

FI 105 - 2s2015 - 2nd Quantization

Exercícios - Segunda quantização

1) 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**, $|\psi_{\vec{R}n}\rangle$, e é definida pelas equações

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

e

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

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

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

onde $a_{i\sigma}^\dagger$ 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.

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

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{\vec{r}\vec{r}'} (t a_1^\dagger(\vec{r}) a_2(\vec{r}') + c.c.) \xrightarrow{transf. Fourier}$$

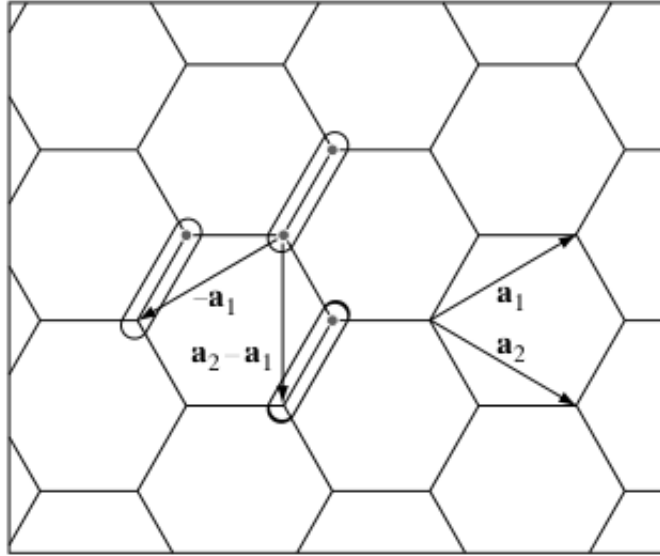


Figure 1: Rede do grafeno.

$$= \sum_{\vec{k}\sigma} \begin{pmatrix} a_{1\sigma}^\dagger & a_{2\sigma}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -tf(\vec{k}) \\ -tf^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1\sigma} \\ a_{2\sigma} \end{pmatrix}$$

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

$$f(\vec{k}) = 1 + e^{-ik_1 a} + e^{i(-k_1 + k_2)a}$$

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.

Problema 2 - Interações magnéticas - RKKY (Ruderman, Kittel, Kasuya, Yosida)

Impurezas magnéticas podem interagir indiretamente na presença de um gás de portadores livres. Por exemplo, a liga $CuMn$ com baixa concentração de Mn apresenta interação magnética mediada pelo gás de elétrons (o sistema é metálico). Outro exemplo é a liga semicondutora $(Ga, Mn)As$, com baixa concentração de Mn . Nesse caso, o Mn substitucional ao Ga atua como impureza

magnética e como aceitador, criando um gás de buracos que media a interação entre os íons magnéticos. Os sistemas apresentando ressonância magnética gigante também têm manifestação da interação RKKY. Nesse problema, vamos deduzir essa interação.

Consideraremos que a impureza magnética tenha spin \vec{S}_I . Os elétrons no sólido (cristalino) são descritos por funções de Bloch,

$$\varphi_{\vec{k}s}^0(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}s}(\vec{r}) = \varphi_{\vec{k}}^0(\vec{r})|s\rangle$$

normalizadas em um volume unitário. s é o índice de spin para S_z . A interação de contato com o íon magnético é descrita pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \sum_j J(\vec{r}_j - \vec{R}_n) \vec{s}_j \cdot \vec{S}_I$$

onde $J(\vec{r} - \vec{R}_n)$ é proporcional a uma função delta e \vec{r}_j é a posição do elétron j .

Vamos trabalhar em segunda quantização. Os operadores de campo para o elétron são

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}) &= \sum_{\vec{k}s} c_{\vec{k}s} \varphi_{\vec{k}s}^0(\vec{r}) \\ \Psi^\dagger(\vec{r}) &= \sum_{\vec{k}s} c_{\vec{k}s}^\dagger \varphi_{\vec{k}s}^{*0}(\vec{r}) \end{aligned}$$

onde c e c^\dagger são operadores de aniquilação e criação de férmions.

O hamiltoniano se escreve na forma

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}\vec{k}'s's'} \left[\int d\vec{r} \varphi_{\vec{k}s}^{*0}(\vec{r}) J(\vec{r} - \vec{R}_n) \vec{s} \cdot \vec{S}_I \varphi_{\vec{k}s}^0(\vec{r}) \right] c_{\vec{k}'s'}^\dagger c_{\vec{k}s}$$

onde \vec{s} opera no spin do elétron.

