

TÓPICOS de MATÉRIA CONDENSADA

Mestrado em Engenharia Física Tecnológica

Série 5

1. Considere um sistema de N partículas, com condições periódicas fronteira, que poderão ser electrões com spin com interacções descritas pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = t \sum_{s,j=1}^N (a_{js}^\dagger a_{j+1s} + a_{j+1s}^\dagger a_{js}) + U \sum_{j=1}^N n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}$$

ou spins J com interacções descritas pelo Hamiltoniano de Heisenberg

$$\mathcal{H} = J \sum_{j=1}^N \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1} - \sum_{j=1}^N H S_j^z$$

a) Indique uma forma de enumerar os estados do sistema, em geral, ou se estivermos interessados em estados com um dado número de partículas ou com uma dada magnetização.

b) Escreva um programa que calcule os valores próprios de energia e os estados do sistema, usando métodos standard de diagonalização de matrizes. A diagonalização exacta de sistemas finitos, conjugada com métodos de extrapolação, tem vindo a ser cada vez mais importante, dado o rápido desenvolvimento das capacidades de cálculo que tem havido.

c) Altere o programa de forma a implementar as simetrias de invariância para translações e de conservação de N ou S_z .

2. No método de Lanczos parte-se de um dado estado $|0\rangle$ e aplica-se repetidamente o Hamiltoniano, gerando a sequência de estados

$$\mathcal{H}|0\rangle = \epsilon_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle \quad (1)$$

$$\mathcal{H}|1\rangle = \alpha_1^*|0\rangle + \epsilon_1|1\rangle + \alpha_2|2\rangle \quad (2)$$

$$\mathcal{H}|2\rangle = \alpha_2^*|1\rangle + \epsilon_2|2\rangle + \alpha_3|3\rangle \quad (3)$$

etc, que eventualmente é truncada, fazendo-se a diagonalização da matriz tridiagonal assim obtida, existindo, para isso, métodos especiais. No caso de haver degenerescência de estados, será necessário recomeçar usando um estado ortogonal ao anteriormente usado.

No método de Lanczos modificado trunca-se logo no segundo estado, ficando-se assim com a matriz

$$\mathcal{H}_{eff} = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & \alpha_1 \\ \alpha_1^* & \epsilon_1 \end{pmatrix}$$

na base dos estados $|0\rangle, |1\rangle$. Diagonalizando-se esta matriz obtêm-se os estados $|0\rangle', |1\rangle'$. O processo é iterado tomando agora o estado $|0\rangle'$ como o novo estado $|0\rangle$.

Obtenha as equações necessárias para escrever um programa de computador para calcular o estado fundamental e a sua energia, usando o método de Lanczos modificado. A grande vantagem computacional deste método é o facto de ser preciso guardar em memória três vectores apenas.

3. a) Uma fracção continuada é definida por

$$f = b_0 + \frac{a_1}{b_1 + \frac{a_2 a_3}{b_2 + b_3 + \dots}} \quad (4)$$

$$= b_0 + \frac{a_1}{b_1 +} \frac{a_2}{b_2 +} \frac{a_3}{b_3 +} \dots \quad (5)$$

As aproximações sucesivas

$$f_n = \frac{A_n}{B_n} = \frac{a_1}{b_1 +} \frac{a_2}{b_2 +} \dots \frac{a_n}{b_n}$$

são dadas por

$$A_n = A_{n-1}b_n + A_{n-2}a_n \quad (6)$$

$$B_n = B_{n-1}b_n + B_{n-2}a_n \quad (7)$$

em que $A_{-1} = 1$, $A_0 = b_0$, $B_{-1} = 0$, $B_0 = 1$. Normalmente, na fracção continuada de um número toma-se $a_n = 1$ e as aproximações f_n convergem para esse número alternadamente por valores inferiores e superiores.

a) Obtenha os primeiros coeficientes b_n da fracção continuada do número π . Obtenha as sucessivas aproximações f_n correspondentes.

b) Proceda de um modo análogo para a “razão dourada” $\gamma = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$. Mostre que esta é a fracção continuada de convergência mais lenta. Mostre que ela é periódica e que γ é portanto solução de uma equação algébrica. Relacione com a sucessão de Fibonacci 0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, ... Obtenha a

expressão analítica de A_n e B_n resolvendo as suas equações de recorrência, com as condições fronteira associadas. Mostre que $\lim_{n \rightarrow \infty} f_n = \gamma$.

4. Dada uma função com um desenvolvimento em série de Taylor

$$f(x) = f_0 + f_1x + f_2x^2 + \dots + f_{n+d}x^{n+d} + \dots$$

a aproximação de Padé n/d a esta série tem a forma

$$f(x) = \frac{P_n(x)}{Q_d(x)} + O(x^{n+d+1})$$

em que $P_n(x)$ e $Q_d(x)$ são polinómios de grau n e d respectivamente

$$P_n(x) = p_0 + p_1x + \dots + p_nx^n \quad (8)$$

$$Q_d(x) = q_0 + q_1x + \dots + q_dx^d \quad (9)$$

A aproximação de Padé n/d é dada pelo quociente dos determinantes

$$FP_n(x) = \begin{vmatrix} f_{n-d+1} & f_{n-d+2} & \dots & f_{n+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ f_n & f_{n+1} & \dots & f_{n+d} \\ \sum_{k=0}^n f_{k-d}x^k & \sum_{k=0}^n f_{k-d+1}x^k & \dots & \sum_{k=0}^n f_kx^k \end{vmatrix}$$

$$FQ_d(x) = \begin{vmatrix} f_{n-d+1} & f_{n-d+2} & \dots & f_{n+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ f_n & f_{n+1} & \dots & f_{n+d} \\ x^d & x^{d-1} & \dots & 1 \end{vmatrix}$$

sendo $f_k = 0$ se $k < 0$.

Calcule as primeiras aproximações de Padé, da forma $2n/2n \pm 1$, para a função $f(x) = \tan(x)$. Obtenha o valor do primeiro polo e do primeiro zero dessas aproximações e compare com $\frac{\pi}{2}$ e π .

5. Obtenha a expansão em cumulantes

$$\begin{aligned} \langle e^{\lambda A} \rangle = \exp[& \lambda \langle A \rangle \\ & + \frac{1}{2} \lambda^2 (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2) \\ & + \frac{1}{6} \lambda^3 (\langle A^3 \rangle - 3 \langle A^2 \rangle \langle A \rangle + 2 \langle A \rangle^3) \\ & + \frac{1}{24} \lambda^4 (\langle A^4 \rangle - 4 \langle A^3 \rangle \langle A \rangle - 3 \langle A^2 \rangle^2 \\ & + 12 \langle A^2 \rangle \langle A \rangle^2 - 6 \langle A \rangle^4) \\ & + \dots] \end{aligned}$$

6. A transformada de Borel da função

$$f(x) = \sum_n a_n x^n$$

é definida por

$$\tilde{f}_B(x) = \sum_n \frac{a_n}{n!} x^n$$

a) Mostre que se tem

$$f(x) = \int_0^\infty e^{-t} \tilde{f}_B(xt) dt$$

b) Calcule a transformada de Borel de $f(x) = \frac{1}{1-x}$ e verifique a relação da alínea anterior.