

FI-193 – Lista 3

Soluções

Questão 01 — Quebra espontânea de simetria

Mostrar que o spin total $\mathbf{S}_T = \sum_i \mathbf{S}_i$ comuta com o Hamiltoniano de Heisenberg (FM ou AFM), mas que a magnetização alternada $\mathbf{M}_N \propto \sum_i e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_i} \mathbf{S}_i$, com $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)$, não comuta com o Hamiltoniano AFM; discutir por que, ainda assim, ela pode ser tratada como constante no estado ordenado.

O Hamiltoniano de Heisenberg em uma rede cúbica com acoplamento entre primeiros vizinhos é

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad [S_i^a, S_j^b] = i\hbar \delta_{ij} \epsilon^{abc} S_i^c,$$

com $J < 0$ (FM) ou $J > 0$ (AFM). Toda a análise abaixo vale para qualquer sinal de J , pois usa apenas a álgebra de momento angular.

a) $[\mathbf{S}_T, H] = 0$: o spin total é constante do movimento

Calculemos o comutador de uma componente $S_T^a = \sum_l S_l^a$ com H . Usando a regra de Leibniz $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$,

$$\begin{aligned} [S_T^a, H] &= J \sum_{\langle ij \rangle} \sum_l \sum_b [S_l^a, S_i^b S_j^b] \\ &= J \sum_{\langle ij \rangle} \sum_l \sum_b \left([S_l^a, S_i^b] S_j^b + S_i^b [S_l^a, S_j^b] \right) \\ &= i\hbar J \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{b,c} \epsilon^{abc} \left(S_i^c S_j^b + S_i^b S_j^c \right), \end{aligned}$$

onde as somas em l foram resolvidas pelos deltas de Kronecker ($l = i$ no primeiro termo, $l = j$ no segundo). No último parêntese, trocando os nomes dos índices mudos $b \leftrightarrow c$ no segundo termo,

$$\sum_{b,c} \epsilon^{abc} S_i^b S_j^c = \sum_{b,c} \epsilon^{acb} S_i^c S_j^b = - \sum_{b,c} \epsilon^{abc} S_i^c S_j^b,$$

pois spins em *sítios distintos* comutam, $[S_i^c, S_j^b] = 0$ para $i \neq j$. Os dois termos se cancelam identicamente e

$$\boxed{[\mathbf{S}_T, H] = 0}$$

para qualquer J , FM ou AFM. Em linguagem vetorial: cada elo contribui com $\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j + \mathbf{S}_j \times \mathbf{S}_i = 0$. O spin total é, portanto, uma constante do movimento — consequência direta da invariância de H sob rotações globais de spin, $[H, e^{-i\boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{S}_T/\hbar}] = 0$. No caso FM o parâmetro de ordem é a magnetização total $\mathbf{M} \propto \mathbf{S}_T$; um estado com $\langle \mathbf{M} \rangle \neq 0$ independente do tempo não surpreende, já que o próprio operador é conservado. $\square$

b) A magnetização alternada não comuta com o H AFM

Defina a magnetização alternada (staggered)

$$\mathbf{M}_N = \sum_{l=1}^N e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_l} \mathbf{S}_l = \sum_l \eta_l \mathbf{S}_l, \quad \eta_l \equiv e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_l} = \pm 1,$$

com $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)$ (em unidades de $1/a$): $\eta_l = +1$ na sub-rede A e $\eta_l = -1$ na sub-rede B . Como a rede cúbica é bipartida, cada elo $\langle ij \rangle$ conecta sub-redes opostas, de modo que

$$\eta_i = -\eta_j \quad \text{para todo elo } \langle ij \rangle.$$

Repetindo o cálculo do item (a), agora com o peso η_l ,

$$\begin{aligned} [M_N^a, H] &= J \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{b,c} i\hbar \varepsilon^{abc} \left(\eta_i S_i^c S_j^b + \eta_j S_i^b S_j^c \right) \\ &= i\hbar J \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{b,c} \varepsilon^{abc} \left(\eta_i S_i^c S_j^b - \eta_i S_i^b S_j^c \right) \quad (\eta_j = -\eta_i) \\ &= i\hbar J \sum_{\langle ij \rangle} \eta_i \sum_{b,c} \varepsilon^{abc} \left(S_i^c S_j^b + S_i^b S_j^c \right) \quad (b \leftrightarrow c \text{ no 2º termo}) \\ &= 2i\hbar J \sum_{\langle ij \rangle} \eta_i \sum_{b,c} \varepsilon^{abc} S_i^c S_j^b. \end{aligned}$$

Reconhecendo $\sum_{b,c} \varepsilon^{abc} S_i^c S_j^b = -(\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j)^a$, obtemos, em forma vetorial,

$$[\mathbf{M}_N, H] = -2i\hbar J \sum_{\langle ij \rangle} \eta_i (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) \neq 0.$$

Enquanto no item (a) as contribuições $\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j$ e $\mathbf{S}_j \times \mathbf{S}_i$ de cada elo se cancelavam, aqui o sinal relativo $\eta_j = -\eta_i$ inverte o cancelamento em soma: os dois termos se *reforçam*. O operador resultante, $\sum_{\langle ij \rangle} \eta_i (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j)$, é um operador de dois corpos genuíno, que não se anula identicamente (por exemplo, seus elementos de matriz entre estados com dois spins vizinhos não colineares são não nulos). Logo a magnetização alternada *não* é uma constante do movimento:

$$\frac{d\mathbf{M}_N}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, \mathbf{M}_N] = -2J \sum_{\langle ij \rangle} \eta_i (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) \neq 0. \quad \square$$

c) O ponto sutil: quebra espontânea de simetria

Há aqui um aparente paradoxo. No estado ordenado AFM observa-se $\langle \mathbf{M}_N \rangle \neq 0$ estático, embora $\mathbf{M}_N$ não seja conservado. A resolução envolve dois ingredientes:

Sistema finito. Em uma rede finita de N sítios, o estado fundamental exato do AFM de Heisenberg é um singlete de spin total ($S_T = 0$, teorema de Marshall–Lieb–Mattis), rotacionalmente invariante, com $\langle \mathbf{M}_N \rangle = 0$. O “estado de Néel” não é autoestado de H . O que existe é uma *torre de Anderson* de estados quase degenerados com $S_T = 0, 1, 2, \dots$ e energias $E_{S_T} - E_0 \sim S_T(S_T + 1)/(2N\chi)$, ou seja, espaçamento $\mathcal{O}(1/N)$ — colapsando muito mais rápido que o gap de mágnons, $\mathcal{O}(1/N^{1/D})$. Um pacote de onda formado por esses estados (o estado tipo Néel, com $\langle \mathbf{M}_N \rangle \neq 0$) não é estacionário: a direção do parâmetro de ordem precessa/difunde com período

$$\tau \sim \frac{\hbar}{\Delta E} \propto N,$$

que diverge no limite termodinâmico. Em um sistema finito, portanto, a magnetização alternada *gira lentamente*, exatamente como exige $[\mathbf{M}_N, H] \neq 0$; ela só é “constante” em escalas de tempo curtas comparadas a $\tau \propto N$.

Limite termodinâmico e campo infinitesimal. A ordem dos limites é essencial. Acoplando um campo alternado infinitesimal, $H_h = H - h \sum_l \eta_l S_l^z$, que seleciona uma direção, a quebra espontânea de simetria é definida por

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \langle M_N^z \rangle \neq 0, \quad \text{enquanto} \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{1}{N} \langle M_N^z \rangle = 0.$$

Tomando $N \rightarrow \infty$ *antes* de $h \rightarrow 0^+$, os estados da torre de Anderson se tornam degenerados, o campo infinitesimal os combina em um estado simétrico-quebrado estável, e o tempo de reorientação $\tau \propto N \rightarrow \infty$ congela a direção de $\langle \mathbf{M}_N \rangle$: o parâmetro de ordem passa a se comportar, para todos os efeitos, como uma constante do movimento *emergente*, ainda que o operador microscópico não comute com H . Esse mecanismo — e a verificação de que as flutuações quânticas (ondas de spin) apenas reduzem, sem destruir, a ordem de Néel em $D \geq 2$ — foi analisado pela primeira vez por P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **86**, 694 (1952).

Questão 02 — Ondas de spin antiferromagnéticas

Tomar o estado de Néel como “vácuo” do modelo de Heisenberg AFM em uma rede hipercúbica em D dimensões (duas sub-redes com $m = \pm S$). (a) Bosonizar via Holstein–Primakoff, com bósons distintos por sub-rede, até ordem quadrática. (b) Diagonalizar por transformação de Bogoliubov e obter a dispersão de mágnons; comparar com o caso FM em k pequeno. (c) Energia do fundamental e magnetização de sub-rede em termos de integrais adimensionais; divergência em $D = 1$. (d) Divergência térmica em $D = 1, 2$ (Mermin–Wagner–Hohenberg). (e) Calor específico e magnetização a baixas T em $D = 3$.

Consideramos

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = J \sum_{\langle ij \rangle} \left[S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right], \quad J > 0,$$

em uma rede hipercúbica de N sítios em D dimensões (parâmetro de rede $a = 1$, $\hbar = 1$), com $z = 2D$ primeiros vizinhos por sítio e ND elos. A rede é bipartida: sub-rede A (Néel para cima) e sub-rede B (Néel para baixo), com $N/2$ sítios cada.

a) Holstein–Primakoff nas duas sub-redes e Hamiltoniano quadrático

Como as duas sub-redes apontam em direções opostas, usamos representações de Holstein–Primakoff *invertidas* entre si. Na sub-rede A ($\langle S^z \rangle = +S$), com bósons a_i ,

$$S_i^z = S - a_i^\dagger a_i, \quad S_i^+ = \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}} a_i, \quad S_i^- = \sqrt{2S} a_i^\dagger \sqrt{1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}}.$$

Na sub-rede B ($\langle S^z \rangle = -S$), giramos o eixo local ($S^z \rightarrow -S^z$, $S^\pm \rightarrow S^\mp$) e usamos bósons b_j :

$$S_j^z = -S + b_j^\dagger b_j, \quad S_j^+ = \sqrt{2S} b_j^\dagger \sqrt{1 - \frac{b_j^\dagger b_j}{2S}}, \quad S_j^- = \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{b_j^\dagger b_j}{2S}} b_j.$$

É imediato verificar que ambas as representações satisfazem $[S^+, S^-] = 2S^z$ e $[S^z, S^\pm] = \pm S^\pm$. O estado de Néel é o vácuo dos bósons: $a_i |\text{Néel}\rangle = b_j |\text{Néel}\rangle = 0$.

Expandindo as raízes, $\sqrt{1 - n/2S} = 1 - n/4S + \dots$, e retendo termos até ordem quadrática nos bósons (equivalente à ordem dominante em $1/S$),

$$S_i^+ \simeq \sqrt{2S} a_i, \quad S_i^- \simeq \sqrt{2S} a_i^\dagger \quad (i \in A); \quad S_j^+ \simeq \sqrt{2S} b_j^\dagger, \quad S_j^- \simeq \sqrt{2S} b_j \quad (j \in B).$$

Cada elo $\langle ij \rangle$ conecta $i \in A$ a $j = i + \boldsymbol{\delta} \in B$. Termo a termo:

$$\begin{aligned} S_i^z S_j^z &= (S - a_i^\dagger a_i) (-S + b_j^\dagger b_j) = -S^2 + S(a_i^\dagger a_i + b_j^\dagger b_j) - a_i^\dagger a_i b_j^\dagger b_j, \\ \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) &\simeq \frac{1}{2} 2S (a_i b_j + a_i^\dagger b_j^\dagger) = S(a_i b_j + a_i^\dagger b_j^\dagger). \end{aligned}$$