(a) Escrevendo $\varphi_{\vec{k}s}(\vec{r}) = \varphi_{\vec{k}}(\vec{r})|s\rangle$, mostre que

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}_n} J(\vec{k}, \vec{k}') \left[S_I^+ c_{\vec{k}'\downarrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow} + S_I^- c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\downarrow} + S_I^z (c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow} - c_{\vec{k}'\downarrow}^\dagger c_{\vec{k}\downarrow}) \right]$$

Qual a expressão para $J(\vec{k}, \vec{k}')$?

Considere agora que $J(\vec{r}) = J\delta(\vec{r})$. Encontre $J(\vec{k}, \vec{k}')$.

(b) Considere a aproximação de Born para a função de onda, em primeira ordem em J , com $\vec{R}_n = 0$:

$$\varphi_{\vec{k}\uparrow}(\vec{r}) = \varphi_{\vec{k}\uparrow}^0(\vec{r}) + \sum'_{\vec{k}'s} \varphi_{\vec{k}'s}^0(\vec{r}) \frac{\langle \varphi_{\vec{k}'s} | \mathcal{H} | \varphi_{\vec{k}\uparrow} \rangle}{\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'}}$$

onde \sum' significa que a soma exclui o termo $\vec{k}'s \equiv \vec{k}\uparrow$. Na extensão do contínuo, teremos

$$\sum'_{\vec{k}} \rightarrow P \int d\vec{k}$$

onde $P \int$ significa a parte principal.

Considere que a parte periódica da função de Bloch seja independente de \vec{k} . Calcule a densidade para cada spin

$$\rho_s(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}s}^\dagger(\vec{r}) \varphi_{\vec{k}s}(\vec{r})$$

e calcule a densidade mostrando que

$$\rho_{\pm}(\vec{r}) = n \left[1 \mp \frac{9n}{\varepsilon_F} \pi J F(2k_F r) S_n^z \right]$$

onde

$$F(x) = \frac{x \cos x - \sin x}{x^4}$$

e a concentração de elétrons é $2n$ (n para cada spin).

Mostre que para $k_F r \gg 1$, temos a forma assintótica

$$\rho_{\downarrow} - \rho_{\uparrow} \approx \frac{9\pi n^2}{4\varepsilon_F} J S_n^z \frac{\cos(2k_F r)}{(k_F r)^3}$$

Sugestão: para a integração, faça a extensão para o plano complexo.

(c) Considere agora a existência de uma segunda impureza magnética, localizada em um ponto da rede indexado por m , a distância r de n e spin S_m . Essa impureza magnética percebe a polarização da outra impureza em n por meio da interação com os elétrons de condução.

A interação de segunda ordem entre as duas impurezas magnéticas pode ser escrita como

$$\mathcal{H}''(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}\vec{k}'ss'} \frac{\langle \varphi_{\vec{k}s} | \mathcal{H} | \varphi_{\vec{k}'s'} \rangle \langle \varphi_{\vec{k}'s'} | \mathcal{H} | \varphi_{\vec{k}s} \rangle}{\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'}}$$

Mostre que esse hamiltoniano tem a forma

$$\mathcal{H}''(\vec{r}) = S_n \cdot S_m \frac{4J^2 m^* k_F^4}{(2\pi)^3} F(2k_F r)$$

Calcule explicitamente esse hamiltoniano fazendo as mesmas aproximações que fizemos antes. Faça um gráfico da interação em função da distância entre as impurezas magnéticas.

Sugestão: não precisa fazer as integrais que são similares. Para a soma sobre os spins utilize as propriedades entre operadores (matrizes) de Pauli.

(d) Considere agora uma liga $Ga_{1-x}Mn_xAs$, onde x é a fração de Mn na amostra. A estrutura cristalina é uma blenda de zinco. Assuma o mesmo parâmetro de rede do $GaAs$ ($a = 5.653$). Cada Mn atua como uma impureza magnética com spin $5/2$ e como aceitador (liberando um buraco). Assuma uma dispersão parabólica para os buracos, com massa efetiva $m_h = 0.45 m_0$, onde m_0 é a massa do elétron livre. Calcule a distância média entre os Mn e calcule a região de concentração x de Mn para a qual a oscilação na interação pode ser desprezada (ou seja, podemos considerar a interação como sendo sempre ferromagnética).

O que você espera, no caso geral, para a interação se i) fizermos uma aproximação de campo médio e ii) se formos além da aproximação de campo médio e considerarmos as distâncias aleatórias das impurezas? Note que essa interação não se limita aos primeiros vizinhos.