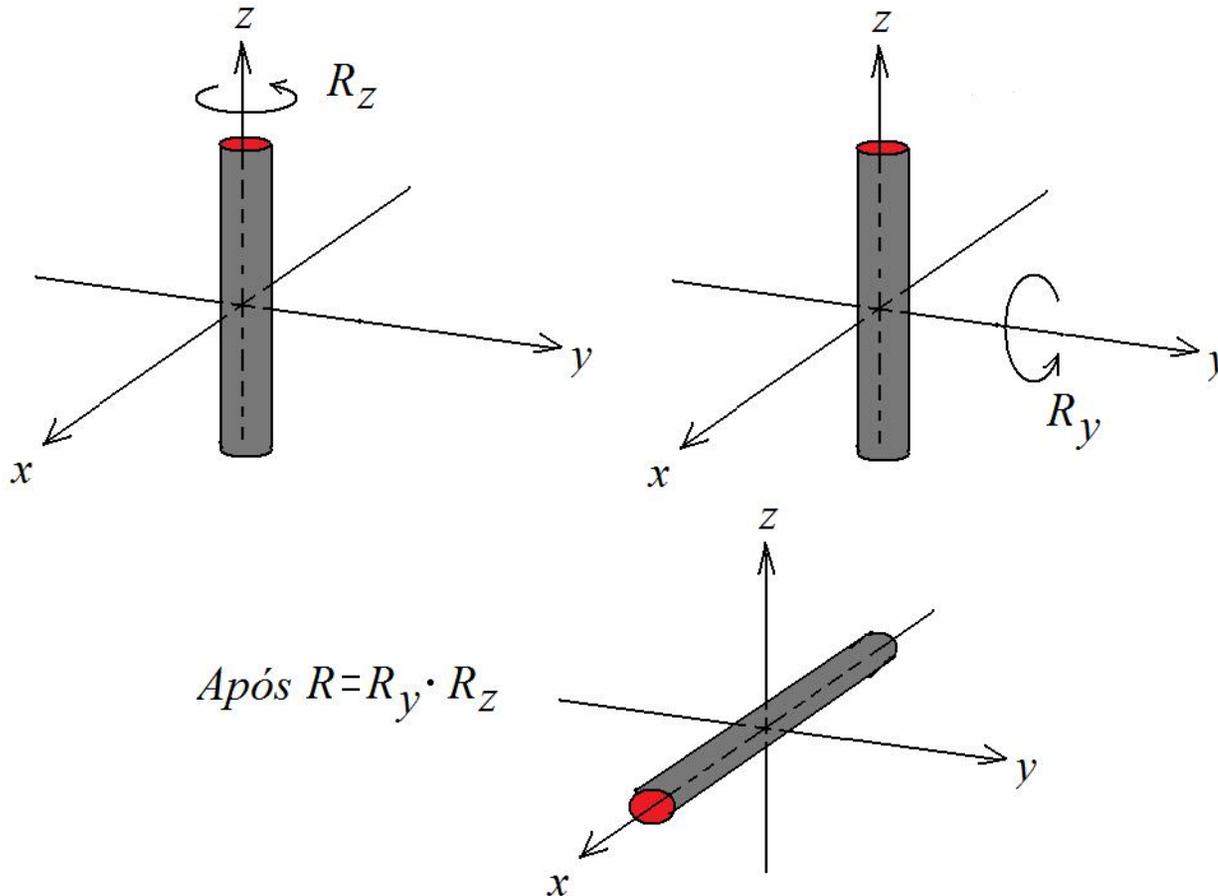


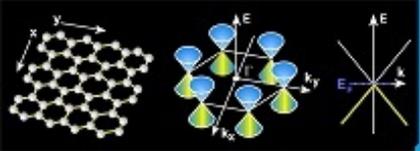
Resultado da rotação combinada $R = R_z(90^\circ) \cdot R_y(90^\circ)$. Primeiro realiza-se a rotação em relação ao eixo y , depois em relação a z .





Resultado da rotação combinada $R = R_y(90^\circ) \cdot R_z(90^\circ)$. Primeiro realiza-se a rotação em relação ao eixo z , depois em relação a y .





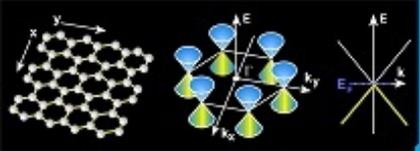
⇒ Conforme mostram as Figuras acima a ordem da operação afeta a posição final do bastão cilíndrico orientado inicialmente ao longo do eixo z . Rotações em eixos distintos não comutam!! Temos portanto:

$$R_y \cdot R_z \neq R_z \cdot R_y .$$

- Operações de rotação sobre vetores: a rotação de um vetor em torno de um eixo orientado na direção $\hat{\mathbf{n}}$ por um certo ângulo θ é dada simplesmente por:

$$\mathbf{V}' = R(\hat{\mathbf{n}}, \theta) \cdot \mathbf{V} , \quad (34)$$

onde $R(\hat{\mathbf{n}}, \theta)$ é uma matriz de rotação. As rotações por um eixo $\hat{\mathbf{n}}$ podem ser obtidas através de rotações combinadas em torno dos eixos x , y e z .



