

Lista 3 de FI-193

1. Quebra espontânea de simetria. Mostre que o spin total $\mathbf{S}_T \equiv \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i$ comuta com o Hamiltoniano de Heisenberg, seja ele FM ou AFM, e portanto é uma constante do movimento. No caso FM, este é o parâmetro de ordem (a magnetização total, que é proporcional ao spin total). Logo, um estado em que esse observável não dependa do tempo, como quando há uma magnetização líquida e quebra espontânea de simetria, não é tão surpreendente. Entretanto, mostre que a magnetização alternada (“staggered”), que é o parâmetro de ordem AFM, $\mathbf{M}_N \propto \sum_{i=1}^N e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_i} \mathbf{S}_i$, onde $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)$ para uma rede cúbica, **não** comuta com o Hamiltoniano de Heisenberg AFM e **não** é uma constante do movimento. No entanto, no estado AFM, há quebra espontânea de simetria e a magnetização alternada pode ser considerada como sendo constante no tempo: isso é muito surpreendente e não trivial. Na verdade, no estado ordenado AFM de um sistema finito de N sítios a magnetização alternada gira com um período muito grande $\propto N$. Esse período diverge no limite termodinâmico. Esse é um ponto sutil no cerne da teoria de quebra espontânea de simetria, que envolve uma compreensão cuidadosa do processo de tomada do limite termodinâmico na presença de um termo infinitesimal de quebra de simetria. Uma discussão cuidadosa (e uma das primeiras da literatura), na linguagem de ondas de spin, pode ser encontrada no artigo original de P. W. Anderson, Phys. Rev. **86**, 694 (1952).

2. Ondas de spin antiferromagnéticas. Imagine que o “vácuo” do modelo de Heisenberg antiferromagnético (AFM) é o *estado de Néel*, onde todos os spins S de uma sub-rede (trabalhe numa rede hiper-cúbica em D dimensões) têm o valor máximo positivo de S_z ($m = S$) e todos os spins da outra sub-rede têm o valor máximo negativo ($m = -S$).

(a) Usando a representação de Holstein-Primakoff, escreva o Hamiltoniano em termos de bósons. Considere definir bósons diferentes para cada sub-rede, e.g., a_i e b_i . Expanda até a ordem em S que corresponde à ordem quadrática em operadores de criação e destruição e obtenha o Hamiltoniano efetivo para um pequeno número de “desvios” do estado de Néel, como feito no caso ferromagnético.

(b) Diagonalize o Hamiltoniano do item (i) através de uma transformação de Bogoliubov e obtenha a lei de dispersão de mágnons AFM. Expanda para pequenos valores de $\mathbf{k}$ e compare com o resultado para mágnons FM.

(c) Escreva as expressões da energia do estado fundamental e da magnetização das sub-redes (deixe a resposta em termos de integrais *adimensionais*). Mostre que para $D = 1$, a correção para a magnetização diverge, indicando a perda da validade da aproximação (e sugerindo a ausência de magnetização de sub-rede em $D = 1$, o que de fato acontece), enquanto que as correções são finitas para $D = 2, 3$ (os valores são razoavelmente próximos dos valores reais, obtidos numericamente).

(d) Mostre que as correções para a magnetização *à temperatura finita* divergem para $D = 1, 2$, em concordância com o teorema de Mermin-Wagner-Hohenberg. Justifique mostrando que as condições de validade do teorema são de fato satisfeitas.

(e) Calcule a dependência do calor específico e da magnetização com a temperatura para baixas temperaturas em $D = 3$.

3. Diagonalização do modelo de Fano-Anderson. O modelo não-interagente de Fano-Anderson descreve uma banda de elétrons de condução destruídos por $c_{\mathbf{k},\sigma}$ cujos estados podem hibridizar com um nível localizado de energia ϵ_f com amplitude de probabilidade V . Ele pode ser visto como o modelo de impureza de Anderson não interagente. Seu Hamiltoniano é dado por

$$H_{\text{FA}} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + \epsilon_f \sum_{\sigma} f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} V \left(c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger f_{\sigma} + f_{\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \right), \quad (1)$$

onde os elétrons no nível localizado são destruídos por f_{σ} e $\epsilon_{\mathbf{k}}$ é a dispersão da banda de condução. Quando diagonalizado, o modelo pode ser escrito na forma

$$H_{\text{FA}} = \sum_{n,\sigma} E_n d_{n,\sigma}^\dagger d_{n,\sigma}, \quad (2)$$

onde E_n são os auto-valores de energia e $d_{n,\sigma}$ destrói elétrons nos auto-estados correspondentes.

