FI 104 - Lista 3

Exercícios - Matriz densidade

(1) Calcule $\left\langle \hat{\mathcal{H}} \right\rangle$ para uma partícula livre. Sugestão: utilize a representação de momentos.

(2) Calcule a matriz densidade, $\langle \vec{r}'_1, ..., \vec{r}'_N | \hat{\rho} | \vec{r}_1, ..., \vec{r}_N \rangle$ para um sistema de N partículas livres em uma caixa com volume $V = L^3$ e condições periódicas de contorno. Assuma que a função de onda de muitas partículas pode ser escrita como um produto de estados de uma partícula.

Exercícios - Segunda quantização

3) Considere uma rede cristalina onde os íons estão separados de tal forma que as funções de onda dos elétrons de valência encontram-se fortemente ligadas aos íons. Expanda o Hamiltoniano em uma base de estados localizados que efflete os estados orbitais atômicos do íon isolado (mas não são os mesmos.). Essa representação é denominada **estados de Wannier**, $|\psi_{\vec{R}n} >$, e é definida pelas equações

$$|\psi_{\vec{R}n} > \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}}^{z.B.} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} |\psi_{\vec{k}n} >$$

e

$$|\psi_{\vec{k}n} > = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} |\psi_{\vec{R}n} >$$

onde $\vec{R}$ representa as coordenadas dos sítios da rede e $\sum_{\vec{k}}^{z.B.}$ representa a soma sobre os vetores de onda na primeira zona de Brillouin. A vantagem da representação das funções de Wannier em relação aos orbitais atômicos é que as primeiras são, por construção, ortogonais.

a) Construa o hamiltoniano na aproximação do elétron fortemente ligado em segunda quantização na representação das funções de Wannier. Em outras palavras, simplificando para apenas um orbital, mostre que o hamiltoniano pode ser escrito na forma

$$\mathcal{H} = \sum_{ii'} a^{\dagger}_{i\sigma} t_{ii'} a_{i'\sigma}$$

onde $a^{\dagger}_{i\sigma}$ é o operador de criação de um elétron no estado de Wannier $i\sigma$, onde i representa o sítio e σ o spin do elétron. Encontre a expressão para $t_{ii'}$.

b) Aplique o hamiltoniano para uma rede quadra com $t_{ii'} = -t$, levando em conta apenas a interação entre os primeiros vizinhos e encontre a dispersão eletrônica nesse caso. Considere o sistema semi-preenchido e localize o nível de Fermi.

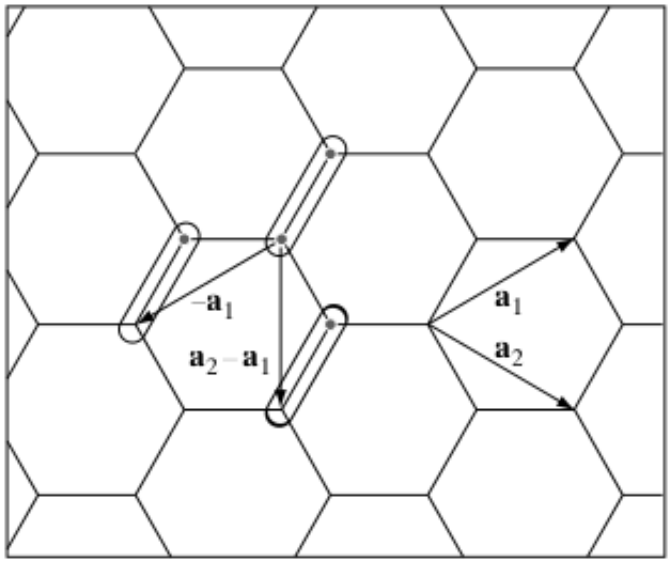

Figure 1: Rede do grafeno.

c) Considere o grafeno, lembrando que a célula unitária possui dois átomos na base, e mostre que a representação de Fourier do Hamiltoniano na aproximação do elétron fortemente ligado tem a forma

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}} &= -\sum_{\vec{r}\vec{r}'}(ta_1^\dagger(\vec{r})a_2(\vec{r}') + c.c.) \rightarrow_{transf.\,Fourier} \\ &= \sum_{\vec{k}\sigma}\begin{pmatrix} a_{1\sigma}^\dagger & a_{2\sigma}^\dagger \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -tf(\vec{k}) \\ -tf^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_{1\sigma} \\ a_{2\sigma} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

onde os índices 1(2) referem-se as duas redes triangulares (ou aos dois átomos da base). e

$$f(\vec{k}) = 1 + e^{-ik_1a} + e^{i(-k_1+k_2)a}$$

e a é o parâmetro indicado na figura onde os vetores unitários são $\vec{a}_1 = (\sqrt{3}, 1)a/2$ e $\vec{a}_2 = (\sqrt{3}, -1)a/2$ (não confundir com os operadores de criação e aniquilação que atuam nos sítios).

d) Encontre a dispersão dos elétrons nesse sistema e o nível de Fermi.

Refs.: para uma discussão dos estados de Wannier, ver cap. 6 de J.M. Ziman, **Principles of the Theory of Solids**, Cambridge, 2a. ed., 1972.

Exercícios - Teoria de Campo Médio

4. Mostre que a resposta do sistema (susceptibidade) na Teoria de Landau é

$$\chi(\vec{r},0) = \frac{1}{c}\frac{1}{|\vec{r}|}\frac{1}{4\pi}\exp[|\vec{r}|/\xi]$$

onde ξ é o comprimento de correlação. Faça os detalhes. Essa equação é a eq. 55 das notas VII-4.2 ou a eq. 4.3.18 do Chaikin & Lubensky.

5. *Ponto tricrítico.* Considere uma ordem a mais na teoria de Landau-Ginzburg. A densidade de energia livre é

$$f = \frac{1}{2}r\langle\phi\rangle^2 + u_4\langle\phi\rangle^4 + u_6\langle\phi\rangle^6 + \frac{1}{2}c(\vec{\nabla}\langle\phi\rangle)^2 - hm$$

onde $u_4$pode ser positivo ou negativo. Para $u_4 < 0$, temos que ter u_6 positivo para garantir a estabilidade.

(a) Esquematize a densidade de energia f para diferentes valores de r. Mostre que há uma transição de primeira ordem para $u_4 < 0$ e $h = 0$.

(b) Calcule $\bar{r}$ e a descontinuidade de $\langle\phi\rangle$ nessa transição.

(c) Para $h = 0$ e $u_4 > 0$, esquematize a linha de transição de fase no plano (u_4, r), identificando as fases e a ordem das transições de fase.

(d) O ponto especial $u_4 = r = 0$, separando as transições de fase de primeira e segunda ordem, é um ponto *tricrítico*. Para $u_4 = 0$, calcule os expoentes tricríticos $\beta, \delta\gamma, \alpha$, que determinam o comportamento das singularidades da magnetização, susceptibilidade e calor específico. ($C_v \propto t^{-\alpha}$, $m(h=0) \propto t^{\beta}$, $m(t=0) \propto h^{1/\delta}$, $\chi \propto t^{-\gamma}$.