

Lista 2 de FI-193

1. Mostre que, para o gás uniforme de elétrons,

$$\langle \hat{V} \rangle_0 = -\frac{3}{2\pi} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{1}{r_s} \text{ Ryd.}$$

2. Problema 1.6 do Fetter & Walecka.

1.6. Consider a polarized electron gas in which $N_{\pm}$ denotes the number of electrons with spin-up (-down).¹

(a) Find the ground-state energy to first order in the interaction potential as a function of $N = N_+ + N_-$ and the polarization $\zeta = (N_+ - N_-)/N$.

(b) Prove that the ferromagnetic state ($\zeta = 1$) represents a lower energy than the unmagnetized state ($\zeta = 0$) if $r_s > (2\pi/5)(9\pi/4)^{1/3}(2^{1/3} + 1) = 5.45$. Explain why this is so.

(c) Show that $\partial^2(E/N)/\partial\zeta^2|_{\zeta=0}$ becomes negative for $r_s > (3\pi^2/2)^{2/3} = 6.03$.

(d) Discuss the physical significance of the two critical densities. What happens for $5.45 < r_s < 6.03$?

3. *Bósons na aproximação de Bogolyubov.* Use algum programa de cálculo numérico (como Mathematica, MatLab ou outros) ou faça um programa para calcular a dependência com a temperatura das quantidades físicas do gás diluído de bósons sem spin com interação de curto alcance na aproximação de Bogolyubov. Antes de começar, note que o problema físico é definido por dois parâmetros característicos do sistema de interesse: a massa do átomo m e o comprimento de espalhamento a . Além disso, podemos controlar externamente a densidade $n = N/V$ e temperatura T . Podemos também definir uma escala de energia característica (onde recuperamos o $\hbar$)

$$E_r = \frac{\hbar^2}{ma^2}.$$

O parâmetro de interação entre os átomos λ definido em sala é

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar^2 a n}{m} = 2\pi \left(\frac{\hbar^2}{ma^2} \right) (na^3) = 2\pi E_r (na^3).$$

É conveniente trabalhar com quantidades adimensionais, como o “parâmetro do gás”

$$g = na^3,$$

tal que

$$\lambda = 2\pi g E_r,$$

e a temperatura reduzida

$$t = \frac{k_B T}{\lambda}.$$

“Prepare” seus cálculos usando essas quantidades adimensionais. Lembre-se de que

$$\begin{aligned} \epsilon_k &= \frac{k^2}{2m}, \\ E_k &= \sqrt{\epsilon_k^2 + 4\lambda\epsilon_k}. \end{aligned}$$

(a) Calcule energia interna por partícula, em unidades de λ , como função da temperatura

$$\frac{U(T)}{N\lambda} = \frac{E_0}{N\lambda} + \frac{1}{\lambda n} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{E_k}{e^{\beta E_k} - 1},$$

onde

$$\frac{E_0}{N\lambda} = 1 + \frac{128}{15} \sqrt{\frac{na^3}{\pi}}.$$

(b) Calcule a fração do condensado como função da temperatura

$$\frac{N_0(T)}{N} = \frac{N_0(0)}{N} - \frac{1}{n} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\epsilon_k + 2\lambda}{E_k} \frac{1}{e^{\beta E_k} - 1},$$

onde

$$\frac{N(0)}{N} = 1 - \frac{8}{3} \sqrt{\frac{na^3}{\pi}}.$$

Faça os cálculos usando os parâmetros do ^{87}Rb ($m = 87m_p$ e $a \approx 84a_0$) e do ^7Li ($m = 7m_p$ e $a \approx 33a_0$), onde m_p é a massa do próton e $a_0 = 0.53 \text{ \AA}$ é o raio de Bohr. Esses átomos têm spin total não nulo, mas trate-os como sendo de spin zero. Considere uma densidade típica de sistemas de átomos ultra-frios de $n = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$. A temperatura crítica de condensação de Bose-Einstein é aquela onde $N(T_c) = 0$. Estime-a para os dois sistemas acima.

4. O modelo de Hubbard de dois sítios. Considere o modelo de Hubbard para dois sítios 1 e 2. Vamos focar no caso em que há ao todo apenas dois elétrons no sistema

(a) Quantos estados existem ao todo nesse setor de dois elétrons?

(b) Mostre que o Hamiltoniano H_{Hub} comuta com o spin total dos elétrons

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 = \sum_{i=1,2;\alpha,\beta} c_{i\alpha}^\dagger \frac{\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}}{2} c_{i\beta},$$

onde $\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}$ é o vetor das matrizes de Pauli. Segue que H_{Hub} , $\mathbf{S}^2$ e S_z formam um conjunto de operadores que comutam entre si e podemos trabalhar na base de seus auto-vetores comuns. Escreva os estados da parte de spin (normalizados) $S = 0$ e $M_S = 0$ (singleto) e $S = 1$ e $M_S = -1, 0$, ou $+1$ (triplete), onde $S(S+1)$ são os autovalores de $\mathbf{S}^2$ e M_S os de S_z . Use a notação $|\sigma_1, \sigma_2\rangle$ para denotar o spin do elétron i ($i = 1, 2$) como tendo projeção $S_{iz} = \frac{1}{2}\sigma_i$, onde $\sigma_i = +$ ou $-$. Determine se cada função de onda é simétrica ou anti-simétrica sob permutação dos spins.

