

## Segunda quantização: aplicações

Refs.: Fetter, Mahan, Bruus, Fiedkin, Altland;

Pethick and Smith, BEC in dilute gases;

Madelung, Introduction to solid-state theory;

Yosida, theory of magnetism;

Kittel, quantum theory of solids.

Ex. 1: gás de elétrons não-interagentes;

considerar: sistema  $N$  elétrons livres, temperatura  $T=0$ ;

(p/ detalhes, veja Sec. 3, Fetter e Cap. 2, Bruus)

Eqs. (36.3) e (40.1)  $\rightarrow$  hamiltoniano:

$$H = \int d^3r \psi^\dagger(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right) \psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{r}} \sum_{\sigma} \epsilon(\vec{r}) C_{\vec{r}\sigma}^\dagger C_{\vec{r}\sigma} \quad (45.1)$$

onde

$$\epsilon(\vec{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

 $C_{\vec{r}\sigma}^\dagger$ : op. criação partícula no estado de partícula única  $|\vec{r}\sigma\rangle$  $C_{\vec{r}\sigma}$ : " destruição " do " " " " " "

$$\text{e álgebra (32.4): } \{C_{\vec{r}\sigma}, C_{\vec{p}\sigma'}\} = \{C_{\vec{r}\sigma}^\dagger, C_{\vec{p}\sigma'}^\dagger\} = 0$$

(45.2)

$$\text{e } \{C_{\vec{r}\sigma}, C_{\vec{p}\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\vec{r}, \vec{p}} \delta_{\sigma, \sigma'}$$

nesse caso, veja Eq. (39.1):

$$\langle \vec{r} | \vec{r}\sigma \rangle = \psi_{\vec{r}\sigma}(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \chi_\sigma; \quad k_i = \frac{2\pi n_i}{L}, \quad i = x, y, z$$

$$n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$\text{e } \chi_\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \chi_\downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

(45.3)

estado fundamental:

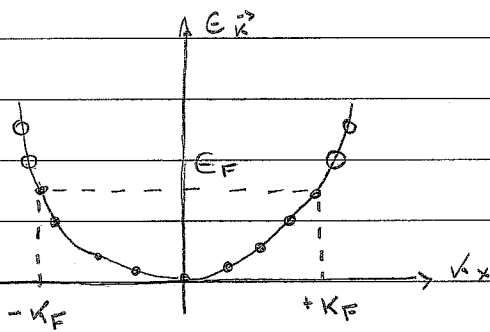
$$|FS\rangle = \prod_{\vec{k}} \prod_{\sigma} C^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} |0\rangle \quad \text{v\u00e1cuo}$$

: "Fermi sphere", (46.1)  
" " " sea "

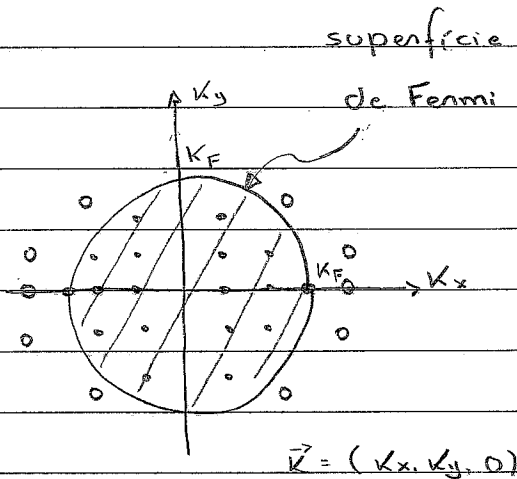
i.e., todos os estados de part\u00edcula \u00fanica  $|\vec{k}\sigma\rangle$ ,  $k \leq k_F$  est\u00e3o duplamente ocupados.

$k_F$ : n\u00famero de onda de Fermi

esquematicamente:



$$\vec{k} = (k_x, 0, 0)$$



$$\vec{k} = (k_x, k_y, 0)$$

Defini\u00e7\u00e3o: superf\u00edcie de Fermi: superf\u00edcie (conjunto p\u00f3s no espa\u00e7o do momento) que separa os estados ocupados  $|\vec{k}| \leq k_F$  dos estados vazios  $|\vec{k}| > k_F$ . (46.2)

propriedades do estado fundamental,

- valor esperado op. n\u00famero de part\u00edculas (33.2):

$$n_{\vec{k}\sigma} = \langle FS | \hat{n}_{\vec{k}\sigma} | FS \rangle = \langle FS | C^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} C_{\vec{k}\sigma} | FS \rangle = \begin{cases} 1, & \text{se } k \leq k_F \\ 0, & \text{se } k > k_F \end{cases}$$

$$= n_{\vec{k}\sigma} |FS\rangle$$

$$= \Theta(k_F - |\vec{k}|) : \text{ocupac\u00e3o do estado de part\u00edcula \u00fanica } |\vec{k}\sigma\rangle \quad (46.3)$$

Como Eq (27.1):  $\hat{N} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \hat{n}_{\vec{k}\sigma} \stackrel{=} {=} \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{k}} \rightarrow \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$ , temos que

$$N = \langle FSI \hat{N} IFS \rangle = \sum_{\vec{k}, \sigma} \langle FSI \hat{n}_{\vec{k}\sigma} IFS \rangle = \sum_{\vec{k}, \sigma} n_{\vec{k}\sigma} =$$

$$= 2 \cdot \sum_{|\vec{k}| \leq k_F} 1 = 2 \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} d^3k \theta(k_F - k) = \frac{V k_F^3}{3\pi^2}; \quad V = L^3 \tag{47.1}$$

ou  $k_F^3 = 3\pi^2 \frac{N}{V} = 3\pi^2 n$ : relação entre  $k_F$  e a densidade de partículas  $n$

Definição:  $p_F = \hbar k_F$ : momento de Fermi

$$v_F = \hbar k_F / m: \text{velocidade de Fermi} \tag{47.2}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}: \text{energia de Fermi}$$

Ex.: cobre:  $n = 8.47 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$

$$\hookrightarrow k_F = 13.6 \text{ nm}^{-1} \quad v_F = 1.57 \cdot 10^6 \text{ m/s} = 0.005c \quad E_F = 7.03 \text{ eV}$$

- energia do estado fundamental:

Eqs. (45.1) e (46.1):

$$E_0 = \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \langle FSI \hat{n}_{\vec{k}\sigma} IFS \rangle = 2 \cdot \frac{\hbar^2}{2m} V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k^2 \theta(k_F - k)$$

$$= 2 \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \frac{V}{8\pi^3} \int_0^{k_F} dk k^4 \int d\Omega = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{5\pi^2} V k_F^5$$

$$k_F^2 V k_F^3 = k_F^2 (3\pi^2 N)$$





onde álgebra ops.  $b$  e  $b^\dagger$ : Eq. (49.2)!

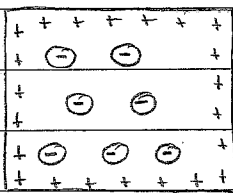
Ex. 2: Gás de elétrons degenerado,

Considerar: sistema  $N$  elétrons interagentes

e volume  $V = L^3$

⊕ distribuição uniforme de íons positivos @ paredes

volume  $V \sim$  neutralidade de carga sistema;



: modelo simples p/ metal

(49.1)

(jellium model)

hamiltoniano:

$$H = H_{el} + H_{ion} + H_{ion-el}$$

(49.2)

onde hamiltoniano eletrônico  $H_{el} =$  Eq. (42.1):

$$H_{el} = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon(\vec{k}) C_{\vec{k}\sigma}^\dagger C_{\vec{k}\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{p}, \vec{q}} \sum_{\sigma, \sigma'} v_{\vec{q}} C_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^\dagger C_{\vec{p}-\vec{q}, \sigma'} C_{\vec{p}, \sigma'} C_{\vec{k}, \sigma};$$

$H_{ion} \sim$  energia potencial eletrostática p/ distribuição de carga  $\rho_{ion}(\vec{r})$ :

$$H_{ion} = \frac{1}{2} \int d^3n d^3n' \rho_{ion}(\vec{n}) \rho_{ion}(\vec{n}') v(\vec{n}-\vec{n}');$$

$H_{ion-el} \sim$  energia potencial elétrons devido potencial eletrostático  $\sim$  distribuição de cargas  $\rho_{ion}(\vec{r})$ :



notas: termo  $\vec{q} = 0$  de Hee:

$$\frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{p}} \sum_{\sigma, \sigma'} \frac{4\pi e^2}{\alpha^2} C_{\vec{k}\sigma}^\dagger C_{\vec{p}\sigma'}^\dagger C_{\vec{p}\sigma'} C_{\vec{k}\sigma} =$$

$$- C_{\vec{p}\sigma'}^\dagger C_{\vec{k}\sigma} C_{\vec{p}\sigma'} = (C_{\vec{k}\sigma} C_{\vec{p}\sigma'}^\dagger - \delta_{\vec{k}, \vec{p}} \delta_{\sigma, \sigma'}) C_{\vec{p}\sigma}$$

$$= \frac{2\pi e^2}{\alpha^2} \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \vec{p}} \sum_{\sigma, \sigma'} \hat{n}_{\vec{k}\sigma} (\hat{n}_{\vec{p}\sigma} - \delta_{\vec{k}, \vec{p}} \delta_{\sigma, \sigma'}) = \frac{2\pi e^2}{\alpha^2} \frac{1}{V} (\hat{N}^2 - \hat{N})$$

pois  $\neq$  partículas fixo:  $\hat{N} \rightarrow N!$

$$= \frac{2\pi e^2}{\alpha^2} \left( \frac{N^2}{V} - \frac{N}{V} \right) \quad (51.1)$$

notas: 1º termo Eq. (51.1)  $\oplus$  Eq. (50.1) = 0

2º termo Eq. (51.1)  $\rightarrow 0$   
 $V \rightarrow +\infty$

$\hookrightarrow$  hamiltoniano (49.2) do sistema assume a forma:

$$H = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon(\vec{k}) C_{\vec{k}\sigma}^\dagger C_{\vec{k}\sigma} + \frac{1}{2V} \sum'_{\vec{k}, \vec{p}, \vec{q}} \frac{4\pi e^2}{q^2} C_{\vec{k}+\vec{q}\sigma}^\dagger C_{\vec{p}-\vec{q}\sigma'}^\dagger C_{\vec{p}\sigma'} C_{\vec{k}\sigma} \quad (51.2)$$

$$= \hat{H}_0 + \hat{V},$$

onde  $\sum'_{\vec{q}} = \sum_{\vec{q} \neq 0}$

próximo steps: determina a energia do estado fundamental em teoria de perturbação, 1ª ordem:

aproximação Hartree-Fock;

considerar: estado não-perturbado = estado fundamental

de  $H_0 = \text{Eq. (46.1)}$ ;

temos que:

$$E_{gs} = E_0 + E^{(1)},$$

onde  $E_0 = \langle FSI | \hat{H}_0 | FSI \rangle : \text{Eq. (48.1)}$

$$E^{(1)} = \langle FSI | \hat{V} | FSI \rangle$$

• sobre Eq. (48.1):

$$E_0 = \frac{3}{5} \left( \frac{\hbar^2 v_F^2}{2m} \right) N = \frac{3}{5} E_F N;$$

é interessante introduzir os parâmetros:

•  $\frac{V}{N} = \frac{4\pi}{3} n_0^3$ ;  $n_0 \sim$  distância entre partículas

•  $n_s = \frac{n_0}{a_0}$ ;  $a_0 = \frac{\hbar^2}{m c^2}$ : raio de Bohr

↑  $\sim$  densidade de partículas.

verifica-se que (exercício):

$$k_F = \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} = \left( \frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{1}{n_0}$$

notar escala de energia,

$$\frac{1}{2} R_y = 13.6 \text{ eV}$$

$$\hookrightarrow E_0 = \frac{e^2}{2a_0} \frac{3}{5} \left( \frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{1}{n_s^2} N = \frac{e^2}{2a_0} \frac{2.21}{n_s^2} N \quad (52.1)$$

• sobre  $E^{(1)}$ :

$$E^{(1)} = 2\pi e^2 \sum_{\vec{k}, \vec{p}, \vec{q}} \sum_{\sigma, \sigma'} \langle FSI | C_{\vec{k}+\vec{q}\sigma}^\dagger C_{\vec{p}-\vec{q}\sigma'}^\dagger C_{\vec{p}\sigma'} C_{\vec{k}\sigma} | FSI \rangle$$

(I)

notar: em princípio, duas possibilidades p/ (I)  $\neq 0$ ;

•  $\langle FSI | C_{\vec{k}+\vec{q}\sigma}^\dagger C_{\vec{p}-\vec{q}\sigma'}^\dagger C_{\vec{p}\sigma'} C_{\vec{k}\sigma} | FSI \rangle =$  pois  $\vec{p} \neq \vec{k}$ , c.c.  $(C_{\vec{k}\sigma})^2 = 0$

$= \delta_{\vec{q},0} \langle FSI | C_{\vec{k}\sigma}^\dagger C_{\vec{p}\sigma'}^\dagger C_{\vec{p}\sigma'} C_{\vec{k}\sigma} | FSI \rangle = \delta_{\vec{q},0} \langle FSI | \hat{n}_{\vec{k}\sigma} \hat{n}_{\vec{p}\sigma'} | FSI \rangle :$

: termo direto



aqui: termo de troca ausente, pois termo  $\vec{q}=0$  ausente  
 ~ presença ions positivos!

$$\cdot \langle FS | C_{\vec{k}+\vec{q}\sigma}^{\dagger} C_{\vec{p}-\vec{q}\sigma'}^{\dagger} C_{\vec{p}\sigma'} C_{\vec{k}\sigma} | FS \rangle =$$

$$= \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\vec{p}, \vec{k}+\vec{q}} \langle FS | C_{\vec{k}+\vec{q}\sigma}^{\dagger} C_{\vec{k}\sigma} C_{\vec{k}+\vec{q}\sigma} C_{\vec{k}\sigma} | FS \rangle$$

pois  $\vec{q} \neq 0 \Rightarrow - C_{\vec{k}+\vec{q}\sigma} C_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} C_{\vec{k}\sigma}$

(53.1)

$$= (-1) \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\vec{p}, \vec{k}+\vec{q}} \langle FS | \hat{n}_{\vec{k}+\vec{q}\sigma} \hat{n}_{\vec{k}\sigma} | FS \rangle : \text{ termo de troca}$$

$$\hookrightarrow E^{(1)} = -\frac{e^2}{2a_0} \sum_{\vec{k}, \vec{q} \neq 0} \sum_{\sigma} \frac{\langle n_{\vec{k}+\vec{q}\sigma} n_{\vec{k}\sigma} \rangle}{q^2}$$

$$= -\frac{e^2}{2a_0} \frac{3}{2\pi} \left( \frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{N}{n_s} = -\frac{e^2}{2a_0} \frac{0.916 N}{n_s} \quad (53.2)$$

veja pg. 55.1.

$$\hookrightarrow \frac{E_{GS}}{N} = \frac{e^2}{2a_0} \left( \frac{2.21}{n_s^2} - \frac{0.916}{n_s} + \dots \right) \quad (53.3)$$

↑ energia de conexão  
 " " troca

Obs. 1: sobre a validade Eq. (53.3);

Eq. (53.2) em 1<sup>o</sup> quantização:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}} ; \text{ se } r'_i = \frac{r_i}{n_0} \text{ e } p'_i = n_0 p_i$$

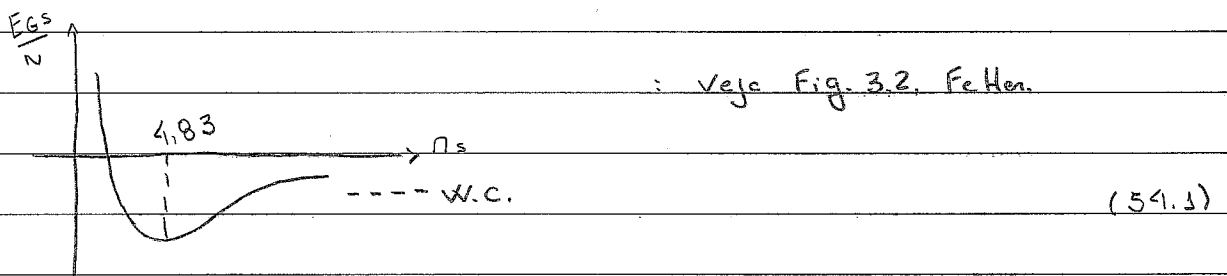
$$\hookrightarrow H = \frac{1}{n_0^2} \left( \sum_{i=1}^N \frac{p_i'^2}{2m} + \frac{1}{2} n_0 \sum_{i \neq j=1}^N \frac{e^2}{r'_{ij}} \right)$$

$\hookrightarrow p_i / n_0 \ll 1$  ( $n_s \ll 1$ ): interação Coulombiana pode ser considerada como uma perturbação ao termo cinético;

↳ Eq. (53.3) ok p/  $n_s \ll 1$  ou gás de elétrons de alta densidade: nesse caso, o potencial  $\hat{V}$  em (51.2) pode ser considerado como uma perturbação ao termo cinético  $H_0$ ;

↳ entretanto, em geral, p/ metais, temos que  $1.8 \leq n_s \leq 5.5$ .

• vamos considerar  $E_{gs}$  em termos do parâmetro  $n_s$ ;



verifica-se que  $E_{gs}$  apresenta um mínimo:

$$(n_s)_{\min} = 4.83 \rightarrow (E_{gs}/N)_{\min} = -0.095 \frac{e^2}{2a_0} = -1.29 \text{ eV}$$

interessante: p/  $N_0$  metálico:  $n_s = 3.96$  e  $E/N = -1.13 \text{ eV}$ .

Obs. 2: sobre a superfície de Fermi: verifica-se que a superfície de Fermi é preservada mesmo na presença de interação elétron-elétron.

