

# TÓPICOS de MATÉRIA CONDENSADA

Mestrado em Engenharia Física Tecnológica

Série 2

1. Um sistema quântico magnético é perturbado acoplando-o a um campo magnético externo, de acordo com o Hamiltoniano

$$\delta H = -\hbar \vec{h}(t) \cdot \vec{S}$$

Mostre que a alteração da magnetização é dada, na chamada resposta linear, por

$$\delta m(\vec{t}) = \delta \langle \vec{S}_H(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t dt' \langle [S_H(t), \vec{S}_H(t') \cdot \vec{h}(t')] \rangle$$

em que  $\langle \dots \rangle$  representa a média com a matriz densidade. Obtenha a expressão da susceptibilidade.

2. Considere um oscilador harmónico forçado, com o Hamiltoniano dado por

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 - f(t)x.$$

a) Resolva as equações de movimento, com as condições iniciais  $x(t_i) = x_i$  e  $p(t_i) = p_i$ .

b) Calcule os comutadores  $[x(t), x(t')]$  e  $[x(t), p(t')]$ . Verifique que, por derivação do primeiro comutador em ordem a  $t'$ , se obtém o segundo.

c) Se a força externa  $f(t')$  for variada, qual é a variação da coordenada  $x(t)$ ? Relacione com o comutador  $[x(t), x(t')]$  e com a teoria da resposta linear.

3. Considere um oscilador harmónico, com massa  $m$  e frequência característica  $\omega_0$ , em equilíbrio termodinâmico à temperatura  $T$ , mas em que, no instante de tempo  $t = 0$ , a frequência característica passa a ser  $\omega_1$ .

Calcule a função de correlação  $\langle x(t)x(t') \rangle$ .

4. As relações de Kramers-Krönig, traduzindo o princípio da causalidade, relacionam a parte real e a parte imaginária da susceptibilidade de acordo com:

$$\chi^R(\omega) = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi^I(\omega') d\omega'}{\omega' - \omega} \frac{1}{\pi}$$

$$\chi^I(\omega) = -P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi^R(\omega') d\omega'}{\omega' - \omega} \frac{1}{\pi}$$

Utilize a primeira destas relações para calcular a parte real da susceptibilidade sabendo que a parte imaginária é dada por:

- a)  $\chi^I(\omega) = \alpha\delta(\omega - \omega_0)$ ,
- b)  $\chi^I(\omega) = \lambda[\theta(\omega - \omega_1) - \theta(\omega - \omega_2)]$  com  $\omega_1 < \omega_2$  e sendo  $\theta(\omega) = 0$ , se  $\omega < 0$  e  $\theta(\omega) = 1$ , se  $\omega > 0$ .
- c)  $\chi^I(\omega) = \frac{\lambda\gamma\omega}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \gamma^2\omega^2}$ .

5. a) Mostre que a fórmula de inversão da transformada

$$\tilde{f}(\omega) = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(\omega') d\omega'}{\omega' - \omega} \frac{1}{\pi}$$

é dada por

$$f(\omega) = -P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{f}(\omega') d\omega'}{\omega' - \omega} \frac{1}{\pi}$$

b) Por transformação de Fourier escreva estas relações no domínio do tempo.

6. A transformação de Holstein-Primakoff estabelece uma correspondência entre os primeiros  $2S + 1$  estados,  $n = 0, \dots, 2S$ , do oscilador harmónico e os estados de um spin  $S$ ,  $m = -S, \dots, S$ . Essa correspondência pode ser feita de forma descendente ou ascendente, conforme se faça  $m = S - n$  ou  $m = n - S$ . No primeiro caso, a correspondência entre operadores é  $\hat{S}_- = \hat{a}^\dagger \sqrt{2S - N}$ ,  $\hat{S}_+ = \sqrt{2S - N} \hat{a}$  e  $\hat{S}_z = S - \hat{N}$ , em que  $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ .

i) Verifique que são verificadas as relações de comutação dos operadores de spin

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_\pm] = \pm \hat{S}_\pm$$

$$[\hat{S}_+, \hat{S}_-] = 2\hat{S}_z$$

bem como a relação

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ \hat{S}_- + \hat{S}_- \hat{S}_+) + \hat{S}_z^2 = S(S+1)$$

ii) No limite  $S \rightarrow \infty$  temos  $\frac{\hat{S}_-}{\sqrt{2S}} \rightarrow \hat{a}^\dagger$ ,  $\frac{\hat{S}_+}{\sqrt{2S}} \rightarrow \hat{a}$ , podendo-se tomar  $\frac{\hat{S}_z}{S} \rightarrow 1$  ou  $S - \hat{S}_z = \hat{N}$ , conforme for mais conveniente ou interessante.

iii) Verifique que neste limite as relações de comutação e a relação atrás indicada conduzem a relações características dos operadores bosónicos.

iv) Considere um spin em equilíbrio termodinâmico à temperatura  $T$ , na presença de um campo magnético  $\vec{H}$ . Verifique que no limite  $S \rightarrow \infty$  definido em ii) a função de partição, a magnetização e as funções de correlação do spin quântico  $S$  tendem para quantidades análogas do oscilador harmónico.

v) Estabeleça a relação entre os operadores de spin e os do oscilador harmónico para a correspondência ascendente  $m = n - S$ . Parta das expressões usuais para a acção dos operadores  $S_+$ ,  $S_-$  e  $S_z$  nos estados  $|Sm\rangle$  e implemente esta correspondência.

vi) Considere o Hamiltoniano de Heisenberg

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{\hat{S}}_i \cdot \vec{\hat{S}}_j - H \sum_i \hat{S}_i^z$$

para um sistema de spins numa rede de dimensão  $d$ . Reescreva o Hamiltoniano usando a transformação de Holstein-Primakoff. Considere o limite  $S \rightarrow \infty$  e obtenha a aproximação quadrática para o Hamiltoniano. Por transformação de Fourier obtenha a relação de dispersão das ondas de spin. De que modo é que a magnetização, a baixas temperaturas, tende para o valor de saturação (lei de Bloch)? Qual é, a baixas temperaturas, a contribuição dos magnões para o calor específico? Analise os resultados em função da dimensão.

