TRANSIÇÕES DE FASE
Curso de Engenharia Física Tecnológica
Série 2b

1. Considere o Hamiltoniano efectivo ou de campo médio para a supercondutividade:

$$\mathcal{H}_{eff} - \mu N = \sum_{k,\sigma} (\epsilon_k - \mu) c^\dagger_{k\sigma} c_{k\sigma} - \sum_k (c^\dagger_{k\uparrow} c^\dagger_{-k\downarrow} \Delta_k + \Delta^*_k c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow})$$

a) Escreva as equações de movimento dos operadores $c_{-k\downarrow}, c^\dagger_{k\uparrow}$, acoplados entre si. Considere o operador $\gamma_{-k\downarrow} = u_k c_{-k\downarrow} + v_k c^\dagger_{k\uparrow}$. Quais as condições que os coeficientes u_k, v_k devem satisfazer para que a equação de movimento deste operador seja

$$i \frac{d\gamma_{-k\downarrow}}{dt} = E_k \gamma_{-k\downarrow}$$

i. e, seja a equação de movimento de um operador de destruição livre? Compare com as equações da teoria variacional de BCS.

b) Proceda de uma forma análoga para os operadores $c_{k\uparrow}, c^\dagger_{-k\downarrow}$, $\gamma_{k\uparrow} = u_k c_{k\uparrow} - v_k c^\dagger_{-k\downarrow}$ e energia E_k.

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

$$\mathcal{H} = \epsilon_1 a^\dagger_1 a_1 + \epsilon_2 a^\dagger_2 a_2 - a^\dagger_1 a^\dagger_2 \Delta - \Delta^* a_2 a_1$$

e que pode ser escrito da seguinte forma:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} a^\dagger_1 & a_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_1 & -\Delta \\ -\Delta^* & \nu\epsilon_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a^\dagger_2 \end{pmatrix} - \nu\epsilon_2$$

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

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a^\dagger_2 \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} b_1 \\ b^\dagger_2 \end{pmatrix}$$

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.

3. a) Defina os operadores $T_k^- = b_k = c_{-k}c_k$, $T_k^+ = b_k^\dagger = c_k^\dagger c_{-k}^\dagger$. Calcule $[T_k^+, T_k^-] = 2T_k^0$, e verifique que os operadores T_k^+, T_k^-, T_k^0 satisfazem uma álgebra de spin $\frac{1}{2}$. Qual o operador que corresponde à identidade?

b) Considere a transformação $U_k = e^{\zeta_k T_k^+ - \zeta_k^* T_k^-}$, em que $\zeta_k = \frac{\theta_k}{2} e^{i\varphi_k}$. Obtenha o seguinte "disentangling theorem"

$$U_k = e^{\zeta_k T_k^+ - \zeta_k^* T_k^-} = e^{\alpha_k T_k^+} (1 + |\alpha_k|^2)^{T_k^0} e^{-\alpha^* T_k^-}$$

com $\alpha_k = \tan \frac{\theta_k}{2} e^{i\varphi_k}$.

c) Verifique que o vácuo usual $|0>$ é transformado no estado

$$|\phi_k >= U_k|0 >= (u_k + v_k T_k^+)|0 >$$

em que $u_k = \frac{1}{\sqrt{1+|\alpha_k|^2}}$, $v_k = \frac{\alpha_k}{\sqrt{1+|\alpha_k|^2}}$.

d) Obtenha os operadores $\gamma_k = U_k c_k U_k^{-1}$, $\gamma_{-k} = U_k c_{-k} U_k^{-1}$. Compare com as expressões da transformação de Bogoliubov-Valatin para a teoria de BCS.

e) Se os operadores T_k^+, T_k^-, T_k^0 verificassem uma álgebra de spin S geral, este "disentangling theorem" continuaria a ser válido? Dê um argumento justificando a sua validade. Como faria a sua derivação, no caso geral?

4. Considere os spinores $\psi_k = \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}$ e $\psi_k^\dagger = \begin{pmatrix} c_{k\uparrow}^\dagger & c_{-k\downarrow} \end{pmatrix}$. Defina os operadores $T_k^+ = \psi_k^\dagger \tau^+ \psi_k$, $T_k^- = \psi_k^\dagger \tau^- \psi_k$, $T_k^0 = \psi_k^\dagger \frac{\tau^3}{2} \psi_k$, em que $\tau^\pm = \frac{1}{2}(\sigma^1 \pm i\sigma^2)$, sendo τ^i, com $i = 1, 2, 3$, as matrizes de Pauli usuais.