Obs. 3: Eq. (53.3) indica que  $E_{gs}$  seja expressa como uma série de potências em  $n_s$ ;

de fato, como derivado por Gell-Mann and Brückner (1957), temos que (veja Sec. 5.1, Mahan):

$$\frac{E_{gs}}{N} = \frac{e^2}{2a_0} \left( \frac{2.21}{n_s^2} - \frac{0.916}{n_s} - 0.094 + 6.0622 \ln(n_s) + \dots \right) \quad (54.2)$$

Hartree-Fock      energia de correlação  
(conexões além HF)

Obs. 4: sobre o limite  $n_s \gg 1$  (baixas densidades), i.e., gás de elétrons diluído;

nesse caso, termo cinético  $H_0$  em (53.2) pode ser considerado como uma perturbação ao termo  $\hat{V}$

↳ resultado perturbativo (53.3): NOT OK!

de fato, nesse limite, temos que (veja Sec. 5.2, Mahan):

estado fundamental = cristal de elétrons:

" " Wigner (W.C.)

(Wigner, 1934)

provável estrutura = bcc!

resultados numéricos:

2D: G.S. = W.C. p/  $n_s \geq 37$  : Tanatar and Ceprenley (1989)

3D: " " " "  $n_s \geq 300$  : Drummond et al., PRB (2004)

Lembrar: gás bidimensional de elétrons (2DEG);

: heteroestruturas GaAs/AlGaAs.

• Details Eq. (53.2).

$$E^{(1)} = - \frac{4\pi e^2}{2} \cdot 2 \cdot V \int \frac{d^3 k d^3 q}{(2\pi)^6} \frac{1}{q^2} \Theta(k_F - |\vec{k} + \vec{q}|) \Theta(k_F - k)$$

$$= - \frac{4\pi e^2 V}{(2\pi)^6} \int d^3 k \Theta(k_F - k) \int d^3 q \frac{1}{(\vec{q} - \vec{k})^2} \Theta(k_F - q)$$

$$\int_0^{k_F} q^2 dq \int d\theta d\phi \sin\theta \frac{1}{k^2 + q^2 - 2kq \cos\theta}$$

$$\frac{\pi}{qk} \ln \frac{(q+k)^2}{(q-k)^2}$$

$$\pi \left( 2k_F + \frac{k_F^2 - k^2}{2k} \ln \frac{(k_F + k)^2}{(k_F - k)^2} \right)$$

$$= - \frac{4\pi^2 e^2 V}{(2\pi)^6} \int_0^{k_F} dk \left( 2k_F k^2 + \frac{k}{2} (k_F^2 - k^2) \ln \frac{(k_F + k)^2}{(k_F - k)^2} \right) \int d\Omega$$

$$k = k_F x$$

$$= k_F^4 \int_0^1 dx \left( 2x^2 + \frac{1}{2} x(1-x)^2 \ln \frac{(1+x)^2}{(1-x)^2} \right)$$

$$= 1$$

$$= - \frac{16\pi^3 e^2 V}{(2\pi)^6} \cdot k_F \underbrace{\left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)}_{k_F^3} = - \frac{e^2}{2a_0} \frac{3}{2\pi} \left( \frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{N}{n_s}$$

Ex. 3: gás de bósons fracamente interagente (3-D);

(p/ detalhes, veja Secs. 18 e 35, Fetter e Sec. 8.1, Pethick)

considerar: sistema  $N$  bósons interagentes c. volume  $V=L^3$ ;  
temperatura  $T=0$ ;

hamiltoniano: Eq. (42.1):

$$H = \sum_{\vec{k}} E(\vec{k}) a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{p}, \vec{q}} V_{\vec{q}} a_{\vec{k}+\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{p}-\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{p}} a_{\vec{k}} \quad (56.1)$$

onde

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m};$$

$a_{\vec{k}}^{\dagger}$ : op. criação partícula no estado partícula única  $|\vec{k}\rangle$

$a_{\vec{k}}$ : "destruição" " " " "  $|\vec{k}\rangle$ ;

$$[a_{\vec{k}}, a_{\vec{p}}] = [a_{\vec{k}}^{\dagger}, a_{\vec{p}}^{\dagger}] = 0 \quad \text{e} \quad [a_{\vec{k}}, a_{\vec{p}}^{\dagger}] = \delta_{\vec{k}, \vec{p}}; \quad \text{Eq. (25.1)};$$

e  $k_i = \frac{2\pi}{L} n_i$ ,  $i = x, y, z$  : partícula livre na "caixa"  $\oplus$   
 $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  condições periódicas de contorno:

: Eq. (45.3)

Lembrar: gás-ideal (não-interagente) de bósons p/  $T < T_{BE}$ ,

$$\text{onde } k_B T_{BE} = 3.31 \frac{\hbar^2}{m} \left( \frac{N}{V} \right)^{2/3},$$

$\hookrightarrow$  condensação de Bose-Einstein

p/ sistema interagente: como  $T < T_{BE}$

$\hookrightarrow$  hipótese: estado fundamental  $|\Phi_0\rangle$  é tal que o modo de partícula única de menor energia  $\vec{k}=0$ :

: macroscopicamente ocupado, i.e.,

$N_0 = \langle \Phi_0 | a_{\vec{k}=0}^\dagger a_{\vec{k}=0} | \Phi_0 \rangle$  é tal que

$$N - N_0 \ll N_0 \approx N$$

(57.1)

• como número de partículas  $c | \vec{k} \neq 0 \ll N_0$

↳ hipótese (3): vamos considerar apenas a interação

entre partículas  $c | \vec{k} \neq 0$  e  $\vec{k} = 0$ ;

nesse caso, é interessante escrever o termo interagente em termos de 8 termos distintos;

notas:

•  $\vec{k} = \vec{q} = \vec{p} = 0$ :  $\sqrt{v_0} a_0^\dagger a_0 a_0 a_0 \rightarrow \bar{E}_0 = \frac{1}{2v} v_0 (a_0^\dagger)^2 (a_0)^2$

•  $\vec{q} \neq 0, \vec{k} = -\vec{q}, \vec{p} = +\vec{q}$ :  $\sqrt{v_{\vec{q}}} a_0^\dagger a_0 a_{\vec{q}} a_{-\vec{q}}$

$$\hookrightarrow \hat{V}_1 = \frac{1}{2v} \sum_{\vec{q}} \sqrt{v_{\vec{q}}} (a_0^\dagger)^2 a_{\vec{q}} a_{-\vec{q}}$$

•  $\vec{q} \neq 0, \vec{k} = \vec{p} = 0$ :  $\sqrt{v_{\vec{q}}} a_{\vec{q}}^\dagger a_{-\vec{q}}^\dagger a_0 a_0$

$$\hookrightarrow \hat{V}_2 = \frac{1}{2v} \sum_{\vec{q}} \sqrt{v_{\vec{q}}} a_{\vec{q}}^\dagger a_{-\vec{q}}^\dagger (a_0)^2$$

•  $\vec{q} \neq 0, \vec{k} = 0, \vec{p} = \vec{q}$ :  $\sqrt{v_{\vec{q}}} a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}} a_0^\dagger a_0$

•  $\vec{q} \neq 0, \vec{p} = 0, \vec{k} = -\vec{q}$ :  $\sqrt{v_{\vec{q}}} a_0^\dagger a_{-\vec{q}}^\dagger a_0 a_{-\vec{q}}$

$$\hookrightarrow \hat{V}_3 = \frac{1}{2v} \sum_{\vec{q}} \sqrt{v_{\vec{q}}} \left( a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}} a_0^\dagger a_0 + a_{-\vec{q}}^\dagger a_{-\vec{q}} a_0^\dagger a_0 \right)$$

$\vec{q} \rightarrow -\vec{q} \oplus \sqrt{-\vec{q}} = \sqrt{\vec{q}}$

$$\hat{V}_3 = \frac{1}{v} \sum_{\vec{q}} \sqrt{v_{\vec{q}}} a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}} a_{\vec{q}} a_0^\dagger a_0$$

(57.2)

•  $\vec{k} \neq 0, \vec{p} = \vec{q} = 0$ :  $\sqrt{v_0} a_{\vec{k}}^\dagger a_0^\dagger a_0 a_{\vec{k}}$

•  $\vec{p} \neq 0, \vec{k} = \vec{q} = 0$ :  $\sqrt{v_0} a_0^\dagger a_{\vec{p}}^\dagger a_{\vec{p}} a_0$

$$\hookrightarrow \hat{V}_4 = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}} V_0 a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}} a^\dagger_0 a_0 + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{p}} V_0 a^\dagger_{\vec{p}} a_{\vec{p}} a^\dagger_0 a_0$$

$$= \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} V_0 a^\dagger_{\vec{q}} a_{\vec{q}} a^\dagger_0 a_0$$

•  $\vec{p} = \vec{q}, \vec{p}, \vec{k}, \vec{k} + \vec{q} \neq 0 : \sqrt{q} a^\dagger_{\vec{k} + \vec{q}} a^\dagger_0 a_{\vec{q}} a_{\vec{k}}$

•  $\vec{k} = -\vec{q}, \vec{p}, \vec{q}, \vec{p} - \vec{q} \neq 0 : \sqrt{q} a^\dagger_0 a^\dagger_{\vec{p} - \vec{q}} a_{\vec{p}} a_{-\vec{q}} : \vec{p} \rightarrow \vec{k}$

$\vec{q} \rightarrow -\vec{q}$

$$\hookrightarrow \hat{V}_5 = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \sqrt{q} a^\dagger_0 a^\dagger_{\vec{k} + \vec{q}} a_{\vec{k}} a_{\vec{q}}$$

•  $\vec{p} = 0, \vec{k}, \vec{q}, \vec{k} + \vec{q} \neq 0 : \sqrt{q} a^\dagger_{\vec{k} + \vec{q}} a^\dagger_{-\vec{q}} a_0 a_{\vec{k}} : \vec{k} \rightarrow \vec{k} - \vec{q}; \vec{q} \rightarrow -\vec{q}$

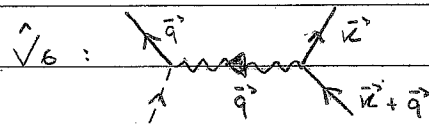
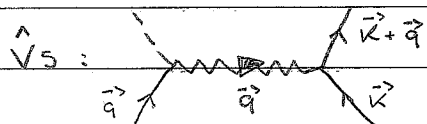
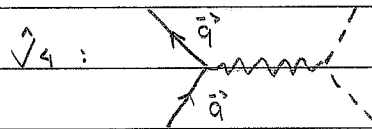
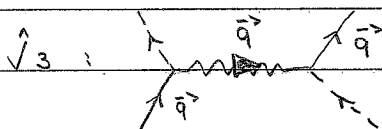
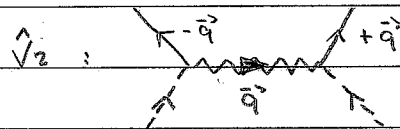
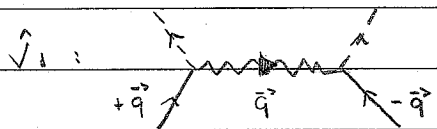
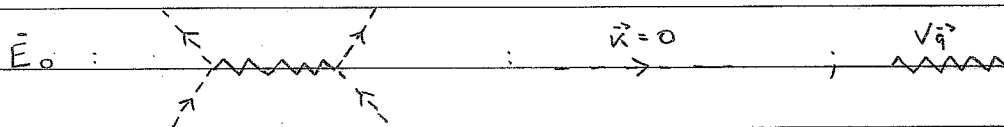
•  $\vec{k} = 0, \vec{p}, \vec{q}, \vec{p} - \vec{q} \neq 0 : \sqrt{q} a^\dagger_{\vec{q}} a^\dagger_{\vec{p} - \vec{q}} a_{\vec{p}} a_0 : \vec{p} \rightarrow \vec{p} + \vec{q}$

$\vec{p} \rightarrow \vec{k}$

$$\hookrightarrow \hat{V}_6 = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \sqrt{q} a^\dagger_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{q}} a_{\vec{k} + \vec{q}} a_0$$

•  $\vec{p}, \vec{k}, \vec{k} + \vec{q}, \vec{p} - \vec{q} \neq 0 \rightarrow \hat{V}_7$  (58.1)

esquemáticamente, veje Fig. (41.1):



(58.2)

$$\begin{aligned} \cdot \text{Eq. (24.4)}: \quad a_0 |N_0, \dots\rangle &= \sqrt{N_0} |N_0-1, \dots\rangle \\ a_0^\dagger |N_0, \dots\rangle &= \sqrt{N_0+1} |N_0+1, \dots\rangle; \end{aligned} \quad (59.1)$$

Como  $N_0 \sim N \gg 1 \rightarrow$  hipótese (2): vamos considerar  $a_0 = a_0^\dagger = N_0^{1/2}$

$\hookrightarrow$  Eqs. (57.2) e (58.1):

$$\cdot \bar{E}_0 = \frac{1}{2v} v_0 (a_0^\dagger)^2 (a_0)^2 = \frac{1}{2v} N_0^2 v_0$$

$$\cdot \hat{V}_1 = \frac{1}{2v} \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}} (a_0^\dagger)^2 a_{\vec{q}} a_{-\vec{q}} = \frac{1}{2v} N_0 \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}} a_{\vec{q}} a_{-\vec{q}}$$

$$\cdot \hat{V}_2 = \frac{1}{2v} \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^\dagger a_{-\vec{q}}^\dagger (a_0)^2 = \frac{1}{2v} N_0 \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}} a_{-\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}}^\dagger$$

$$\cdot \hat{V}_3 = \frac{1}{v} \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}} a_0^\dagger a_0 = \frac{1}{v} N_0 \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}}$$

$$\cdot \hat{V}_4 = \frac{1}{v} \sum_{\vec{q}} v_0 a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}} a_0^\dagger a_0 = \frac{1}{v} N_0 \sum_{\vec{q}} v_0 a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}}$$

(59.2)

$$\cdot \hat{V}_5 = \frac{1}{v} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} v_{\vec{q}} a_0^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}} a_{\vec{q}} = \frac{1}{v} N_0^{1/2} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} v_{\vec{q}} a_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}} a_{\vec{q}}$$

$$\cdot \hat{V}_6 = \frac{1}{v} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} v_{\vec{q}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q}} a_0 = \frac{1}{v} N_0^{1/2} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} v_{\vec{q}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q}}$$

hamiltoniano (56.1) em termos  $\hat{V}_i$ :

$$H = \bar{E}_0 + \sum_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \sum_{i=1}^7 \hat{V}_i \quad (59.3)$$

notas: hamiltoniano (59.3) não conserva o número de partículas, i.e.  $[H, \hat{N}] \neq 0$ ,

onde

$$\hat{N} = \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}$$



considerando apenas termos quadráticos em ops.  $a$  e  $a^\dagger$ ,  
temos que:

$$H = \bar{E}_0 + \sum_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \sum_{i=1}^4 \hat{V}_i$$

$$\begin{aligned} \hookrightarrow H = \frac{1}{2v} v_0 N_0^2 + \sum_{\vec{k} \neq 0} \left( \epsilon(\vec{k}) + \frac{v_0}{v} (v_0 + v\vec{k}) \right) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \\ + \frac{1}{2} \frac{v_0}{v} v\vec{k} (a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger + a_{-\vec{k}} a_{\vec{k}}); \end{aligned} \quad (60.1)$$

como (60.1) não conserva o número de partículas, é necessário  
incluir o vínculo:

$$1 = \hat{N} = \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} = N_0 + \sum_{\vec{k} \neq 0} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \rightarrow \langle \hat{N} \rangle = N \quad (60.2)$$

há dois procedimentos possíveis:

(i) adicionar potencial químico  $\mu$ : veja P.10.3, Fetter  
ou (ii) substituir (60.2) em (60.1) e eliminar  $N_0$ ;

considerando (ii), temos que:

$$N_0^2 = N^2 - 2N \sum_{\vec{k} \neq 0} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}, \vec{p}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} a_{\vec{p}}^\dagger a_{\vec{p}} \approx N^2 - 2N \sum_{\vec{k} \neq 0} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}$$

$$\sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{1}{v} v_0 v\vec{k} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \approx \frac{N}{v} \sum_{\vec{k} \neq 0} v\vec{k} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}$$

$\hookrightarrow$  Eq. (60.1):

$$\begin{aligned} H = \frac{1}{2} n^2 v_0 + \sum_{\vec{k}} \left( \epsilon(\vec{k}) + n v\vec{k} \right) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \\ + \frac{1}{2} n v\vec{k} (a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger + a_{-\vec{k}} a_{\vec{k}}) \end{aligned} \quad (60.3)$$

onde  $n = N/v$ : densidade de partículas.

notas: problema inicial (56.1) interconjugado aproximado  
 por um problema efetivo não-interconjugado (60.3):  
 exemplo: aproximação de campo médio.