(c) A função de onda total deve ser anti-simétrica sob a permutação simultânea de variáveis de spins e de coordenadas espaciais. Escreva os kets das partes espaciais que correspondem a cada parte de spin determinada no item (a). Use a notação $|i, j\rangle$, ($i, j = 1, 2$) para a parte espacial, correspondendo a um elétron no sítio i e um elétron no sítio j . O número total de estados assim construídos corresponde ao número do item (a)?

(d) Encontre as matrizes correspondentes a H_{Hub} nos sub-espacos de singleto e de triplete e ache os auto-valores e auto-vetores de cada uma dessas matrizes.

(e) Ordene em ordem crescente os auto-valores dos itens (e). Qual são os spins totais do estado fundamental e do primeiro estado excitado?

(f) Mostre que no limite relevante para isolantes de Mott $U \gg t$, os dois estados de mais baixa energia apresentam pequena probabilidade de se encontrar dupla ocupação de cada um dos sítios. Em outras palavras, os elétrons estão fortemente confinados a cada sítio, caracterizando um isolante.

(g) Encontre a diferença $\Delta E \equiv J$ entre os estados de mais baixa energia no limite $U \gg t$, relevante para isolantes de Mott. Mostre que o sub-espaco desses dois estados de energia mais baixos pode ser descrito pelo Hamiltoniano efetivo de Heisenberg

$$H_{Heis} = J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \text{const.},$$

e que o valor de J é positivo e corresponde ao valor derivado em sala.

5. Exchange Direto. Considere o seguinte termo entre sítios i e j diferentes que foi desprezado no modelo de Hubbard

$$H_{DE} = \sum_{ij;\sigma_1\sigma_2} \langle ij|\hat{V}|ji\rangle a_{i\sigma_1}^\dagger a_{j\sigma_2}^\dagger a_{i\sigma_2} a_{j\sigma_1},$$

onde

$$\langle ij|\hat{V}|ji\rangle = \int d^3r_1 d^3r_2 \varphi_i^*(\mathbf{r}_1) \varphi_j(\mathbf{r}_1) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \varphi_j^*(\mathbf{r}_2) \varphi_i(\mathbf{r}_2) \equiv J_{ij}^{\text{DE}}$$

é a integral coulombiana de “exchange” entre os orbitais $\varphi_i(\mathbf{r})$ e $\varphi_j(\mathbf{r})$.

(a) Note que a integral pode ser escrita como a auto-interação de uma distribuição de carga *complexa*

$$J_{ij} = \int d^3r_1 \int d^3r_2 \rho_{ij}^*(\mathbf{r}_1) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \rho_{ij}(\mathbf{r}_2), \quad (1)$$

onde

$$\rho_{ij}(\mathbf{r}) = \phi_i(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}).$$

Fazendo transformadas de Fourier na expressão da Eq. (1) e usando

$$\int d^3r \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{|\mathbf{r}|} = \frac{4\pi}{k^2},$$

mostre que J_{ij}^{DE} é real e positivo.

(b) Restringindo-se ao sub-espço de ocupação simples ($\sum_{\sigma} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma} = 1$), prove que esse termo dá origem a um Hamiltoniano de Heisenberg ferromagnético (FM).

6. Representação de Jordan-Wigner. Em $D = 1$, considere os seguintes operadores ($S = 1/2$)

$$d_l = \exp\left(i\pi \sum_{k=-\infty}^{l-1} \left(\frac{1}{2} + S_{kz}\right)\right) S_l^-;$$

$$d_l^{\dagger} = \exp\left(-i\pi \sum_{k=-\infty}^{l-1} \left(\frac{1}{2} + S_{kz}\right)\right) S_l^+.$$

(a) Mostre que eles satisfazem todas as regras de anti-comutação de operadores de férmions. Note como as exponenciais “mudam a estatística” dos operadores de spin para sítios diferentes. Mostre que

$$d_l^{\dagger} d_l = \frac{1}{2} + S_{lz}.$$

Portanto, podemos representar spins $1/2$ em $D = 1$, através de operadores de férmions, sendo que $|\uparrow\rangle \rightarrow |n_d = 1\rangle$ e $|\downarrow\rangle \rightarrow |n_d = 0\rangle$. Essa é a representação de Jordan-Wigner.

(b) Considere agora o modelo XY em $D = 1$

$$H_{XY} = \sum_i (J_x S_{ix} S_{(i+1)x} + J_y S_{iy} S_{(i+1)y}).$$

Escreva-o em termos dos férmions de Jordan-Wigner e ache o espectro do problema (utilize a transformação de Bogoliubov fermiônica de problemas anteriores. Pode ser necessário fazer uma transformação de gauge

$$d_{\mathbf{k}} \rightarrow e^{i\phi_{\mathbf{k}}} d_{\mathbf{k}}, \quad d_{\mathbf{k}}^{\dagger} \rightarrow e^{-i\phi_{\mathbf{k}}} d_{\mathbf{k}}^{\dagger},$$

antes de aplicar a transformação de Bogoliubov. Comente sobre os casos particulares (i) $J_x = J_y$ (modelo XX) e (ii) $J_y = 0$ (modelo de Ising). Escreva também o Hamiltoniano de Heisenberg e mostre que ele é equivalente a um problema de férmions interagentes e sem spin.