O termo quártico $a^\dagger a b^\dagger b$ é de ordem superior em $1/S$ e é descartado. Somando sobre os ND elos ($ND S^2$ vezes o termo constante; cada sítio de A aparece em z elos, idem para B),

$$H \simeq -DNJS^2 + JS \sum_{i \in A} \sum_{\boldsymbol{\delta}} \left[a_i^\dagger a_i + b_{i+\boldsymbol{\delta}}^\dagger b_{i+\boldsymbol{\delta}} + a_i b_{i+\boldsymbol{\delta}} + a_i^\dagger b_{i+\boldsymbol{\delta}}^\dagger \right],$$

onde $\boldsymbol{\delta}$ percorre os $z = 2D$ vetores de primeiros vizinhos $\pm \hat{\mathbf{e}}_\ell$. Passando a Fourier em cada sub-rede ($N/2$ sítios, $\mathbf{k}$ na zona de Brillouin magnética),

$$a_i = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} a_{\mathbf{k}}, \quad b_j = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} b_{\mathbf{k}},$$

obtemos (usando $\sum_{i \in A} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i} = \frac{N}{2} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$)

$$H = -DNJS^2 + JSz \sum_{\mathbf{k}} \left[a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger) \right], \quad \gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta} = \frac{1}{D} \sum_{\ell=1}^D \cos k_{\ell}.$$

Diferentemente do FM, o Hamiltoniano quadrático contém termos *anômalos* ab e $a^\dagger b^\dagger$: o estado de Néel não é autoestado de H e os números de bósons não são conservados separadamente.

b) Transformação de Bogoliubov e dispersão de mágnons

Para cada $\mathbf{k}$, diagonalizamos o bloco $\{a_{\mathbf{k}}, b_{-\mathbf{k}}\}$ com a transformação de Bogoliubov bosônica

$$a_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger, \quad b_{-\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad u_{\mathbf{k}} = \cosh \theta_{\mathbf{k}}, \quad v_{\mathbf{k}} = \sinh \theta_{\mathbf{k}},$$

que preserva as relações de comutação bosônicas, pois $u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 = 1$ garante $[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}}^\dagger] = u^2 [\alpha, \alpha^\dagger] + v^2 [\beta^\dagger, \beta] = 1$, e analogamente para b . Substituindo (omitimos o rótulo $\mathbf{k}$ e usamos ordenamento normal em α, β):

$$a^\dagger a + b^\dagger b = (u^2 + v^2) (\alpha^\dagger \alpha + \beta^\dagger \beta) - 2uv (\alpha \beta + \alpha^\dagger \beta^\dagger) + 2v^2,$$

$$ab + a^\dagger b^\dagger = (u^2 + v^2) (\alpha \beta + \alpha^\dagger \beta^\dagger) - 2uv (\alpha^\dagger \alpha + \beta^\dagger \beta) - 2uv.$$

O coeficiente do termo anômalo $\alpha \beta + \alpha^\dagger \beta^\dagger$ é

$$-2uv + \gamma_{\mathbf{k}} (u^2 + v^2) = -\sinh 2\theta_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}} \cosh 2\theta_{\mathbf{k}},$$

que se anula com a escolha

$$\tanh 2\theta_{\mathbf{k}} = \gamma_{\mathbf{k}} \implies \cosh 2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}}, \quad \sinh 2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{\gamma_{\mathbf{k}}}{\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}}.$$

O coeficiente do termo diagonal fica

$$(u^2 + v^2) - 2uv \gamma_{\mathbf{k}} = \cosh 2\theta_{\mathbf{k}} - \gamma_{\mathbf{k}} \sinh 2\theta_{\mathbf{k}} = \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2},$$

e a constante gerada pelo ordenamento normal vale $2v^2 - 2uv\gamma_{\mathbf{k}} = \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2} - 1$. Portanto

$$H = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}}), \quad \omega_{\mathbf{k}} = JSz \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2} = 2DJS \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2},$$

com dois ramos degenerados de mágnons (α e β , que carregam $\Delta S^z = \mp 1$) e

$$E_0 = -DNJS^2 + JSz \sum_{\mathbf{k}} \left[\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2} - 1 \right].$$

Limite $k \rightarrow 0$ e comparação com o FM. Para $\mathbf{k}$ pequeno,

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{D} \sum_{\ell} \cos k_{\ell} \simeq 1 - \frac{k^2}{2D} \implies 1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2 \simeq \frac{k^2}{D},$$

logo

$$\omega_{\mathbf{k}} \simeq 2\sqrt{D} JS |\mathbf{k}| \equiv c |\mathbf{k}|, \quad c = 2\sqrt{D} JS.$$

A dispersão AFM é *linear* em k — os mágnons são modos de Goldstone tipo som, com velocidade c — enquanto no FM a dispersão é *quadrática*, $\omega_{\mathbf{k}}^{\text{FM}} = 2DJS(1 - \gamma_{\mathbf{k}}) \simeq JSk^2$. A diferença reflete que no FM o parâmetro de ordem ($\mathbf{S}_T$) comuta com H , ao passo que no AFM ele não comuta (Questão 01), levando a modos com dinâmica relativística efetiva.

c) Energia do fundamental e magnetização de sub-rede em $T = 0$

Convertendo $\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D}$ (integral adimensional sobre a zona de Brillouin, normalizada a 1), a energia por sítio do fundamental é

$$\frac{E_0}{N} = -DJS^2 - DJS \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left[1 - \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2} \right] = -DJS(S + \epsilon_D), \quad \epsilon_D \equiv \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left[1 - \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2} \right] > 0.$$

A correção de ponto zero *abaixa* a energia em relação ao valor clássico de Néel ($-DJS^2$ por sítio); em $D = 1$, $\epsilon_1 = 1 - 2/\pi$ reproduz o resultado de Anderson, próximo do exato de Bethe.