· a fim de diagonalizar (60.3), vamos considerar a seguinte  
 transformação de Bogoliubov:

$$\begin{aligned} a_{\vec{k}} &= u_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} b_{-\vec{k}}^{\dagger} & \rightarrow & \quad a_{-\vec{k}} = u_{\vec{k}} b_{-\vec{k}} + v_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^{\dagger} \\ a_{\vec{k}}^{\dagger} &= u_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^{\dagger} + v_{\vec{k}} b_{-\vec{k}} & & \quad a_{-\vec{k}}^{\dagger} = u_{\vec{k}} b_{-\vec{k}}^{\dagger} + v_{\vec{k}} b_{\vec{k}} \end{aligned} \quad (61.1)$$

onde  $u_{-\vec{k}} = u_{\vec{k}} \in \mathbb{R}$  e  $v_{-\vec{k}} = v_{\vec{k}} \in \mathbb{R}$

notas:

$$\cdot [a_{\vec{k}}, a_{\vec{p}}] = [u_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} b_{-\vec{k}}^{\dagger}; u_{\vec{p}} b_{\vec{p}} + v_{\vec{p}} b_{-\vec{p}}^{\dagger}] =$$

$$= u_{\vec{k}} v_{\vec{p}} [b_{\vec{k}}, b_{-\vec{p}}^{\dagger}] + v_{\vec{k}} u_{\vec{p}} [b_{-\vec{k}}^{\dagger}, b_{\vec{p}}] = 0$$

$$\underbrace{\hspace{10em}}_{\delta_{\vec{k}, -\vec{p}}}$$

$$\underbrace{\hspace{10em}}_{-\delta_{\vec{k}, -\vec{p}}}$$

$$\cdot [a_{\vec{k}}, a_{-\vec{p}}^{\dagger}] = [u_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} b_{-\vec{k}}^{\dagger}; u_{-\vec{p}} b_{-\vec{p}}^{\dagger} + v_{-\vec{p}} b_{\vec{p}}] =$$

$$= u_{\vec{k}} u_{-\vec{p}} [b_{\vec{k}}, b_{-\vec{p}}^{\dagger}] + v_{\vec{k}} v_{-\vec{p}} [b_{-\vec{k}}^{\dagger}, b_{\vec{p}}] = \delta_{\vec{k}, \vec{p}};$$

$$\underbrace{\hspace{10em}}_{\delta_{\vec{k}, \vec{p}}}$$

$$\underbrace{\hspace{10em}}_{-\delta_{\vec{k}, \vec{p}}}$$

i.e., ops  $b_{\vec{k}}$  e  $b_{-\vec{k}}^{\dagger}$  satisfazem álgebra (25.1) se

$$u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 = 1$$

(61.2)

como transf. (61.1) preserva álgebra: transformação  
 canônica

como  $\epsilon(\vec{k}) = \epsilon(-\vec{k})$  e  $v_{\vec{k}} = v_{-\vec{k}}$ , podemos escrever (60.3) como (verificar):

$$H = \frac{1}{2} n^2 v_0 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} (\epsilon(\vec{k}) + n v_{\vec{k}}) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} (\epsilon(\vec{k}) + n v_{\vec{k}}) (a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + a_{-\vec{k}} a_{-\vec{k}}^\dagger) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} (\epsilon(\vec{k}) + n v_{\vec{k}}) (a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger + a_{-\vec{k}} a_{\vec{k}}) \quad (62.1)$$

$$\equiv A(\vec{k}) \quad \equiv B(\vec{k})$$

ou, em forma matricial:

$$H = \frac{1}{2} n^2 v_0 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} (\epsilon(\vec{k}) + n v_{\vec{k}}) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \psi^\dagger(\vec{k}) H_{\vec{k}} \psi(\vec{k}), \quad (62.2)$$

$$\text{onde: } \psi(\vec{k}) = \begin{pmatrix} a_{\vec{k}} \\ a_{-\vec{k}}^\dagger \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad H_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} A(\vec{k}) & B(\vec{k}) \\ B(\vec{k}) & A(\vec{k}) \end{pmatrix}$$

• Eqs. (61.1) e (62.1):

$$H = \frac{1}{2} n^2 v_0 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} (\epsilon(\vec{k}) + n v_{\vec{k}}) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}}$$

$$\underbrace{(A(\vec{k}) (u_{\vec{k}}^2 + \sigma_{\vec{k}}^2) + 2 \cdot B(\vec{k}) u_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k}})}_{(I)} (b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} + b_{-\vec{k}} b_{-\vec{k}}^\dagger) +$$

$$+ \underbrace{(2 \cdot A(\vec{k}) u_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k}} + B(\vec{k}) (u_{\vec{k}}^2 + \sigma_{\vec{k}}^2))}_{(II)} (b_{\vec{k}}^\dagger b_{-\vec{k}}^\dagger + b_{-\vec{k}} b_{\vec{k}})$$

(II)

(62.3)

Obs.: coeficiente  $v_{\vec{k}}$  em (61.1)  $\rightarrow \sigma_{\vec{k}}!$

verifica-se que (veja pg. 66.1) se

$$u_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{2} + \frac{A(\vec{k})}{2\omega(\vec{k})} ; \quad v_{\vec{k}}^2 = -\frac{1}{2} + \frac{A(\vec{k})}{2\omega(\vec{k})} ; \quad \omega(\vec{k}) = \sqrt{A^2(\vec{k}) - B^2(\vec{k})}$$

$$\epsilon \quad u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} = -\frac{B(\vec{k})}{2\omega(\vec{k})} \quad (63.1)$$

$$\hookrightarrow (I) = \omega(\vec{k}) ; \quad (II) = 0 \quad \epsilon \quad u_{\vec{k}}^2 \cdot v_{\vec{k}}^2 = 1 ;$$

i.e., como é possível determinar  $u_{\vec{k}}$  e  $v_{\vec{k}}$  tal que  $(II) = 0$

$\hookrightarrow$  transf. (61.1)  $\rightarrow$  diagonalização hamiltoniano (62.1)!

temos que:

$$H = \frac{1}{2} n v_0^2 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} A(\vec{k}) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \omega(\vec{k}) (b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} + b_{-\vec{k}} b_{-\vec{k}}^\dagger)$$

$$1 + b_{-\vec{k}}^\dagger b_{-\vec{k}}$$

$$\hookrightarrow H = \frac{1}{2} n v_0^2 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} (A(\vec{k}) - \omega(\vec{k})) + \sum_{\vec{k}} \omega(\vec{k}) b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} \quad (63.2)$$

$$\equiv E_0$$

o estado fundamental  $|0\rangle$  do sistema é tal que:

$$b_{\vec{k}} |0\rangle = 0, \quad \forall \vec{k} \quad (63.3)$$

$\hookrightarrow E_0$ : energia do estado fundamental;

$\hookrightarrow |0\rangle$ : vácuo (estado de referência) p/ bósons  $b$ !

Eq. (63.2):  $b_{\vec{k}}^{\dagger}$ : op. criação de uma excitação elementar (quasipartícula) c/ energia  $\omega(\vec{k})$  e momento  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ .

Obs. 1: Eqs. (60.2) e (61.1):

$$N = \langle \hat{N} \rangle = N_0 + \sum_{\vec{k}} \langle 0 | a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} | 0 \rangle$$

$$\hookrightarrow N - N_0 = \sum_{\vec{k}} \langle 0 | a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} | 0 \rangle = \sum_{\vec{k}} \mathcal{J}_{\vec{k}}^2 \quad ; \quad (64.1)$$

$$\langle 0 | (u_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^{\dagger} + \mathcal{J}_{\vec{k}} b_{-\vec{k}}) (u_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + \mathcal{J}_{\vec{k}} b_{-\vec{k}}^{\dagger}) | 0 \rangle$$

$$\mathcal{J}_{\vec{k}}^2 \langle 0 | b_{-\vec{k}} b_{-\vec{k}}^{\dagger} | 0 \rangle = \mathcal{J}_{\vec{k}}^2$$

$$(1 + b_{-\vec{k}}^{\dagger} b_{-\vec{k}}) | 0 \rangle$$

: número de partículas (bósons  $a_{\vec{k}}$  c/  $\vec{k} \neq 0$ )  $\neq$  condensado;

Lembrar: p/ gás ideal  $N_0(T=0) = N$ ;

aqui,  $N_0(T=0) < N \sim$  interações!

Obs. 2: sobre a energia das excitações elementares:

$$\omega(\vec{k}) = (A^2(\vec{k}) - B^2(\vec{k}))^{1/2} = (E^2(\vec{k}) + 2nE(\vec{k})\sqrt{v_{\vec{k}}})^{1/2}$$

p/  $k \ll 1$ , temos que

$$\omega(\vec{k}) \approx (2nE(\vec{k})\sqrt{v_{\vec{k}}=0})^{1/2} = \left(2n \frac{\hbar^2 k^2}{2m} v_0\right)^{1/2} = \left(\frac{n v_0}{m}\right)^{1/2} \hbar k, \quad (64.2)$$

$\equiv c$

i.e.,  $\omega(\vec{k}) \propto \vec{k}$  p/  $k \ll 1$ : similar fónons

$\hookrightarrow c$ : velocidade do som.

Obs. 3: sobre a simetria do estado fundamental:

em termos das operadores de campo (42.2); i.e.,

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} a_{\vec{k}} \quad \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} a_{\vec{k}}^\dagger,$$

o hamiltoniano (56.1) assume a forma (37.2) e/  $\hat{U} = 0$ ;

sob a transformação global  $U(\theta)$ :

$$U(\theta) \hat{\psi} U^\dagger(\theta) = e^{i\theta} \hat{\psi} \quad \text{e} \quad U(\theta) \hat{\psi}^\dagger U^\dagger(\theta) = e^{-i\theta} \hat{\psi}^\dagger, \quad (65.1)$$

onde cte  $\theta \in \mathbb{R}$ , verifica-se que (exercício) o hamiltoniano (37.2) é invariante.

notar:

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \underbrace{\frac{1}{L^{3/2}} a_{\vec{k}=0}}_{(N_0/L^3)^{1/2} = n_0^{1/2}} + \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{k} \neq 0} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} a_{\vec{k}}, \quad (65.2)$$

pois o estado fundamental (63.3), temos que

$$\langle 0 | \hat{\psi}(\vec{r}) | 0 \rangle = n_0^{1/2} + \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{k} \neq 0} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \langle 0 | a_{\vec{k}} | 0 \rangle$$

$$\langle 0 | a_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + b_{\vec{k}}^\dagger b_{-\vec{k}}^\dagger | 0 \rangle = 0,$$

$$\text{pois } \langle 0 | b_{\vec{k}} | 0 \rangle = 0 \quad \text{e} \quad \langle 0 | b_{-\vec{k}}^\dagger | 0 \rangle = (b_{-\vec{k}} | 0 \rangle)^\dagger = 0$$

$$\hookrightarrow \langle 0 | \hat{\psi}(\vec{r}) | 0 \rangle = n_0^{1/2} \quad (65.3)$$

Eq. (63.1)  $\rightarrow$  estado fundamental  $|0\rangle$  quebra (espontaneamente) a simetria  $U(1)$  de notação global (65.1) apresentada pelo hamiltoniano (37.2)!

de fato, se  $|0\rangle$  invariante sob transf. (65.1), temos que

$$U(\theta)|0\rangle = e^{i\alpha}|0\rangle \quad ; \quad \alpha: \text{fase arbitrária} \quad (66.1)$$

$$\text{como: } n_0^2 = \langle 0|\hat{\psi}^\dagger|0\rangle = (\langle 0|U^\dagger)(U\hat{\psi}^\dagger U^\dagger)(U|0\rangle)$$

$$e^{-i\alpha}\langle 0|e^{i\theta}\hat{\psi}^\dagger e^{i\alpha}|0\rangle$$

$$\hookrightarrow \langle 0|\hat{\psi}^\dagger|0\rangle = e^{i\theta}\langle 0|\hat{\psi}^\dagger|0\rangle \quad (66.2)$$

como  $\theta \neq 0$ , Eq. (66.2)  $\rightarrow \langle 0|\hat{\psi}^\dagger|0\rangle = 0$ : NOT OK c/ (65.3)!

$\hookrightarrow$  hipótese (66.1): NOT OK!

• Condensação de Bose-Einstein: exemplo de um sistema que apresenta quebra espontânea de simetria:

: estado fundamental apresenta simetria menor do que o hamiltoniano do sistema. (66.3)

• Detalhes Eq. (63.1):

como  $u_{\vec{u}}^2 - \sigma_{\vec{u}}^2 = 1$ , podemos considerar:

$$u_{\vec{u}} = \cosh \phi_{\vec{u}} \quad \text{e} \quad \sigma_{\vec{u}} = \sinh \phi_{\vec{u}}$$

$$\hookrightarrow (\text{II}) = \underbrace{A(\vec{u}) 2 \sinh \phi_{\vec{u}} \cosh \phi_{\vec{u}}}_{\sinh 2\phi_{\vec{u}}} + \underbrace{B(\vec{u}) (\cosh^2 \phi_{\vec{u}} + \sinh^2 \phi_{\vec{u}})}_{\cosh 2\phi_{\vec{u}}} = 0$$

$$\hookrightarrow \tanh 2\phi_{\vec{u}} = -\frac{B(\vec{u})}{A(\vec{u})} \quad \rightarrow \quad \cosh 2\phi_{\vec{u}} = \frac{A(\vec{u})}{\sqrt{A^2(\vec{u}) - B^2(\vec{u})}} = \frac{A(\vec{u})}{\omega(\vec{u})}$$

$$\text{e} \quad \sinh 2\phi_{\vec{u}} = \frac{-B(\vec{u})}{\sqrt{A^2(\vec{u}) - B^2(\vec{u})}} = \frac{-B(\vec{u})}{\omega(\vec{u})}$$

como  $2\cosh^2 \phi_{\vec{u}} = 1 + \cosh 2\phi_{\vec{u}}$

$$\hookrightarrow u_{\vec{u}}^2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{A(\vec{u})}{\omega(\vec{u})} \right)$$

e  $2\sinh^2 \phi_{\vec{u}} = -1 + \cosh 2\phi_{\vec{u}}$

$$\hookrightarrow \sigma_{\vec{u}}^2 = \frac{1}{2} \left( -1 + \frac{A(\vec{u})}{\omega(\vec{u})} \right)$$



Obs. 4: o procedimento discutido acima é a chamada teoria de Bogoliubov p/ o gás de bósons fracamente interagente.

• consideram: gás diluído de bósons;

como o # partículas c/ momento  $\vec{k} = 0 = N_0 \sim N$

↳ principal contribuição interação entre partículas

~ colisões bósons com  $k$  "pequeno";

é interessante substituir o potencial de interação

$V(\vec{r} - \vec{r}')$  por um potencial efetivo, em particular,

por um potencial local de contato:

$$V(\vec{r} - \vec{r}') \rightarrow V_{\text{eff}}(\vec{r} - \vec{r}') = g \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (6.7.1)$$

$$\text{como } V_{\vec{k}} = \int d^3r e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} V(r) \rightarrow V_{\text{eff}, \vec{k}} = g;$$

além disso, como a principal contribuição p/ colisões de baixas energias e  $k \ll 1$  é o espalhamento por ondas, verifica-se que (veja pg. ):

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \quad (6.7.2)$$

onde  $a$ : comprimento de espalhamento.

próxima etapa: determinar as propriedades do sistema em termos  $n$  e  $a$ ;

(1) energia excitações elementares,

como:

$$A(\vec{k}) = E(\vec{k}) + nV\vec{k} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + ng = ng \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2mng} + 1 \right)$$

$$B(\vec{k}) = nV\vec{k} = ng$$

$$\hookrightarrow \omega(\vec{k}) = \left( A^2(\vec{k}) - B^2(\vec{k}) \right)^{1/2} = ng \left( \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2mng} + 1 \right)^2 - 1 \right)^{1/2}$$

pt  $k \ll 1$  :  $\omega(\vec{k}) \approx ng \left( \frac{\hbar^2 k^2}{mng} \right)^{1/2} = \left( \frac{ng}{m} \right)^{1/2} \hbar k$

$$\hookrightarrow \text{velocidade som } c = \left( \frac{ng}{m} \right)^{1/2} = \left( \frac{4\pi a n \hbar^2}{m^2} \right)^{1/2} \quad (68.1)$$

(2) Depletion of the condensate,

Definição :  $\frac{N - N_0}{N}$  : medida # partículas  $\notin$  condensado (68.2)

Lembrar : Eq. (64.1) ; temos que :

$$\frac{N - N_0}{N} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}^2 = \frac{V}{N} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \psi_{\vec{k}}^2 = \frac{V}{2N} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left( -1 + \frac{A(\vec{k})}{\omega(\vec{k})} \right)$$

$$= \frac{1}{2n} \int \frac{k^2 dk}{(2\pi)^3} \left( -1 + \frac{\hbar^2 k^2 / 2mng + 1}{\left( \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2mng} \right)^2 + 2 \left( \frac{\hbar k^2}{2mng} \right) \right)^{1/2}} \right) \int d\Omega$$

$$y^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2mng}$$

$$= \frac{1}{2n} \cdot \frac{1}{8\pi^3} \cdot 4\pi^2 \left( \frac{2mng}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty dy y^2 \left( \frac{y^2 + 1}{(y^2 + 2y)^{1/2}} - 1 \right)$$

$$\frac{1}{4n\pi} \left( \frac{2mng}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{2/3}$$

$$= \frac{1}{3} \frac{\sqrt{n}}{\pi} \left( \frac{mg}{\hbar^2} \right)^{3/2} = \frac{8}{3} \left( \frac{na^3}{\pi} \right)^{1/2} \quad (68.3)$$

(3) energia estado fundamental,

$$\text{Eq. (63.2)} : E_0 = \frac{1}{2} n v_0^2 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} (A(\vec{k}) - \omega(\vec{k}));$$

pt  $\sqrt{\vec{k}} = g$  , temos que  $E_0 \rightarrow +\infty$  :

: relacionado ao fato de que a aproximação  $V_{\vec{k}} = g$  não descreve adequadamente processos  $c|k \gg 1$ ;

é possível evitar essa divergência:

(i) introduzindo um cut-off nas integrais sob momento (veja Sec. 8.1.4, Pethick)

ou (ii) adicionando e subtraindo a cte (veja pg. )

$$\pm \frac{1}{2} \int_{\vec{k}} \frac{m}{\hbar^2 k^2} (ng)^2 = \pm \frac{1}{4} (ng) \int_{\vec{k}} \frac{2mg}{\hbar^2 k^2} \quad ; \text{ notan } O(g^2) \quad (69.1)$$

segundo o procedimento (ii), verifica-se que (veja Eq. (35.25), F. Hen):

$$\frac{E_0}{N} = \frac{2\pi \hbar^2 n a}{m} \left( 1 + \frac{128}{15} \left( \frac{na^3}{\pi} \right)^{1/2} \right) \quad ; \quad (69.2)$$

: ou a/ tratamento perturbativo!

(4) pressão gás de fluido de bósons,

como  $P = - \left( \frac{\partial E}{\partial V} \right)_N \stackrel{=}{=} \text{Eq. (69.2)}$ , temos que

$$EP = \frac{2\pi \hbar^2 n^2 a}{m} \left( 1 + \frac{64}{5} \left( \frac{na^3}{\pi} \right)^{1/2} \right) \quad (69.3)$$

notan Eqs. (68.1) e (69.3): sistema estável apenas p/ interação repulsiva  $g > 0$  ou  $a > 0$  !

