FÍSICA da MATÉRIA CONDENSADA

Mestrado em Engenharia Física Tecnológica

Série 2

1. Considere um spin quântico S num campo magnético H, com o Hamiltoniano $\mathcal{H} = -HS_z$.

a) Calcule a função de partição $Z = Tre^{-\beta\mathcal{H}}$, a magnetização $M = < S_z >$ (função de Brillouin) e a susceptibilidade longitudinal $\chi_{zz} = \frac{\partial M}{\partial H}$. Obtenha os valores limites para pequenos e grandes campos magnéticos.

b) Particularize para o caso quântico limite $S = \frac{1}{2}$.

c) Considere o limite clássico $S \to \infty$, $H \to 0$, $SH \to sh$ e obtenha as expressões da função de partição, da magnetização (função de Langevin) e da susceptibilidade longitudinal.

d) Obtenha directamente os resultados da alínea anterior, considerando um spin clássico $\vec{s}$, de módulo fixo $|\vec{s}| = s$.

e) Faça os gráficos de $\frac{Z}{2S+1}, \beta F = -\ln \frac{Z}{2S+1}, \frac{M}{S}$ e de $\frac{\chi_{zz}}{\beta S^2}$, em função de βHS, para vários valores de S, incluindo o caso limite $S \to \infty$.

2. a) Calcule as susceptibilidades transversais χ_{+-}, χ_{-+}, usando

$$S_-|Sm\rangle = \sqrt{(S+m)(S-m+1)}|Sm-1\rangle \tag{1}$$

$$S_+|Sm\rangle = \sqrt{(S-m)(S+m+1)}|Sm+1\rangle \tag{2}$$

ou, alternativamente,

$$S_+S_- = (S+S_z)(S-S_z+1) \tag{3}$$

$$S_-S_+ = (S-S_z)(S+S_z+1) \tag{4}$$

para as relacionar com a susceptibilidade longitudinal χ_{zz}.

b) Manipule a expressão da susceptibilidae longitudinal de modo a obter $\coth \frac{\beta H}{2} M + \frac{\chi_{zz}}{\beta} + M^2 = S(S+1)$. Compare com $\langle S_x^2 + S_y^2 \rangle + \langle (S_z - \langle S_z \rangle)^2 \rangle + \langle S_z \rangle^2 = S(S+1)$.

c) Obtenha as susceptibilidades $\chi_{xx}, \chi_{xy}, \chi_{yx}$ e χ_{yy}.

d) Qual o comportamento das susceptibilidades transversais, em função do campo (tome o limite clássico).

3. i) Calcule a função de partição, a magnetização $< \hat{S}_\alpha(t) >$ e as funções de correlação $< \hat{S}_\alpha(t)\hat{S}_{\overline{\beta}}(t') >$ para um spin quântico $\hat{\vec{S}}$, em presença de

um campo magnético constante $\vec{H}$, e que se encontra em equilíbrio termodinâmico à temperatura T, sendo $\hat{S}_\alpha$, com $\alpha = 0, \pm 1$ e $\overline{\alpha} = -\alpha$ as componentes esféricas do spin numa base em que o campo magnético está na direcção do eixo dos z. Exprima o resultado em função da magnetização M (função de Brillouin) e da susceptibilidade longitudinal $\chi_0 = \frac{\partial M}{\partial H}$.

ii) Calcule a susceptibilidade magnética, dada pela teoria da resposta linear por $\chi_{\alpha\beta}(t-t') = \frac{i}{\hbar}\theta(t-t') < [\hat{S}_\alpha(t), \hat{S}_{\overline{\beta}}(t')] >_{eq}$, e a sua transformada de Fourier.

iii) Repita este cálculo para a função de correlação ordenada no tempo $< T_t \hat{S}_\alpha(t) \hat{S}_{\overline{\beta}}(t') >_{eq}$.

iv) Considere o limite clássico, $\hbar \to 0$, $S \to \infty$. Verifique que se obtém a função de Langevin para a magnetização de um spin.