7. Demonstre as seguintes identidades, válidas para quaisquer operadores:

$$[A, BC] = [A, B]C - B[C, A]$$

$$[A, BC] = \{A, B\}C - B\{C, A\}$$

$$[AB, C] = A[B, C] - [C, A]B$$

$$[AB, C] = A\{B, C\} - \{C, A\}B$$

$$[AB, CD] = A[B, C]D - [C, A]BD + CA[B, D] - C[D, A]B$$

$$[AB, CD] = A\{B, C\}D - \{C, A\}BD + CA\{B, D\} - C\{D, A\}B$$

$$[AB, CD] = A[B, C]D - AC[D, B] + [A, C]DB - C[D, A]B$$

$$[AB, CD] = A\{B, C\}D - AC\{D, B\} + \{A, C\}DB - C\{D, A\}B$$

8. a) Mostre que o operador número  $N = \sum_{is} a_{is}^\dagger a_{is}$  comuta com os operadores que tenham igual número de operadores de criação e de destruição.

b) Mostre que o operador  $S_z$  comuta com os operadores que tenham igual número de operadores de subida  $S_+$  e de descida  $S_-$ .

9. Considere um electrão num determinado estado, acoplado aos electrões de uma banda de condução, de acordo com o Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \hbar\Omega a^\dagger a + \sum_k \hbar\omega_k b_k^\dagger b_k + \sum_k (V_k a^\dagger b_k + V_k^* b_k^\dagger a)$$

Obtenha as equações de movimento dos operadores  $a(t)$  e  $b_k(t)$ . Resolva formalmente as equações de movimento dos operadores  $b_k(t)$  da banda de condução e obtenha uma equação de movimento efectiva para o operador  $a(t)$  do electrão naquele estado. Interprete fisicamente.

10. Considere electrões numa banda de condução, com energia  $\epsilon(\vec{k})$  e que interactuam de acordo com o Hamiltoniano  $\mathcal{H}_I = U \sum_i N_{i\uparrow} N_{i\downarrow}$ , em que  $N_{i\uparrow}, N_{i\downarrow}$  são os operadores de ocupação electrónicos, no ponto  $i$  da rede (modelo de Hubbard).

a) Considere a aproximação de campo médio e faça o desacoplamento dos operadores de modo a definir o campo efectivo sentido pelos electrões de cada polarização de spin. Considere uma situação ferromagnética, uniforme no espaço.

b) Considere que os electrões são descritos pelo conjunto grande canónico e escreva as equações autoconsistentes de campo médio.

c) Obtenha a linha da transição de fase, onde a magnetização  $m$  se anula, na ausência de campo aplicado  $h$ . Particularize para  $T = 0K$  e indique para que valores de  $U$  existe transição de fase (critério de Stoner).

d) Obtenha a susceptibilidade estática  $\frac{\partial m}{\partial h}$ , em termos da susceptibilidade de Pauli.

11. Considere o modelo de Hubbard para a interacção entre electrões de condução. Usando as equações de movimento e o formalismo canónico obtenha

- a) a teoria de campo médio para as energias dos electrões,
- b) a teoria de Stoner para as ondas de spin.

12. Considere a a teoria de Stoner do magnetismo itinerante, usando o modelo de Hubbard.

a) Na aproximação das fases aleatórias a susceptibilidade transversal, envolvendo uma média do produto dos operadores  $S^+S^-$  é dada por

$$\chi^{+-}(k, \omega) = \frac{\chi_0^{+-}(k, \omega)}{1 - U\chi_0^{+-}(k, \omega)}$$

em que  $\chi_0^{+-}(k, \omega)$  é a susceptibilidade dos electrões, na presença do campo efectivo.

Em teoria da resposta linear, a função de Lindhard para esta susceptibilidade é dada por:

$$\chi_0^{+-}(k, \omega) = -\frac{1}{V} \sum_q \frac{f_{q+k\downarrow} - f_{q\uparrow}}{\tilde{\epsilon}_{q+k\downarrow} - \tilde{\epsilon}_{q\uparrow} - (\omega - i\delta)}.$$

Tomando  $k = 0$ , determine  $\chi_0^{+-}(0, \omega)$ . Faça  $\omega = 0$  e interprete o resultado obtido, geometrica ou matematicamente. Qual o limite de  $\chi_0^{+-}(0, 0)$  quando  $\Delta \rightarrow 0$ ?

b) Determine  $\chi^{+-}(0, \omega)$ . Mostre que, na ausência de campo externo  $h$ , diverge quando  $\omega \rightarrow 0$ , na fase ferromagnética. Explique a razão desta divergência da susceptibilidade transversal.