

FI-193 – Lista 2

Soluções

Questão 01 — Energia de troca do gás uniforme de elétrons

Mostre que, para o gás uniforme de elétrons,

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

Preparação: o valor esperado de $\hat{V}$ no mar de Fermi

O modelo de *jellium* consiste em N elétrons num volume V sobre um fundo uniforme de carga positiva que neutraliza o sistema. A interação, em segunda quantização,

$$\hat{V} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\sigma\sigma'} \frac{4\pi e^2}{q^2} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma},$$

onde o termo $\mathbf{q} = 0$ (interação direta média) foi removido por cancelar-se exatamente com a atração elétron-fundo e a repulsão fundo-fundo.

O estado não perturbado $|F\rangle$ é o mar de Fermi: todos os estados $\mathbf{k}$ com $k < k_F$ ocupados com ambos os spins, $n_{\mathbf{k}\sigma} = \theta(k_F - k)$. Calculamos $\langle \hat{V} \rangle_0 = \langle F | \hat{V} | F \rangle$ com o teorema de Wick (aqui, simples contagem de contrações). O valor esperado

$$\langle F | c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma} | F \rangle$$

só é não nulo se os operadores de criação repovoarem exatamente os estados esvaziados pelos de aniquilação. Como $\mathbf{q} \neq 0$, o emparelhamento *direto* ($\mathbf{k} + \mathbf{q} = \mathbf{k}$) é impossível; resta apenas o emparelhamento de *troca*,

$$\mathbf{k} + \mathbf{q} = \mathbf{k}', \quad \sigma = \sigma',$$

que, pela anticomutação dos operadores fermiônicos, vem com sinal negativo:

$$\langle F | c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma} | F \rangle = -\delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{q}} n_{\mathbf{k}\sigma} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}.$$

Portanto

$$\langle \hat{V} \rangle_0 = -\frac{1}{2V} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q} \neq 0} \frac{4\pi e^2}{q^2} n_{\mathbf{k}\sigma} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} = -\frac{1}{2V} \sum_{\sigma} \sum_{\substack{\mathbf{k} < k_F \\ \mathbf{k}' < k_F}} \frac{4\pi e^2}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2},$$

onde na última igualdade trocamos $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$. A soma sobre σ dá um fator 2 e, no limite termodinâmico, $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow V \int d^3k / (2\pi)^3$:

$$\langle \hat{V} \rangle_0 = -4\pi e^2 V \int_{k < k_F} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int_{k' < k_F} \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2}.$$

A integral interna

Fixado $\mathbf{k}$, calculemos

$$I(\mathbf{k}) \equiv \int_{k' < k_F} \frac{d^3 k'}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2} = 2\pi \int_0^{k_F} dk' k'^2 \int_{-1}^1 \frac{du}{k^2 + k'^2 - 2kk'u},$$

com $u = \cos \theta$. A integral angular é elementar,

$$\int_{-1}^1 \frac{du}{k^2 + k'^2 - 2kk'u} = \frac{1}{2kk'} \ln \left| \frac{k + k'}{k - k'} \right|,$$

de modo que

$$I(\mathbf{k}) = \frac{\pi}{k} \int_0^{k_F} dk' k' \ln \left| \frac{k + k'}{k - k'} \right|.$$

Com a primitiva conhecida

$$\int_0^b dx x \ln \left| \frac{a+x}{a-x} \right| = ab + \frac{b^2 - a^2}{2} \ln \left| \frac{a+b}{a-b} \right|,$$

obtemos, escrevendo $x = k/k_F$,

$$I(\mathbf{k}) = 4\pi k_F F(x), \quad F(x) = \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|,$$

que é a conhecida *função de Lindhard estática* (a menos de normalização).

A integral externa

Substituindo,

$$\langle \hat{V} \rangle_0 = - \frac{4\pi e^2 V}{(2\pi)^6} \int_{k < k_F} d^3 k \, 4\pi k_F F\left(\frac{k}{k_F}\right) = - \frac{4\pi e^2 V}{(2\pi)^6} (4\pi)^2 k_F^4 \int_0^1 dx x^2 F(x).$$

Falta a integral adimensional. O primeiro pedaço é imediato,

$$\int_0^1 dx \frac{x^2}{2} = \frac{1}{6}.$$

Para o segundo, o caminho mais limpo é expandir o logaritmo em série de Taylor, válida para $0 \leq x < 1$:

$$\ln \frac{1+x}{1-x} = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{2n+1}}{2n+1}.$$

Então

$$\begin{aligned} \int_0^1 dx \frac{x(1-x^2)}{4} \ln \frac{1+x}{1-x} &= \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2n+1} \int_0^1 dx (x^{2n+2} - x^{2n+4}) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2n+1} \left(\frac{1}{2n+3} - \frac{1}{2n+5} \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)(2n+3)(2n+5)}, \end{aligned}$$

onde usamos $\frac{1}{2n+3} - \frac{1}{2n+5} = \frac{2}{(2n+3)(2n+5)}$. Por frações parciais,

$$\frac{1}{(2n+1)(2n+3)(2n+5)} = \frac{1}{4} \left[\frac{1}{(2n+1)(2n+3)} - \frac{1}{(2n+3)(2n+5)} \right],$$

uma soma telescópica cujo valor é o primeiro termo:

$$\int_0^1 dx \frac{x(1-x^2)}{4} \ln \frac{1+x}{1-x} = \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{1 \cdot 3} = \frac{1}{12}, \quad \text{e assim} \quad \int_0^1 dx x^2 F(x) = \frac{1}{6} + \frac{1}{12} = \frac{1}{4}.$$

Montagem do resultado

Reunindo tudo,

$$\left\langle \hat{V} \right\rangle_0 = -\frac{4\pi e^2 V}{(2\pi)^6} (4\pi)^2 k_F^4 \cdot \frac{1}{4} = -\frac{4\pi \cdot 16\pi^2}{4 \cdot 64\pi^6} e^2 V k_F^4 = -\frac{e^2 V k_F^4}{4\pi^3}.$$

Como $N = V k_F^3 / 3\pi^2$ (dois spins),

$$\frac{\left\langle \hat{V} \right\rangle_0}{N} = -\frac{e^2 k_F^4}{4\pi^3} \cdot \frac{3\pi^2}{k_F^3} = -\frac{3 e^2 k_F}{4\pi}.$$

Resta expressar em Rydberg e r_s . O raio de Wigner–Seitz r_s é definido por

$$\frac{1}{n} = \frac{V}{N} = \frac{4\pi}{3} (r_s a_0)^3, \quad n = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \implies k_F^3 = \frac{9\pi/4}{(r_s a_0)^3} \implies k_F a_0 = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{1}{r_s}.$$

Como $1 \text{ Ryd} = e^2/2a_0$,

$$\frac{\left\langle \hat{V} \right\rangle_0}{N} = -\frac{3}{4\pi} (k_F a_0) \frac{e^2}{a_0} = -\frac{3}{2\pi} (k_F a_0) \text{ Ryd},$$

e finalmente

$$\boxed{\frac{\left\langle \hat{V} \right\rangle_0}{N} = -\frac{3}{2\pi} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{1}{r_s} \text{ Ryd} \approx -\frac{0,916}{r_s} \text{ Ryd}.}$$

Este é o termo de *troca* (exchange) da expansão perturbativa de alta densidade: junto com a energia cinética, $E/N = (2,21/r_s^2 - 0,916/r_s) \text{ Ryd} + \mathcal{O}(\ln r_s)$. $\square$

Questão 02 — Gás de elétrons polarizado (Fetter & Walecka, Prob. 1.6)

Considere o gás uniforme de elétrons em que N_+ elétrons têm spin para cima e N_- , spin para baixo, com $N = N_+ + N_-$ e polarização $\zeta = (N_+ - N_-)/N$. (a) Obtenha a energia do estado fundamental em primeira ordem em teoria de perturbação como função de N e ζ . (b) Mostre que o estado ferromagnético ($\zeta = 1$) tem energia menor que o paramagnético ($\zeta = 0$) se $r_s > \frac{2\pi}{5} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} (2^{1/3} + 1) \approx 5,45$ e explique fisicamente. (c) Mostre que $\partial^2(E/N)/\partial\zeta^2|_{\zeta=0} < 0$ se $r_s > \left(\frac{3\pi^2}{2}\right)^{2/3} \approx 6,03$. (d) Qual o significado físico dessas duas densidades críticas? O que ocorre para $5,45 < r_s < 6,03$?