• Sobre a Eq. (67.2),

Lembrar: espalhamento partícula massa  $m$  sob potencial  $V(\vec{r})$ ; nesse caso, é interessante escrever a eq. de Schrödinger em forma integral; verifica-se que:

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) = N e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{e^{i\kappa|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}') \quad (69.4)$$

onde  $N = (2\pi)^{-3/2}$  e  $U(\vec{r}) = 2mV(\vec{r})/\hbar^2$ ;

• componente assintótico ( $r \rightarrow +\infty$ ) dos estados de espalhamento  $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) \rightarrow$  definição amplitude de espalhamento:

$$f_{\vec{k}}(\hat{n}) = f(\vec{k}; \vec{k}') = -\frac{1}{4\pi N} \int d^3r' e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} U(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}') \quad (69.5)$$

$$\vec{k}' = \kappa \hat{n}$$

• além do método das ondas parciais, é possível expandir  $f(\vec{k}, \vec{k}')$  em termos dos phase shifts  $\delta_l(\kappa)$ :

$$f_{\kappa}(\theta) = \frac{1}{\kappa} \sum_{l \geq 0} (2l+1) e^{i\delta_l(\kappa)} \sin \delta_l(\kappa) P_l(\cos \theta) \quad (69.6)$$

$$\hat{k} \cdot \hat{k}' = \cos \theta$$

• p/ potencial de esfera dura,  $V(r) = \begin{cases} \infty, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases}$  temos que

$\delta_0(\kappa) = -\kappa a$  : phase shift espalhamento por ondas s;

em particular, p/  $\kappa a \ll 1$ , temos que

$$f(\vec{k}; \vec{k}') = -a, \quad |\vec{k}| = |\vec{k}'| \ll 1 \quad (69.7)$$

· caso geral: Eq. (69.7): definição do comprimento de espalhamento  $a$

· próxima etapa: teoria de espalhamento em espaço de momento (veja Sec. 11, Fethi);

$$\text{considerar: } \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{p}) = \int d^3\vec{n} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{n}} \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{n}) \quad (69.8)$$

$$U(\vec{p}) = \int d^3\vec{n} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{n}} U(\vec{n})$$

Eqs. (69.4) e (69.8) c/  $n=1$ :

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{p}) = \int d^3\vec{n} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{n}} \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{n}) = \int d^3\vec{n} \underbrace{e^{-i(\vec{p}-\vec{k})\cdot\vec{n}}}_{(2\pi)^3 \delta(\vec{p}-\vec{k})}$$

$$- \frac{1}{4\pi} \underbrace{\int d^3\vec{n} d^3\vec{n}' \frac{e^{i\kappa|\vec{n}-\vec{n}'|}}{|\vec{n}-\vec{n}'|} \left( \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}\cdot\vec{n}'} U(\vec{q}) \right) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{n}} \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{n})}_{(\text{II})}$$

$$\hookrightarrow (\text{II}) = \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3} U(\vec{q}) \underbrace{\int d^3\vec{n} \frac{e^{i\kappa n}}{n} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{n}}}_{4\pi} \int d^3\vec{n}' e^{i(\vec{q}-\vec{p})\cdot\vec{n}'} \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{n}')_{\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{p}-\vec{q})}$$

$$p^2 - \kappa^2 - i\eta$$

$$\hookrightarrow \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{p}) = (2\pi)^3 \delta(\vec{p}-\vec{k}) - \frac{1}{p^2 - \kappa^2 - i\eta} \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3} U(\vec{q}) \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{p}-\vec{q}) \quad (69.9)$$

similar, Eqs. (69.5) e (69.8):

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = - \frac{1}{4\pi} \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3} U(\vec{q}) \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{k}'-\vec{q}) \quad (69.10)$$

notas: Eqs. (69.9) e (69.10):

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{p}) = (2\pi)^3 \delta(\vec{p} - \vec{k}) - \frac{4\pi}{k^2 - p^2 + i\eta} f(\vec{p}, \vec{k}) \quad (69.11)$$

$$\int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^3} U(\vec{q} - \vec{p}) * \text{Eq. (69.11)}:$$

$$\int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^3} U(\vec{q} - \vec{p}) \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{p}) = (2\pi)^3 \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^3} U(\vec{q} - \vec{p}) \delta(\vec{p} - \vec{k})$$

$\vec{p} \rightarrow -\vec{p} + \vec{q}$   $U(\vec{q} - \vec{k})$

$$- 4\pi f(\vec{q}, \vec{k})$$

$$- 4\pi \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^3} \frac{1}{k^2 - p^2 + i\eta} U(\vec{q} - \vec{p}) f(\vec{p}, \vec{k})$$

$$\text{ou } - 4\pi f(\vec{p}, \vec{k}) = U(\vec{p} - \vec{k}) - 4\pi \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{1}{k^2 - q^2 + i\eta} U(\vec{p} - \vec{q}) f(\vec{q}, \vec{k}):$$

(69.12)

: equaçõ integral p/  $f(\vec{k}, \vec{k})$ !

consideras: interaçõ duas partículas massa  $m$  via  
potenciale efetivo  $V_{\text{eff}, \vec{k}} = g$ ;

nesse caso:

$$m \rightarrow \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{1}{2} m \rightarrow \frac{2mV(\vec{a})}{\hbar^2} = U(\vec{a}) \rightarrow \frac{mV(\vec{a})}{\hbar^2}$$

$$\text{Eq. (49.2): } - 4\pi f(\vec{p}, \vec{k}) = \frac{mg}{\hbar^2} + \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{mg/\hbar^2}{k^2 - q^2 + i\eta} (-4\pi f(\vec{q}, \vec{k}))$$

$$= -a : \text{Eq. (69.7)} : \text{OK p/ } |\vec{p}|, |\vec{k}| \ll 1 \quad (69.13)$$

em  $O(q^1)$ , soluçõ iterativa (69.13):

$$\langle \pi f(\vec{p}, \vec{v}) = a = \frac{mg}{\hbar^2} \rightarrow g = \frac{4\pi \hbar^2 a}{m} : \text{Eq. (67.2)}$$

notas: ordem  $O(q^2)$ :

$$a = \frac{mg}{\hbar^2} = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{q^2} \left( \frac{mg}{\hbar} \right)^2 : \quad (69.14)$$

$$\frac{1}{v} \sum_{\vec{q}} \frac{(mg)^2}{\hbar^2 q^2}$$

: divergência  $\sum_{\vec{q}} \frac{1}{|\vec{q}|} \gg 1$  pode ser removida introduzindo um cut-off;

" similar determinação  $E_0$ ;

notas: Eq. (69.1)  $\propto 2^{\text{a}}$  termo Eq. (69.14)!

sobre as propriedades do gás de bósons a  $T \neq 0$ ,

(i) calor específico,

Eq. (63.2)  $\rightarrow$  determinação da energia interna do sistema;  
temos que:

$$U = \langle H \rangle = E_0 + \sum_{\vec{k}} \omega(\vec{k}) \langle b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} \rangle,$$

$$\text{onde } \langle b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} \rangle = \frac{1}{e^{\beta \omega(\vec{k})} - 1}; \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

$$\hookrightarrow U = E_0 + V \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \omega(\vec{k}) \frac{1}{e^{\beta \omega(\vec{k})} - 1}$$

pt  $T \ll T_D$ , apenas excitações elementares de baixas energias  
são excitadas  $\rightarrow$  podemos considerar  $\omega(\vec{k}) = \hbar c k$ ; Eq. (64.2);

$$\hookrightarrow U = E_0 + \frac{4\pi V}{8\pi^3} \int k^2 dk \hbar c k \frac{1}{e^{\beta \hbar c k} - 1}$$

$$x = \beta \hbar c k$$

$$\frac{\hbar c}{(\beta \hbar c)^4} \int dx \frac{x^3}{e^x - 1}$$

$\pi^4/15$

$$\hookrightarrow U = E_0 = \frac{\pi^2}{30} \frac{V}{(\hbar c)^3} (k_B T)^4, \quad T \ll T_D \quad (70.1)$$

$$\hookrightarrow C_V = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = \frac{2\pi^2}{15} k_B \frac{V}{(\hbar c)^3} (k_B T)^3, \quad T \ll T_D \quad (70.2)$$

i.e.,  $C_V \sim T^3$ : similar contribuição fônons pt

$C_V$  de um sólido a baixas

temperaturas!



(2) thermal depletion of the condensate,

Eq. (64.1):

$$N = \langle \hat{N} \rangle = N_0 + \sum_{\vec{k}} \langle a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \rangle$$

$$= \sum_{\vec{k}} \langle b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} \rangle + \sum_{\vec{k}} \langle b_{-\vec{k}} b_{-\vec{k}}^\dagger \rangle$$

$$= 1 + b_{-\vec{k}}^\dagger b_{-\vec{k}}$$

$$= N_0 + \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'} \mathcal{U}_{\vec{k}}^2 + \sum_{\vec{k}} (\mathcal{U}_{\vec{k}}^2 + \mathcal{V}_{\vec{k}}^2) \langle b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} \rangle$$

$$N_0(T=0)$$

$$= A(\vec{k}) / \omega(\vec{k}) : \text{Eq. (63.3)}$$

$$\hookrightarrow N(T) - N_0(T=0) = \sum_{\vec{k}} \frac{A(\vec{k})}{\omega(\vec{k})} \frac{1}{e^{\beta \omega(\vec{k})} - 1} : \text{thermal depletion}$$

(I)

p/  $T \ll T_{BE} : \omega(\vec{k}) = \hbar c k ; \frac{A(\vec{k})}{\omega(\vec{k})} = \frac{\hbar^2 k^2 / 2m + n g}{\hbar c k} \approx \frac{n g}{\hbar c k}$

$$\frac{1}{e^{\beta \hbar c k} - 1} \approx \frac{k_B T}{\hbar c k}$$

$$\hookrightarrow \text{(I)} \approx \int k^2 dk \frac{n g}{\hbar c k} \frac{k_B T}{\hbar c k} \int d\Omega$$

(II)

em geral, p/  $d$  dimensões espaciais, temos que

$$\text{(II)} \approx \int_0^\infty k^{d-3} dk : \text{p/ } d \leq 2, \text{ integral divergente no infra-vermelho } (k \rightarrow 0) :$$

(73.1)

: exemplo Teorema de Mermin-Wagner: flutuações térmicas destroem o condensado (a ordem) p/  $d \leq 2$ !

Ex. 4: modelo de Hubbard;

(p/ detalhes, veja Cap. 2, Friedkin e Cap. 2, Aetland)

ideia: determinar hamiltoniano do modelo;

modelo mais simples utilizado p/ descrever sistema eletrônico fortemente correlacionado em uma rede.

inicial: Funções de Wannier (veja Cap. 9, Kittel).

Lembrar: função de onda de Bloch:

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}); \quad u_{n\vec{k}}(\vec{r}+\vec{R}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (72.1)$$

índice de banda

vetor de rede

Definição: função de Wannier:

$$\Phi_n(\vec{r}-\vec{R}_i) = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (72.2)$$

# sítios da rede

propriedades:

(i) expansão função de Bloch em termos  $\Phi_n$ :

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{i=1}^N e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} \Phi_n(\vec{r}-\vec{R}_i) \quad (72.3)$$

(ii) ortogonalidade:

$$\int d^3r \Phi_n^*(\vec{r}) \Phi_n(\vec{r}-\vec{R}_i) = 0, \quad \text{se } \vec{R}_i \neq 0 \quad (72.4)$$

(iii)  $\Phi_n(\vec{r}-\vec{R}_i)$ : localizada em torno do sítio da rede  $\vec{R}_i$  (72.5)

• Vamos verificar as propriedades (72.3) - (72.5):

• Eqs. (72.2) e (72.3):

$$\phi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{p}} \sum_i e^{i(\vec{k}-\vec{p}) \cdot \vec{R}_i} \phi_{n\vec{p}}(\vec{r}) = \phi_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

$N \delta_{\vec{k}, \vec{p}}$

• Eqs. (72.2) e (72.4):

$$\int d^3r \phi_n^*(\vec{r}) \phi_n(\vec{r} - \vec{R}_i) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{p}} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{R}_i} \int d^3r \phi_{n\vec{k}}^*(\vec{r}) \phi_{n\vec{p}}(\vec{r})$$

$\delta_{\vec{k}, \vec{p}}$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} = \delta_{\vec{R}_i, 0}$$

• hipótese:  $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \psi_n(\vec{r})$ ; Eqs. (72.1) e (72.2):

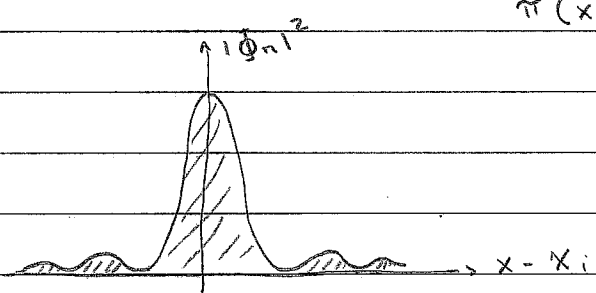
$$\phi_n(\vec{r} - \vec{R}_i) = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\vec{k}} e^{i(\vec{r} - \vec{R}_i) \cdot \vec{k}} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{N^{1/2}} \psi_n(\vec{r}) \sum_{\vec{k}} e^{i(\vec{r} - \vec{R}_i) \cdot \vec{k}}$$

(I)

notas:  $\mathbb{D}$ : como  $k = \frac{2\pi m}{L}$ ,  $m = 0, \pm 1, \dots, \pm \frac{1}{2}N$ ;  $L = Na$

$$\hookrightarrow (I) = \sum_m e^{i(2\pi m^3/L)} \xrightarrow{N \gg 1} \frac{Na}{\pi^3} \sin\left(\frac{\pi z}{a}\right); z = x - x_i$$

$$\hookrightarrow \phi_n(x - x_i) \approx N^{1/2} \psi_n(x) \frac{\sin(\pi(x - x_i)/a)}{\pi(x - x_i)/a}$$



próximo etapa: determinar hamiltoniano sistema de elétrons  
 incoerentes na representação tight-binding:  
 : base de partícula única = estados de Wannier;

Eq. (72.2) pode ser escrita como:

$$\langle \vec{n} | \Phi_{n,i} \rangle = \Phi_n(\vec{n} - \vec{R}_i) = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \underbrace{\langle \vec{n} | \phi_{n,\vec{k}} \rangle}_{= \phi_{n\vec{k}}(\vec{n})}$$

$$\hookrightarrow |\Phi_{n,i}\rangle = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \phi_{n\vec{k}}(\vec{n}) \quad (73.1)$$

como estados  $|\Phi_{n,i}\rangle$  : base, temos que:

$$|\vec{n}\rangle = \sum_{n,i} |\Phi_{n,i}\rangle \langle \Phi_{n,i} | \vec{n} \rangle = \sum_{n,i} \Phi_n(\vec{n} - \vec{R}_i) |\Phi_{n,i}\rangle$$

Eq. (35.1):  $\hat{\psi}(\vec{n}) = \sum_{\alpha} \langle \vec{n} | \alpha \rangle a_{\alpha}$

$$\hookrightarrow \hat{\psi}(\vec{n}) = \sum_{n,i} \langle \vec{n} | \Phi_{n,i} \rangle c_{ni}$$

incluindo índice de spin, veja Eq. (43.1):

$$\hat{\psi}_{\sigma}(\vec{n}) = \sum_{n,i} \Phi_n(\vec{n} - \vec{R}_i) c_{ni\sigma} \quad \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{n}) = \sum_{n,i} \Phi_n^*(\vec{n} - \vec{R}_i) c_{ni\sigma}^{\dagger}$$

nesse caso: (73.2)

$c_{ni\sigma}^{\dagger}$  : adiciona 1 part. c/ spin  $\sigma$  no estado de Wannier  $|\Phi_{n,i}\rangle$   
 $c_{ni\sigma}$  : remove " " " " do " " " "

Consideramos:  $\Gamma$  apenas 1 orbital (atômico) / sítio de rede;  
 nesse caso: orbitais atômicos  $\rightarrow$  1 única banda  
 de energia

$\hookrightarrow$  podemos omitir índice de banda  $n$ !

$$\text{Eq. (73.2): } \hat{\Psi}_\sigma(\vec{r}) = \sum_i \Phi(\vec{r} - \vec{R}_i) C_{i\sigma} \quad \text{e} \quad \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) = \sum_i \Phi^*(\vec{r} - \vec{R}_i) C_{i\sigma}^\dagger;$$

(74.1)

$C_{i\sigma}^\dagger$ : op. criação elétron c/ spin  $\sigma$  no sítio  $i$  da rede

$C_{i\sigma}$ : " destruição " " " " " " " " "

álgebra (35.2)  $\rightarrow$  álgebra ops.  $C_{i\sigma}^\dagger$  e  $C_{i\sigma}$  (verificar):

$$\{C_{i\alpha}, C_{j\beta}\} = \{C_{i\alpha}^\dagger, C_{j\beta}^\dagger\} = 0 \quad \text{e} \quad \{C_{i\alpha}, C_{j\beta}^\dagger\} = \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \quad (74.2)$$

sobre o hamiltoniano (43.3):

$$H_0 = T + U_{\text{ext}}$$

potencial periódico

$\sim$  ions

$$H_0 = \sum_\sigma \int d^3r \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U_{\text{ext}}(\vec{r}) \right) \hat{\Psi}_\sigma(\vec{r}) \quad \oplus \quad \text{Eq. (74.1):}$$

$$\hookrightarrow H_0 = \sum_{ij} \sum_\sigma \int d^3r \underbrace{\Phi^*(\vec{r} - \vec{R}_i) \left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U_{\text{ext}}(\vec{r}) \right) \Phi(\vec{r} - \vec{R}_j)}_{t_{ij}} C_{i\sigma}^\dagger C_{j\sigma}$$

$\equiv t_{ij}$ : amplitude de tunelamento  
 (hopping energy)

$$\hookrightarrow H_0 = \sum_{ij} \sum_\sigma t_{ij} C_{i\sigma}^\dagger C_{j\sigma} \quad (74.3)$$

