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 $\psi_s^+(\mathbf{r})$.

2. Calcule $\langle 0|\hat{\psi}(\mathbf{r}_1)\hat{\psi}(\mathbf{r}_2)\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}_1')\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}_2')|0\rangle$.

3. Considere uma base ortonormal discreta $|K_i\rangle$ e a base contínua de posições $|x\rangle$ de uma partícula. Sejam $a_i^\dagger$ e $\hat{\psi}^\dagger(x)$ os respectivos operadores de criação de uma partícula nesses estados.

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

   (b) Considere o operador de dois corpos

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2}\int dx dx' \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(x')\hat{\psi}(x')\hat{\psi}(x)V(x,x').$$

   Mostre que $\mathcal{V}$ pode ser escrito como

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2}\sum_{qrst}\langle qr|V|ts\rangle a_q^\dagger a_r^\dagger a_s a_t$$

   e obtenha a expressão de $\langle qr|V|ts\rangle$.

   (c) Suponha que os operadores $a_i^\dagger$ correspondam à criação de partículas em autoestados de uma partícula livre confinada ao intervalo $0 \leq x \leq L$ com condições periódicas de contorno. Calcule $\langle qr|V|ts\rangle$ para o caso de interação de contato, $V(x,x') = V_0\delta(x-x')$.

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

Fórmulas

Equações de Hartree-Fock:

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

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

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

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