a) Energia em primeira ordem como função de N e ζ

O estado variacional é um mar de Fermi com dois raios distintos: os $N_{\pm}$ elétrons de spin $\pm$ ocupam os estados com $k < k_{F\pm}$. Como cada setor de spin tem densidade de estados $V/(2\pi)^3$ por spin,

$$N_{\pm} = \frac{V k_{F\pm}^3}{6\pi^2}.$$

Definindo k_F pelo gás *não polarizado* de mesma densidade total, $N = V k_F^3/3\pi^2$, e usando $N_{\pm} = \frac{N}{2}(1 \pm \zeta)$,

$$\frac{k_{F\pm}^3}{k_F^3} = \frac{2N_{\pm}}{N} = 1 \pm \zeta \quad \Rightarrow \quad \boxed{k_{F\pm} = k_F (1 \pm \zeta)^{1/3}}.$$

Energia cinética. Cada setor contribui como um gás de férmions sem spin (um único ramo):

$$T_{\pm} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < k_{F\pm}} d^3k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi k_{F\pm}^5}{5} \frac{\hbar^2}{2m} = \frac{3}{5} N_{\pm} \frac{\hbar^2 k_{F\pm}^2}{2m},$$

onde usamos $N_{\pm} = V k_{F\pm}^3/6\pi^2$.

Energia de troca. Em primeira ordem, o valor esperado de $\hat{V}$ no determinante de Slater contém apenas o termo de troca (o termo direto cancela com o fundo positivo, como na Questão 01), e a troca só conecta elétrons de *mesmo* spin: o cálculo da Questão 01, repetido para um único ramo de spin com raio de Fermi $k_{F\pm}$ (sem o fator 2 de spin, e com $N_{\pm} = V k_{F\pm}^3/6\pi^2$), dá

$$E_{\pm}^{\text{ex}} = -\frac{e^2 V k_{F\pm}^4}{8\pi^3} = -\frac{3 e^2 k_{F\pm}}{4\pi} N_{\pm}.$$

(É o mesmo resultado por partícula da Questão 01, com $k_F \rightarrow k_{F\pm}$: a troca é diagonal em spin e cada setor ignora o outro.)

Soma e adimensionalização. Convertendo para Rydberg com $1 \text{ Ryd} = e^2/2a_0 = \hbar^2/2ma_0^2$ e $k_F a_0 = \alpha/r_s$, onde

$$\alpha \equiv \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3},$$

temos $\hbar^2 k_{F\pm}^2/2m = (\alpha^2/r_s^2)(1 \pm \zeta)^{2/3}$ Ryd e $3e^2 k_{F\pm}/4\pi = (3\alpha/2\pi r_s)(1 \pm \zeta)^{1/3}$ Ryd. Com $N_{\pm} = \frac{N}{2}(1 \pm \zeta)$,

$$\begin{aligned} \frac{E(N, \zeta)}{N} &= \sum_{s=\pm} \frac{N_s}{N} \left[\frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_{Fs}^2}{2m} - \frac{3e^2 k_{Fs}}{4\pi} \right] \\ &= \frac{3}{5} \frac{\alpha^2}{r_s^2} \frac{(1+\zeta)^{5/3} + (1-\zeta)^{5/3}}{2} - \frac{3\alpha}{2\pi r_s} \frac{(1+\zeta)^{4/3} + (1-\zeta)^{4/3}}{2} \quad [\text{Ryd}], \end{aligned}$$

ou, numericamente,

$$\boxed{\frac{E(N, \zeta)}{N} = \frac{2,21}{r_s^2} g_{5/3}(\zeta) - \frac{0,916}{r_s} g_{4/3}(\zeta) \text{ Ryd}, \quad g_p(\zeta) \equiv \frac{(1+\zeta)^p + (1-\zeta)^p}{2}.}$$

Para $\zeta = 0$ recupera-se $E/N = 2,21/r_s^2 - 0,916/r_s$, como devia. $\square$

b) Ferromagnetismo para $r_s > 5,45$

Para $\zeta = 1$ (estado ferromagnético), $g_{5/3}(1) = 2^{5/3}/2 = 2^{2/3}$ e $g_{4/3}(1) = 2^{4/3}/2 = 2^{1/3}$:

$$\frac{E(1)}{N} = 2^{2/3} \frac{3\alpha^2}{5r_s^2} - 2^{1/3} \frac{3\alpha}{2\pi r_s}, \quad \frac{E(0)}{N} = \frac{3\alpha^2}{5r_s^2} - \frac{3\alpha}{2\pi r_s}.$$

A condição $E(1) < E(0)$ é

$$\frac{3\alpha^2}{5r_s^2} (2^{2/3} - 1) < \frac{3\alpha}{2\pi r_s} (2^{1/3} - 1) \iff r_s > \frac{2\pi\alpha}{5} \frac{2^{2/3} - 1}{2^{1/3} - 1}.$$

Usando a fatoração $2^{2/3} - 1 = (2^{1/3} - 1)(2^{1/3} + 1)$,

$$\boxed{r_s > \frac{2\pi}{5} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} (2^{1/3} + 1) \approx 5,45.}$$

Interpretação física. A polarização é uma competição entre as duas parcelas:

- A *energia cinética* ($\propto 1/r_s^2$) **pune** a polarização: empilhar todos os elétrons num único setor de spin obriga a ocupar estados de k maiores ($k_F \rightarrow 2^{1/3} k_F$), aumentando a energia cinética pelo fator $2^{2/3} \approx 1,59$.
- A *energia de troca* ($\propto -1/r_s$) **favorece** a polarização: elétrons de mesmo spin evitam-se automaticamente pelo princípio de Pauli (buraco de troca), reduzindo a repulsão coulombiana; com todos os spins paralelos, *todos* os pares se beneficiam desse mecanismo, e a troca cresce em módulo pelo fator $2^{1/3} \approx 1,26$.

Como as parcelas escalam diferentemente com a densidade, em alta densidade (r_s pequeno) domina a cinética e o estado é paramagnético; em baixa densidade (r_s grande) domina a troca e torna-se vantajoso polarizar. Esse é o *ferromagnetismo de Bloch*. $\square$

c) Instabilidade local do estado paramagnético para $r_s > 6,03$

Expandimos $g_p(\zeta)$ em torno de $\zeta = 0$:

$$g_p(\zeta) = \frac{(1+\zeta)^p + (1-\zeta)^p}{2} = 1 + \frac{p(p-1)}{2} \zeta^2 + \mathcal{O}(\zeta^4) \implies \left. \frac{d^2 g_p}{d\zeta^2} \right|_{\zeta=0} = p(p-1).$$

Logo

$$\left. \frac{\partial^2(E/N)}{\partial \zeta^2} \right|_{\zeta=0} = \frac{3\alpha^2}{5r_s^2} \cdot \frac{5}{3} \cdot \frac{2}{3} - \frac{3\alpha}{2\pi r_s} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{1}{3} = \frac{2\alpha^2}{3r_s^2} - \frac{2\alpha}{3\pi r_s}.$$

A condição de instabilidade $\partial^2(E/N)/\partial \zeta^2|_0 < 0$ é

$$\frac{2\alpha^2}{3r_s^2} < \frac{2\alpha}{3\pi r_s} \iff r_s > \pi\alpha = \pi \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3}.$$

Elevando ao cubo, $(\pi\alpha)^3 = \pi^3 \cdot \frac{9\pi}{4} = \frac{9\pi^4}{4} = \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^2$, ou seja,

$$r_s > \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} \approx 6,03.$$

□

d) Significado das duas densidades críticas

As duas escalas delimitam regimes distintos de estabilidade do estado paramagnético $\zeta = 0$ (nesta aproximação de primeira ordem):

- $r_s^{(1)} \approx 5,45$ é o ponto em que o mínimo *global* da energia muda: para $r_s > 5,45$ o estado totalmente polarizado $\zeta = 1$ passa a ter energia menor que o paramagnético. É o ponto da transição ferromagnética, que aqui é de *primeira ordem*: a polarização de equilíbrio salta descontinuamente de $\zeta = 0$ para $\zeta = 1$ (com esta forma de $E(\zeta)$, o mínimo nunca ocorre em $0 < \zeta < 1$; a função tem no máximo dois mínimos locais, nas bordas).
- $r_s^{(2)} \approx 6,03$ é o ponto *espinodal*: para $r_s > 6,03$ o estado $\zeta = 0$ deixa de ser sequer um mínimo local ($\partial^2 E / \partial \zeta^2 < 0$) e torna-se localmente instável — qualquer flutuação infinitesimal de polarização cresce e o sistema rola para $\zeta = 1$. Fisicamente, a susceptibilidade de spin do gás paramagnético diverge e muda de sinal nesse ponto (instabilidade de Stoner do gás de elétrons em Hartree–Fock).