Rotações formam um grupo denominado **grupo das rotações**, satisfazendo as propriedades a seguir:

i) Associatividade:

$$R_1 \cdot (R_2 \cdot R_3) = (R_1 \cdot R_2) \cdot R_3 = R_1 \cdot R_2 \cdot R_3 .$$

ii) O produto de duas rotações é também uma rotação:

$$R_1 \cdot R_2 = R_3$$

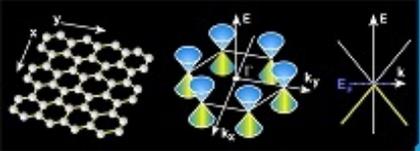
iii) Existe um elemento identidade, que corresponde à rotação em um eixo qualquer por um ângulo de 0° , tal que:

$$R(0) \cdot R_1 = R_1 \cdot R(0) = R_1$$

e $R(0) = E$ é a identidade do grupo;

iv) Para cada elemento existe um inverso, ou seja, a cada rotação corresponde uma rotação inversa, tal que:

$$R \cdot R^{-1} = R^{-1} \cdot R = E = \mathbf{1} .$$



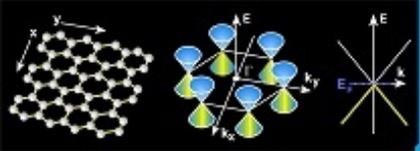
Para um ângulo θ qualquer as matrizes de rotação em torno dos eixos x, y e z são dadas abaixo:

$$R_x(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}, \quad (35)$$

$$R_y(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{bmatrix}, \quad (36)$$

$$R_z(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (37)$$

Para o grupo das rotações próprias $\det(R) = 1$. Além disso $R^{-1}(\hat{\mathbf{n}}, \theta) = R(\hat{\mathbf{n}}, -\theta)$, de tal forma que $RR^{-1} = R^{-1}R = \mathbf{1}$.



Geradores do Grupo das Rotações

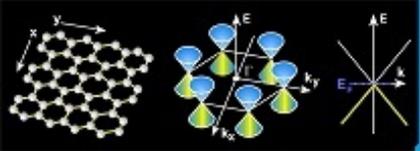
Podemos escrever as matrizes de rotação em termos de geradores infinitesimais de rotações:

$$R_x(\epsilon) = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \epsilon J_x + \dots \quad (38)$$

$$R_y(\epsilon) = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \epsilon J_y + \dots \quad (39)$$

$$R_z(\epsilon) = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \epsilon J_z + \dots \quad (40)$$

onde J_x , J_y e J_z são denominados geradores de rotações.

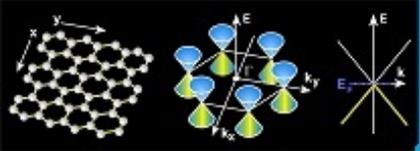


Os operadores J_x , J_y e J_z podem ser escritos na forma abaixo:

$$J_x = i\hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (41)$$

$$J_y = i\hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (42)$$

$$J_z = i\hbar \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (43)$$



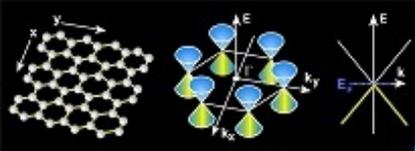
⇒ Os **geradores de rotação** são os operadores de momento angular e **satisfazem** a uma álgebra bem específica, denominada **álgebra de Lie** dos operadores J_i , da forma:

$$[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k, \quad (44)$$

onde ϵ_{ijk} é o tensor de permutações de Levi-Civita, $\epsilon_{ijk} = +1$ para $ijk = xyz$ e permutações cíclicas e vale -1 para trocas anti-cíclicas.

- Uma álgebra não-comutativa é denominada de álgebra não-abeliana, enquanto que uma álgebra cujos operadores comutam é denominada álgebra abeliana e o grupo é denominado grupo abeliano.

O grupo das rotações é portanto um grupo não-abeliano.



Para uma rotação geral por um ângulo infinitesimal θ em torno de um eixo $\hat{\mathbf{n}}$ podemos escrever:

$$R_{\hat{\mathbf{n}}}(\theta) = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}} \theta, \quad (45)$$

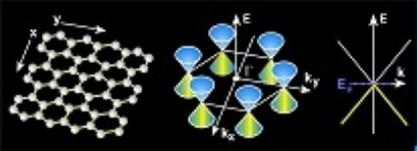
onde $\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z)$ é o vetor momento angular.

Extendendo para rotações arbitrárias, fazendo para tanto sucessivas rotações infinitesimais $\delta\theta = \theta/N$ na forma:

$$R_{\hat{\mathbf{n}}}(\theta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}} \frac{\theta}{N} \right)^N,$$

o resultado final será dado por:

$$R_{\hat{\mathbf{n}}}(\theta) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}} \theta \right]. \quad (46)$$

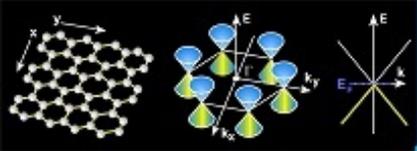


⇒ Uma vez definidos os geradores de rotações no espaço tridimensional \mathbf{R}^3 que atuam sobre os vetores do \mathbf{R}^3 cabe a pergunta:

O que ocorre com os estados físicos $|\psi\rangle$ quando sujeitamos o sistema a rotações arbitrárias?

uma vez que na Mecânica Quântica é a função $|\psi\rangle$ que descreve o sistema físico de interesse.