A magnetização de sub-rede é $\langle S_i^z \rangle = S - \langle a_i^\dagger a_i \rangle \equiv S - \Delta m$. Invertendo a transformação de Bogoliubov e usando $\langle \alpha^\dagger \alpha \rangle = \langle \beta^\dagger \beta \rangle = 0$ no vácuo de mágnons,

$$\langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle = v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{\cosh 2\theta_{\mathbf{k}} - 1}{2} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}} - 1 \right],$$

de modo que

$$\Delta m = \frac{1}{2} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left[\frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}} - 1 \right].$$

Note que Δm é independente de S e de J : é um número puro que só depende de D .

Divergência em $D = 1$. Em $D = 1$, $\gamma_k = \cos k$ e $\sqrt{1 - \gamma_k^2} = |\sin k|$, logo o integrando se comporta como

$$\frac{1}{|\sin k|} \sim \frac{1}{|k|} \quad (k \rightarrow 0),$$

e

$$\Delta m \sim \int_0 \frac{dk}{2\pi} \frac{1}{k} \rightarrow \infty \quad (\text{divergência logarítmica infravermelha}).$$

A correção diverge: a teoria de ondas de spin perde a validade e não há magnetização de sub-rede em $D = 1$ — em acordo com a solução exata (cadeia de Heisenberg é crítica, sem ordem de Néel mesmo em $T = 0$).

Finitude em $D = 2, 3$. Para $k \rightarrow 0$ o integrando é $\sim \sqrt{D}/(2|\mathbf{k}|)$ e $d^D k \sim k^{D-1} dk$, de modo que a integral converge no infravermelho para $D \geq 2$ (e as linhas $1 - \gamma^2 = 0$ no bordo da zona são igualmente integráveis). Numericamente,

$$\Delta m \simeq 0,197 \quad (D = 2), \quad \Delta m \simeq 0,078 \quad (D = 3),$$

ou seja, $\langle S^z \rangle \simeq 0,303$ em $D = 2$ ($S = 1/2$), razoavelmente próximo dos valores numéricos exatos (QMC: $\approx 0,307$).

d) Temperatura finita: divergência em $D = 1, 2$ e Mermin–Wagner–Hohenberg

A $T > 0$ os mágnons são termicamente populados, $\langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}} \rangle = n_B(\omega_{\mathbf{k}}) = (e^{\omega_{\mathbf{k}}/T} - 1)^{-1}$, e

$$\langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle = v_{\mathbf{k}}^2 + (u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2) n_B(\omega_{\mathbf{k}}) \implies \Delta m(T) = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left[\frac{n_B(\omega_{\mathbf{k}}) + \frac{1}{2}}{\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}} - \frac{1}{2} \right].$$

A parte térmica do integrando, para $k \rightarrow 0$ (onde $\omega_{\mathbf{k}} \simeq ck \ll T$ e $n_B \simeq T/\omega_{\mathbf{k}}$), comporta-se como

$$\frac{n_B(\omega_{\mathbf{k}})}{\sqrt{1-\gamma_{\mathbf{k}}^2}} \simeq \frac{T}{ck} \cdot \frac{\sqrt{D}}{k} \propto \frac{T}{k^2},$$

de modo que a contribuição infravermelha é

$$\int_0 dk k^{D-1} \frac{T}{k^2} = T \int_0 dk k^{D-3} = \begin{cases} \infty, & D = 1 (\sim 1/k^2) \text{ e } D = 2 \text{ (logarítmica)}, \\ \text{finita}, & D = 3. \end{cases}$$

Logo, para qualquer $T > 0$, as flutuações térmicas de longo comprimento de onda destroem a ordem de Néel em $D = 1, 2$: $\Delta m(T)$ diverge e a hipótese de sub-rede magnetizada é inconsistente. Isso concorda com o teorema de Mermin–Wagner–Hohenberg, cujas hipóteses são de fato satisfeitas aqui: (i) a simetria quebrada é *contínua* — $SU(2)$ de rotações de spin, $[\mathbf{S}_T, H] = 0$ (Questão 01); (ii) as interações são de *curto alcance* (primeiros vizinhos, $\sum_j |J_{ij}| |\mathbf{R}_{ij}|^2 < \infty$); (iii) $D \leq 2$ e $T > 0$. O teorema proíbe então $\langle \mathbf{M}_N \rangle \neq 0$, e a divergência acima é o mecanismo microscópico (proliferação de modos de Goldstone de baixa energia). $\square$

e) Baixas temperaturas em $D = 3$: $C \propto T^3$ e $\Delta m(T) \propto T^2$

Em $D = 3$ e $T \ll JS$, somente os mágnons de grande comprimento de onda, $\omega_{\mathbf{k}} \simeq ck$ com $c = 2\sqrt{3}JS$, são excitados.

Calor específico. A energia térmica dos dois ramos é

$$U(T) - E_0 = 2 \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} n_B(\omega_{\mathbf{k}}) \longrightarrow N \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{ck}{e^{ck/T} - 1} = \frac{N}{2\pi^2} \int_0^\infty dk \frac{ck^3}{e^{ck/T} - 1},$$

onde estendemos a integral a todo o espaço (o erro é exponencialmente pequeno). Com $x = ck/T$ e $\int_0^\infty dx x^3/(e^x - 1) = \pi^4/15$,

$$\frac{U - E_0}{N} = \frac{\pi^2}{30} \frac{T^4}{c^3} \implies \boxed{\frac{C}{N} = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{U}{N} \right) = \frac{2\pi^2}{15} \left(\frac{T}{c} \right)^3 \propto T^3,}$$

exatamente como fônons acústicos (dispersão linear em $D = 3$) — e em contraste com o FM, cuja dispersão quadrática dá $C \propto T^{3/2}$.