O que ocorre para $5,45 < r_s < 6,03$? Nessa janela o estado ferromagnético $\zeta = 1$ já é o mínimo global, mas o paramagnético $\zeta = 0$ ainda é um mínimo *local* ($\partial^2 E / \partial \zeta^2 > 0$): o paramagneto é **metaestável**. Há uma barreira de energia em $0 < \zeta < 1$ separando os dois mínimos — assinatura típica de transição de primeira ordem, análoga à região entre a curva de coexistência e a espinodal num líquido superaquecido. O sistema preso em $\zeta = 0$ é estável contra flutuações pequenas de polarização, mas decai para $\zeta = 1$ por uma flutuação grande (nucleação).

Ressalva. Esses números não devem ser levados ao pé da letra: em $r_s \sim 5$ –6 a expansão de alta densidade já não é confiável (o termo de correlação, de segunda ordem, é da mesma ordem que os retidos). Cálculos de Monte Carlo quântico indicam que a fase ferromagnética só aparece em r_s muito maiores ($r_s \sim 75$, Ceperley–Alder), e antes disso o sistema cristaliza (cristal de Wigner em $r_s \sim 100$). O valor do problema é ilustrar o mecanismo de Bloch: troca favorece alinhamento, cinética o combate, e a densidade decide. □

Questão 3 — Bósons na aproximação de Bogolyubov

Gás diluído de bósons na aproximação de Bogolyubov: com $E_r = \hbar^2/(ma^2)$, $\lambda = 2\pi g E_r$, $g = na^3$, $t = k_B T/\lambda$, $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2/2m$ e $E_k = \sqrt{\varepsilon_k^2 + 4\lambda\varepsilon_k}$, calcular numericamente $U(T)/N\lambda$ e $N_0(T)/N$ para ^{87}Rb ($a \approx 84 a_0$) e ^7Li ($a \approx 33 a_0$), com $n = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, e estimar T_c tal que $N_0(T_c) = 0$.

Preparação: adimensionalização das integrais

Introduzimos o momento característico k_λ pela condição $\varepsilon_{k_\lambda} = \lambda$, isto é, $k_\lambda = \sqrt{2m\lambda}/\hbar$, e a variável adimensional $x = k/k_\lambda$. Então

$$\varepsilon_k = \lambda x^2, \quad E_k = \sqrt{\varepsilon_k^2 + 4\lambda\varepsilon_k} = \lambda x \sqrt{x^2 + 4}, \quad \beta E_k = \frac{x \sqrt{x^2 + 4}}{t}.$$

O fator de fase dá $d^3k = 4\pi k_\lambda^3 x^2 dx$ (integrando o ângulo sólido). Usando $\lambda = 2\pi g E_r$ e $E_r = \hbar^2/(ma^2)$,

$$k_\lambda^3 = \left(\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\right)^{3/2} = \left(\frac{4\pi g}{a^2}\right)^{3/2} = \frac{(4\pi g)^{3/2}}{a^3}, \quad \frac{1}{n} \frac{k_\lambda^3}{2\pi^2} = \frac{(4\pi g)^{3/2}}{2\pi^2 g} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \sqrt{g},$$

pois $n = g/a^3$. Assim as duas integrais dependem apenas de t e do prefator $\sqrt{g}$:

$$\begin{aligned} \frac{U(T)}{N\lambda} &= \frac{E_0}{N\lambda} + \frac{4\sqrt{g}}{\sqrt{\pi}} \mathcal{I}_U(t), & \mathcal{I}_U(t) &= \int_0^\infty dx \frac{x^3 \sqrt{x^2 + 4}}{e^{x\sqrt{x^2 + 4}/t} - 1}, \\ \frac{N_0(T)}{N} &= \frac{N_0(0)}{N} - \frac{4\sqrt{g}}{\sqrt{\pi}} \mathcal{I}_N(t), & \mathcal{I}_N(t) &= \int_0^\infty dx \frac{x(x^2 + 2)}{\sqrt{x^2 + 4}} \frac{1}{e^{x\sqrt{x^2 + 4}/t} - 1}, \end{aligned}$$

com as constantes de $T = 0$ dadas no enunciado,

$$\frac{E_0}{N\lambda} = 1 + \frac{128}{15} \sqrt{\frac{na^3}{\pi}}, \quad \frac{N_0(0)}{N} = 1 - \frac{8}{3} \sqrt{\frac{na^3}{\pi}}.$$

No integrando de $\mathcal{I}_N$ o limite $x \rightarrow 0$ é finito: $E_k \rightarrow 2\lambda x$ e o fator de Bose $\rightarrow t/(2x)$, de modo que o integrando $\rightarrow t/2$ (a região de fônons contribui de forma regular). Em x grande o corte é exponencial, $e^{-x^2/t}$.

Parâmetros numéricos

Com $a_0 = 0,53 \text{ \AA}$ e $n = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$:

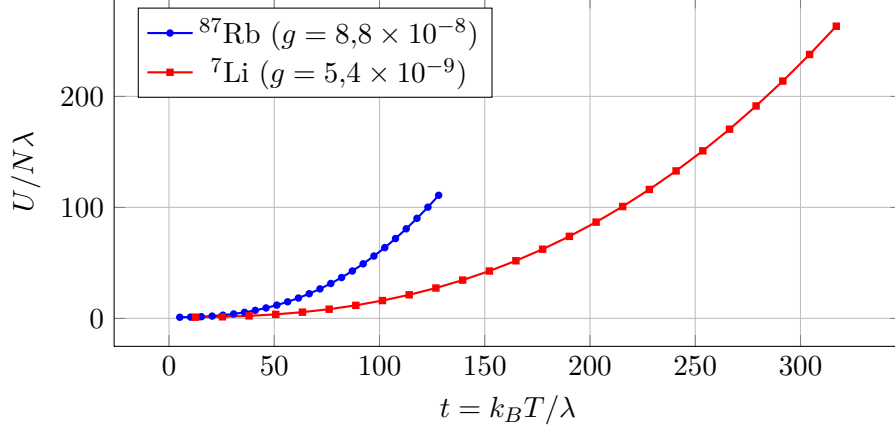
Átomo	$g = na^3$	λ/k_B (nK)	$N_0(0)/N$	t_c	T_c (nK)	T_c^{BEC} (nK)
^{87}Rb	$8,82 \times 10^{-8}$	0,155	0,99955	128,1	19,8	18,3
^7Li	$5,35 \times 10^{-9}$	0,756	0,99989	317,0	240	228

onde $T_c^{\text{BEC}} = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left(\frac{n}{\zeta(3/2)}\right)^{2/3}$ é a temperatura crítica do gás ideal. Alguns valores representativos das curvas:

^{87}Rb			^7Li		
t	$U/N\lambda$	N_0/N	t	$U/N\lambda$	N_0/N
25,6	2,89	0,922	63,4	5,62	0,918
51,2	12,0	0,763	126,8	27,4	0,758
76,9	31,4	0,550	190,2	73,9	0,545
102,5	63,8	0,294	253,6	151	0,291
128,1	111	0	317,0	263	0