⇒ Seja uma rotação R que opera sobre os vetores do espaço \mathbf{R}^3 , a ação da rotação R sobre $|\psi\rangle$ se dá através de uma operação unitária que preserva a norma do estado.



Chamemos aqui U um operador unitário que satisfaz as relações de unitariedade (32), ou seja,

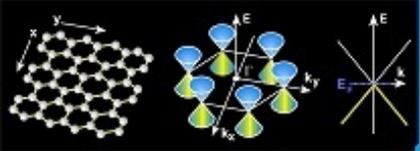
$$UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbf{1} \Leftrightarrow U^\dagger = U^{-1} . \quad (47)$$

Todo o operador unitário preserva a norma dos estados $|\psi\rangle$ e pode ser escrito através de uma matriz hermitiana \hat{A} na forma:

$$U = e^{i\hat{A}}, \quad \text{onde } \hat{A} = \hat{A}^\dagger .$$

Rotações no espaço euclidiano \mathbf{R}^3 são representadas por matrizes cujo determinante é unitário e onde $R^{-1} = R^T$, onde R^T é a matriz transposta de R denominadas ortogonais pertencentes ao grupo denominado $SO(3)$ (Special Orthogonal of dimension 3). É um caso particular das matrizes unitárias, pois as matrizes R são reais, que podem ser expressas como

$$R = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\theta}} .$$



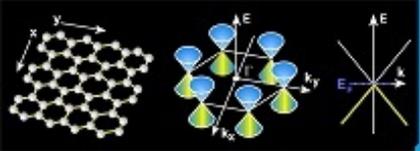
⇒ Para uma rotação R no espaço \mathbf{R}^3 , tal que os vetores do \mathbf{R}^3 transformem de acordo com

$$\mathbf{V}' = R\mathbf{V} ,$$

as funções $|\psi\rangle$ irão transformar de modo correspondente a:

$$|\psi'\rangle = U(R)|\psi\rangle , \quad (48)$$

onde $U(R)$ é uma matriz unitária com a dimensão N que é a dimensão do espaço de Hilbert correspondente ao sistema físico de interesse.



- Sobre os vetores do \mathbf{R}^3 sabemos que $U(R) = R$, porém existem infinitas representações $U(R)$ possíveis correspondentes a R , variando a dimensão N escolhida para as matrizes.

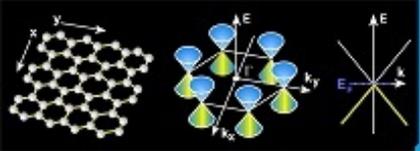
- Representações não triviais são denominadas Representações Spinoriais.

⇒ Pela teoria de grupos, $U(R)$ e R devem ser homomórficos (ou isomórficos se a correspondência é de um para um), com geradores que satisfaçam a mesma álgebra para os geradores infinitesimais, ou ainda:

$$R \cdot \mathbf{1} = R \leftrightarrow U(R) \cdot \mathbf{1} = U(R) , \quad (49)$$

$$R_1 \cdot R_2 = R_3 \leftrightarrow U(R_1)U(R_2) = U(R_3) , \quad (50)$$

$$R \cdot R^{-1} = R^{-1} \cdot R = \mathbf{1} \leftrightarrow U(R)U(R^{-1}) = U(R)U^{-1}(R) = \mathbf{1} \quad (51)$$



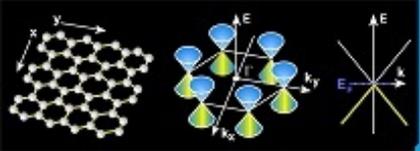
As relações acima se satisfazem, desde que para uma rotação infinitesimal θ o operador $U(R)$ tenha a mesma forma que R :

$$U(R) = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\theta} + \dots, \quad (52)$$

com a álgebra (44), que reproduzimos a seguir:

$$[J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k,$$

porém com \mathbf{J} em $U(R)$ sendo representado por matrizes de dimensão N , enquanto que em R os geradores tem dimensão 3.



⇒ Considerando apenas o momento angular intrínseco, as principais representações do grupo das rotações são as seguintes:

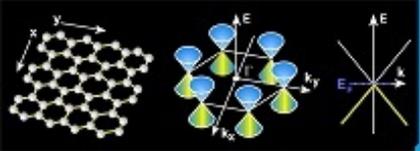
→ Partículas de spin 0 são também denominadas partículas escalares, e nesse caso

$$U(R) = \mathbf{1} ;$$

Exemplos: fônons longitudinais, mésons, bóson de Higgs(?)