Magnetização de sub-rede. A parte térmica do item (d) é

$$\delta m(T) = \Delta m(T) - \Delta m(0) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{n_B(\omega_{\mathbf{k}})}{\sqrt{1-\gamma_{\mathbf{k}}^2}}.$$

No regime dominante $k \rightarrow 0$, $(1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2)^{-1/2} \simeq \sqrt{3}/k = 2\sqrt{3}JS/\omega_{\mathbf{k}}$ ($k \rightarrow \omega/c$), isto é, o integrando é $\simeq (2DJS/\omega_{\mathbf{k}}) n_B(\omega_{\mathbf{k}})$ com $\omega_{\mathbf{k}} = ck$:

$$\delta m(T) \simeq \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty dk k^2 \frac{\sqrt{3}}{k} \frac{1}{e^{ck/T} - 1} = \frac{\sqrt{3}}{2\pi^2} \frac{T^2}{c^2} \int_0^\infty dx \frac{x}{e^x - 1} = \frac{\sqrt{3}}{2\pi^2} \frac{T^2}{c^2} \cdot \frac{\pi^2}{6},$$

ou seja,

$$\boxed{\delta m(T) = \frac{\sqrt{3}}{12} \left(\frac{T}{c} \right)^2 = \frac{1}{48\sqrt{3}} \left(\frac{T}{JS} \right)^2 \propto T^2.}$$

Em $D = 3$, portanto, a ordem de Néel sobrevive a temperatura finita, com correções suaves: $\langle S^z \rangle(T) = S - \Delta m(0) - \mathcal{O}(T^2)$ e $C \propto T^3$ — novamente em contraste com o FM ($\delta m \propto T^{3/2}$, lei de Bloch).

Questão 3 — Diagonalização do modelo de Fano-Anderson

O modelo de Fano-Anderson descreve uma banda de condução que hibridiza, com amplitude V , com um nível localizado de energia ϵ_f :

$$H_{FA} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \epsilon_f \sum_{\sigma} f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + \sum_{k,\sigma} V (c_{k\sigma}^\dagger f_{\sigma} + f_{\sigma}^\dagger c_{k\sigma}).$$

Sendo quadrático, ele pode ser levado à forma diagonal $H_{FA} = \sum_{n,\sigma} E_n d_{n\sigma}^\dagger d_{n\sigma}$.

a) Equações acopladas e equação de autovalores

Como os setores de spin se desacoplam, omitimos σ . Escrevemos os novos modos como combinação linear dos antigos,

$$d_n^\dagger = A_n f^\dagger + \sum_k B_{nk} c_k^\dagger. \quad (1)$$

A forma diagonal de H_{FA} implica

$$[H_{FA}, d_n^\dagger] = \sum_m E_m [d_m^\dagger d_m, d_n^\dagger] = E_n d_n^\dagger,$$

pois, para férmions, $[d_m^\dagger d_m, d_n^\dagger] = d_m^\dagger \{d_m, d_n^\dagger\} - \{d_m^\dagger, d_n^\dagger\} d_m = \delta_{mn} d_m^\dagger$. Por outro lado, com a forma original de H_{FA} e as relações canônicas $\{f, f^\dagger\} = 1$, $\{c_k, c_{k'}^\dagger\} = \delta_{kk'}$, calculamos termo a termo:

$$\begin{aligned} [H_{FA}, f^\dagger] &= \epsilon_f f^\dagger + V \sum_k c_k^\dagger, \\ [H_{FA}, c_k^\dagger] &= \epsilon_k c_k^\dagger + V f^\dagger. \end{aligned}$$

Aplicando isso ao *ansatz* (1),

$$\begin{aligned} [H_{FA}, d_n^\dagger] &= A_n \left(\epsilon_f f^\dagger + V \sum_k c_k^\dagger \right) + \sum_k B_{nk} (\epsilon_k c_k^\dagger + V f^\dagger) \\ &= \left(\epsilon_f A_n + V \sum_k B_{nk} \right) f^\dagger + \sum_k (V A_n + \epsilon_k B_{nk}) c_k^\dagger. \end{aligned}$$

Igualando a $E_n d_n^\dagger = E_n A_n f^\dagger + \sum_k E_n B_{nk} c_k^\dagger$ e usando a independência linear de $f^\dagger$ e dos $c_k^\dagger$, obtemos as equações acopladas

$$E_n A_n = \epsilon_f A_n + V \sum_k B_{nk}, \quad E_n B_{nk} = V A_n + \epsilon_k B_{nk}. \quad (2)$$

Da segunda equação, $B_{nk} = V A_n / (E_n - \epsilon_k)$ (válido enquanto $E_n \neq \epsilon_k$, o que ocorre para $V \neq 0$). Substituindo na primeira e cancelando $A_n \neq 0$,

$$E_n = \epsilon_f + V^2 \sum_k \frac{1}{E_n - \epsilon_k} \quad \Longrightarrow \quad \boxed{E_n = \epsilon_f - V^2 \sum_k \frac{1}{\epsilon_k - E_n}}$$

que é a equação dos autovalores, Eq. (5) do enunciado. □

b) Banda de níveis igualmente espaçados

Tomamos $\epsilon_k = \delta k$, $k \in \mathbb{Z}$. A equação dos autovalores fica

$$E_n = \epsilon_f - V^2 \sum_{k \in \mathbb{Z}} \frac{1}{\delta k - E_n} = \epsilon_f - \frac{V^2}{\delta} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \frac{1}{k - E_n/\delta}.$$

Reconhecemos a soma dada, com $a = E_n/\delta$:

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

(Ela segue da expansão em frações parciais da cotangente, $\pi \cot(\pi a) = \frac{1}{a} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2a}{a^2 - k^2}$, agrupando os termos k e $-k$ em pares simétricos, isto é, no sentido de valor principal.) Assim,

$$E_n = \epsilon_f - \frac{V^2}{\delta} [-\pi \cot(\pi E_n/\delta)] \implies \boxed{E_n = \epsilon_f + \Delta \cot\left(\frac{\pi E_n}{\delta}\right), \quad \Delta \equiv \frac{\pi V^2}{\delta}.}$$

□

c) Defasagens, energia do estado fundamental e densidade de estados

Cada raiz de (2) fica presa entre dois níveis consecutivos da banda; escrevemos então

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

e, como $\cot(\pi E_k/\delta) = \cot(k\pi + \phi_k) = \cot \phi_k$, a Eq. (7) vira $E_k = \epsilon_f + \Delta \cot \phi_k$.