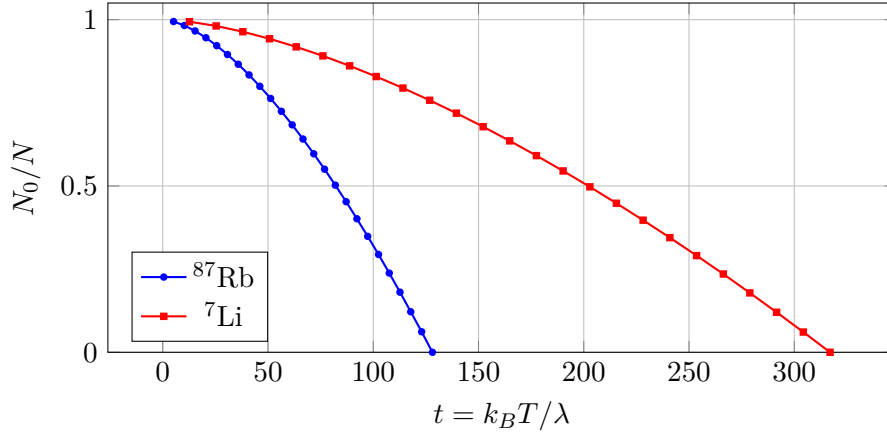
a) Energia interna $U(T)/N\lambda$

A integral $\mathcal{I}_U(t)$ foi calculada por quadratura de Simpson (malha de 4000 pontos, corte em $x_{\max} = 30 + 10\sqrt{t}$, onde o integrando já é desprezível). Como $\sqrt{g} \ll 1$, a curva parte de $E_0/N\lambda \approx 1$ e cresce; em t grande recupera-se o comportamento de gás ideal $U \propto T^{5/2}$ (pois $E_k \rightarrow \varepsilon_k$ domina a integral).



b) Fração condensada $N_0(T)/N$ e estimativa de T_c

Com o mesmo esquema numérico, resolvemos $N_0(t_c) = 0$ por bissecção em t . A depleção quântica em $T = 0$ é minúscula ($4,5 \times 10^{-4}$ para o Rb, $1,1 \times 10^{-4}$ para o Li), de modo que quem esvazia o condensado é a depleção *térmica*.



Os resultados são

$$^{87}\text{Rb}: \quad t_c \approx 128, \quad T_c \approx 20 \text{ nK}; \quad ^7\text{Li}: \quad t_c \approx 317, \quad T_c \approx 240 \text{ nK}.$$

Comentário físico. Ambos os valores ficam *ligeiramente acima* da temperatura crítica do gás ideal na mesma densidade: $T_c/T_c^{\text{BEC}} \approx 1,08$ (Rb) e $\approx 1,05$ (Li). Isso é esperado: em $t \gg 1$ a maioria dos modos excitados tem $\varepsilon_k \gg \lambda$, onde $E_k \approx \varepsilon_k$ e a integral de depleção reproduz a contagem do gás ideal, $N_{\text{exc}}/N \simeq (T/T_c^{\text{BEC}})^{3/2}$; a interação só endurece o espectro em k pequeno ($E_k \approx c\hbar k$, som de Bogolyubov), reduzindo a ocupação térmica desses modos e exigindo T um pouco maior para esvaziar o condensado. O desvio cresce com g , coerente com Rb (g maior) apresentar o maior desvio. Vale a ressalva de que a teoria de Bogolyubov é uma expansão em torno do condensado e deixa de ser quantitativa perto de T_c (onde $N_0 \rightarrow 0$); a estimativa de T_c aqui é, portanto, apenas indicativa — o deslocamento real de T_c com a interação é um problema não perturbativo. O ^7Li tem T_c maior simplesmente por ser ~ 12 vezes mais leve ($T_c^{\text{BEC}} \propto 1/m$), apesar de λ e g menores.

Questão 4 — O modelo de Hubbard de dois sítios

Considere o modelo de Hubbard para dois sítios, 1 e 2, com exatamente dois elétrons: conte os estados do setor, mostre que $[H_{\text{Hub}}, \mathbf{S}] = 0$, construa os estados de spin (singleto/triplete) e as partes espaciais compatíveis com a antissimetria, diagonalize H_{Hub} em cada subespaço, ordene os níveis e analise o limite de Mott $U \gg t$, obtendo o Hamiltoniano efetivo de Heisenberg.

O Hamiltoniano é

$$H_{\text{Hub}} = -t \sum_{\sigma} (c_{1\sigma}^{\dagger} c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^{\dagger} c_{1\sigma}) + U (n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} + n_{2\uparrow} n_{2\downarrow}), \quad n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}.$$

a) Contagem de estados no setor de dois elétrons

Há 4 estados de partícula única disponíveis: (i, σ) com $i = 1, 2$ e $\sigma = \uparrow, \downarrow$. Como os elétrons são férmions idênticos, o setor de dois elétrons é gerado pelos pares distintos desses orbitais,

$$\binom{4}{2} = \frac{4!}{2!2!} = 6.$$

Explicitamente, na notação $c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma'}^{\dagger} |0\rangle$:

$$c_{1\uparrow}^{\dagger} c_{2\uparrow}^{\dagger} |0\rangle, \quad c_{1\downarrow}^{\dagger} c_{2\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, \quad c_{1\uparrow}^{\dagger} c_{2\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, \quad c_{1\downarrow}^{\dagger} c_{2\uparrow}^{\dagger} |0\rangle, \quad c_{1\uparrow}^{\dagger} c_{1\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, \quad c_{2\uparrow}^{\dagger} c_{2\downarrow}^{\dagger} |0\rangle.$$

São, portanto, **6 estados**.

b) $[H_{\text{Hub}}, \mathbf{S}] = 0$ e estados de spin

O spin total é

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

Termo de interação. Cada $n_{i\sigma}$ conta ocupações; escrevendo $\mathbf{S} = \sum_i \mathbf{S}_i$ com $\mathbf{S}_i = \sum_{\alpha\beta} c_{i\alpha}^{\dagger} (\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}/2) c_{i\beta}$, basta notar que $n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = \frac{1}{2} n_i (n_i - 1)$ com $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$ (identidade válida no espaço de Fock fermiônico, pois $n_{i\sigma}^2 = n_{i\sigma}$). Como n_i é o número total de elétrons no sítio i , que é um escalar de spin, $[n_i, \mathbf{S}_j] = 0$ para todos i, j , e o termo de U comuta com $\mathbf{S}$.

Termo cinético. Usando $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$ e as relações canônicas $\{c_{i\alpha}, c_{j\beta}^{\dagger}\} = \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta}$, obtém-se

$$[c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma}, c_{k\alpha}^{\dagger} c_{k\beta}] = \delta_{jk} \delta_{\sigma\alpha} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{k\beta} - \delta_{ik} \delta_{\beta\sigma} c_{k\alpha}^{\dagger} c_{j\sigma}.$$

Logo, para a componente S^a ($a = x, y, z$),

$$\begin{aligned} \left[\sum_{\sigma} c_{1\sigma}^{\dagger} c_{2\sigma}, S^a \right] &= \sum_{\sigma} \sum_{k, \alpha\beta} \frac{\sigma_{\alpha\beta}^a}{2} [c_{1\sigma}^{\dagger} c_{2\sigma}, c_{k\alpha}^{\dagger} c_{k\beta}] \\ &= \sum_{\alpha\beta} \frac{\sigma_{\alpha\beta}^a}{2} (c_{1\alpha}^{\dagger} c_{2\beta} - c_{1\alpha}^{\dagger} c_{2\beta}) = 0, \end{aligned}$$

onde o primeiro termo vem de $k = 2$ (com $\sigma = \alpha$ após a soma) e o segundo de $k = 1$ (com $\sigma = \beta$). O termo hermitiano conjugado se anula da mesma forma. Fisicamente: o *hopping* transporta o elétron sem girar seu spin, de modo que $\mathbf{S}$ é conservado. Portanto $[H_{\text{Hub}}, \mathbf{S}] = 0$, e como $[S^2, S_z] = 0$, $\{H_{\text{Hub}}, S^2, S_z\}$ é um conjunto de operadores que comutam dois a dois. $\square$

Estados de spin. Na notação $|\sigma_1, \sigma_2\rangle$ (spin do elétron 1 e do elétron 2, $\sigma_i = \pm$), a composição de dois spins $1/2$ dá

$$\underbrace{|\chi_{0,0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle - |-, +\rangle)}_{\text{singlete: } S=0, M_S=0} \quad \text{e} \quad \begin{aligned} |\chi_{1,+1}\rangle &= |+, +\rangle, \\ |\chi_{1,0}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle + |-, +\rangle), \\ |\chi_{1,-1}\rangle &= |-, -\rangle, \end{aligned} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\text{triplete: } S=1, M_S=+1,0,-1}$$

Sob a permutação $\sigma_1 \leftrightarrow \sigma_2$, o singlete é **antissimétrico** (troca de sinal) e os três estados do triplete são **simétricos**.

c) Partes espaciais compatíveis com a antissimetria

A função de onda total (espacial $\otimes$ spin) deve ser antissimétrica sob a permutação simultânea dos dois elétrons. Logo:

- **Singlete** (spin antissimétrico) $\Rightarrow$ parte espacial *simétrica*. Com a notação $|i, j\rangle$ (um elétron no sítio i , outro no sítio j), as combinações simétricas são

$$|1, 2\rangle_s \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 2\rangle + |2, 1\rangle), \quad |1, 1\rangle, \quad |2, 2\rangle,$$

ou seja, *3 estados espaciais*, incluindo as duplas ocupações.