• similar ao termo de interação:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3r d^3r' \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}') v(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r})$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{ijnm} \int d^3r d^3r' \underbrace{\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{r}-\vec{R}_i) \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{r}'-\vec{R}_j)}_{(I)} v(\vec{r}, \vec{r}') \underbrace{\hat{\psi}(\vec{r}'-\vec{R}_n) \hat{\psi}(\vec{r}-\vec{R}_m)}_{(II)}$$

$$(I) \equiv \langle ij | V | mn \rangle$$

$$* C_{i\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma'}^{\dagger} C_{n\sigma'} C_{m\sigma}$$

$$\hookrightarrow V = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{ijnm} \langle ij | V | mn \rangle C_{i\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma'}^{\dagger} C_{n\sigma'} C_{m\sigma} \quad (75.1)$$

↑ notan o mesmo índices: veja Eq. (34.1)

Obs.:

$$(I) = \int d^3r d^3r' \underbrace{\langle \hat{\psi}_i | \vec{r} \rangle \langle \hat{\psi}_j | \vec{r}' \rangle}_{\langle \hat{\psi}_i \hat{\psi}_j | \vec{r} \vec{r}' \rangle} v(\vec{r}, \vec{r}') \underbrace{\langle \vec{r}' | \hat{\psi}_n \rangle \langle \vec{r} | \hat{\psi}_m \rangle}_{\langle \vec{r} \vec{r}' | \hat{\psi}_m \hat{\psi}_n \rangle}$$

$$\langle \hat{\psi}_i \hat{\psi}_j | \vec{r} \vec{r}' \rangle$$

$$\langle \vec{r} \vec{r}' | \hat{\psi}_m \hat{\psi}_n \rangle$$

$$= \langle \hat{\psi}_i \hat{\psi}_j | V | \hat{\psi}_m \hat{\psi}_n \rangle \equiv \langle ij | V | mn \rangle$$

↳ Eqs (74.3) e (75.1):

$$H = \sum_{\sigma} \sum_{ij} t_{ij} C_{i\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{ijem} \langle ij | V | mn \rangle C_{i\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma'}^{\dagger} C_{n\sigma'} C_{m\sigma}$$

: hamiltoniano na representação tight-binding

(75.2)

Eq. (75.2): descreve sistemas cujos orbitais atômicos são bastante localizados em torno sítios de rede

↳ bandas e/ou pequena largura de banda;

- metais de transição: orbitais  $d$  parcialmente preenchidos;
- terras raras ou actínidos: "  $f$  " " "

• sobre o termo cinético do hamiltoniano (75.2):

hipótese:

$$t_{ij} = \begin{cases} E_i & \text{: energia sítio } i \\ -t & \text{, se } i \text{ e } j \text{ primeiros vizinhos} \\ 0 & \text{, c.c.} \end{cases} \quad (76.3)$$

nesse caso,  $H_0$  pode ser escrito como:

$$H_0 = \sum_{\sigma} \sum_i E_i C_{i\sigma}^{\dagger} C_{i\sigma} - t \sum_{\sigma} \sum_{\langle ij \rangle} (C_{i\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma} + C_{j\sigma}^{\dagger} C_{i\sigma}) \quad (76.2)$$

$\equiv$  H.C. (hermitiano conjugado)

• notação:  $\langle ij \rangle$ : soma sob (pares) sítios  $i$  e  $j$  primeiros vizinhos;

e.g., p/ rede quadrada c/  $N$  sítios:  $i = 1, 2, \dots, N$

$$j = i + \delta; \quad \vec{\delta} = a\hat{x}, a\hat{y}.$$

• notari:

$$-t C_{i\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma} \quad \begin{array}{c} \curvearrowright \\ \bullet \quad \bullet \\ i \quad j \end{array} \quad \equiv \quad \text{H.C.} \quad \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ i \quad j \\ \curvearrowleft \end{array}$$

• hipótese:  $E_i = 0$ ;

• vamos verificar que  $H_0$  pode ser diagonalizado via uma transformada de Fourier;

Definição:  $N$ : # sítios de rede

$$C_{i\sigma}^{\dagger} = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\vec{k} \in BZ} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} C_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} \quad \equiv \quad C_{i\sigma} = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\vec{k} \in BZ} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} C_{\vec{k}\sigma} \quad (76.3)$$

álgebra (74.2)  $\rightarrow$  álgebra ops.  $C_{\vec{k}\sigma}^\dagger \in C_{\vec{k}\sigma}$  (verifican):

$$\{C_{\vec{k}\alpha}, C_{\vec{p}\beta}\} = \{C_{\vec{k}\alpha}^\dagger, C_{\vec{p}\beta}^\dagger\} = 0 \quad \equiv \quad \{C_{\vec{k}\alpha}, C_{\vec{p}\beta}^\dagger\} = \delta_{\vec{k}, \vec{p}} \delta_{\alpha, \beta} \quad (77.1)$$

Eq. (76.2):

$$H_0 = -t \sum_{\sigma} \sum_{i, \delta} (C_{i\sigma}^\dagger C_{i+\delta, \sigma} + C_{i+\delta, \sigma}^\dagger C_{i\sigma}) \quad \oplus \quad \text{Eq. (76.3):}$$

notan:

$$\sum_{i, \delta} C_{i\sigma}^\dagger C_{i+\delta, \sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{p}} \sum_{\vec{\delta}} \sum_i e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i + i\vec{p} \cdot (\vec{R}_i + \vec{\delta})} C_{\vec{k}\sigma}^\dagger C_{\vec{p}\sigma}$$

$$e^{i\vec{p} \cdot \vec{\delta}} \sum_i e^{-i(\vec{k} - \vec{p}) \cdot \vec{R}_i}$$

$$= N \delta_{\vec{k}, \vec{p}}$$

$$= \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{\delta}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}} C_{\vec{k}\sigma}^\dagger C_{\vec{k}\sigma}$$

$$\hookrightarrow H_0 = -t \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{\delta}} (e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}}) C_{\vec{k}\sigma}^\dagger C_{\vec{k}\sigma}$$

$$= \sum_{\vec{k}, \sigma} (-2t) \sum_{\vec{\delta}} \cos(\vec{k} \cdot \vec{\delta}) C_{\vec{k}\sigma}^\dagger C_{\vec{k}\sigma}$$

$$\equiv E(\vec{k})$$

$$\hookrightarrow H_0 = \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k} \in \text{BZ}} E(\vec{k}) C_{\vec{k}\sigma}^\dagger C_{\vec{k}\sigma}, \quad (77.2)$$

onde  $\vec{k} \in \text{BZ}$ : 1ª zona de Brillouin: (veja pg. 78.1)



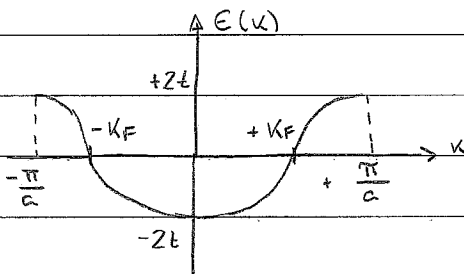
Ex. 1: cadeia 1D:

$$s = a \quad \text{e} \quad -\frac{\pi}{a} \leq k \leq +\frac{\pi}{a} \quad ; \quad a: \text{parâmetro da rede}$$

$$\hookrightarrow E(k) = -2t \cos(ks) = -2t \cos(ka) \quad (78.1)$$

Se  $N_e = \frac{1}{2} N$  : semi-preenchimento, temos que:

$$N_e = \frac{1}{2} N = \sum_k 1 = L \int_{-k_F}^{k_F} \frac{dk}{2\pi} = N a \cdot \frac{2k_F}{2\pi} \rightarrow k_F = \frac{\pi}{2a} \quad : \quad \# \text{ onda de Fermi}$$



$$\hookrightarrow E_F = E(\pi/2a) = 0 :$$

: energia de Fermi

$$(78.2)$$

Ex. 2: rede quadrada:  $\vec{s} = a\hat{x}, a\hat{y}$

$$-\frac{\pi}{a} \leq k_x, k_y \leq +\frac{\pi}{a}$$

$$\hookrightarrow E(\vec{k}) = -2t (\cos k_x a + \cos k_y a) \quad (78.3)$$

veja Fig. 2.3, Friedlin!

• sobre 1ª zona de Brillouin (veja Cap. 8, Ashcroft):

Lembranças: funções de Bloch:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}); \quad u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\vec{R} = \sum_i n_i \vec{a}_i; \quad \text{vetor rede de Bravais} \quad (78.4)$$

$$\vec{k} = \sum_i x_i \vec{b}_i; \quad \vec{b}_i: \text{vetores primitivos rede recíproca};$$

valores  $x_i \sim$  condições periódicas de contorno (p.b.c.):

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + n_i \vec{a}_i) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}); \quad N = N_1 N_2 N_3: \# \text{ células unitárias cristal:}$$

$$\begin{aligned} \hookrightarrow \psi_{\vec{k}}(\vec{r} + n_i \vec{a}_i) &= e^{i\vec{k} \cdot (n_i \vec{a}_i)} \underbrace{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r} + n_i \vec{a}_i)}_{\substack{u_{\vec{k}}(\vec{r}) \\ \psi_{\vec{k}}(\vec{r})}} = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \\ &\quad \uparrow \\ &\quad \text{p.b.c.} \end{aligned}$$

$$\hookrightarrow e^{i\vec{k} \cdot (n_i \vec{a}_i)} = 1 \rightarrow \vec{k} \cdot (n_i \vec{a}_i) = 2\pi m_i$$

$$n_i \sum_j x_j \vec{b}_j \cdot \vec{a}_i = n_i x_i \cdot 2\pi = 2\pi m_i$$

$$\underbrace{\qquad\qquad\qquad}_{2\pi \delta_{ij}}$$

$$\hookrightarrow x_i = \frac{m_i}{n_i}; \quad m_i \in \mathbb{Z}$$

$$\hookrightarrow \vec{k} = \sum_i \frac{m_i}{n_i} \vec{b}_i; \quad m_i \in \mathbb{Z} \quad (78.5)$$

como: volume  $\Delta\vec{k}$  associado a cada vetor  $\vec{k}$ :

$$\Delta\vec{k} = \frac{\vec{b}_1}{N_1} \cdot \left( \frac{\vec{b}_2}{N_2} \times \frac{\vec{b}_3}{N_3} \right) = \frac{1}{N} \vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3) = \frac{1}{N} \cdot \text{VCELULA UNITÁRIA R.R.}$$

↳ # vetores  $\vec{k}$  = # sítios rede recíproca!

em particular, p1 rede cúbica:

$$\vec{k} = \sum_i \frac{2\pi}{a} m_i \hat{e}_i ; m_i = 1, \dots, N_i \quad (78.6)$$

↳ 1ª zona de Brillouin (BZ):

$$\vec{k} = \sum_i k_i \hat{e}_i \in \text{BZ} \rightarrow -\frac{\pi}{a} \leq k_i \leq +\frac{\pi}{a} \quad (78.7)$$

• sobre o termo de interação do hamiltoniano (75.2);  
vamos considerar 3 termos particulares:

(i) termo direto:

nesse caso,  $m=i$  e  $n=j$ ; em particular,  $p \neq i \neq j$ , temos que:

$$V_D = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \sum_{ij} \underbrace{\langle ij | V | ij \rangle}_{\equiv V_{ij}} \underbrace{C_{i\alpha}^+ C_{j\beta}^+ C_{j\beta} C_{i\alpha}}_{C_{i\alpha}^+ C_{i\alpha} C_{j\beta}^+ C_{j\beta}}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} \left( \sum_{\alpha} C_{i\alpha}^+ C_{i\alpha} \right) \left( \sum_{\beta} C_{j\beta}^+ C_{j\beta} \right)$$

$$\hookrightarrow V_D = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j \quad (79.1)$$

: descrição interação (clássica) cargas localizadas nos  
sítios  $i$  e  $j$   $\rightarrow$  instabilidades do tipo  
onda de densidade de carga (CDW)

notar Eq. (75.1):

$$V_{ij} = \int d^3n d^3n' |\phi(\vec{n}-\vec{R}_i)|^2 v(\vec{n}, \vec{n}') |\phi(\vec{n}'-\vec{R}_j)|^2$$

(ii) termo de troca (exchange):

nesse caso,  $m=j$  e  $n=i$ ; em particular,  $p \neq i \neq j$ , temos que:

$$V_E = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \sum_{ij} \langle ij | V | ij \rangle C_{i\alpha}^+ C_{j\beta}^+ C_{i\beta} C_{j\alpha} \quad (79.2)$$

(I)

(I) pode ser escrito como:

$$(I) = \sum_{\alpha\beta\mu\nu} C_{i\alpha}^\dagger C_{j\beta}^\dagger C_{i\beta} C_{j\alpha} = - \sum_{\alpha\mu} C_{i\alpha}^\dagger C_{i\beta} C_{j\beta}^\dagger C_{j\alpha}, \text{ pois } i \neq j$$

$$= - \sum_{\alpha\beta\mu\nu} \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu} C_{i\alpha}^\dagger C_{i\beta} C_{j\mu}^\dagger C_{j\nu}$$

$$\text{identidade: } \sum_{\alpha=1}^3 \sigma_{\alpha\beta}^a \sigma_{\mu\nu}^a = 2 \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu} - \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mu\nu} \quad (80.1)$$

(veja pg. 80.1)

$$\hookrightarrow (I) = - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\mu\nu} (\sigma_{\alpha\beta}^a \sigma_{\mu\nu}^a + \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mu\nu}) C_{i\alpha}^\dagger C_{i\beta} C_{j\mu}^\dagger C_{j\nu}$$

$$= - \frac{1}{2} \left( \sum_{\alpha} C_{i\alpha}^\dagger C_{i\alpha} \right) \left( \sum_{\mu} C_{j\mu}^\dagger C_{j\mu} \right) +$$

$$- \frac{1}{2} \sum_a \left( \sum_{\alpha\beta} C_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^a C_{i\beta} \right) \left( \sum_{\mu\nu} C_{j\mu}^\dagger \sigma_{\mu\nu}^a C_{j\nu} \right)$$

$$= 2 S_i^a$$

$$= 2 S_j^a \quad : \text{ veja Eq. (44.3)}$$

$$\hookrightarrow (I) = -2 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{1}{2} \hat{n}_i \cdot \hat{n}_j = -2 \left( \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \frac{1}{4} \hat{n}_i \cdot \hat{n}_j \right)$$

$\hookrightarrow$  Eq. (79.2) :

$$V_E = -2 \sum_{i \neq j} \frac{1}{2} \langle ij | V | ij \rangle \left( \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \frac{1}{4} \hat{n}_i \cdot \hat{n}_j \right) : \quad (80.2)$$

$$\equiv J_{ij}^F : \text{ de (acoplamento) de troca}$$

: Como  $J_{ij}^F > 0$ , temos que termo de troca

:  $\hookrightarrow$  acoplamento ferromagnético (FM) entre spins

sítios  $i$  e  $j$  ;

• sobre a identidade (80.1):

Lembrar:  $\hat{1}_{2 \times 2}$  e matrizes de Pauli  $\sigma^x$ ,  $\sigma^y$  e  $\sigma^z$  são linearmente independentes

$\hookrightarrow$   $\forall$  matriz  $2 \times 2$  pode ser escrita como:

$$A = \lambda_0 \hat{1} + \sum_{a=1}^3 \lambda_a \sigma^a,$$

onde (verificar)  $\lambda_0 = \frac{1}{2} \text{Tr} A$  e  $\lambda_a = \frac{1}{2} \text{Tr} (\sigma^a A)$

$$\hookrightarrow A = \frac{1}{2} \text{Tr}(A) \hat{1} + \frac{1}{2} \sum_a \text{Tr}(\sigma^a A) \sigma^a$$

$$\sum_{\mu} A_{\mu\mu}$$

$$\sum_{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu}^a A_{\nu\mu}$$

$$\hookrightarrow A_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \sum_{\mu} A_{\mu\mu} \delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \left( \sum_a \sigma_{\mu\nu}^a \sigma_{\alpha\beta}^a \right) A_{\nu\mu}$$

$$\hookrightarrow \sum_{\mu\nu} \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu} A_{\nu\mu} = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \left( \delta_{\nu\mu} \delta_{\alpha\beta} + \sum_a \sigma_{\mu\nu}^a \sigma_{\alpha\beta}^a \right) A_{\nu\mu}$$

como a matriz  $A$  é arbitrária

$$\hookrightarrow 2 \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu} = \delta_{\nu\mu} \delta_{\alpha\beta} + \sum_{a=1}^3 \sigma_{\mu\nu}^a \sigma_{\alpha\beta}^a : \text{Eq. (80.1)}$$

notas Eq. (75.3):

$$J_{ij}^F = \frac{1}{2} \int d\vec{n} d\vec{n}' \phi^*(\vec{n} - \vec{R}_i) \phi^*(\vec{n} - \vec{R}_j) v(\vec{n}, \vec{n}') \phi(\vec{n}' - \vec{R}_i) \phi(\vec{n} - \vec{R}_j) > 0$$

(81.1)

notas 1º termo Eq. (80.2):

$$H = - \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad J_{ij} > 0 : \text{hamiltoniano modelo Heisenberg (FM)} \quad (81.2)$$

Obs. Eq. (81.1): notas nelecção  $J_{ij}$  c/ interacção Coulomb!