(a) Os estados criados por $d_{n\sigma}^\dagger$ são combinações lineares dos estados criados por $c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ e $f_{\sigma}^\dagger$. Portanto, podemos escrever

$$d_n^\dagger = A_n f^\dagger + \sum_{\mathbf{k}} B_{n,\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad (3)$$

onde A_n e $B_{n,\mathbf{k}}$ são coeficientes a serem determinados e deixamos de escrever o rótulo de spin σ por simplicidade, já que um setor de spin se desacopla do outro. Tomando comutadores de cada lado da Eq. (3) com as Eqs. (1) e (2),

mostre que os coeficientes procurados satisfazem as equações acopladas

$$\begin{aligned} E_n A_n &= \epsilon_f A_n + V \sum_{\mathbf{k}} B_{n,\mathbf{k}}, \\ E_n B_{n,\mathbf{k}} &= V A_n + \epsilon_{\mathbf{k}} B_{n,\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (4)$$

Levando uma na outra obtemos a equação que os auto-valores de energia devem satisfazer

$$E_n = \epsilon_f - V^2 \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}} - E_n} \right). \quad (5)$$

(b) Vamos fazer uma simplificação e tomar os momentos dos elétrons como escalares igualmente espaçados $\epsilon_k = \delta k$, $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, onde δ é o espaçamento entre níveis e k é um inteiro qualquer (não vamos nos preocupar nesse momento com os limites da banda). Isso garante que não haja degenerescências no (quase-)contínuo da banda de condução, o que complicaria um pouco a análise. Assim, a Eq. (5) fica

$$E_n = \epsilon_f - V^2 \sum_{k \in \mathbb{Z}} \left(\frac{1}{\epsilon_k - E_n} \right). \quad (6)$$

Use a soma infinita

$$S(a) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \frac{1}{k - a} = -\pi \cot(\pi a),$$

e mostre que

$$E_n = \epsilon_f + \Delta \cot(\pi E_n / \delta), \quad (7)$$

onde

$$\Delta \equiv \frac{\pi V^2}{\delta}.$$

(c) Como o estado de energia ϵ_f é adicionado a um (quase-)contínuo de estados de condução, os auto-valores de energia correspondem a apenas pequenas modificações de cada estado k da banda de condução ϵ_k . Podemos, portanto, usar o rótulo k no lugar do rótulo n e escrever

$$E_k = \epsilon_k + \Delta \epsilon_k = \delta k + \delta \frac{\phi_k}{\pi} = \delta \left(k + \frac{\phi_k}{\pi} \right), \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (8)$$

onde parametrizamos o pequeno deslocamento de energia através de uma defasagem dependente de k , ϕ_k . É como se cada inteiro k fosse deslocado por ϕ_k/π . Assim, a Eq. (7) nos dá

$$E_k = \epsilon_f + \Delta \cot(k\pi + \phi_k) = \epsilon_f + \Delta \cot(\phi_k). \quad (9)$$

A energia do estado fundamental a $T = 0$ é dada por

$$E^{(0)} = 2 \sum_k E_k \Theta(-E_k), \quad (10)$$

onde o fator de 2 vem da degenerescência de spin e a função teta de Heaviside garante que somemos apenas até a energia de Fermi (potencial químico), aqui tomado em zero. Assim, podemos voltar ao contínuo de energias e escrever

$$\begin{aligned} E^{(0)} &= 2 \sum_k E_k \Theta(-E_k) \\ &= \frac{2}{\delta} \int d\epsilon E \Theta(-E). \\ &= \frac{2}{\delta} \int dE E \frac{d\epsilon}{dE} \Theta(-E). \end{aligned} \quad (11)$$

Use as Eqs. (7) e (8) (podem ignorar os rótulos n ou k já que voltamos para o contínuo) para mostrar que

$$\frac{d\epsilon}{dE} = 1 + \delta \frac{\Delta/\pi}{(E - \epsilon_f)^2 + \Delta^2}. \quad (12)$$