- **Triplete** (spin simétrico) $\Rightarrow$ parte espacial *antissimétrica*. A única possibilidade é

$$|1, 2\rangle_a \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 2\rangle - |2, 1\rangle),$$

pois $|i, i\rangle$ é simétrico e não admite versão antissimétrica (é o princípio de Pauli: dois elétrons de spins paralelos não ocupam o mesmo sítio).

Contagem: 3 (singlete, $S = 0$) + 1×3 (uma parte espacial $\times$ três projeções M_S do triplete) = 6 estados, em acordo com o item (a). $\square$

d) Matrizes de H_{Hub} e diagonalização

Em segunda quantização, os seis estados são (fixando a ordem dos operadores para definir os sinais):

$$\begin{aligned} |s_0\rangle &\equiv |1, 2\rangle_s \otimes |\chi_{0,0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger - c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger) |0\rangle, \\ |d_1\rangle &\equiv |1, 1\rangle \otimes |\chi_{0,0}\rangle = c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle, \quad |d_2\rangle \equiv |2, 2\rangle \otimes |\chi_{0,0}\rangle = c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle, \\ |t_{M_S}\rangle &\equiv |1, 2\rangle_a \otimes |\chi_{1,M_S}\rangle, \quad \text{e.g.} \quad |t_{+1}\rangle = c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle. \end{aligned}$$

Subespaço triplete. O termo de U anula os $|t_{M_S}\rangle$ (não há dupla ocupação). O *hopping* tenta criar dupla ocupação com spins paralelos, proibida por Pauli; por exemplo,

$$H_{\text{Hub}} c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle = -t(c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow}^\dagger + c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger) |0\rangle = 0.$$

Logo, em cada setor M_S , a matriz é 1×1 :

$$\boxed{E_t = 0} \quad (\text{três estados degenerados, } M_S = 0, \pm 1).$$

Subespaço singlete. Calculemos a ação do *hopping* sobre $|s_0\rangle$:

$$\begin{aligned} H_t c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &= -t(c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger + c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger) |0\rangle, \\ H_t c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle &= -t(c_{1\downarrow}^\dagger c_{1\uparrow}^\dagger + c_{2\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger) |0\rangle = +t(c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger + c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger) |0\rangle, \end{aligned}$$

(o sinal extra vem da anticomutação). Assim,

$$H_{\text{Hub}} |s_0\rangle = -\sqrt{2}t (|d_1\rangle + |d_2\rangle), \quad H_{\text{Hub}} |d_{1,2}\rangle = U |d_{1,2}\rangle - \sqrt{2}t |s_0\rangle.$$

Na base ordenada $\{|1, 2\rangle_s, |1, 1\rangle, |2, 2\rangle\}$,

$$H_{\text{sing}} = \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{2}t & -\sqrt{2}t \\ -\sqrt{2}t & U & 0 \\ -\sqrt{2}t & 0 & U \end{pmatrix}.$$

A combinação antissimétrica das duplas ocupações, $|d_-\rangle \equiv (|d_1\rangle - |d_2\rangle)/\sqrt{2}$, desacopla:

$$H_{\text{sing}} |d_-\rangle = U |d_-\rangle \implies E_{d_-} = U.$$

No bloco 2×2 restante, gerado por $\{|s_0\rangle, |d_+\rangle \equiv (|d_1\rangle + |d_2\rangle)/\sqrt{2}\}$,

$$H_{2 \times 2} = \begin{pmatrix} 0 & -2t \\ -2t & U \end{pmatrix},$$

cujo polinômio característico $E^2 - UE - 4t^2 = 0$ dá

$$E_{\pm} = \frac{U}{2} \pm \sqrt{\frac{U^2}{4} + 4t^2}.$$

Os autovetores correspondentes são (não normalizados)

$$|\psi_{\pm}\rangle \propto |s_0\rangle + \frac{-E_{\pm}}{2t} |d_+\rangle = |s_0\rangle - \frac{E_{\pm}}{2t} |d_+\rangle;$$

em particular, o estado de menor energia é

$$|\psi_-\rangle = \cos\theta |s_0\rangle + \sin\theta |d_+\rangle, \quad \tan 2\theta = \frac{4t}{U}, \quad 0 \leq \theta < \frac{\pi}{4},$$

com $E_- < 0$ para todo $U \geq 0, t \neq 0$.

Verificação numérica. Para $t = 1, U = 3$: $E_- = 3/2 - \sqrt{9/4 + 4} = 3/2 - 5/2 = -1$, $E_+ = 4$, $E_{d_-} = U = 3$ e $E_t = 0$ (triplete). A diagonalização numérica direta da matriz 6×6 na base de Fock confirma o espectro $\{-1, 0, 0, 0, 3, 4\}$.

e) Ordenação dos níveis

Como $\sqrt{U^2/4 + 4t^2} > U/2$, temos $E_- < 0$ e $E_+ > U$; portanto

$$E_- < \underbrace{E_t = 0}_{\times 3} < \underbrace{E_{d_-} = U} < E_+.$$

O estado fundamental é o singlete $|\psi_-\rangle$ ($S = 0$) e o primeiro estado excitado é o triplete ($S = 1$, triplamente degenerado). O ganho do singlete vem da possibilidade de o elétron “visitar” o sítio vizinho virtualmente — processo vedado ao triplete pelo princípio de Pauli.

f) Limite $U \gg t$: pouca dupla ocupação (isolante de Mott)

A probabilidade de dupla ocupação no estado fundamental é

$$P_{\text{dupla}} = |\langle d_+ | \psi_- \rangle|^2 = \sin^2 \theta.$$

Para $U \gg t$, $\tan 2\theta = 4t/U \ll 1$ implica $\theta \simeq 2t/U$, de modo que

$$P_{\text{dupla}} \simeq \sin^2 \theta \simeq \frac{4t^2}{U^2} \ll 1.$$

Equivalentemente, expandindo o autovetor: $|\psi_- \rangle \simeq |s_0 \rangle + \frac{2t}{U} |d_+ \rangle + \mathcal{O}(t^2/U^2)$. Já o tripleto tem $P_{\text{dupla}} = 0$ *exatamente*. Assim, os dois níveis mais baixos (singleto $|\psi_- \rangle$ e tripleto) têm peso desprezível em configurações duplamente ocupadas: cada elétron fica essencialmente confinado ao seu sítio, com a carga congelada — a caricatura de dois sítios de um **isolante de Mott**. Os estados com dupla ocupação apreciável ($|d_- \rangle$ e $|\psi_+ \rangle$) ficam separados por um gap de ordem U (a “banda de Hubbard superior”). $\square$

g) $\Delta E \equiv J = 4t^2/U$ e o Hamiltoniano de Heisenberg

Expandindo E_- para $t/U \ll 1$,

$$\begin{aligned} E_- &= \frac{U}{2} - \frac{U}{2} \sqrt{1 + \frac{16t^2}{U^2}} = \frac{U}{2} - \frac{U}{2} \left[1 + \frac{8t^2}{U^2} + \mathcal{O}\left(\frac{t^4}{U^4}\right) \right] \\ &= -\frac{4t^2}{U} + \mathcal{O}\left(\frac{t^4}{U^3}\right). \end{aligned}$$

Como $E_t = 0$ exatamente,

$$\Delta E \equiv J = E_t - E_- = \frac{4t^2}{U} > 0$$

(troca *antiferromagnética*), que é justamente o valor obtido em sala pela teoria de perturbação de segunda ordem: o elétron faz uma excursão virtual ao sítio vizinho (amplitude t), paga energia U no estado intermediário duplamente ocupado e retorna, em dois caminhos possíveis ($1 \rightarrow 2 \rightarrow 1$ e $2 \rightarrow 1 \rightarrow 2$), com o fator 2 adicional vindo da estrutura de spin do singleto: $J = 2 \times 2t^2/U = 4t^2/U$.