(iii) termo (local) de Hubbard;

hipótese: interacção Coulomb entre electrões e blindada  
(lembrar potencial de Yukawa);

nesse caso, a principal contribuição p/ interacção  
electrónica ~ termo local;

↳ podemos considerar:

$$\langle ij | V | mn \rangle = \begin{cases} U, & i=j=m=n \\ 0, & \text{c.c.} \end{cases}$$

temos que:

$$V \approx H_U = \frac{1}{2} U \sum_i \sum_{\alpha\beta} C_{i\alpha}^\dagger C_{i\beta}^\dagger C_{i\beta} C_{i\alpha}$$

$$C_{i\alpha}^\dagger C_{i\alpha} C_{i\beta}^\dagger C_{i\beta}, \text{ pois } \alpha \neq \beta, \text{ c.c. } (C_{i\alpha})^2 = 0$$

$$= \frac{1}{2} U \sum_i \sum_{\sigma} C_{i\sigma}^\dagger C_{i\sigma} C_{i,-\sigma}^\dagger C_{i,-\sigma} = U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$$

$$\hat{n}_{i,\sigma} \quad \hat{n}_{i,-\sigma}$$

$$\hookrightarrow H = H_0 + H_U$$

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} C_{i\sigma}^\dagger C_{j\sigma} + H.c. + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (82.1)$$

: hamiltoniano modelo de Hubbard (1-banda):

- modelo de Hubbard tem sido utilizado p/ descrever:
  - propriedades eletrônicas metálicas cujas larguras das eletrônicas são pequenas (e.g., metais de transição);
  - magnetismo de banda (Fe, Co, Ni, ...);
  - transição metal-isolante (transição de Mott);
  - supercondutores alta-temperatura.

• soluções modelo:

- $d \geq 2$  : apenas soluções aproximadas
- $d = 1$  : solução exata : PRL 20, 1445 (1968)

p/ review recente, veja Anovas et al., arXiv: 2103.12097

• parâmetros do modelo:

-  $U/t$  : razão energia Coulomb / largura banda ↖ veja Eq. (78.1)

-  $n$  : densidade de partículas ou # partículas / sítio

-  $T/t$  : temperatura

• simetrias do modelo (veja Sec. 2.2, Friedkin)



(i) invariância sob rotação spin;

verifica-se que (82.1) é invariante sob transformação  $SU(2)$ :

$$C_{i\alpha} \rightarrow U_{\alpha\beta} C_{i\beta} \quad (83.1)$$

onde  $U_{\alpha\beta}$ : elemento matriz  $2 \times 2$  e unitário  $U$ ,  $\det U = 1$ ;  
apesar forma hamiltoniano (82.1) não é explicitamente invariante sob transf. (83.1), verifica-se que (82.1) pode ser escrito como (verificar):

$$H = \frac{1}{2} N_e U + H_0 = \frac{2}{3} U \sum_i S_i^z \quad \text{invariante sob} \quad (83.2)$$

(83.1)

(ii) Conservação de carga;

verifica-se que (exercício), hamiltoniano (82.1) invariante sob transformação (global)  $U(1)$ :

$$C_{i\alpha} \rightarrow e^{i\theta} C_{i\alpha} \quad ; \quad \theta = cte \quad (83.3)$$

(iii) transf. partícula-buraco;

considera modelo de Hubbard em uma rede bipartida, e.g., redes quadrada e honeycomb;

considera transformação:

$$C_{i\uparrow} \rightarrow d_{i\uparrow} \quad \text{e} \quad C_{i\downarrow} \rightarrow \begin{cases} +d_{i\downarrow} & , i \in \text{subrede A} \\ -d_{i\downarrow} & , i \in \text{subrede B} \end{cases} \quad (83.4)$$

verifica-se que (exercício):

$$H(b, U) \rightarrow H(b, -U) + U N_{\uparrow}^{\#} \quad \# \text{ total spins up!}$$

como (índice sítio omitido):

$$n_{\uparrow} + n_{\downarrow} = C_{\uparrow}^{\dagger} C_{\uparrow} + C_{\downarrow}^{\dagger} C_{\downarrow} = d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} = d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + 1$$

$$\hat{n}_\uparrow - \hat{n}_\downarrow = c_\uparrow^\dagger c_\uparrow - c_\downarrow^\dagger c_\downarrow = d_\uparrow^\dagger d_\uparrow - d_\downarrow^\dagger d_\downarrow = d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + d_\downarrow^\dagger d_\downarrow - 1$$

↳ sob transf. (83.4):

$Q \rightarrow S_z + 1$  : transf. carga sistema

$S_z \rightarrow Q - 1$  : " componente z spin total

Eq. (83.4) : mapeamento modelo repulsivo ( $U > 0$ )  $\leftrightarrow$  atrativo ( $U < 0$ );  
em particular, p/  $U < 0$ , temos que  $H_U \rightarrow$  formação singletos  
( $S=0$ ) locais  $\sim$  sítios vazios e duplamente ocupados.

• Casos limites modelo (82.1):

(i) limite não-interagente  $U=0$ :

sistema descrito pelo modelo tight-binding (76.2);

se # elétrons  $N_e \leq 2N$ ,  $N$ : # sítios da rede,

$\sim$  fator de preenchimento  $n \leq 2$

↳ banda eletrônica parcialmente preenchida:

= sistema metálico

(84.1)

(ii) limite atômico  $U/t \rightarrow +\infty$ :

$H = H_0 + H_U \rightarrow H_0$  : sítios desacoplados;

possíveis configurações dos sítios da rede:

$n_\uparrow = n_\downarrow = 0 \rightarrow$  energia estado  $E_0 = 0$

$n_\uparrow = n_\downarrow = 1 \rightarrow$  " "  $E_D = U$

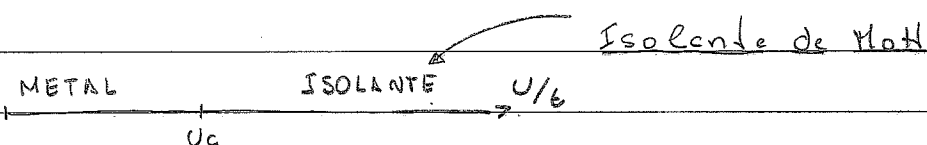
$n_\uparrow = 1$  e  $n_\downarrow = 0$  }  $\rightarrow$  " "  $E_S = 0$

$n_\uparrow = 0$  e  $n_\downarrow = 1$  }

notas:  $p \rightarrow +\infty$ , configurações  $n$  sítios duplamente ocupados não são possíveis, apenas configurações  $n$  sítios vazios ou parcialmente ocupados;

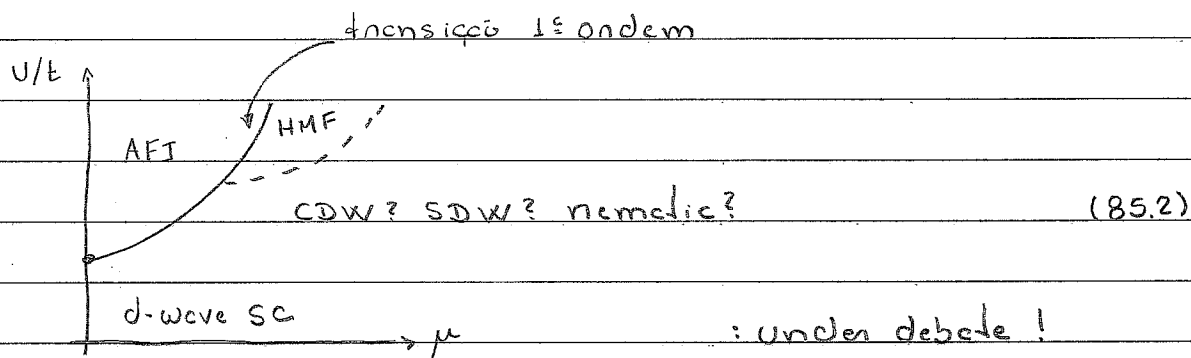
em particular,  $p$  semi-preenchimento, i.e.,  $N_e = N$  ou  $n = 1$ , temos 1 elétron localizado/sítio: sistema isolante. (85.1)

Resumo Eqs. (84.1) e (85.1):



$\hookrightarrow$  deve  $\exists U = U_c$ : transição metal-isolante  
(transição Mott-Hubbard):

Ex.: possível diagrama de fase  $p$  modelo na rede quadrada (arxiv: 2103.12097):



AFI: isolante  $n$  ordem de Néel (AFM)

HMF: half-metallic FM phase

CDW: charge density wave

SDW: spin " "

SC: superconductivity

: under debate!

Ex. 5: modelo de Heisenberg e o superexchange;

(p/ detalhes, veja Cap. 2, Frodin e Cap. 2, Auletand)

ideia: considerar modelo de Hubbard (82.1) no limite de acoplamento forte, i.e.,  $U/t \gg 1$ .

inicial: teoria de perturbação de Brillouin-Wigner:  
(veja Cap. 11, G. Baym)

considerar:  $H = H_0 + V$ ;  $H_0 |\alpha\rangle = E_\alpha^0 |\alpha\rangle$ : problema de autovalores não-perturbado;

nesse caso, verifica-se que os estados perturbados  $|\psi_\alpha\rangle$  e autovalores perturbados  $E_\alpha$  podem ser determinados a partir da equação:

$$|\psi_\alpha\rangle = |\alpha\rangle + \sum_{\beta \neq \alpha} |\beta\rangle \frac{1}{E_\alpha - E_\beta^0} \langle \beta | V | \psi_\alpha \rangle \quad (86.1)$$

↑ energia e estado perturbados

notar Eq. (86.1): solução iterativa  $\rightarrow$  determinação  $E_\alpha$  e  $|\psi_\alpha\rangle$ !

o caso autovalor  $E_\alpha^0$  degenerado, é interessante considerar o seguinte procedimento:

Definição projetor  $\hat{P}$ :  $1 = \hat{P} + \sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha|$  (86.2)

$\hookrightarrow$  Eq. (86.1):  $|\psi_\alpha\rangle = |\alpha\rangle + \hat{P} \frac{1}{E_\alpha - H_0} V |\psi_\alpha\rangle$  (86.3)

o problema de autovalores pode ser escrito como:

$$H |\psi\rangle = (H_0 + V) |\psi\rangle = E |\psi\rangle \rightarrow (E - H_0) |\psi\rangle = V |\psi\rangle$$

ou, formalmente:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{E - H_0} V |\psi\rangle \quad \text{Eq. (86.2):}$$

$$= \frac{1}{E - H_0} \hat{P} V |\psi\rangle + \sum_{\alpha} \frac{1}{E - H_0} |\alpha\rangle \langle \alpha | V |\psi\rangle$$

$$\hat{P} (E - H_0)^{-1} \quad |\alpha\rangle \cdot \frac{1}{E - E_{\alpha}^0}$$

$$\hookrightarrow |\psi\rangle = \hat{P} \frac{1}{E - H_0} V |\psi\rangle + \sum_{\alpha} |\alpha\rangle \frac{\langle \alpha | V |\psi\rangle}{E - E_{\alpha}^0} \quad (87.1)$$

considerando  $|\psi\rangle = \sum_{\alpha} C_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle$  e  $E_{\alpha} \rightarrow E$  em (86.3), temos que:

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha} C_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle = \hat{P} \frac{1}{E - H_0} V \left( \sum_{\alpha} C_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle \right) + \sum_{\alpha} C_{\alpha} |\alpha\rangle$$

$|\psi\rangle$

: comparação c/ Eq. (87.1)

$$\hookrightarrow \text{coeficiente } C_{\alpha} = \frac{\langle \alpha | V |\psi\rangle}{E - E_{\alpha}^0} \quad (87.2)$$

próxima etapa: aplicação ao modelo de Hubbard  
no limite  $U/t \gg 1$ ;

vimos que, Eq. (84.2): p/  $U \rightarrow +\infty$ , estados de mais baixa energia:  
configurações c/ sítios vazios  $|0\rangle$  ou ocupados por  
1 elétron  $|\uparrow\rangle$  ou  $|\downarrow\rangle$ ;

$\hookrightarrow$  ideia caso  $t \ll U \ll +\infty$ : projetar  $H = H_0 + H_U$  no subespaço  
definido pelos estados  $|0\rangle$ ,  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$  via um  
tratamento perturbativo;

hipótese:  $N_e = N$  ou  $n = 1$ : semi-preenchimento;  
 nesse caso, subespaço  $E_s$  de menor energia formado  
 pelos estados:

$$|\alpha\rangle = C_{1\sigma_1}^\dagger C_{2\sigma_2}^\dagger \dots C_{N\sigma_N}^\dagger |0\rangle; \sigma_i = \uparrow \text{ ou } \downarrow \quad (88.1)$$

$\hookrightarrow \dim E_s = 2^N$ ;  $N$ : # sítios da rede

como  $U \gg t$ , vamos considerar no método perturbativo:

$H_0 = H_U$ : termo não-perturbado

$V = H_0$ : " cinético  $H_0$  perturbação p/  $H_U$ !

Eq. (84.2) e (88.1):  $H_U |\alpha\rangle = 0$

$\hookrightarrow$  estados (88.1): autoestados não-perturbados

= autovalores "  $E_\alpha^0 = 0$ !

Eq. (86.1):  $|\psi_\alpha\rangle = |\alpha\rangle + \sum_{\beta \neq \alpha} |\beta\rangle \frac{1}{E - E_\beta^0} \langle \beta | H_0 | \psi_\alpha \rangle$

Como  $H_0 |\psi_\alpha\rangle$ :

$$\begin{array}{ccc} \uparrow & \downarrow & H_0 \rightarrow \\ \cdot & \cdot & \uparrow \downarrow \\ i & j & i \quad j \end{array} \quad (88.2)$$

$\hookrightarrow |\beta\rangle$ : estados c/ 1 sítio duplamente ocupado.

c.c.  $\langle \beta | H_0 | \psi_\alpha \rangle = 0$ !

Como  $E \approx E_\alpha^0 = 0 \ll U = E_\beta^0 \rightarrow E - E_\beta^0 = -U$

$\hookrightarrow |\psi_\alpha\rangle = |\alpha\rangle - \frac{1}{U} \sum_{\beta \neq \alpha} |\beta\rangle \langle \beta | H_0 | \psi_\alpha \rangle$

$\approx |\alpha\rangle - \frac{1}{U} \sum_{\beta \neq \alpha} |\beta\rangle \langle \beta | H_0 | \alpha \rangle \quad (88.3)$

Eq. (88.3):  $|\psi_\alpha\rangle$  em 1ª ordem em  $H_0$ ;

notas Eq. (87.2):

$$\langle \alpha | H_0 | \psi \rangle = \sum_{\alpha'} \langle \alpha | H_0 | \psi_{\alpha'} \rangle C_{\alpha'} = E C_\alpha \quad \oplus \text{ Eq. (88.3):}$$

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha'} \langle \alpha | H_0 | \alpha' \rangle C_{\alpha'} - \frac{1}{U} \sum_{\alpha'} \sum_{\beta \neq \alpha} \langle \alpha | H_0 | \beta \rangle \langle \beta | H_0 | \alpha' \rangle C_{\alpha'} &= E C_\alpha \\ = 0 : \text{Eq. (88.2)} & \qquad = \langle \alpha | H_0 \left( \sum_{\beta} |\beta\rangle \langle \beta| \right) H_0 | \alpha' \rangle \quad (89.1) \\ & \qquad \qquad \qquad = 1 : \sum_{\beta} \text{ s/ restrições} \\ & \qquad \qquad \qquad \text{devido (88.2)} \end{aligned}$$

$$\hookrightarrow \sum_{\alpha'} \langle \alpha | \underbrace{(-1)}_U H_0^2 | \alpha' \rangle C_{\alpha'} = E C_\alpha :$$

: determinação autovalores não-perturbados  $E =$   
 = solução problema de autovalores p/  $H$  efetivo:

$$H_{\text{eff}} = P_S \underbrace{(-1)}_U H_0^2 P_S \quad (89.2)$$

projetado no subespaço  $E_S$

Eq. (89.1): descrição estados de mais baixa energia do modelo de Hubbard (82.1) no limite de acoplamento forte e fator de preenchimento  $n=1$ !

notas:

$$H_0^2 = t^2 \sum_{\substack{\langle ij \rangle \alpha \\ \langle nm \rangle \beta}} (C_{i\alpha}^\dagger C_{j\alpha} + C_{j\alpha}^\dagger C_{i\alpha}) (C_{n\beta}^\dagger C_{m\beta} + C_{m\beta}^\dagger C_{n\beta})$$

$$= t^2 \sum_{\substack{i, n, s, p \\ \alpha, \beta}} (C_{i\alpha}^\dagger C_{i+s, \alpha} + C_{i+s, \alpha}^\dagger C_{i\alpha}) (C_{n\beta}^\dagger C_{n+p, \beta} + C_{n+p, \beta}^\dagger C_{n\beta})$$

(1)
(2)
  
(3)
(4)

no subespaço  $E_s$ , os tensores (1), (2), (3) e (4)  $\neq 0$  ise:

$$(1) = C_{i\alpha}^+ C_{i+s,\alpha} C_{n\beta}^+ C_{n+p,\beta} : \left. \begin{array}{l} i = n+p \\ i+s = n \end{array} \right\} \rightarrow n-s = n+p \rightarrow s = -p : \text{NOT OK!}$$

: e.g.,  $p$  nede  $\square$ ,  $\vec{s}, \vec{p} = a\hat{x}$  e  $a\hat{y}$

$$(2) = C_{i+s,\alpha}^+ C_{i\alpha} C_{n+p,\beta}^+ C_{n\beta} : \left. \begin{array}{l} i+s = n \\ i = n+p \end{array} \right\} \rightarrow s = -p : \text{NOT OK!}$$

$$(3) = C_{i\alpha}^+ C_{i+s,\alpha} C_{n+p,\beta}^+ C_{n\beta} : \left. \begin{array}{l} i = n \\ i+s = n+p \end{array} \right\} \rightarrow s = p : \text{OK!}$$

$$\hookrightarrow (3) = C_{i\alpha}^+ C_{j\alpha} C_{j\beta}^+ C_{i\beta} , \langle ij \rangle$$

$$(4) = C_{i+s,\alpha}^+ C_{i\alpha} C_{n\beta}^+ C_{n+p,\beta} : \left. \begin{array}{l} i+s = n+p \\ i = n \end{array} \right\} \rightarrow s = p : \text{OK!}$$

$$\hookrightarrow (4) = C_{j\alpha}^+ C_{i\alpha} C_{i\beta}^+ C_{j\beta} = (3)^+$$

$$\hookrightarrow H_0^2 = t^2 \underbrace{\sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\alpha\beta} C_{i\alpha}^+ C_{j\alpha} C_{j\beta}^+ C_{i\beta}}_{(I)} + \text{H.c.} \quad (90.1)$$

notan:

$$(I) = \sum_{\alpha\beta} C_{i\alpha}^+ C_{i\beta} C_{j\alpha} C_{j\beta}^+$$

$$\delta_{\alpha\beta} - C_{j\beta}^+ C_{j\alpha}$$

$$= \sum_{\alpha} C_{i\alpha}^+ C_{i\alpha} - \sum_{\alpha\beta} C_{i\alpha}^+ C_{i\beta} C_{j\beta}^+ C_{j\alpha}$$

$$\hat{n}_i - 2(\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j + \frac{1}{4} \hat{n}_i \hat{n}_j) : \text{veja pg. 80}$$



$$\hookrightarrow H_0^2 = -4t^2 \sum_{\langle ij \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \frac{1}{4} \hat{n}_i \hat{n}_j) + 2t^2 \sum_{\langle ij \rangle} \hat{n}_i \quad (91.1)$$

como p/ semi-preenchimento  $\sum_i \hat{n}_i = \sum_i \langle \hat{n}_i \rangle = N$

$$\hookrightarrow H_0^2 = -4t^2 \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + cte$$

