SEGUNDA PROVA - FI002

NOME: RA:

1. A função de onda espalhada $|\psi_s^+\rangle$, correspondente uma onda plana incidente $|\psi_s\rangle$, satisfaz a equação

$$|\psi_s^+\rangle = |\psi_s\rangle + G_+(E_s)V|\psi_s^+\rangle$$

onde a função de Green é dada por

$$G_+(E_s) = \frac{1}{E_s - H_0 + i\hbar\alpha}$$

e $H_0 = p^2/2m$.

(a) Escreva essa equação na representação de coordenadas. Use $\langle \mathbf{r}|G_+(E_s)|\mathbf{r}'\rangle \equiv G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E_s)$.

(b) Suponha que $\langle \mathbf{r}|V|\mathbf{r}'\rangle = \lambda u(r)u(r')$ e resolva a equação para $\psi_s^+(\mathbf{r})$.

(c) Calcule $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E_s)$.

2. Considere duas bases ortonormais discretas de uma partícula, rotuladas por $|K_i\rangle$ e $|L_i\rangle$. Sejam $a_i^\dagger$ e $b_i^\dagger$ os respectivos operadores de criação de uma partícula nesses estados.

   (a) Obtenha a relação de transformação entre esses operadores.

   (b) Mostre que o operador de dois corpos

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{ij} a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i$$

   pode ser escrito como

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum_{qrst} \langle qr|V|ts\rangle b_q^\dagger b_r^\dagger b_s b_t$$

   e obtenha $\langle qr|V|ts\rangle$.

   (c) Supondo que os números V_{ij} formem uma matriz real e simétrica, mostre que $\langle qr|V|ts\rangle = \langle rq|V|st\rangle$.

3. Mostre que, na teoria de Hartree-Fock, o valor esperado de $\mathcal{H}$ no estado ionizado $a_k|\psi_\nu\rangle$ é dado por $\langle\mathcal{H}\rangle = E_\nu - \epsilon_k$.

4. Considere os operadores aditivos de posição e momento definidos por

$$\mathbf{R} = \int \mathbf{r}\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})d^3r \qquad e \qquad \mathbf{P} = \int \mathbf{p}\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{p})\hat{\phi}(\mathbf{p})d^3p$$

onde

$$\hat{\phi}(\mathbf{p}) = \int \langle\mathbf{p}|\mathbf{r}\rangle\hat{\psi}(\mathbf{r})d^3r.$$

Mostre que, para bósons, $[\mathbf{R}, \mathbf{P}] = i\hbar N$ onde N é o operador número total de partículas.

Fórmulas

Equações de Hartree-Fock:

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \langle i|H_0|j\rangle a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} \sum_{qrst} \langle qr|V|ts\rangle a_q^\dagger a_r^\dagger a_s a_t.$$

$$|\psi_\nu\rangle = a_n^\dagger a_{n-1}^\dagger \dots a_2^\dagger a_1^\dagger |0\rangle.$$

$$\epsilon_m = \langle m|H_0|m\rangle + \sum_{t=1}^{n} [\langle mt|V|mt\rangle - \langle mt|V|tm\rangle].$$

$$E_\nu = \sum_{k=1}^{n} \langle k|H_0|k\rangle + \frac{1}{2} \sum_{l,k=1}^{n} [\langle lk|V|lk\rangle - \langle lk|V|kl\rangle].$$