Mapeamento em Heisenberg. No subespaço dos dois níveis mais baixos, cada sítio carrega um spin $1/2$ localizado. Para dois spins $1/2$,

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2} [S(S+1) - s_1(s_1+1) - s_2(s_2+1)] = \frac{1}{2} S(S+1) - \frac{3}{4} = \begin{cases} -\frac{3}{4}, & S = 0, \\ +\frac{1}{4}, & S = 1. \end{cases}$$

Logo o Hamiltoniano efetivo

$$H_{\text{Heis}} = J \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \text{const.}, \quad J = \frac{4t^2}{U}, \quad \text{const.} = -\frac{J}{4} + \mathcal{O}\left(\frac{t^4}{U^3}\right),$$

reproduz exatamente o espectro de baixa energia:

$$E_{\text{Heis}}(S=0) = -\frac{3J}{4} - \frac{J}{4} = -J = -\frac{4t^2}{U} = E_-, \quad E_{\text{Heis}}(S=1) = \frac{J}{4} - \frac{J}{4} = 0 = E_t,$$

com a degenerescência correta ($1 + 3$). Como $J > 0$, o acoplamento é antiferromagnético e o fundamental é o singleto, em acordo com o item (e). Este é o mecanismo de *superexchange* que faz do modelo de Hubbard em meio preenchimento e $U \gg t$ um antiferromagneto de Heisenberg. $\square$

Questão 5 — Exchange direto

Considere o termo entre sítios $i \neq j$ desprezado no modelo de Hubbard,

$$H_{\text{DE}} = \sum_{ij; \sigma_1 \sigma_2} \langle ij | \hat{V} | ji \rangle a_{i\sigma_1}^\dagger a_{j\sigma_2}^\dagger a_{i\sigma_2} a_{j\sigma_1}, \quad \langle ij | \hat{V} | ji \rangle = \int d^3 r_1 d^3 r_2 \varphi_i^*(\mathbf{r}_1) \varphi_j(\mathbf{r}_1) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \varphi_j^*(\mathbf{r}_2) \varphi_i(\mathbf{r}_2) \equiv J_{ij}^{\text{DE}}.$$

(a) Mostre que J_{ij}^{DE} é real e positivo. (b) No subespaço de ocupação simples, mostre que H_{DE} é um Heisenberg ferromagnético.

a) J_{ij}^{DE} é real e positivo

Definindo a distribuição de carga *complexa*

$$\rho_{ij}(\mathbf{r}) \equiv \varphi_i(\mathbf{r}) \varphi_j^*(\mathbf{r}),$$

a integral de exchange é exatamente a auto-interação coulombiana dessa distribuição:

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

pois $\rho_{ij}^*(\mathbf{r}_1) = \varphi_i^*(\mathbf{r}_1) \varphi_j(\mathbf{r}_1)$ e $\rho_{ij}(\mathbf{r}_2) = \varphi_i(\mathbf{r}_2) \varphi_j^*(\mathbf{r}_2)$, reproduzindo o integrando do enunciado.

Introduzimos as transformadas de Fourier

$$\rho_{ij}(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \tilde{\rho}_{ij}(\mathbf{k}), \quad \tilde{\rho}_{ij}(\mathbf{k}) = \int d^3 r e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \rho_{ij}(\mathbf{r}),$$

e usamos a transformada do potencial de Coulomb,

$$\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = e^2 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{k^2} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)},$$

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

$$\begin{aligned} J_{ij} &= e^2 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{k^2} \left[\int d^3 r_1 \rho_{ij}^*(\mathbf{r}_1) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1} \right] \left[\int d^3 r_2 \rho_{ij}(\mathbf{r}_2) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_2} \right] \\ &= e^2 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{k^2} \tilde{\rho}_{ij}^*(\mathbf{k}) \tilde{\rho}_{ij}(\mathbf{k}) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2}{k^2} |\tilde{\rho}_{ij}(\mathbf{k})|^2, \end{aligned}$$

onde reconhecemos, na primeira linha, que a integral em $\mathbf{r}_1$ é $[\tilde{\rho}_{ij}(\mathbf{k})]^*$ e a integral em $\mathbf{r}_2$ é $\tilde{\rho}_{ij}(\mathbf{k})$.

O integrando final, $(4\pi e^2/k^2) |\tilde{\rho}_{ij}(\mathbf{k})|^2$, é manifestamente real e não negativo para todo $\mathbf{k}$. Logo

$$J_{ij}^{\text{DE}} = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2}{k^2} |\tilde{\rho}_{ij}(\mathbf{k})|^2 \geq 0,$$

com igualdade apenas se $\tilde{\rho}_{ij} \equiv 0$, isto é, se os orbitais φ_i e φ_j não se superpõem em lugar nenhum. Para orbitais com superposição não nula, $J_{ij}^{\text{DE}} > 0$ estritamente. $\square$

b) Heisenberg ferromagnético no subespaço de ocupação simples

Trabalhamos com a soma de spins na forma

$$\Theta_{ij} \equiv \sum_{\sigma_1 \sigma_2} a_{i\sigma_1}^\dagger a_{j\sigma_2}^\dagger a_{i\sigma_2} a_{j\sigma_1}, \quad i \neq j.$$

Como $i \neq j$, os operadores $a_{j\sigma_2}^\dagger$ e $a_{i\sigma_2}$ anticomutam ($\{a_{j\sigma_2}^\dagger, a_{i\sigma_2}\} = 0$), de modo que podemos reagrupá-los em blocos de mesmo sítio ao custo de um sinal:

$$\Theta_{ij} = - \sum_{\sigma_1 \sigma_2} a_{i\sigma_1}^\dagger a_{i\sigma_2} a_{j\sigma_2}^\dagger a_{j\sigma_1}.$$

Para reescrever a soma em operadores de spin, usamos a identidade de completeza (Fierz) das matrizes de Pauli,

$$\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\gamma\delta} = 2 \delta_{\alpha\delta} \delta_{\gamma\beta} - \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} \implies \delta_{\alpha\delta} \delta_{\gamma\beta} = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta}),$$

que se verifica diretamente: $\{\mathbf{1}, \sigma^x, \sigma^y, \sigma^z\}$ é uma base ortogonal das matrizes 2×2 com produto interno $\text{Tr}(A^\dagger B)$, e a identidade acima é a resolução da identidade nessa base.

Escrevendo Θ_{ij} com quatro índices de spin livres e as deltas que implementam as contrações σ_2 e σ_1 ,

$$\begin{aligned} -\Theta_{ij} &= \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (a_{i\alpha}^\dagger a_{i\beta}) (a_{j\gamma}^\dagger a_{j\delta}) \delta_{\beta\gamma} \delta_{\delta\alpha} \\ &= \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (a_{i\alpha}^\dagger a_{i\beta}) (a_{j\gamma}^\dagger a_{j\delta}) \frac{1}{2} (\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta}) \\ &= \frac{1}{2} \left(\sum_{\alpha\beta} a_{i\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} a_{i\beta} \right) \cdot \left(\sum_{\gamma\delta} a_{j\gamma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\gamma\delta} a_{j\delta} \right) + \frac{1}{2} \left(\sum_{\alpha} a_{i\alpha}^\dagger a_{i\alpha} \right) \left(\sum_{\gamma} a_{j\gamma}^\dagger a_{j\gamma} \right) \\ &= \frac{1}{2} (2\mathbf{S}_i) \cdot (2\mathbf{S}_j) + \frac{1}{2} n_i n_j = 2\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{1}{2} n_i n_j, \end{aligned}$$

onde usamos as definições

$$\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} a_{i\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} a_{i\beta}, \quad n_i = \sum_{\alpha} a_{i\alpha}^\dagger a_{i\alpha}.$$

Portanto,

$$\boxed{\sum_{\sigma_1 \sigma_2} a_{i\sigma_1}^\dagger a_{j\sigma_2}^\dagger a_{i\sigma_2} a_{j\sigma_1} = - \left(2\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{1}{2} n_i n_j \right).}$$