Jacobiano $d\epsilon/dE$. No contínuo, $\epsilon = \delta k$ e $E = \epsilon + \frac{\delta}{\pi} \phi(E)$, com $\cot \phi = (E - \epsilon_f)/\Delta$, ou seja, $\phi(E) = \operatorname{arccot}[(E - \epsilon_f)/\Delta]$. Logo,

$$\epsilon = E - \frac{\delta}{\pi} \operatorname{arccot}\left(\frac{E - \epsilon_f}{\Delta}\right),$$

e, usando $\frac{d}{dx} \operatorname{arccot} x = -\frac{1}{1+x^2}$,

$$\frac{d\epsilon}{dE} = 1 - \frac{\delta}{\pi} \cdot \left(-\frac{1}{1 + \left(\frac{E - \epsilon_f}{\Delta}\right)^2} \right) \cdot \frac{1}{\Delta} = \boxed{1 + \delta \frac{\Delta/\pi}{(E - \epsilon_f)^2 + \Delta^2}}.$$

Integral da energia. Com $\mu = 0$ e limites de banda $\pm D$, a Eq. (11) dá

$$E^{(0)} = \frac{2}{\delta} \int_{-D}^0 dE E \left[1 + \delta \frac{\Delta/\pi}{(E - \epsilon_f)^2 + \Delta^2} \right] = \underbrace{\frac{2}{\delta} \int_{-D}^0 E dE}_{I_1} + \underbrace{\frac{2\Delta}{\pi} \int_{-D}^0 \frac{E dE}{(E - \epsilon_f)^2 + \Delta^2}}_{I_2}.$$

A primeira parcela é a energia da banda livre:

$$I_1 = \frac{2}{\delta} \left[\frac{E^2}{2} \right]_{-D}^0 = -\frac{D^2}{\delta} = -\rho_0 D^2, \quad \rho_0 \equiv \frac{1}{\delta}.$$

Na segunda, escrevemos $E = (E - \epsilon_f) + \epsilon_f$ e usamos as primitivas elementares

$$\int \frac{(E - \epsilon_f) dE}{(E - \epsilon_f)^2 + \Delta^2} = \frac{1}{2} \ln[(E - \epsilon_f)^2 + \Delta^2], \quad \int \frac{dE}{(E - \epsilon_f)^2 + \Delta^2} = \frac{1}{\Delta} \arctan\left(\frac{E - \epsilon_f}{\Delta}\right).$$

Então,

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{2\Delta}{\pi} \left\{ \frac{1}{2} \ln[(E - \epsilon_f)^2 + \Delta^2] + \frac{\epsilon_f}{\Delta} \arctan\left(\frac{E - \epsilon_f}{\Delta}\right) \right\}_{-D}^0 \\ &= \frac{2\Delta}{\pi} \left\{ \frac{1}{2} \ln\left[\frac{\epsilon_f^2 + \Delta^2}{(D + \epsilon_f)^2 + \Delta^2}\right] + \frac{\epsilon_f}{\Delta} \left[\arctan\left(-\frac{\epsilon_f}{\Delta}\right) - \arctan\left(-\frac{D + \epsilon_f}{\Delta}\right) \right] \right\}, \end{aligned}$$

e, como o arco-tangente é ímpar,

$$\boxed{E^{(0)} = -\rho_0 D^2 + \frac{2\Delta}{\pi} \left\{ \frac{1}{2} \ln\left[\frac{\epsilon_f^2 + \Delta^2}{(D + \epsilon_f)^2 + \Delta^2}\right] + \frac{\epsilon_f}{\Delta} \left[\arctan\left(\frac{D + \epsilon_f}{\Delta}\right) - \arctan\left(\frac{\epsilon_f}{\Delta}\right) \right] \right\}}, \quad (3)$$

que é a Eq. (13). (Conferimos numericamente esta expressão contra a quadratura direta da integral em um caso-teste; a diferença é da ordem do erro de máquina.)

Limite de banda larga. Para $\epsilon_f > 0$ e $D \gg \epsilon_f, \Delta$:

$$(D + \epsilon_f)^2 + \Delta^2 \approx D^2 \implies \frac{1}{2} \ln\left[\frac{\epsilon_f^2 + \Delta^2}{D^2}\right] = \ln\left(\frac{\sqrt{\epsilon_f^2 + \Delta^2}}{D}\right),$$

e $\arctan[(D + \epsilon_f)/\Delta] \rightarrow \pi/2$; usando $\pi/2 - \arctan(\epsilon_f/\Delta) = \arctan(\Delta/\epsilon_f)$ (válido para $\epsilon_f > 0$),

$$\boxed{E^{(0)} \approx -\rho_0 D^2 + \frac{2\Delta}{\pi} \left[\ln\left(\frac{\sqrt{\epsilon_f^2 + \Delta^2}}{D}\right) + \frac{\epsilon_f}{\Delta} \arctan\left(\frac{\Delta}{\epsilon_f}\right) \right]}. \quad (4)$$

Densidade de estados. Da conservação do número de estados, $\rho_0(\epsilon)d\epsilon = \rho(E)dE$, segue

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

a densidade de estados original mais uma ressonância Lorentziana de peso unitário, centrada em ϵ_f e de largura $\Delta = \pi\rho_0 V^2$ — o nível localizado se dissolve na banda como uma ressonância virtual. $\square$

d) Ocupação do nível localizado (Hellman-Feynman)

Pelo teorema de Hellman-Feynman aplicado ao estado fundamental,

$$\langle n_f \rangle = \sum_{\sigma} \langle f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \rangle = \left\langle \frac{\partial H_{FA}}{\partial \epsilon_f} \right\rangle = \frac{\partial E^{(0)}}{\partial \epsilon_f}.$$