→ Partículas de spin 1 são ditas partículas vetoriais, sendo um exemplo os fótons do campo eletromagnético. No caso geral as matrizes de rotação são dadas por:

$$U(R) = R .$$

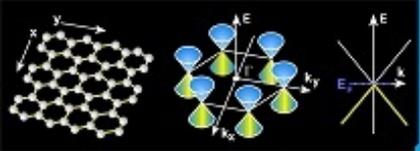


→ Partículas de spin $1/2$ são representadas por spinores de Pauli, e tem-se

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} , \quad (53)$$

onde $\boldsymbol{\sigma} = (\boldsymbol{\sigma}_x, \boldsymbol{\sigma}_y, \boldsymbol{\sigma}_z)$ são as matrizes de Pauli, dadas abaixo

$$\boldsymbol{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \quad \boldsymbol{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} , \quad \boldsymbol{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} , \quad (54)$$



- As matrizes de Pauli satisfazem a seguinte álgebra:

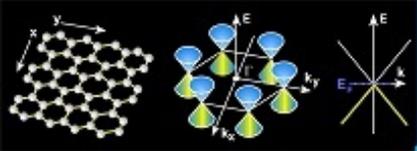
$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k, \quad (55)$$

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}), \quad (56)$$

sendo \mathbf{a} e \mathbf{b} dois vetores quaisquer.

$$U(R) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\theta}\right] = \exp\left[-\frac{i}{2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\theta}\right] \quad (57)$$

Exemplos: elétron, próton, nêutron.



⇒ Momento angular total \mathbf{J} é a soma do momento angular de spin \mathbf{S} com o momento angular orbital \mathbf{L} :

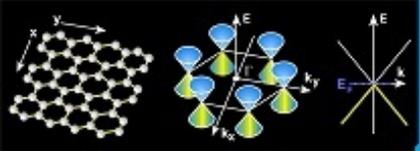
$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} . \quad (58)$$

Na Mecânica Quântica o momento angular orbital é dado por:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla , \quad (59)$$

cuja componente z , por exemplo é dada simplesmente por:

$$L_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) .$$



⇒ Tanto o momento angular de spin quanto o momento angular orbital são quantizados.

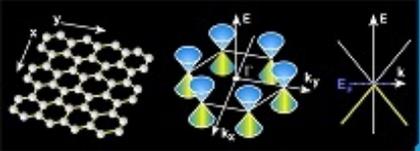
⇒ Para \mathbf{L} as autofunções de \mathbf{L}^2 e L_z são as harmônicas esféricas, $Y_l^m(\theta, \varphi)$, satisfazendo as relações:

$$\mathbf{L}^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \varphi) , \quad (60)$$

$$L_z Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar m Y_l^m(\theta, \varphi) . \quad (61)$$

onde $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ é um número inteiro e $m = (-l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l)$, ou seja $-l \leq m \leq l$.

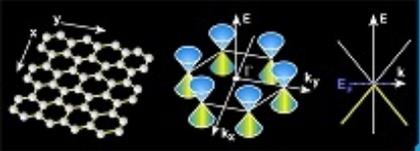
- O número l é denominado número quântico orbital e m é a projeção do mesmo sobre o eixo z , sendo denominado de número quântico magnético.



- Para o momento angular de spin, temos

$$\mathbf{S}^2 = \hbar^2 s(s + 1) , \quad (62)$$

enquanto $s_z = S_z/\hbar = (-S, -S + 1 \dots S - 1, S)$, ou seja, $-s \leq s_z + s$, sendo que s pode assumir valores inteiros e semi-inteiros, $s = 0, 1/2, 1, 3/2 \dots$, diferentemente de l que somente assume valores inteiros.



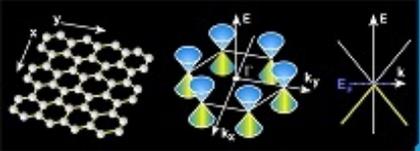
⇒ De modo geral, uma vez que $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ temos $\mathbf{J}^2 = \hbar^2 j(j+1)$, onde $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$

Para j inteiro é possível encontrar representações triviais através das funções harmônicas esféricas, enquanto que para valores semi-inteiros não há representações triviais, somente spinoriais.

A adição de momento angular de dois sistemas com momentos individuais \mathbf{J}_1 e \mathbf{J}_2 , tal que $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$, impõem os seguintes limites:

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq (j_1 + j_2) . \quad (63)$$

Exemplo: Dois elétrons com $l = 0$ e spin $s = 1/2$ interagem produzem um sistema composto com momento angular total $0 \leq j \leq 1$: $j = 0$ é o estado singlete e $j = 1$ é o estado tripleto, pois permite três projeções distintas $s_z = -1, 0, +1$ onde os spins $1/2$ se superpõem construtivamente.



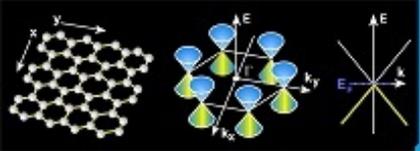
O Teorema Spin-Estatística

- Para duas partículas idênticas devemos escrever:

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_1(\mathbf{x}_1)\Psi_2(\mathbf{x}_2) \pm \Psi_2(\mathbf{x}_1)\Psi_1(\mathbf{x}_2)] . \quad (64)$$

- Partículas de spin semi-inteiro, denominadas férmions, devem ter sua função de ondas totalmente anti-simétrica e obedecem à estatística de Fermi-Dirac e o princípio de exclusão de Pauli.

- Partículas de spin inteiro, denominadas bósons, devem ter função de ondas totalmente simétrica pela permuta de duas delas, obedecendo a estatística de Bose-Einstein.