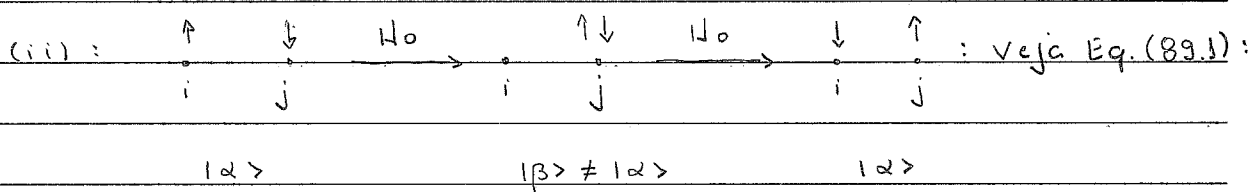
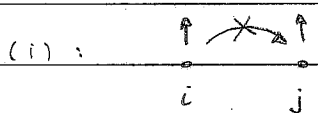
$\hookrightarrow$  Eq. (89.2):  $H_{eff} = J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$  : hamiltoniano modelo Heisenberg (AFM)

$$J = 4t^2/U \quad (91.2)$$

Eq. (91.2):

- como  $J = 4t^2/U > 0 \rightarrow$  spins primeiros vizinhos: alinhamento antiparalelo ou antiferromagnético (AFM), veja diagrama de feses (85.2) p/  $\mu=0$ ;

- a interação AFM em (91.2)  $\sim$  interação Coulomb e é denominada superexchange: Anderson, PR 115, 2 (1959);  $\neq$  acoplamento de troca (dinelo)  $\sim$  FM, Eq. (80.2), o superexchange é AFM e envolve estados virtuais:



- como spins primeiros vizinhos antiparalelos  $\rightarrow$  após termo cinético  $H_0$  é possível  $\rightarrow$  redução energia sistema e/ou quebra degenerescência estados não-perturbados  $|\alpha\rangle$ : Eq. (88.3)!



Obs.: o modelo de Heisenberg p/ spin  $S=1/2$  apresenta soluçõ exata apenas em  $d=1$ ;

" " determinada via ansatz de Bethe;  
o estado fundamental não apresenta ordem magnética AFM de longo alcance, mas apresenta um comportamento denominado crítico devido ao decaimento algébrico da função de correlação spin-spin, isto é,

$$\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle \sim \frac{(-1)^{|i-j|}}{|R_i - R_j|}, \quad |R_i - R_j| \gg 1 \quad (92.1)$$

hipótese:  $N_c < N$  ou  $n < 1$ ;

nesse caso, o subespaço  $E_0$  de mais baixa energia do modelo de Hubbard é formado por estados que apresentam sítios vazios  $|0\rangle$  ou ocupados por 1 elétron  $|\uparrow\rangle$  ou  $|\downarrow\rangle$ ; além dos graus de liberdade de spin descritos por (91.2), temos também graus de liberdade de carga = movimento dos buracos (sítios vazios);

nesse caso, verifica-se que o  $H$  efetivo (89.2) assume a forma (veja lista de problemas 1):

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \hat{P} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c.) \hat{P} + J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad J > 0 \quad (92.2)$$

: hamiltoniano modelo  $t$ - $J$

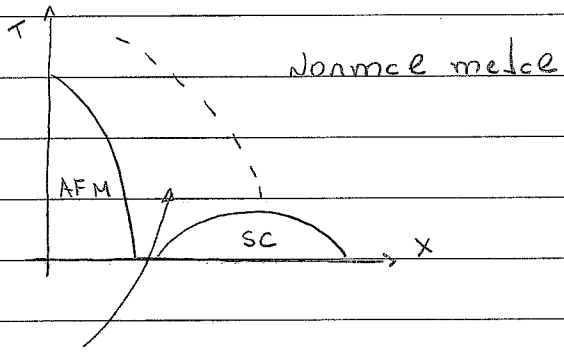
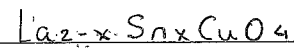
$\hat{P}$ : projetor associado subespaço  $E_0$  definido acima;

notas: aumento # buracos  $\oplus$  movimento buracos poderia

$\hookrightarrow$  destruição ~~ordem~~ Néel AFM de longo-alcance:

: possível relação c/ high- $T_c$  superconductivity!

Diagrama de fases cupratos:

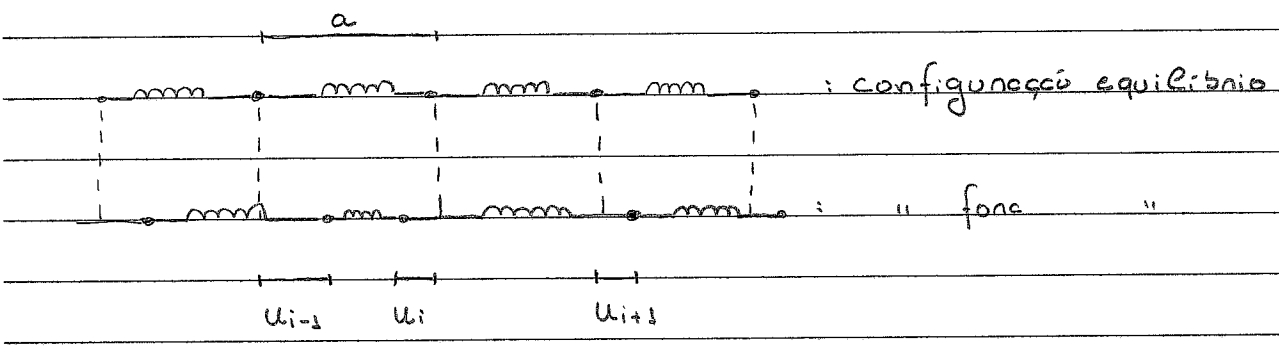


Obs.: veja INFO pg. 66, Alend.

Ex. 6 : interação elétron-fônon;  
(p/ detalhes, veja Cap. 1, Mahon e Cap. 3, Brues)

inicial I : fônons em 1D,  
ideia : descrição modos vibracionais sistema 1D;

considerar: N ions massa M, conectados por molas,  
cte de mola  $\kappa$ ; distância equilíbrio entre  
partículas = a:



Definição:  $R_i = R_i^0 + u_i$ ; posição ion  $i$   
 $\uparrow$  " equilíbrio ion  $i$   
 |----- deslocamento ion  $i$  w.r.t.  $R_i^0$

temos que:  $R_{i+1} - R_i = a$ ; parâmetro de rede  
 $|u_i| \ll a$

(93.1)

$L = Na$ : comprimento cadeia;  $N_{ion} = N$ ;

hamiltoniano:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2M} p_i^2 + \frac{1}{2} \kappa (u_{i+1} - u_i)^2 \tag{93.2}$$

⊕ condições periódicas de contorno (p.b.c.):  $u_{N+1} = u_1$ .



- determinação modos normais: mecânica clássica:

$$\text{como } \dot{u}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{e} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial u_i}$$

$$\hookrightarrow \dot{u}_i = \frac{1}{m} p_i \quad \text{e} \quad \dot{p}_i = -\kappa(2u_i - u_{i+1} - u_{i-1})$$

$$\hookrightarrow m\ddot{u}_i = -\kappa(2u_i - u_{i+1} - u_{i-1}) \quad : \text{eq. de movimento} \quad (94.1)$$

$$\text{hipótese: } u_j(t) = A e^{i(\kappa a_j - \omega t)} \quad \rightarrow \quad \ddot{u}_j(t) = -\omega^2 u_j(t)$$

$$\text{e } u_{j+1}(t) = e^{+i\kappa a} u_j(t) \quad (94.2)$$

$$\hookrightarrow -m\omega^2 u_j = -\kappa u_j (2 - e^{i\kappa a} - e^{-i\kappa a})$$

$$\hookrightarrow \omega^2 = \omega_{\kappa}^2 = \frac{2\kappa}{m} (1 - \cos \kappa a) = \frac{4\kappa}{m} \sin^2\left(\frac{\kappa a}{2}\right) \quad : \quad (94.3)$$

: frequências: modos normais de vibração

• solução: mecânica quântica:

nesse caso:

$u_i, p_j$ : variáveis clássicas  $\rightarrow$   $u_i, p_j$ : ops. hermitianos

$$\text{tais que: } [u_i, u_j] = [p_i, p_j] = 0 \quad \text{e} \quad [u_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (94.4)$$

nesse caso, é interessante escrever o hamiltoniano (93.2) em termos dos ops.  $u_k$  e  $p_k$ :

$$u_j = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{k \in BZ} e^{i\kappa a_j} u_k \quad \text{e} \quad u_k = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{j=1}^N e^{-i\kappa a_j} u_j$$

(94.5)

$$p_j = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{k \in BZ} e^{i\kappa a_j} p_k \quad \text{e} \quad p_k = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{j=1}^N e^{-i\kappa a_j} p_j$$

$$\text{notas: } [u_k, p_{k'}] = \frac{1}{N} \sum_j e^{-ikac - ik'a_j} [u_j, p_j]$$

$$= \frac{1}{N} \sum_j e^{-i(k+k')aj} (i\hbar) = i\hbar \delta_{k, -k'} \quad \text{NOTAR!}$$

$$N \delta_{k, -k'}$$

$$\hookrightarrow \text{álgebra: } [u_k, u_{k'}] = [p_k, p_{k'}] = 0 \quad \text{e} \quad [u_k, p_{k'}] = i\hbar \delta_{k, -k'} \quad (95.1)$$

Obs.:  $k \in \text{BZ}$ : 1ª zona de Brillouin: (veja pg. 78.2)

$$k \in \left\{ -\frac{\pi}{a} + \Delta k; -\frac{\pi}{a} + 2\Delta k; \dots, -\frac{\pi}{a} + N\Delta k \right\}; \quad \Delta k = \frac{2\pi}{L} = \frac{2\pi}{Na}$$

$$+\pi/a \quad (95.2)$$

temos que:

$$\sum_j p_j^2 = \frac{1}{N} \sum_{k, k'} \sum_j e^{i(k+k')aj} p_k p_{k'} = \sum_k p_k p_{-k}$$

$$\sum_j (u_{j+1} - u_j)^2 = \sum_j u_{j+1}^2 + u_j^2 - u_{j+1} u_j - u_j u_{j+1}$$

$$= 2 \sum_k u_k u_{-k} = \frac{1}{N} \sum_{k, k'} \sum_j e^{i(k+k')aj} (e^{ika} + e^{ik'a}) u_k u_{k'}$$

$$= 2 \sum_k (1 - \cos ka) u_k u_{-k} \quad (95.3)$$

$\hookrightarrow$  Eqs. (93.2) e (95.3):

$$H = \frac{1}{2m} \sum_{k \in \text{BZ}} p_k p_{-k} + m^2 \underbrace{\sum_k (1 - \cos ka) u_k u_{-k}}_{\omega_k^2: \text{Eq. (94.3)}} \quad (95.4)$$

$$\text{Obs.: como } u_j^+ = u_j \quad \text{Eq. (94.5)} \rightarrow u_k^+ = u_{-k}$$

$$\text{e } p_j^+ = p_j \quad (\text{verifiquemos!}) \quad p_k^+ = p_{-k} \quad (95.5)$$

Eq. (95.4): p/ cada número de onda  $k$ , temos que

$H =$  hamiltoniano oscilador harmônico 1D,  
frequência  $\omega_k$ ;

$\hookrightarrow$  introdução ops. criação e destruição  $a_k^+$  e  $a_k$ :

$$a_k = \sqrt{\frac{m\omega_k}{2\hbar}} \left( u_k + \frac{i}{m\omega_k} p_k \right) \quad (96.1)$$

$$\hat{=} a_k^+ = \sqrt{\frac{m\omega_k}{2\hbar}} \left( u_k^+ - \frac{i}{m\omega_k} p_k^+ \right) = \sqrt{\frac{m\omega_k}{2\hbar}} \left( u_{-k} - \frac{i}{m\omega_k} p_{-k} \right)$$

notas:

$$[a_k, a_{k'}^+] = \frac{m}{2\hbar} (\omega_k \omega_{k'})^{1/2} \left( \underbrace{-\frac{i}{m\omega_{k'}} [u_k, p_{-k'}]}_{i\hbar \delta_{kk'}} + \underbrace{\frac{i}{m\omega_k} [p_k, u_{-k'}]}_{-i\hbar \delta_{kk'}} \right);$$

de fato, temos que:

$$[a_k, a_{k'}] = [a_k^+, a_{k'}^+] = 0 \quad \hat{=} \quad [a_k, a_{k'}^+] = \delta_{k, k'}; \quad (96.2)$$

: álgebra (25.1): bósons

• Eqs. (95.4) e (96.1): verifica-se que (exercício):

$$H = \sum_{k \in BZ} \hbar \omega_k \left( a_k^+ a_k + \frac{1}{2} \right); \quad \omega_k: \text{Eq. (94.3)} \quad (96.3)$$

$a_k^+$ : op. criação fônon (bóson), energia  $\hbar \omega_k$  e momento  $p = \hbar k$ ;

$a_k$ : " destruição " " " " " e " " " " " " " "

• ops.  $a_k(t)$  e  $a_k^+(t)$  na versão de Heisenberg e considerando hamiltoniano (96.3), temos que (verificar!):

$$a_k(t) = a_k e^{-i\omega_k t} \quad \hat{=} \quad a_k^+(t) = a_k^+ e^{i\omega_k t} \quad (96.4)$$

Eq. (96.1): temos que (verifican):

$$u_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k}} (a_k + a_{-k}^\dagger) \quad \oplus \quad \text{Eq. (96.4)} \quad (97.1)$$

$$\hookrightarrow u_k(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k}} (a_k e^{-i\omega_k t} + a_{-k}^\dagger e^{i\omega_k t}) \quad \oplus \quad \text{Eq. (94.5)}$$

$$\hookrightarrow u_j(t) = \int_{\text{KGBZ}} \left( \frac{\hbar}{2m\omega_k} \right) e^{ikaj} (a_k e^{-i\omega_k t} + a_{-k}^\dagger e^{i\omega_k t}) ; \quad (97.2)$$

: expressão em segunda quantização deslocamento ion<sub>j</sub>  
 w.n.l.  $R_j^0$ : comparan a quantização campo de  
 Klein-Gordon (veja Eq. (3.7), Mandel)

Obs. 1: Eqs. (94.3) e (96.3): soluções clássicas e quânticas:  
 mesmas frequências/energias modos vibracionais;

$$\text{Obs. 2: Eq. (94.3): } \hbar\omega_k \approx \underbrace{\sqrt{k}}_{v_s} \hbar v_k, \quad |k| \ll 1; \quad (97.3)$$

$v_s$ : velocidade do som

$\hbar\omega_k \xrightarrow[k \rightarrow 0]{} 0 \sim$  teorema de Goldstone: formação cristal

$\sim$  quebra espontânea simetria (contínua) de translação

Obs. 3: Eq. (96.3): hamiltoniano conjunto  $N$  osciladores  
 harmônicos independentes.



caso geral 1D: sistema c/ p átomos/célula unitária:

1 modo acústico

(p-1) modos óticos :  $\omega_\lambda(k) \xrightarrow{k \rightarrow 0} c|k|$

$N_{ions} = pN$  ;  $N$  : # sítios de rede

nesse caso, o hamiltoniano (96.3) assume a forma:

$$H = \sum_{\lambda=1}^p \sum_{k \in BZ} \omega_\lambda(k) (a_{k\lambda}^\dagger a_{k\lambda} + 1/2) \tag{98.1}$$

inicial II: fônons em 3D

(p/ detalhes, veja Cap. 22, Ashcroft)

3D: similar 1D  $\oplus$  introdução polarização ~ similares fônons.  
fônon

hamiltoniano sistema  $N_{ions} = N$  em uma rede,  
massa ion = M:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2M} P_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\vec{R}_i - \vec{R}_j) = \hat{T} + \hat{U} \tag{98.2}$$

similar Eq. (93.1):  $\vec{R}_i = \vec{R}_i^0 + \vec{u}_i$

hipótese:  $|\vec{u}_i| \ll a$  : parâmetro de rede

$\hookrightarrow$  expansão Taylor p/  $\hat{U}$ :

Definição:  $\vec{R} = \vec{R}_i - \vec{R}_j \quad \text{e} \quad \partial_\alpha = \frac{\partial}{\partial R_\alpha} \quad \rightarrow \quad \vec{\nabla} = (\partial_1, \partial_2, \partial_3)$

notas:  $V(\vec{R}) = V(\vec{R}_i - \vec{R}_j) = V(\vec{R}_i^0 - \vec{R}_j^0 + \vec{u}_i - \vec{u}_j)$



$$\hookrightarrow V(\vec{R}_i - \vec{R}_j) \approx V(\vec{R}_i^0 - \vec{R}_j^0) + (\vec{u}_i - \vec{u}_j) \cdot \vec{\nabla} V \Big|_{\vec{R} = \vec{R}_i^0 - \vec{R}_j^0}$$

= 0 : equilíbrio!