4. Numa transição de fase os expoentes críticos β, γ e δ são definidos pelo anulamento da magnetização com a temperatura $M \propto (T_C - T)^\beta$, para $T < T_C$, e da divergência da susceptibilidade com a temperatura $\chi \propto |T - T_C|^{-\gamma}$, para campo magnético nulo, i.e. $H = 0$, e pelo anulamento da magnetização com o campo, $M^\delta \propto H$, para $T = T_C$.

a) Usando a equação de estado $\Delta = H + J_0 M$ e a equação constitutiva $M = B(\frac{\Delta}{k_B T})$, do modelo de Heisenberg ferromagnético, determine aqueles expoentes críticos, obtendo os valores clássicos $\beta = \frac{1}{2}, \gamma = 1$ e $\delta = 3$.

b) Verifique que aqueles expoentes são universais, dependendo apenas do facto de se ter $B(\frac{\Delta}{k_B T}) = a_1(\frac{\Delta}{k_B T}) - a_3(\frac{\Delta}{k_B T})^3 + \cdots$, para pequenos valores do campo.

5. a) Obtenha a equação de movimento de um spin $\vec{S}$ num campo magnético $\vec{H}$. Escreva as equações das componentes do spin na base esférica.

b) Considere o modelo de Heisenberg ferromagnético, numa rede cúbica simples a d dimensões. Linearize as equações de movimento e obtenha a relação de dispersão $\omega(\vec{q})$ das ondas de spin.

c) Considere o modelo de Heisenberg antiferromagnético, tratando de um modo análogo as magnetizações das duas subredes.

6. A transformação de Holstein-Primakoff estabelece uma correspondência entre os primeiros $2S+1$ estados, $n = 0, \cdots, 2S$, do oscilador harmónico e os estados de um spin S, $m = -S, \cdots, S$. Essa correspondência pode ser feita de forma descendente ou ascendente, conforme se faça $m = S - n$ ou $m = n - S$.

No primeiro caso, a correspondência entre operadores é $\hat{S}_- = \hat{a}^\dagger\sqrt{2S-N}$, $\hat{S}_+ = \sqrt{2S-N}\hat{a}$ e $\hat{S}_z = S - \hat{N}$, em que $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$.

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

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

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

bem como a relação

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

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

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

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

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

7. Considere o Hamiltoniano de Heisenberg ferromagético, com o Hamiltoniano

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

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

8. Considere um sistema bosónico ou fermiónico com dois graus de liberdade e Hamiltoniano dado por:

$$\mathcal{H} = \epsilon_1 a_1^\dagger a_1 + \epsilon_2 a_2^\dagger a_2 - a_1^\dagger a_2^\dagger \Delta - \Delta^* a_2 a_1$$

e que pode ser escrito da seguinte forma:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} a_1^\dagger & a_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_1 & -\Delta \\ -\Delta^* & \nu\epsilon_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2^\dagger \end{pmatrix} - \nu\epsilon_2$$

em que $\nu = +1$ para bosoẽs e $\nu = -1$ para fermiões.

a) Pretendendo-se diagonalizar o Hamiltoniano através da transformação de Bogoliubov-Valatin dada por

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2^\dagger \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2^\dagger \end{pmatrix}$$

a que condições deve satisfazer a matriz U?

b) Resolva o problema da diagonalização do Hamiltoniano, obtendo as energias $\tilde{\epsilon}_1, \tilde{\epsilon}_2$ e a matriz da transformação U.

c) Obtenha a equação de movimento de $\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2^\dagger \end{pmatrix}$. Mostre que o problema da diagonalização desta equação de movimento conduz aos mesmos resultados da alínea anterior.

9. Considere o Hamiltoniano de Heisenberg antiferromagnético, com o Hamiltoniano

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{|J|}{2} \sum_{<i,j>} \hat{\vec{S}}_i \cdot \hat{\vec{S}}_j - H \sum_i \hat{S}_i^z$$

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

10. Determine a forma como o valor da magnetização, dada pela teoria de campo médio, é reduzida pelas ondas de spin, tanto no caso do ferromagnetismo como no caso do antiferromagnetismo. Analise a dependência na dimensionalidade do espaço e determine a dimensão abaixo da qual o parâmetro de ordem é destruído pelas flutuações (dimensão crítica inferior).

11. Tal como se viu no problema anterior os grupos $SU(2)$ e $O(3)$ tendem, no limite $S \to \infty$, para o grupo de Weyl, caracterizado pelos operadores $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$, obedecendo a $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$. É um exemplo de "group contraction". Outro exemplo é o grupo de Lorentz que tende para o grupo de Galileu no limite $c \to \infty$. Indique os geradores do grupo de Lorentz e obtenha as suas relações de comutação. Mostre que no limite $c \to \infty$ se obtém o grupo de Galileu.