Finalmente, integre a Eq. (11) entre $-D$ e D (recuperando os limites da banda) e obtenha a expressão da energia do estado fundamental

$$E^{(0)} = -\rho_0 D^2 + \frac{2\Delta}{\pi} \left\{ \frac{1}{2} \ln \left[\frac{\epsilon_f^2 + \Delta^2}{(D + \epsilon_f)^2 + \Delta^2} \right] + \frac{\epsilon_f}{\Delta} \left[\arctan \left(\frac{D + \epsilon_f}{\Delta} \right) - \arctan \left(\frac{\epsilon_f}{\Delta} \right) \right] \right\}, \quad (13)$$

onde usamos que a densidade de estados da banda de condução é constante e igual a $\rho_0 = 1/\delta$. Mostre que, se $\epsilon_f > 0$ e $D \gg \epsilon_f, \Delta$ (limite de banda larga),

$$E^{(0)} \approx -\rho_0 D^2 + \frac{2\Delta}{\pi} \left\{ \ln \left[\frac{\sqrt{\epsilon_f^2 + \Delta^2}}{D} \right] + \frac{\epsilon_f}{\Delta} \arctan \left(\frac{\Delta}{\epsilon_f} \right) \right\}. \quad (14)$$

Note que

$$\rho_0(\epsilon) d\epsilon = \rho(E) dE \Rightarrow \rho(E) = \rho_0(\epsilon) \frac{d\epsilon}{dE} = \rho_0 \left[1 + \delta \frac{\Delta/\pi}{(E - \epsilon_f)^2 + \Delta^2} \right] = \rho_0 + \frac{\Delta/\pi}{(E - \epsilon_f)^2 + \Delta^2}. \quad (15)$$

A densidade de estados total é a soma da densidade de estados original e uma ressonância de forma Lorentziana centrada em ϵ_f de largura $\Delta = \pi\rho_0 V^2$.

(d) Usando o teorema de Hellman-Feynman, mostre que o valor médio da ocupação do nível localizado no estado fundamental é

$$\langle n_f \rangle = \frac{2}{\pi} \arctan \left(\frac{\Delta}{\epsilon_f} \right).$$

4. Formação de momentos localizados. a teoria de campo médio do modelo de impureza de Anderson. O Hamiltoniano de campo médio para o modelo de impureza de Anderson é

$$H_{\text{And-MF}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_{f\sigma} f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} V \left(c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger f_{\sigma} + f_{\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} \right), \quad (16)$$

onde

$$\epsilon_{f\sigma} = \epsilon_f + U \langle n_{f-\sigma} \rangle. \quad (17)$$

(a) As equações de auto-consistência são facilmente obtidas usando o resultado do problema anterior **adaptado pro caso acima em que as energias dos orbitais nos dois setores de spins são diferentes**. Mostre que a ocupação média e a magnetização do orbital localizado são dadas por

$$n \equiv \langle n_f \rangle = \sum_{\sigma} \langle n_{f\sigma} \rangle = \frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \text{arccot} \left(\frac{\epsilon_{f\sigma}}{\Delta} \right), \quad (18)$$

$$m \equiv \langle m_f \rangle = \sum_{\sigma} \sigma \langle n_{f\sigma} \rangle = \frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \sigma \text{arccot} \left(\frac{\epsilon_{f\sigma}}{\Delta} \right), \quad (19)$$

onde Δ foi definido no problema anterior.

(b) Mostre que

$$\begin{aligned} \langle n_{f\uparrow} \rangle &= \frac{1}{2} (n + m), \\ \langle n_{f\downarrow} \rangle &= \frac{1}{2} (n - m), \end{aligned}$$

e que, portanto

$$\epsilon_{f\sigma} = \epsilon_f + \frac{U}{2} (n + \sigma m). \quad (20)$$

A linha de transição em que há a formação de momento localizado é definida pelo valor crítico da interação U_c onde $m \rightarrow 0^+$. Analise esse limite nas equações de auto-consistência e obtenha a expressão paramétrica pra linha de transição

$$\epsilon_f + \frac{U_c n}{2} = \Delta \cot\left(\frac{\pi n}{2}\right), \quad (21)$$

$$\frac{\pi \Delta}{U_c} = \sin^2\left(\frac{\pi n}{2}\right). \quad (22)$$

Plote num gráfico de $\epsilon_f + U/2$ versus U/Δ a linha crítica U_c variando parametricamente n e identifique a região de momentos localizados estáveis. Compare com a curva mostrada na aula.