Mostre que o Hamiltoniano reduzido de BCS toma a forma

$$\mathcal{H}_{red} - \mu N = \sum_k (\epsilon_k - \mu)(\psi_k^\dagger \tau^3 \psi_k + 1) + \sum_{k,k'} V_{k,k'} (\psi_k^\dagger \tau^+ \psi_k)(\psi_{k'}^\dagger \tau^- \psi_{k'})$$

donde resulta o Hamiltoniano de campo médio

$$\mathcal{H}_{eff} - \mu N = \sum_k (\epsilon_k - \mu)(2T_k^0 + 1) - \sum_k (T_k^+ \Delta_k + \Delta^* T_k^-)$$

Compare com a teoria de Stoner para o ferromagnetimo no modelo de Hubbard.

Referências:

C. Kittel, Quantum Theory of Solids, cap.8, J. Wiley & Sons.
P. W. Anderson, Phys. Rev. **112**, 1900 (1958).
Y. Nambu, Phys. Rev. **117**, 648 (1960).

5. Considere os operadores definidos por

$$\hat{S}^a = a^\dagger_\alpha S^a_{\alpha\beta} a_\beta$$

(usando a convenção de soma sobre os índices repetidos) em que os operadores $a^\dagger_\alpha$, a_β são operadores de criação e de destruição bosónicos ou fermiónicos e $S^a_{\alpha\beta}$ são as matrizes da representação S do momentum angular.

a) Use as identidades

$$[AB, CD] = A[B, C]D - [C, A]BD + CA[B, D] - C[D, A]B$$

$$[AB, CD] = A\{B, C\}D - \{C, A\}BD + CA\{B, D\} - C\{D, A\}B$$

ou

$$[AB, CD] = A[B, C]D - AC[D, B] + [A, C]DB - C[D, A]B$$

$$[AB, CD] = A\{B, C\}D - AC\{D, B\} + \{A, C\}DB - C\{D, A\}B$$

para verificar que os operadores $\hat{S}^a$ satisfazem as relações de comutação que caracterizam os operadores de spin.

A representação de Schwinger consiste em usarmos operadores bosónicos e matrizes de Pauli, e a representação de Abrikosov em usarmos operadores fermiónicos e matrizes de spin S.

No caso de as matrizes $S^a_{\alpha\beta}$ serem de spin $\frac{1}{2}$, use a identidade

$$\sigma^l_{\alpha\beta}\sigma^l_{\mu\nu} = 2\delta_{\alpha\nu}\delta_{\mu\beta} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\mu\nu}$$

para exprimir o operador $\hat{\vec{S}}^2$ em termos do operador número $N = a^\dagger_\alpha a_\alpha$.

Ao usarmos estas representações o espaço de Hilbert é alargado. Como são representados os $2S+1$ estados físicos?

b) Considere os spinores $\psi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2^\dagger \end{pmatrix}$ e $\psi^\dagger = \begin{pmatrix} a_1^\dagger & a_2 \end{pmatrix}$ e defina os operadores $\vec{T} = \psi^\dagger \frac{\vec{\sigma}}{2} \psi$, os quais satisfazem a álgebra de spin $\frac{1}{2}$.

Considere agora os spinores $\varphi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$ e $\varphi^\dagger = \begin{pmatrix} a_1^\dagger & a_2^\dagger \end{pmatrix}$ e defina os operadores $\vec{S} = \varphi^\dagger \frac{\vec{\sigma}}{2} \varphi$, os quais satisfazem também a álgebra de spin $\frac{1}{2}$.

Verifique que os operadores $\vec{T}$ e $\vec{S}$ comutam entre si. Qual a sua acção no espaço dos estados?

6. Considere o modelo de Ising a uma dimensão, com interacções de primeiros vizinhos apenas, em que N spins de Ising i.e. variáveis clássicas $\sigma_i = \pm 1$, interactuam entre si de acordo com o Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - H \sum_i \sigma_i$$

a) Defina a matriz de transferência V de um ponto para o seu vizinho, com elementos $V_{i,i+1} = e^{\beta\left(J\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{H}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1})\right)}$. Exprima a função de partição $Z = Tre^{-\beta\mathcal{H}}$ em termos da matriz de transferência. Considere o caso de haver ou não condições fronteira periódicas.

Este resultado ilustra a equivalência entre um problema quântico a d dimensões e um problema clássico a $d+1$ dimensões, de que a construção do integral de caminho é um exemplo.

b) Por diagonalização da matriz de transferência calcule a função de partição Z, a magnetização $M = \frac{1}{N} < \sum_i \sigma_i >$ e a função de correlação $\chi_{ij} =< \sigma_i \sigma_j >$. Considere condições fronteira periódicas e faça $H = 0$, numa primeira fase. Considere o limite termodinâmico, $N \rightarrow \infty$.

c) Verifique a relação (teorema da flutuação-dissipação)

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = \beta \sum_{j=1}^{N} [< \sigma_i \sigma_j > - < \sigma_i >< \sigma_j >]$$

entre a susceptibilidade χ e a função de correlação χ_{ij}.