● Bósons

↪ Em geral são as partículas mediadoras das interações: fóton (eletromagnética), fônon (vibrações da rede cristalina), mágnon (ondas de spin), alguns átomos com número de férmions total par;

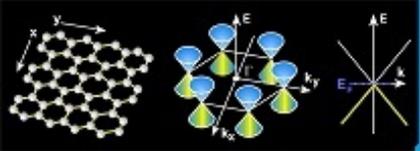
↪ A função de ondas de dois bósons deve ser totalmente simétrica pela troca de coordenadas $(x_1\sigma_1) \leftrightarrow (x_2\sigma_2)$, ou seja,

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{2} [\varphi_a(x_1)\varphi_b(x_2) \pm \varphi_a(x_2)\varphi_b(x_1)] \otimes [\chi_a(\sigma_1)\chi_b(\sigma_2) \pm \chi_a(\sigma_2)\chi_b(\sigma_1)]$$

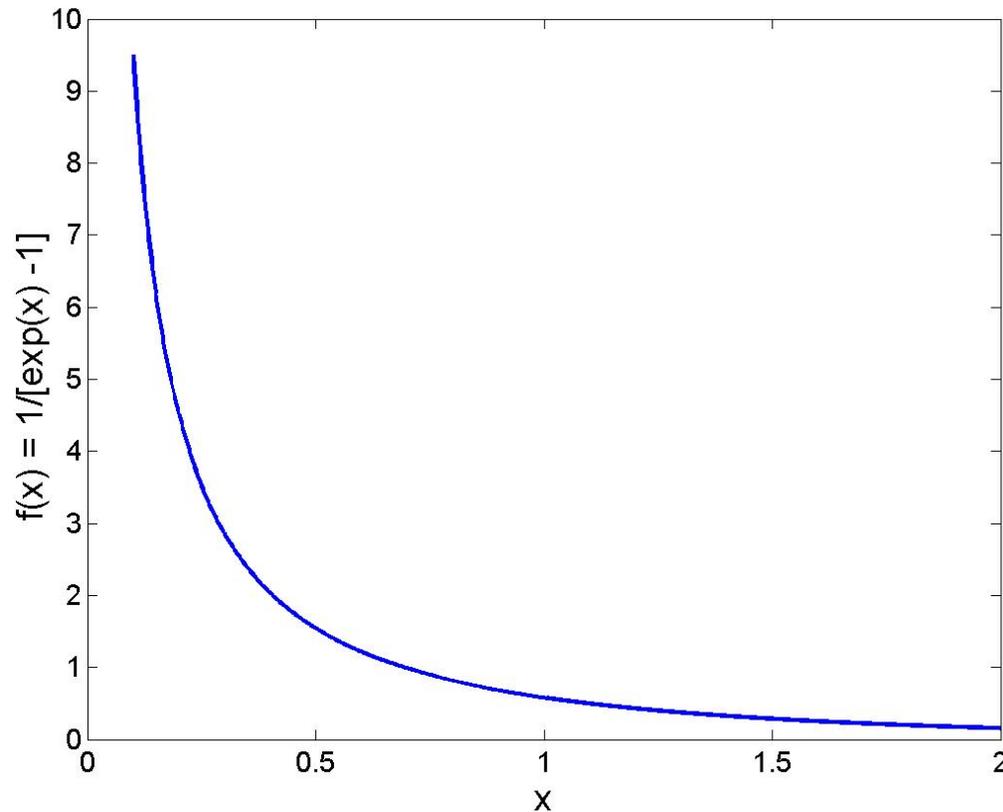
↪ Não há limite para o número de bósons ocupando um orbital $\varphi_a(x)$ e eles satisfazem em equilíbrio térmico a chamada estatística de Bose-Einstein:

$$f_{BE} = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}, \text{ onde } \beta = \frac{1}{k_B T}.$$

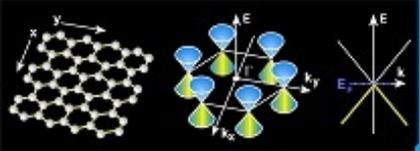
↪ Efeitos interessantes: condensação de Bose-Einstein, laser...



A função de distribuição de Bose-Einstein:



↪ A variável x é definida como $x = \beta \hbar \omega$. No caso de bósons $f(\omega)$ representa o número de ocupação no estado de energia $\hbar \omega$ para a temperatura T .



● Férmions

↪ Em geral são as partículas elementares com massa: elétrons, prótons, nêutrons, neutrinos, quarks, etc...

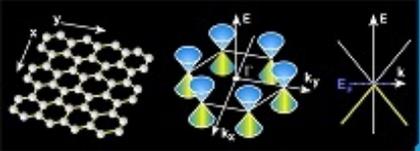
↪ A função de ondas de dois férmions deve ser totalmente anti-simétrica pela troca de coordenadas $(x_1\sigma_1) \leftrightarrow (x_2\sigma_2)$, ou seja:

$$\Psi(x_1\sigma_1, x_2\sigma_2) = \frac{1}{2} [\varphi_a(x_1)\varphi_b(x_2) \pm \varphi_a(x_2)\varphi_b(x_1)] \otimes [\chi_a(\sigma_1)\chi_b(\sigma_2) \mp \chi_a(\sigma_2)\chi_b(\sigma_1)]$$