Usando a forma de banda larga (4) (o termo $-\rho_0 D^2$ não depende de ϵ_f),

$$\begin{aligned} \frac{\partial E^{(0)}}{\partial \epsilon_f} &= \frac{2\Delta}{\pi} \left[\frac{1}{2} \cdot \frac{2\epsilon_f}{\epsilon_f^2 + \Delta^2} + \frac{1}{\Delta} \arctan\left(\frac{\Delta}{\epsilon_f}\right) + \frac{\epsilon_f}{\Delta} \cdot \frac{1}{1 + \Delta^2/\epsilon_f^2} \cdot \left(-\frac{\Delta}{\epsilon_f^2}\right) \right] \\ &= \frac{2\Delta}{\pi} \left[\frac{\epsilon_f}{\epsilon_f^2 + \Delta^2} + \frac{1}{\Delta} \arctan\left(\frac{\Delta}{\epsilon_f}\right) - \frac{\epsilon_f}{\epsilon_f^2 + \Delta^2} \right] = \frac{2}{\pi} \arctan\left(\frac{\Delta}{\epsilon_f}\right). \end{aligned}$$

Os dois termos algébricos se cancelam exatamente e resta

$$\boxed{\langle n_f \rangle = \frac{2}{\pi} \arctan\left(\frac{\Delta}{\epsilon_f}\right)}. \quad (5)$$

Limites de sanidade: $\epsilon_f \rightarrow +\infty$ dá $\langle n_f \rangle \rightarrow 0$ (nível vazio, bem acima de $\mu = 0$); $\epsilon_f \rightarrow 0^+$ dá $\langle n_f \rangle \rightarrow 1$ (ressonância no nível de Fermi, meio nível ocupado por spin); interpretando o ramo $\epsilon_f < 0$ como $\arctan \rightarrow \pi - \arctan(\Delta/|\epsilon_f|)$, obtém-se $\langle n_f \rangle \rightarrow 2$ para $\epsilon_f \rightarrow -\infty$ (nível duplamente ocupado). A hibridização suaviza o degrau da ocupação numa escala Δ . $\square$

Questão 4 — Formação de momentos localizados: campo médio do modelo de Anderson

O Hamiltoniano de campo médio do modelo de impureza de Anderson é

$$H_{\text{And-MF}} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_{f\sigma} f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + \sum_{k,\sigma} V (c_{k\sigma}^\dagger f_{\sigma} + f_{\sigma}^\dagger c_{k\sigma}), \quad \epsilon_{f\sigma} = \epsilon_f + U \langle n_{f,-\sigma} \rangle.$$

a) Equações de autoconsistência

O Hamiltoniano de campo médio é exatamente o modelo de Fano-Anderson da Questão 3, mas agora cada setor de spin σ vê um nível localizado com energia efetiva própria $\epsilon_{f\sigma}$. Como os setores continuam desacoplados, basta aplicar o resultado (5) *por setor de spin e sem o fator 2 de degenerescência*:

$$\langle n_{f\sigma} \rangle = \frac{1}{\pi} \arctan\left(\frac{\Delta}{\epsilon_{f\sigma}}\right) = \frac{1}{\pi} \operatorname{arccot}\left(\frac{\epsilon_{f\sigma}}{\Delta}\right),$$

onde usamos $\arctan(1/x) = \operatorname{arccot}(x)$ com o ramo $\operatorname{arccot} : \mathbb{R} \rightarrow (0, \pi)$, que é o ramo fisicamente correto: ele dá $\langle n_{f\sigma} \rangle \rightarrow 1$ quando $\epsilon_{f\sigma} \rightarrow -\infty$ e $\langle n_{f\sigma} \rangle \rightarrow 0$ quando $\epsilon_{f\sigma} \rightarrow +\infty$, interpolando continuamente. Assim,

$$n \equiv \langle n_f \rangle = \sum_{\sigma} \langle n_{f\sigma} \rangle = \frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \operatorname{arccot}\left(\frac{\epsilon_{f\sigma}}{\Delta}\right), \quad m \equiv \langle m_f \rangle = \sum_{\sigma} \sigma \langle n_{f\sigma} \rangle = \frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \sigma \operatorname{arccot}\left(\frac{\epsilon_{f\sigma}}{\Delta}\right), \quad (6)$$

com $\Delta = \pi \rho_0 V^2$ como antes. Estas são equações de autoconsistência porque $\epsilon_{f\sigma}$ depende de $\langle n_{f,-\sigma} \rangle$. $\square$

b) Linha crítica de formação de momento localizado

Das definições $n = \langle n_{f\uparrow} \rangle + \langle n_{f\downarrow} \rangle$ e $m = \langle n_{f\uparrow} \rangle - \langle n_{f\downarrow} \rangle$, resolvendo o sistema linear,

$$\langle n_{f\uparrow} \rangle = \frac{n+m}{2}, \quad \langle n_{f\downarrow} \rangle = \frac{n-m}{2},$$

e portanto ($\sigma = \pm 1$, $-\sigma$ troca $m \rightarrow -m$)

$$\epsilon_{f\sigma} = \epsilon_f + U \langle n_{f,-\sigma} \rangle = \epsilon_f + \frac{U}{2} (n - \sigma m).$$

(Adotamos aqui a convenção em que o setor σ vê o campo médio da população oposta; no enunciado a mesma expressão aparece com $n + \sigma m$, o que corresponde apenas a trocar o rótulo $\sigma \rightarrow -\sigma$ e não altera nada do que segue.) As equações (6) ficam

$$n = \frac{1}{\pi} \left[\operatorname{arccot}\left(\frac{\epsilon_f + \frac{U}{2}(n-m)}{\Delta}\right) + \operatorname{arccot}\left(\frac{\epsilon_f + \frac{U}{2}(n+m)}{\Delta}\right) \right], \quad (7)$$

$$m = \frac{1}{\pi} \left[\operatorname{arccot}\left(\frac{\epsilon_f + \frac{U}{2}(n-m)}{\Delta}\right) - \operatorname{arccot}\left(\frac{\epsilon_f + \frac{U}{2}(n+m)}{\Delta}\right) \right]. \quad (8)$$

