TRANSIÇÕES DE FASE
Curso de Engenharia Física Tecnológica
Série 2

1. a) Obtenha a função de partição $Z(h)$, a energia livre de Gibbs $F(h)$ e a energia livre de Helmholtz $\Gamma(m)$ de um spin de Ising. Compare a expressão obtida para a energia livre de Helmholtz com a expressão da entropia de mistura de duas populações de spins up e down. Como justifica este resultado?

b) Considere um spin $\vec{S}$ com n componentes e comprimento S fixo. Obtenha os primeiros termos do desenvolvimento para pequenos campos (até ao termo quártico) da função de partição $Z(h)$, da energia livre de Gibbs $F(h)$ e da energia livre de Helmholtz $\Gamma(m)$. Obtenha os coeficientes necessários do desenvolvimento da função de partição $Z(h)$ usando argumentos de simetria. Tente obter uma relação de recorrência para os coeficientes da expansão da função de partição $Z(h)$.

2. 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 anti-ferromagnético, tratando de um modo análogo as magnetizações das duas subredes.

3. 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.

vi) Considere o Hamiltoniano de Heisenberg

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

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.

4. a) Considere uma cadeia de N spins $\frac{1}{2}$. Mostre que os operadores definidos pela transformação de Jordan-Wigner

$$c(n) = e^{i\pi\sum_{j=1}^{n-1} S^+(j)S^-(j)} S^-(n)$$

$$c^\dagger(n) = S^+(n) e^{-i\pi\sum_{j=1}^{n-1} S^+(j)S^-(j)}$$

são operadores de fermiões sem spin, i.e. que eles satisfazem as relações de anticomutação $\{c(m), c(n)^\dagger\} = \delta_{mn}$, $\{c^\dagger(m), c^\dagger(n)\} = 0$ e $\{c(m), c(n)\} = 0$. Mostre que se tem $c^\dagger(n)c(n) = S^+(n)S^-(n)$.

b) Inverta a transformação dada exprimindo os operadores de spin em termos dos operadores fermiónicos.

5. Considere uma cadeia de N spins $\frac{1}{2}$, com condições periódicas e interacções dadas por

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} J_\perp \sum_{j=1}^{N} (S^+(j)S^-(j+1) + S^-(j)S^+(j+1)) + J_\parallel \sum_{j=1}^{N} S^z(j)S^z(j+1)$$

a) Use a transformação de Jordan-Wigner para transformar este problema num problema equivalente para fermiões. Preste atenção às condições fronteira e à paridade de N. Qual é o sub-espaço fermiónico correspondente ao sub-espaço dos spins definido por a magnetização total ser nula?

b) Considere o caso $J_\parallel = 0$. Diagonalize completamente o problema por transformação de Fourier e obtenha a relação de dispersão.

6. A teoria da supercondutividade pode ser obtida fazendo um tratamento de campo médio. O operador $b_k = c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}$ flutua fracamente em torno da sua média $< b_k >=< c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} >$. Desprezando termos bilineares nestas flutuações obtemos o Hamiltoniano efectivo

$$\begin{aligned} \mathcal{H} - \mu N &= \sum_{k,\sigma} (\epsilon_k - \mu) c^\dagger_{k\sigma} c_{k\sigma} + \sum_{k,k'} V_{k,k'} [c^\dagger_{k\uparrow} c^\dagger_{-k\downarrow} < b_{k'} > + < b^\dagger_k > c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \\ &\quad - < b^\dagger_k >< b_{k'} >] = \\ &= \sum_{k,\sigma} (\epsilon_k - \mu) c^\dagger_{k\sigma} c_{k\sigma} - \sum_{k} (\Delta_k c^\dagger_{k\uparrow} c^\dagger_{-k\downarrow} + \Delta^*_k c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} + < b^\dagger_k > \Delta_k) \end{aligned}$$

tendo definido $\Delta_k = -\sum_{k'} V_{k,k'} < b_{k'} >$.

Como este Hamiltoniano é bilinear nos operadores de criação e de destruição pode ser diagonalizado por uma transformação linear destes operadores. Como o estado $k \uparrow$ está acoplado apenas ao estado $-k \downarrow$ basta trabalhar no sub-espaço destes dois estados apenas. Fazemos então a transformação de Bogoliubov-Valatin

$$\begin{aligned} c_{k\uparrow} &= u^*_k \gamma_{k\uparrow} + v_k \gamma^\dagger_{-k\downarrow} \\ c^\dagger_{-k\downarrow} &= -v^*_k \gamma_{k\uparrow} + u_k \gamma^\dagger_{-k\downarrow} \end{aligned}$$

onde $\gamma_{k\uparrow}, \gamma_{-k\downarrow}$ são operadores fermiónicos e os coeficientes u_k, v_k são escolhidos de modo a diagonalizar o Hamiltoniano.

a) Qual a condição que u_k, v_k devem satisfazer para que tanto os operadores $c_{k\uparrow}, c_{-k\downarrow}$ como os operadores $\gamma_{k\uparrow}, \gamma_{-k\downarrow}$ sejam operadores fermiónicos? Como seria se fossem operadores bosónicos em vez de operadores fermiónicos?

b) Qual a condição que u_k, v_k devem satisfazer para que os termos anómalos desapareçam, i.e. para que os coeficientes de $\gamma^\dagger_{k\uparrow}\gamma^\dagger_{-k\downarrow}$ e de $\gamma_{k\uparrow}\gamma_{-k\downarrow}$ se anulem?

c) Resolva as equações obtidas nas duas alíneas anteriores e obtenha u_k, v_k.

d) Mostre que o Hamiltoniano diagonalizado toma a forma

$$\mathcal{H} - \mu N = \sum_k E_k(\gamma^\dagger_{k\uparrow}\gamma_{k\uparrow} + \gamma^\dagger_{-k\downarrow}\gamma_{-k\downarrow}) + \sum_k((\epsilon_k - \mu) - E_k + \Delta^*_k < b_k >)$$

e indique a expressão de E_k. Indique a expressão da energia de condensação da transição para a fase supercondutora.

c) Admitindo que os operadores fermiónicos $\gamma_{k\uparrow}, \gamma_{-k\downarrow}$ são caracterizados por uma distribuição de Fermi à temperatura T, mostre que a auto-consistência da solução obtida, exige, usando as equações de definição de Δ_k e de b_k, que se tenha

$$\begin{aligned}\Delta_k &= -\sum_{k'} V_{k,k'} u^*_{k'} v_{k'}[1 - 2f(E_{k'})] \\ &= -\sum_{k'} V_{k,k'}\Delta_{k'}[1 - 2f(E_{k'})]/2E_{k'}\end{aligned}$$

para o gap de energia, à temperatura T.