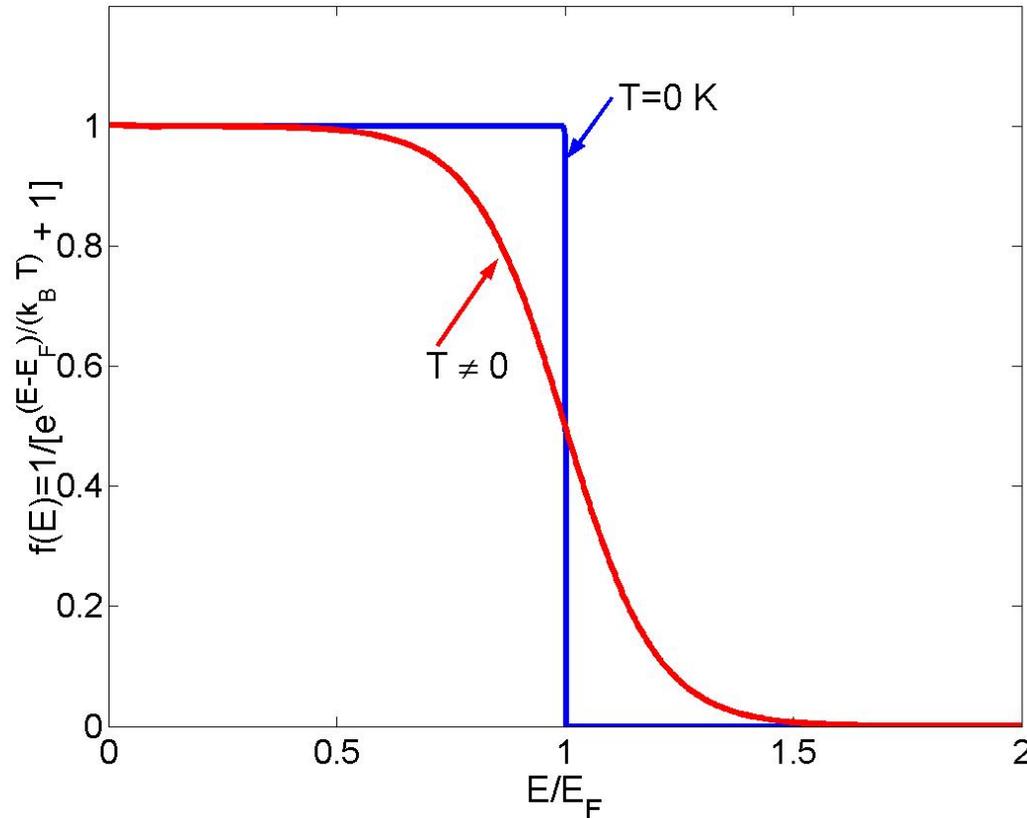
↪ Cada estado quântico pode ser ocupado por apenas um férmion - Princípio de Exclusão de Pauli. Em equilíbrio térmico satisfazem a estatística de Fermi-Dirac:

$$f_{BE} = \frac{1}{e^{\beta(E-E_F)} + 1}, \text{ onde } \beta = \frac{1}{k_B T}.$$

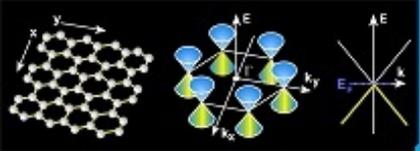
↪ Efeitos interessantes: interação de troca e o magnetismo da matéria, a tabela periódica...



A função de distribuição de Fermi-Dirac:



$\leadsto f(E)$ representa o número de ocupação no estado de energia E para a temperatura T . Torna-se um degrau para $T = 0$.



Operadores de Criação e Aniquilação

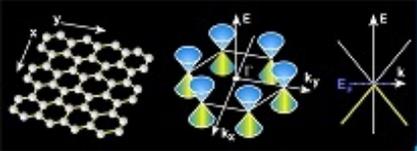
⇒ Permitem satisfazer o teorema spin-estatística automaticamente, na chamada Representação de Número.

⇒ Os estados físicos são descritos pelo número de partículas em cada nível de energia acessível ao sistema.

Por simplicidade vamos considerar um único estado físico ocupado por n partículas, tal que:

$$|\Psi\rangle = |n\rangle .$$

- Os operadores de criação irão adicionar partículas ao estado $|n\rangle$ enquanto que os operadores de aniquilação irão subtrair uma partícula desse estado.



Operadores Bosônicos

- Seja a o operador de aniquilação e a^\dagger o operador de criação de um bóson, temos a álgebra de bósons:

$$[a, a^\dagger] = 1, \quad (65)$$

$$[a, a] = 0, \quad (66)$$

$$[a^\dagger, a^\dagger] = 0, \quad (67)$$

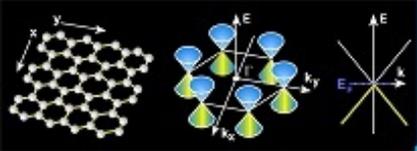
$$\hat{n} = a^\dagger a, \quad (68)$$

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad (69)$$

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad (70)$$

$$\hat{n} |n\rangle = n |n\rangle, \quad (71)$$

onde n é um número inteiro.



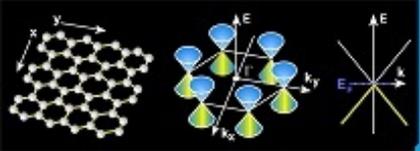
- O vácuo $|0\rangle$ é o estado no qual não há partículas, tal que:

$$a|0\rangle = 0, \quad (72)$$

pois não é possível aniquilar uma partícula do estado que já não possui nenhuma.