A solução $m = 0$ sempre existe; o momento localizado se forma quando uma solução $m \neq 0$ bifurca dela. Na linha crítica, $m \rightarrow 0^+$: expandimos (8) em primeira ordem em m . Escrevendo $g(x) = \operatorname{arccot}(x/\Delta)$, com $g'(x) = -\Delta/(x^2 + \Delta^2)$, e $x_{\pm} = \epsilon_f + \frac{U}{2}(n \pm m)$,

$$m = \frac{1}{\pi} [g(x_-) - g(x_+)] = \frac{1}{\pi} [-g'(\epsilon_f + \frac{U}{2}n) \cdot Um] + \mathcal{O}(m^3).$$

Cancelando $m \neq 0$, a condição crítica ($U = U_c$) é

$$1 = \frac{U_c}{\pi} \frac{\Delta}{(\epsilon_f + \frac{U_c}{2}n)^2 + \Delta^2}. \quad (9)$$

Em $m = 0$ a Eq. (7) vira $n = \frac{2}{\pi} \operatorname{arccot} \left(\frac{\epsilon_f + \frac{U_c}{2}n}{\Delta} \right)$, ou seja,

$$\boxed{\epsilon_f + \frac{U_c n}{2} = \Delta \cot \left(\frac{\pi n}{2} \right)}. \quad (10)$$

Substituindo em (9) e usando $\cot^2 \theta + 1 = 1/\sin^2 \theta$,

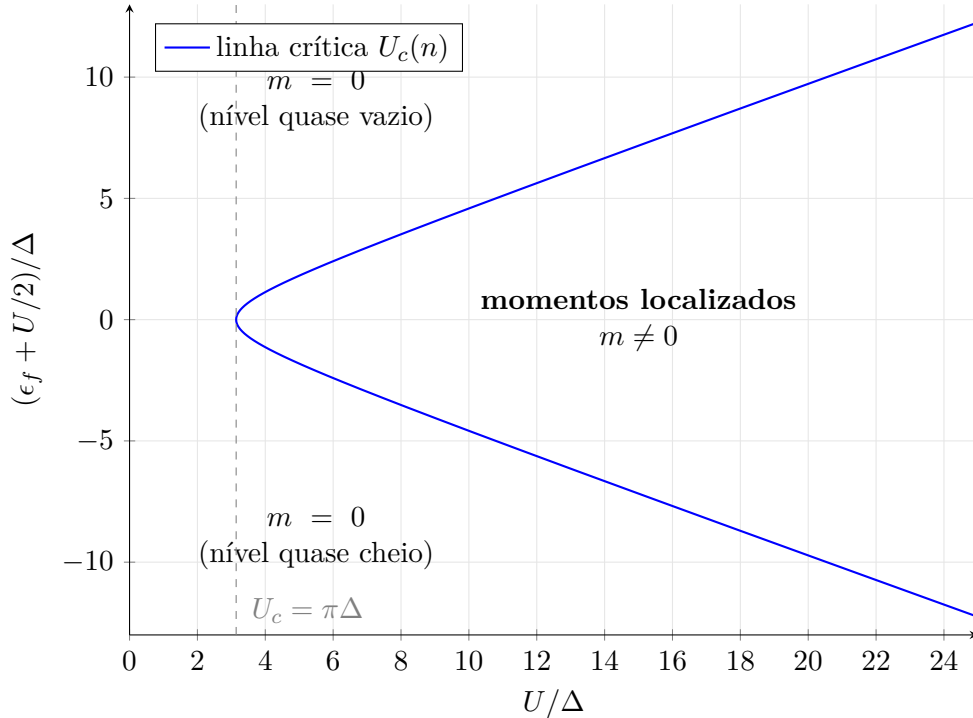
$$1 = \frac{U_c \Delta}{\pi} \frac{1}{\Delta^2 \cot^2 \left(\frac{\pi n}{2} \right) + \Delta^2} = \frac{U_c}{\pi \Delta} \sin^2 \left(\frac{\pi n}{2} \right) \implies \boxed{\frac{\pi \Delta}{U_c} = \sin^2 \left(\frac{\pi n}{2} \right)}.$$

As Eqs. (10) e acima definem a linha crítica parametricamente em $n \in (0, 2)$. $\square$

Gráfico da linha crítica. Nos eixos $x = U/\Delta$ e $y = (\epsilon_f + U/2)/\Delta$, a parametrização é

$$x(n) = \frac{\pi}{\sin^2 \left(\frac{\pi n}{2} \right)}, \quad y(n) = \cot \left(\frac{\pi n}{2} \right) + \frac{1-n}{2} x(n),$$

onde y vem de (10): $\epsilon_f/\Delta = \cot(\pi n/2) - x n/2$, logo $y = \epsilon_f/\Delta + x/2 = \cot(\pi n/2) + x(1-n)/2$. Os pontos abaixo foram calculados numericamente a partir dessas fórmulas.



Discussão. A região de momentos localizados estáveis é o *interior* da “língua” delimitada pela curva: para um dado U/Δ , os valores de $(\epsilon_f + U/2)/\Delta$ entre os dois ramos da curva sustentam solução $m \neq 0$. A curva é simétrica sob $y \rightarrow -y$ (isto é, $n \rightarrow 2 - n$), reflexo da simetria partícula-buraco do modelo: trocar elétrons por buracos leva $\epsilon_f \rightarrow -(\epsilon_f + U)$, ou seja, $y \rightarrow -y$.

O ponto mais favorável à formação de momento é o caso simétrico $n = 1$ ($\epsilon_f + U/2 = 0$, nível de ressonância centrado no nível de Fermi), onde $\sin^2(\pi n/2) = 1$ dá o menor valor crítico possível,

$$U_c^{\min} = \pi\Delta.$$

Longe da simetria ($n \rightarrow 0$ ou $n \rightarrow 2$, nível quase vazio ou quase duplamente ocupado) a curva dispara, $U_c \rightarrow \infty$: sem ocupação simples apreciável não há momento a polarizar. Este é o diagrama de Anderson (Phys. Rev. **124**, 41 (1961)) mostrado em aula: interação forte comparada à largura Δ da ressonância e nível efetivamente com um elétron são as duas condições para o momento local sobreviver ao acoplamento com a banda. $\square$