No subespaço de ocupação simples, $n_i = n_j = 1$ em todo sítio, e o Hamiltoniano de exchange direto fica

$$H_{\text{DE}} = \sum_{ij} J_{ij}^{\text{DE}} \Theta_{ij} = -2 \sum_{ij} J_{ij}^{\text{DE}} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij}^{\text{DE}},$$

isto é, um Hamiltoniano de Heisenberg

$$H_{\text{DE}} = -2 \sum_{ij} J_{ij}^{\text{DE}} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \text{const.},$$

com acoplamento $-2J_{ij}^{\text{DE}} < 0$, já que provamos no item (a) que $J_{ij}^{\text{DE}} > 0$. Acoplamento negativo em $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ favorece spins *paralelos*: o exchange direto é *ferromagnético*. Fisicamente, o sinal vem da anticomutação dos férmions (o sinal “−” gerado ao reordenar os operadores), combinada com a positividade da auto-interação coulombiana — é a regra de Hund entre sítios. $\square$

Questão 6 — Representação de Jordan–Wigner

Em $D = 1$ e para $S = 1/2$, considere

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

(a) Mostre que satisfazem todas as regras de anticomutação fermiônicas e que $d_l^\dagger d_l = \frac{1}{2} + S_{lz}$. (b) Escreva o modelo XY em $D = 1$ em férmions de Jordan–Wigner e ache o espectro; comente os casos $J_x = J_y$ (XX) e $J_y = 0$ (Ising); escreva o Heisenberg como férmions sem spin interagentes.

a) Regras de anticomutação

Notação e propriedades da string. Defina o operador número local e a *string* de Jordan–Wigner

$$n_k \equiv \frac{1}{2} + S_{kz} \quad (\text{autovalores } 0 \text{ e } 1), \quad K_l \equiv \exp\left(i\pi \sum_{k<l} n_k\right) = \prod_{k<l} e^{i\pi n_k},$$

de modo que $d_l = K_l S_l^-$ e $d_l^\dagger = K_l^\dagger S_l^+$. Precisaremos de três fatos elementares:

(i) Como n_k tem autovalores inteiros (0 ou 1),

$$e^{i\pi n_k} = 1 - 2n_k = -2S_{kz},$$

que é hermitiano e unitário: $(e^{i\pi n_k})^\dagger = e^{-i\pi n_k} = e^{i\pi n_k}$ e $(e^{i\pi n_k})^2 = 1$. Em particular $K_l^\dagger = K_l$, $K_l^2 = 1$, e podemos trocar livremente $K_l \leftrightarrow K_l^\dagger$.

(ii) No mesmo sítio, o fator $e^{i\pi n_k}$ anticomuta com $S_k^\pm$. De fato, $S_k^\pm$ muda n_k de uma unidade, $e^{i\pi n_k} S_k^\pm = S_k^\pm e^{i\pi(n_k \pm 1)}$, logo

$$e^{i\pi n_k} S_k^\pm = -S_k^\pm e^{i\pi n_k}.$$

(Verificação direta com $e^{i\pi n_k} = -2S_{kz}$: $-2S_{kz} S_k^\pm = \mp S_k^\pm$ e $-2S_k^\pm S_{kz} = \pm S_k^\pm$, pois $S_{kz} S_k^\pm = S_k^\pm (S_{kz} \pm 1)$ e, para $S = 1/2$, $S_{kz} S_k^+ = \frac{1}{2} S_k^+$, $S_k^+ S_{kz} = -\frac{1}{2} S_k^+$.)

(iii) Operadores de spin em sítios diferentes comutam. Em particular, K_l (que só envolve sítios $k < l$) comuta com $S_l^\pm$, S_{lz} e com qualquer operador em sítios $\geq l$.

Mesmo sítio. Usando (iii), K_l comuta com $S_l^\pm$, e usando (i), $K_l^\dagger K_l = K_l K_l^\dagger = 1$. Logo

$$d_l^\dagger d_l = K_l^\dagger S_l^+ K_l S_l^- = K_l^\dagger K_l S_l^+ S_l^- = S_l^+ S_l^-, \quad d_l d_l^\dagger = S_l^- S_l^+.$$

Para $S = 1/2$, na base $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$, $S^+ S^- = \frac{1}{2} + S_z$ e $S^- S^+ = \frac{1}{2} - S_z$. Portanto

$$\boxed{d_l^\dagger d_l = \frac{1}{2} + S_{lz}} \quad \text{e} \quad \{d_l, d_l^\dagger\} = S_l^+ S_l^- + S_l^- S_l^+ = 1.$$

Além disso,

$$d_l^2 = K_l S_l^- K_l S_l^- = K_l^2 (S_l^-)^2 = 0, \quad (d_l^\dagger)^2 = (S_l^+)^2 (K_l^\dagger)^2 = 0,$$

pois $(S_l^\pm)^2 = 0$ para spin 1/2. Assim $\{d_l, d_l\} = \{d_l^\dagger, d_l^\dagger\} = 0$ no mesmo sítio, e a identificação $|\uparrow\rangle \rightarrow |n_d = 1\rangle$, $|\downarrow\rangle \rightarrow |n_d = 0\rangle$ é consistente.

Sítios diferentes ($l < l'$): aqui a string é essencial. Sem a string, S_l^- e $S_{l'}^-$ comutariam; vamos ver como as exponenciais convertem comutação em anticomutação. Para $l < l'$, escreva

$$K_{l'} = K_l U, \quad U \equiv \prod_{k=l}^{l'-1} e^{i\pi n_k},$$

onde U contém, em particular, o fator $e^{i\pi n_l}$ do sítio l . Pelos fatos (ii) e (iii),

$$S_l^- U = -U S_l^-, \quad S_l^+ U = -U S_l^+,$$

pois $S_l^\pm$ anticomuta com o fator $e^{i\pi n_l}$ de U e comuta com todos os outros. Além disso, K_l e U comutam com tudo que vive em sítios $\geq l'$, e K_l comuta com $S_l^\pm$.

(1) $\{d_l, d_{l'}\} = 0$. Calculamos os dois produtos:

$$\begin{aligned} d_l d_{l'} &= K_l S_l^- K_l U S_{l'}^- = K_l^2 S_l^- U S_{l'}^- = -U S_l^- S_{l'}^-, \\ d_{l'} d_l &= K_l U S_{l'}^- K_l S_l^- = K_l^2 U S_{l'}^- S_l^- = +U S_l^- S_{l'}^-, \end{aligned}$$

onde usamos: S_l^- comuta com K_l (sítios $k < l$); $K_l^2 = \mathbb{1}$; $S_l^- U = -U S_l^-$ na primeira linha; $S_{l'}^-$ comuta com K_l , U e S_l^- (sítios distintos) na segunda. Somando,

$$\{d_l, d_{l'}\} = -U S_l^- S_{l'}^- + U S_l^- S_{l'}^- = 0.$$

O sinal relativo veio *exclusivamente* do fator $e^{i\pi n_l}$ contido na string de $d_{l'}$: é ele que “muda a estatística”.

(2) $\{d_l^\dagger, d_{l'}^\dagger\} = 0$. Segue tomando o adjunto de (1): $\{d_l^\dagger, d_{l'}^\dagger\} = \{d_{l'}, d_l\}^\dagger = 0$.

(3) $\{d_l, d_{l'}^\dagger\} = 0$ para $l \neq l'$. Ainda com $l < l'$ (o caso $l > l'$ é o adjunto deste),

$$\begin{aligned} d_l d_{l'}^\dagger &= K_l S_l^- U K_l S_{l'}^+ = K_l^2 S_l^- U S_{l'}^+ = -U S_l^- S_{l'}^+, \\ d_{l'}^\dagger d_l &= U K_l S_{l'}^+ K_l S_l^- = K_l^2 U S_{l'}^+ S_l^- = +U S_l^- S_{l'}^+, \end{aligned}$$

usando $K_{l'}^\dagger = K_{l'} = K_l U = U K_l$ (todos os fatores $e^{i\pi n_k}$ comutam entre si) e novamente $S_l^- U = -U S_l^-$, $[S_l^-, S_{l'}^+] = 0$. Logo

$$\{d_l, d_{l'}^\dagger\} = 0 \quad (l \neq l').$$

Reunindo tudo:

$$\boxed{\{d_l, d_{l'}^\dagger\} = \delta_{ll'} \mathbb{1}, \quad \{d_l, d_{l'}\} = \{d_l^\dagger, d_{l'}^\dagger\} = 0}$$

para todos os pares l, l' : os d_l são operadores de férmions genuínos, com $d_l^\dagger d_l = \frac{1}{2} + S_{lz}$. $\square$

b) Modelo XY em $D = 1$

Reescrita em $S^\pm$. Com $S_x = \frac{1}{2}(S^+ + S^-)$ e $S_y = \frac{1}{2i}(S^+ - S^-)$,

$$J_x S_{ix} S_{(i+1)x} + J_y S_{iy} S_{(i+1)y} = \frac{J_x + J_y}{4} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) + \frac{J_x - J_y}{4} (S_i^+ S_{i+1}^+ + S_i^- S_{i+1}^-).$$