- Não há restrição ao número de partículas n do sistema, e a energia associada ao sistema é igual à n vezes a energia de uma única partícula. Em termos do operador Hamiltoniano podemos escrever:

$$\hat{H} = \hbar\omega\hat{n} = \hbar\omega a^\dagger a. \quad (73)$$



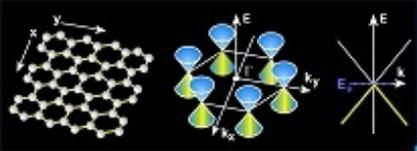
- Para um sistema físico com bósons de diferentes energias e graus de liberdade, como polarização, etc, podemos escrever:

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij} , [a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \quad (74)$$

onde δ_{ij} é a delta de Kronecker, que deve ser substituída pela delta de Dirac no caso dos parâmetros i, j admitirem espectro contínuo.

- Da mesma forma, podemos generalizar (73) para o seguinte:

$$\hat{H} = \sum_i \hbar\omega_i \hat{n}_i = \sum_i \hbar\omega_i a_i^\dagger a_i . \quad (75)$$



Operadores Fermiônicos

Seja c o operador de aniquilação e c^\dagger o operador de criação de um férmion, tem-se a seguinte álgebra:

$$\{c, c^\dagger\} = 1, \quad (76)$$

$$\{c, c\} = 0, \quad (77)$$

$$\{c^\dagger, c^\dagger\} = 0, \quad (78)$$

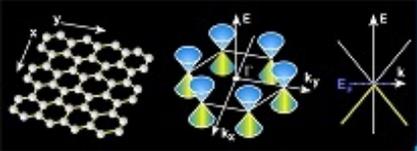
$$\hat{n} = c^\dagger c, \quad (79)$$

$$c^\dagger |0\rangle = |1\rangle, \quad (80)$$

$$c |1\rangle = |0\rangle, \quad (81)$$

$$\hat{n} |n\rangle = n |n\rangle, \quad (82)$$

sendo $n = 0, 1$ e $\{c, c^\dagger\} = cc^\dagger + c^\dagger c = 1$ o anti-comutador.



Podemos definir o vácuo $|0\rangle$ como o estado no qual não há partículas, tal que

$$c|0\rangle = 0 . \quad (83)$$

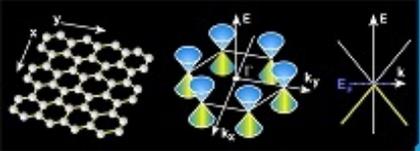
• Não é possível colocar mais do que uma partícula no estado físico dado, temos a restrição de que $n = 0, 1$ e portanto

$$c^\dagger|1\rangle = 0 . \quad (84)$$

Quanto à energia, temos o operador Hamiltoniano da forma:

$$\hat{H} = \varepsilon \hat{n} = \varepsilon c^\dagger c . \quad (85)$$

onde ε é a energia associada ao estado físico em questão.



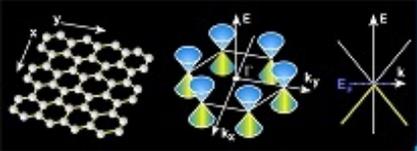
- Para um sistema com diferentes estados físicos e graus de liberdade:

$$\left\{c_i, c_j^\dagger\right\} = \delta_{ij} , \quad \left\{c_i, c_j\right\} = \left\{c_i^\dagger, c_j^\dagger\right\} = 0 \quad (86)$$

onde δ_{ij} é a delta de Kronecker, que deve ser substituída pela delta de Dirac no caso dos parâmetros i, j admitirem espectro contínuo.

Da mesma forma, podemos generalizar (87) para o seguinte:

$$\hat{H} = \sum_i \epsilon_i \hat{n}_i = \sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i . \quad (87)$$



O Formalismo da Matriz Densidade

Utilizando a definição de projetor:

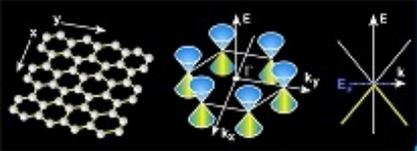
$$P_\alpha = |\alpha\rangle\langle\alpha| ,$$

podemos definir uma matriz denominada matriz densidade

$$\hat{\rho} = \sum_i w_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| , \quad (88)$$

onde w_i é a probabilidade de obter o estado $|\alpha_i\rangle$ em uma dada medida, e obviamente, pela teoria das probabilidades:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}) = \sum_i w_i = 1 . \quad (89)$$

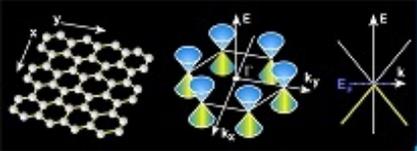


No formalismo da matriz densidade, o valor médio de um operador quântico qualquer \hat{A} é dado por:

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) . \quad (90)$$

A matriz $\hat{\rho}$ quântica satisfaz a equação de Liouville quântica, na forma:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}] , \quad (91)$$



Na condição de equilíbrio,

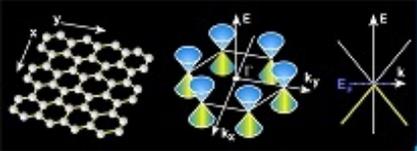
$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = 0 \rightarrow [\hat{H}, \hat{\rho}] = 0$$

e conseqüentemente $\hat{\rho} = \rho(\hat{H})$, cuja solução geral no chamado ensemble canônico é dada simplesmente por:

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{\text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}})} . \quad (92)$$

Por analogia com a Mecânica Estatística Clássica, $\hat{\rho}$ está associada à função distribuição de probabilidades, e a função de partição quântica no ensemble canônico vale:

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}}) . \quad (93)$$



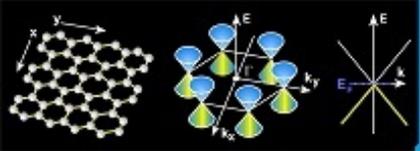
Noções de Teoria de Perturbações

⇒ Considere uma situação física em que as soluções para a Hamiltoniana sejam conhecidas na ausência de uma perturbação qualquer:

$$\hat{H}_0|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle , \quad (94)$$

onde $\{|n\rangle\}$ forma uma base completa de soluções de \hat{H}_0 , satisfazendo as relações de ortonormalidade e completeza, já mencionadas previamente:

$$\begin{aligned} \langle m|n\rangle &= \delta_{mn} , \\ \sum_n |n\rangle\langle n| &= \mathbf{1} . \end{aligned}$$



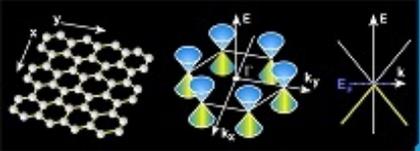
Se uma pequena perturbação \hat{V} é introduzida no sistema, de tal forma que:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} , \quad (95)$$

podemos supor que a solução de \hat{H} pode ser construída a partir das soluções de \hat{H}_0 :

$$|n'\rangle = |n\rangle + |\delta n\rangle , \quad (96)$$

onde $|n'\rangle$ deve ser solução de \hat{H} , enquanto $|n\rangle$ é a solução correspondente de \hat{H}_0 e também de \hat{H} quando \hat{V} tende para zero.

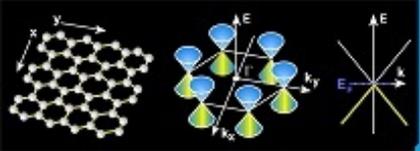


Resolvendo a equação de Schroedinger para \hat{H} em termos da função (96) temos:

$$\hat{H}|n'\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V})|n'\rangle = \epsilon'_n|n'\rangle ,$$

que podemos escrever na forma:

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})|n\rangle + (\hat{H}_0 + \hat{V})|\delta n\rangle = \epsilon'_n(|n\rangle + |\delta n\rangle) .$$



Rearranjando os fatores e aproximando $\epsilon'_n = \epsilon_n + \Delta_n \approx \epsilon_n$ temos:

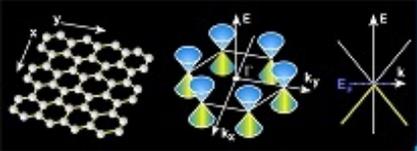
$$|\delta n\rangle = \frac{1}{\epsilon'_n - \hat{H}_0} \hat{V} |n\rangle + \frac{1}{\epsilon'_n - \hat{H}_0} \hat{V} |\delta n\rangle, \quad (97)$$

que nos dá uma forma recursiva de encontrar os desvios $|\delta n\rangle$ em termos da base original $\{|n\rangle\}$:

$$|n'\rangle = |n\rangle + \frac{1}{\epsilon'_n - \hat{H}_0} \hat{V} |n\rangle + \frac{1}{\epsilon'_n - \hat{H}_0} \hat{V} \frac{1}{\epsilon'_n - \hat{H}_0} \hat{V} |n\rangle + \dots \quad (98)$$

Esta última equação pode ser trabalhada, fazendo uso da completudeza $\sum_m |m\rangle \langle m| = 1$:

$$|n'\rangle = |n\rangle + \frac{1}{\epsilon'_n - \hat{H}_0} \hat{V} |n\rangle + \dots = |n\rangle + \frac{1}{\epsilon'_n - \hat{H}_0} \left(\sum_m |m\rangle \langle m| \right) \hat{V} |n\rangle + \dots$$

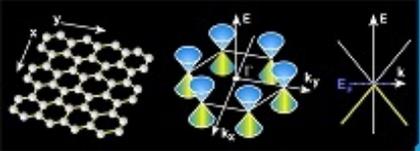


⇒ Alguns detalhes de cálculos foram omitidos mas o resultado desejado é dado abaixo:

$$|n'\rangle = |n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle m | \hat{V} | n \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} |m\rangle + \dots, \quad (99)$$

e para a energia obtém-se através de $\langle n' | \hat{H} | n' \rangle$ o seguinte valor, até ordens mais baixas:

$$\epsilon'_n = \epsilon_n + \langle n | \hat{V} | n \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | \hat{V} | n \rangle|^2}{\epsilon_n - \epsilon_m} \quad (100)$$



Referências deste Capítulo

- [1] J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Revised Edition (1994).
- [2] R. Eisberg e R. Resnick, *Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas*, Ed. Campus (1979).
- [3] Volker Heine, *Group Theory in Quantum Mechanics*, Dover (1993).
- [4] C. Kittel, *Introduction to Solid State Theory*.
- [5] C. Kittel, *The Quantum Theory of Solids*.
- [6] O. Madelung, *Introduction to Solid State Theory*.