Passagem a férmions de Jordan–Wigner. Invertendo o item (a): $S_l^+ = K_l d_l^\dagger$ e $S_l^- = K_l d_l$ (usando $K_l^\dagger = K_l$ e $[K_l, S_l^\pm] = 0$). Para primeiros vizinhos, $K_{l+1} = K_l e^{i\pi n_l}$ e as strings quase se cancelam:

$$S_l^+ S_{l+1}^- = K_l d_l^\dagger K_l e^{i\pi n_l} d_{l+1} = d_l^\dagger e^{i\pi n_l} d_{l+1} = d_l^\dagger (\mathbb{1} - 2d_l^\dagger d_l) d_{l+1} = d_l^\dagger d_{l+1},$$

pois $K_l^2 = \mathbb{1}$, K_l comuta com os operadores dos sítios $l, l+1$, e $d_l^\dagger d_l^\dagger d_l = 0$. Analogamente,

$$S_l^+ S_{l+1}^+ = d_l^\dagger e^{i\pi n_l} d_{l+1}^\dagger = d_l^\dagger d_{l+1}^\dagger, \quad S_l^- S_{l+1}^- = d_{l+1} d_l = -d_l d_{l+1},$$

(no primeiro caso $d_l^\dagger e^{i\pi n_l} = d_l^\dagger$ pela mesma razão; o segundo é o adjunto do primeiro). Assim, os termos de string desaparecem para acoplamentos de primeiros vizinhos e

$$H_{XY} = \sum_l \left[\frac{J_x + J_y}{4} (d_l^\dagger d_{l+1} + d_{l+1}^\dagger d_l) + \frac{J_x - J_y}{4} (d_l^\dagger d_{l+1}^\dagger + d_{l+1} d_l) \right] :$$

um problema *quadrático* de férmions sem spin, com salto e com termos de “emparelhamento” tipo BCS gerados pela anisotropia $J_x \neq J_y$.

Fourier. Com $d_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikl} d_k$ (rede de N sítios, espaçamento $a = 1$, condições periódicas; ignoramos o efeito de borda da string, subdominante em $N \rightarrow \infty$):

$$\begin{aligned} \sum_l (d_l^\dagger d_{l+1} + \text{h.c.}) &= \sum_k 2 \cos k d_k^\dagger d_k, \\ \sum_l d_l^\dagger d_{l+1}^\dagger &= \sum_k e^{ik} d_k^\dagger d_{-k}^\dagger = \sum_k i \sin k d_k^\dagger d_{-k}^\dagger, \end{aligned}$$

onde na última igualdade usamos que $d_k^\dagger d_{-k}^\dagger$ é *ímpar* sob $k \rightarrow -k$, de modo que só a parte ímpar $i \sin k$ de e^{ik} sobrevive. Portanto

$$H_{XY} = \sum_k \epsilon_k d_k^\dagger d_k + \sum_k \frac{J_x - J_y}{4} \left(i \sin k d_k^\dagger d_{-k}^\dagger - i \sin k d_{-k} d_k \right), \quad \epsilon_k \equiv \frac{J_x + J_y}{2} \cos k.$$

Transformação de gauge. O emparelhamento tem amplitude *imaginária pura*. Fazendo a transformação de gauge (independente de k)

$$d_k \rightarrow e^{i\pi/4} d_k, \quad d_k^\dagger \rightarrow e^{-i\pi/4} d_k^\dagger,$$

o termo de salto é invariante, enquanto $d_k^\dagger d_{-k}^\dagger \rightarrow e^{-i\pi/2} d_k^\dagger d_{-k}^\dagger = -i d_k^\dagger d_{-k}^\dagger$, e o Hamiltoniano fica com coeficientes reais. Agrupando k e $-k$ ($k > 0$):

$$H_{XY} = \sum_{k>0} \left[\epsilon_k (d_k^\dagger d_k + d_{-k}^\dagger d_{-k}) + \Delta_k (d_k^\dagger d_{-k}^\dagger + d_{-k} d_k) \right], \quad \Delta_k \equiv \frac{J_x - J_y}{2} \sin k.$$

Transformação de Bogoliubov. Este é exatamente o problema de Bogoliubov fermiônico das listas anteriores. Definindo

$$\gamma_k = u_k d_k - v_k d_{-k}^\dagger, \quad \gamma_{-k} = u_k d_{-k} + v_k d_k^\dagger, \quad u_k^2 + v_k^2 = 1,$$

com $u_k = \cos \theta_k$, $v_k = \sin \theta_k$ e $\tan(2\theta_k) = \Delta_k / \epsilon_k$, os termos anômalos são eliminados e

$$H_{XY} = \sum_k E_k \left(\gamma_k^\dagger \gamma_k - \frac{1}{2} \right),$$

com o espectro de quasipartículas

$$E_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta_k^2} = \frac{1}{2} \sqrt{(J_x + J_y)^2 \cos^2 k + (J_x - J_y)^2 \sin^2 k}.$$

Casos particulares. (i) $J_x = J_y = J$ (modelo XX). O emparelhamento desaparece, $\Delta_k = 0$, e o Hamiltoniano já é diagonal *sem* Bogoliubov:

$$H_{XX} = \sum_k J \cos k \, d_k^\dagger d_k, \quad E_k = |J \cos k|.$$

São *férmions livres* com relação de dispersão $J \cos k$; o número de férmions $\sum_l n_l = \sum_l (\frac{1}{2} + S_{lz})$ é conservado (o modelo XX conserva S_{tot}^z). No setor $S_{\text{tot}}^z = 0$ a banda está semi-cheia, o “mar de Fermi” tem níveis ocupados até $\cos k = 0$, e as excitações partícula-buraco em torno dos pontos de Fermi $k_F = \pm\pi/2$ custam energia arbitrariamente pequena: o espectro é *sem gap* (criticalidade da cadeia XX).

(ii) $J_y = 0$ (modelo de Ising). Aqui $\epsilon_k = \frac{J_x}{2} \cos k$ e $\Delta_k = \frac{J_x}{2} \sin k$, logo

$$E_k = \frac{|J_x|}{2} \sqrt{\cos^2 k + \sin^2 k} = \frac{|J_x|}{2},$$

uma banda *plana*: as excitações são sem dispersão e há um *gap* $|J_x|/2$. Isso é o esperado para o Ising $J_x S_{ix} S_{(i+1)x}$ sem campo transverso: os autoestados são produtos de autoestados de S_x , o estado fundamental (duplamente degenerado) tem todos os spins alinhados em $\pm x$, e virar a orientação relativa de um elo custa energia fixa — as excitações elementares (paredes de domínio) são estáticas, sem termo cinético que as faça propagar.

Heisenberg como férmions interagentes. Acrescentando o termo $J_z \sum_l S_{lz} S_{(l+1)z}$ ao caso $J_x = J_y = J$ obtemos o modelo de Heisenberg (XXZ em geral). Como $S_{lz} = d_l^\dagger d_l - \frac{1}{2} = n_l - \frac{1}{2}$ envolve apenas operadores locais, não há strings:

$$J_z \sum_l S_{lz} S_{(l+1)z} = J_z \sum_l \left(n_l - \frac{1}{2}\right) \left(n_{l+1} - \frac{1}{2}\right) = J_z \sum_l n_l n_{l+1} - J_z \sum_l n_l + \frac{J_z N}{4}.$$

Portanto,

$$H_{\text{Heis}} = \sum_l \left[\frac{J}{2} (d_l^\dagger d_{l+1} + d_{l+1}^\dagger d_l) + J_z n_l n_{l+1} - J_z n_l \right] + \frac{J_z N}{4} :$$

férmions sem spin com salto de primeiros vizinhos, um potencial químico $-J_z$ e, crucialmente, uma *interação* densidade–densidade $J_z n_l n_{l+1}$ entre primeiros vizinhos. Ao contrário do XY, o Heisenberg não é um problema quadrático: é um gás de férmions *interagentes* (em $D = 1$, solúvel por ansatz de Bethe, mas não por uma simples transformação de Bogoliubov). $\square$