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^3 (u_i - u_j)_\alpha (u_i - u_j)_\beta \frac{\partial^2 V}{\partial R_\alpha \partial R_\beta} \Big|_{\vec{R} = \vec{R}_i^0 - \vec{R}_j^0} + O(V^3)$$

$$\equiv \Phi_{\alpha\beta}(i, j) \quad (99.1)$$

$$\hookrightarrow \hat{U} = \hat{U}_{eq} + \hat{U}_{HARM}$$

onde  $\hat{U}_{eq} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(R_i^0 - R_j^0)$  : cte

•  $\hat{U}_{HARM}$  pode ser escrito como:

$$\hat{U}_{HARM} = \frac{1}{4} \sum_{i \neq j} \sum_{\alpha\beta} (u_i - u_j)_\alpha \Phi_{\alpha\beta}(i, j) (u_i - u_j)_\beta$$

$$= \frac{1}{4} \sum_i \sum_{\alpha\beta} u_{i,\alpha} \sum_j \Phi_{\alpha\beta}(i, j) u_{j,\beta} + \sum_j \sum_{\alpha\beta} u_{j,\alpha} \sum_i \Phi_{\alpha\beta}(i, j) u_{i,\beta}$$

$$\delta_{ij} u_{i,\alpha} \sum_e \Phi_{\alpha\beta}(i, e) u_{j,\beta} \quad \delta_{ij} u_{i,\alpha} \sum_e \Phi_{\alpha\beta}(e, j) u_{j,\beta}$$

$$- \sum_{i,j} u_{i,\alpha} \Phi_{\alpha\beta}(i, j) u_{j,\beta} - \sum_{i,j} u_{j,\alpha} \Phi_{\alpha\beta}(i, j) u_{i,\beta}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sum_{\alpha\beta} u_{i,\alpha} \left( \delta_{ij} \sum_e \Phi_{\alpha\beta}(i, e) - \Phi_{\alpha\beta}(i, j) \right) u_{j,\beta} \quad (99.2)$$

$$\equiv \mathcal{D}_{\alpha\beta}(i, j)$$

Obs.:  $\sum_{i \neq j} \rightarrow \sum_{i,j}$ , pois  $(u_i - u_j)_\alpha = 0$  p/  $i=j$ !

$\mathcal{D}_{\alpha\beta}(i, j)$  : elemento matriz  $\hat{\mathcal{D}}(i, j) = \hat{\mathcal{D}}(\vec{R})$

de fato,  $\vec{R} = \vec{R}^0 = \vec{R}_i^0 - \vec{R}_j^0$

propriedades matriz  $\hat{D}(\vec{R})$ :

$$(i) D_{\alpha\beta}(i,j) = D_{\beta\alpha}(i,j) \text{ ou } \hat{D}(\vec{R})^t = \hat{D}(\vec{R}) ;$$

:  $\hat{D}(\vec{R})$  : matriz simétrica

$$(ii) D_{\alpha\beta}(i,j) = D_{\alpha\beta}(j,i) \text{ ou } \hat{D}(\vec{R}) = \hat{D}(-\vec{R})$$

(100.1)

$$(iii) \sum_{ij} D_{\alpha\beta}(i,j) = 0 \text{ ou } \sum_{\vec{R}} \hat{D}(\vec{R}) = 0 ;$$

de fato, p/ uma translação rígida de rede, i.e.,  
 $\vec{u}_i = \vec{d}$  : vetor arbitrário, temos que  $U_{HARM} = 0$ ;

$$\text{Eq. (98.2): } U_{HARM} = \frac{1}{2} \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} d_{\alpha} D_{\alpha\beta}(i,j) d_{\beta} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} d_{\alpha} \left( \sum_{ij} D_{\alpha\beta}(i,j) \right) d_{\beta} = 0$$

= 0, pois  $\vec{d}$  : arbitrário !

• determinação modos normais : mecânica clássica:

Eq. de movimento:

$$M \ddot{u}_{i\alpha} = - \frac{\partial U_{HARM}}{\partial u_{i\alpha}} = - \sum_j \sum_{\beta} D_{\alpha\beta}(i,j) u_{j\beta} \quad (100.2)$$

$$\text{hipótese : } u_{j\alpha}(t) = A_{\alpha} E_{\alpha} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R}_j - \omega t)} \quad (100.3)$$

$$\hookrightarrow M \omega^2 A_{\alpha} E_{\alpha} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R}_i - \omega t)} = \sum_j \sum_{\beta} D_{\alpha\beta}(i,j) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R}_j - \omega t)} A_{\beta} E_{\beta}$$

$$M \omega^2 E_{\alpha} = \sum_{\beta} \sum_j D_{\alpha\beta}(i,j) e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} E_{\beta}$$

$$D_{\alpha\beta}(\vec{R})$$

(100.4)

$$= D_{\alpha\beta}(\vec{k})$$

$$\hookrightarrow \sum_{\beta} D_{\alpha\beta}(\vec{k}) E_{\beta} = M\omega^2 E_{\alpha} \quad \text{ou} \quad \hat{D}(\vec{k}) \hat{E} = M\omega^2 \hat{E} :$$

(101.1)

: problema autovalores p/ matriz  $\hat{D}(\vec{k})$

↑ matriz dinâmica

notas: p/ cada  $\vec{k}$ : 3 modos normais  $\sim \alpha = 1, 2, 3$

↳ p/ sistema: 3N modos normais!

Eqs. (100.3) e (100.4):

$$D_{\alpha\beta}(\vec{k}) = \sum_{\vec{R}} D_{\alpha\beta}(\vec{R}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}} (D_{\alpha\beta}(\vec{R}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} + D_{\alpha\beta}(-\vec{R}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}} 2 D_{\alpha\beta}(\vec{R})$$

$D_{\alpha\beta}(\vec{R})$

= 0

$$= \sum_{\vec{R}} D_{\alpha\beta}(\vec{R}) (\cos \vec{k} \cdot \vec{R} - 1)$$

$$= -2 \sum_{\vec{R}} D_{\alpha\beta}(\vec{R}) \sin^2 \left( \frac{\vec{k} \cdot \vec{R}}{2} \right) \quad (101.2)$$

↳  $\hat{D}(\vec{k})$ : matriz real e simétrica

↳ autovalores  $\hat{E}^1(\vec{k}), \hat{E}^2(\vec{k}), \hat{E}^3(\vec{k}) \in \mathbb{R}$

(101.3)

$$e \quad \hat{E}^{\lambda}(\vec{k}) \cdot \hat{E}^{\mu}(\vec{k}) = \delta_{\lambda\mu}, \quad \lambda, \mu = 1, 2, 3$$

↑ vetores de polarização

↳ autovalores (101.3):  $\omega \rightarrow \omega_{\lambda}(\vec{k}), \quad \lambda = 1, 2, 3$

• p/  $|\vec{k}| \ll 1$ , temos que

$$D_{\alpha\beta}(\vec{k}) \approx -\frac{\kappa^2}{2} \sum_{\vec{R}} (\vec{k} \cdot \vec{R})^2 D_{\alpha\beta}(\vec{R})$$

↳  $\omega(\vec{k}) = c|\vec{k}|$ , p/  $|\vec{k}| \ll 1$  : veja Eq. (97.3).

Obs.: p/ cristal isotrópico, podemos considerar, e.g.:

$\hat{E}_1 \parallel \vec{k} \rightarrow \hat{E}_1$  : modo longitudinal

$\hat{E}_2 \perp \hat{E}_3 \perp \vec{k} \rightarrow \hat{E}_2$  e  $\hat{E}_3$  : modos transversais;

nomenclatura pode ser utilizada de forma aproximada

p/ cristal anisotrópico (veja comentário pg. 442, Ashcroft)

solução: mecânica quântica:

similar 1-D, Eq. (94.5):

$$u_{j\alpha} = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\vec{k} \in BZ} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} u_{\vec{k}\alpha} \quad \equiv \quad u_{\vec{k}\alpha} = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} u_{j\alpha}$$

(102.1)

$$p_{j\alpha} = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\vec{k} \in BZ} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} p_{\vec{k}\alpha} \quad \equiv \quad p_{\vec{k}\alpha} = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} p_{j\alpha}$$

álgebra:  $[u_{i\alpha}, u_{j\beta}] = [p_{i\alpha}, p_{j\beta}] = 0 \quad \equiv \quad [u_{i\alpha}, p_{j\beta}] = i\hbar \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij}$

$\equiv [u_{\vec{k}\alpha}, u_{\vec{k}'\beta}] = [p_{\vec{k}\alpha}, p_{\vec{k}'\beta}] = 0 \quad \equiv [u_{\vec{k}\alpha}, p_{\vec{k}'\beta}] = i\hbar \delta_{\alpha\beta} \delta_{\vec{k}, -\vec{k}'}$

(102.2)

novamente:  $u_{\vec{k}\alpha}^\dagger = u_{-\vec{k}\alpha}$  e  $p_{\vec{k}\alpha}^\dagger = p_{-\vec{k}\alpha}$  : veja

Eq. (95.5)

hamiltoniano (98.2) e Eq. (99.2):

$$H = \hat{T} + \hat{U}_{\text{HARM}} =$$

$$= \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} p_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} u_{i\alpha} D_{\alpha\beta}(i,j) u_{j\beta}$$

(102.3)

notas:  $\hat{U}_{HARM}$  e Eq. (102.3):

$$\frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} \sum_{ij} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i + i\vec{k}'\cdot\vec{R}_j} D_{\alpha\beta}(i,j) u_{\vec{k},\alpha} u_{\vec{k}',\beta}$$

$$\text{se } \vec{R}_j = \vec{R}_i + \vec{R} \rightarrow \vec{R}_i - \vec{R}_j = -\vec{R}$$

$$\sum_i e^{i(\vec{k} + \vec{k}')\cdot\vec{R}_i} \sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} D_{\alpha\beta}(\vec{R})$$

$$N \delta_{\vec{k}, -\vec{k}'}$$

$$D_{\alpha\beta}(\vec{R}) : \text{veja Eq. (100.4)}$$

$\hookrightarrow$  hamiltoniano (102.3) : (verificar!):

$$H = \frac{1}{2M} \sum_{\vec{k} \in BZ} p_{\vec{k},\alpha} p_{-\vec{k},\alpha} + M \sum_{\vec{k} \in BZ} u_{\vec{k},\alpha} D_{\alpha\beta}(\vec{k}) u_{-\vec{k},\beta} \quad (103.1)$$

é interessante escrever  $u_{\vec{k}}$  e  $p_{\vec{k}}$  na base definida pelos versores  $\hat{E}^s(\vec{k})$ : autovalores matriz  $\hat{D}(\vec{k})$ :

$$u_{\vec{k},\alpha} = \sum_{s=1}^3 u_{\vec{k}s} E_{\alpha}^s(\vec{k})$$

(103.2)

$$p_{\vec{k},\alpha} = \sum_{s=1}^3 p_{\vec{k}s} E_{\alpha}^s(\vec{k}) \quad ; \quad \alpha = x, y, z \quad \text{e} \quad s = 1, 2, 3$$

$$\text{e álgebra: } [u_{\vec{k}s}, u_{\vec{k}'n}] = [p_{\vec{k},\alpha}, p_{\vec{k}'n}] = 0$$

(103.3)

$$\text{e } [u_{\vec{k}s}, p_{\vec{k}'n}] = i\hbar \delta_{ns} \delta_{\vec{k}, -\vec{k}'} \quad ; \quad n, s = 1, 2, 3$$

nesse caso, verifica-se que o hamiltoniano (103.1) assume a forma (veja pg. 104.1):

$$H = \frac{1}{2M} \sum_{\vec{k} \in BZ} \sum_{s=1}^3 \vec{p}_{\vec{k}s} \cdot \vec{p}_{-\vec{k}s} + M^2 \omega_s^2(\vec{k}) u_{\vec{k}s} u_{-\vec{k}s} \quad (104.1)$$

• Similar 1-D, veja Eq. (96.1), é interessante introduzir ops. criação e destruição  $a_{\vec{k}s}^\dagger$  e  $a_{\vec{k}s}$ :

$$a_{\vec{k}s} = \sqrt{\frac{M \omega_s(\vec{k})}{2\hbar}} \left( u_{\vec{k}s} + \frac{i}{M \omega_s(\vec{k})} p_{\vec{k}s} \right) \quad (104.2)$$

$$a_{\vec{k}s}^\dagger = \sqrt{\frac{M \omega_s(\vec{k})}{2\hbar}} \left( u_{-\vec{k}s} - \frac{i}{M \omega_s(\vec{k})} p_{-\vec{k}s} \right); \quad s=1,2,3$$

onde:  $[a_{\vec{k}s}, a_{\vec{k}'s'}] = [a_{\vec{k}s}^\dagger, a_{\vec{k}'s'}^\dagger] = 0$  e  $[a_{\vec{k}s}, a_{\vec{k}'s'}^\dagger] = \delta_{\vec{k}s} \delta_{\vec{k}',s'}$

• Eqs. (104.1) e (104.2): verifique-se que (exercício):

$$H = \sum_{s=1}^3 \sum_{\vec{k} \in BZ} \hbar \omega_s(\vec{k}) (a_{\vec{k}s}^\dagger a_{\vec{k}s} + 1/2), \quad (104.3)$$

onde  $\omega_s(\vec{k})$ : autovalores Eq. (103.1).

$a_{\vec{k}s}^\dagger$ : op. criação fônon, energia  $\hbar \omega_s(\vec{k})$ , momento  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$  e polarização  $s = 1,2,3$ ;

$a_{\vec{k}s}$ : "destruição", " " " " e " " " "

• Similar Eq. (96.4), ops.  $a_{\vec{k}s}^\dagger(t)$  e  $a_{\vec{k}s}(t)$  na versão de Heisenberg e considerando o hamiltoniano (104.3):

$$a_{\vec{k}s}(t) = a_{\vec{k}s} e^{-i\omega_s(\vec{k})t} \quad e \quad a_{\vec{k}s}^\dagger(t) = a_{\vec{k}s}^\dagger e^{i\omega_s(\vec{k})t} \quad (104.4)$$

Eq. (104.2)  $\rightarrow u_{\vec{k}s} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M \omega_s(\vec{k})}} (a_{\vec{k}s} + a_{-\vec{k}s}^\dagger)$   $\oplus$  Eq. (104.4):

• sobre o hamiltoniano (104.1):

• Eq. (101.1) pode ser escrita como:

$$\sum_{\beta} D_{\alpha\beta}(\vec{k}) E_{\beta}^s(\vec{k}) = M \omega_s^2(\vec{k}) E_{\alpha}^s(\vec{k}), \quad s \text{ fixo}$$

$$\hookrightarrow \sum_{\beta} D_{\alpha\beta}(-\vec{k}) E_{\beta}^s(-\vec{k}) = M \omega_s^2(-\vec{k}) E_{\alpha}^s(-\vec{k})$$

$$D_{\alpha\beta}(\vec{k}) \quad \omega_s^2(\vec{k}) : \text{ veja Eq. (101.2)}$$

$$\hookrightarrow E_{\alpha}^s(-\vec{k}) = E_{\alpha}^s(\vec{k}) \quad (104.5)$$

• Eqs. (103.1) e (103.2):

$$p_{\vec{k}\alpha} p_{-\vec{k}\alpha} = \sum_{n,s} p_{\vec{k}s} p_{-\vec{k}n} \underbrace{E_{\alpha}^s(\vec{k}) E_{\alpha}^n(-\vec{k})}_{= \delta_{ns}} = \sum_s p_{\vec{k}s} p_{-\vec{k}s}$$

$$\begin{aligned} M u_{\vec{k}\alpha} D_{\alpha\beta}(\vec{k}) u_{-\vec{k}\beta} &= M \sum_{n,s} u_{\vec{k}s} u_{-\vec{k}n} \underbrace{E_{\alpha}^s(\vec{k}) D_{\alpha\beta}(\vec{k}) E_{\beta}^n(-\vec{k})}_{E_{\alpha}^n(-\vec{k}) M \omega_n^2(-\vec{k})} \\ &= \sum_s M^2 \omega_s^2(\vec{k}) u_{\vec{k}s} u_{-\vec{k}s} \end{aligned}$$



$$u_{\vec{k}s}(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_s(\vec{k})}} \left( a_{\vec{k}s} e^{-i\omega_s(\vec{k})t} + a_{-\vec{k}s}^\dagger e^{+i\omega_s(\vec{k})t} \right)$$

⊕ Eqs. (102.1) e (103.2):

$$u_{j\alpha}(t) = \sum_{s=1}^3 \sum_{\vec{k} \in BZ} \sqrt{\frac{\hbar}{2mN\omega_s(\vec{k})}} \epsilon_{\alpha}^s(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j^0} + \left( a_{\vec{k}s} e^{-i\omega_s(\vec{k})t} + a_{-\vec{k}s}^\dagger e^{i\omega_s(\vec{k})t} \right) \quad (105.1)$$

polarização!

: comparan c/ caso 1D, Eq. (97.2).

Obs.: p sistema c/ p átomos / célula unitária:

3 modos acústicos

e 3(p-1) " óticos → s = 1, 2, ..., 3p

· próxima etapa: determinação da interação elétron-fóton;

consideram: sistema N ions e N elétrons descritos pelo hamiltoniano:

$$H = H_{ph} + H_e + H_{ei}, \quad (105.2)$$

onde:  $H_{ph}$ : Eq. (104.3) : vibrações da rede

$$\left. \begin{aligned} H_e &= \sum_i \frac{1}{2m} p_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v(\vec{r}_i - \vec{r}_j) : N \text{ elétrons} \\ H_{ei} &= \sum_{ij} v(\vec{r}_i - \vec{R}_j) : \text{interação elétrons-íons} \end{aligned} \right\} \text{quantização}$$

$\vec{r}_i$ : posição elétron

$\vec{R}_j = \vec{R}_j^0 + \vec{u}_j$ : posição íon: Eq. (98.2)

é interessante escrever  $H_{ei}$  em 2ª quantização:

$$H_{ei} = \int d^3\vec{n} (-e) \rho(\vec{n}) \sum_{j=1}^{N_{IONS}} V(\vec{n} - \vec{R}_j) \quad (106.1)$$

$$= U_{ext}(\vec{n}) \quad : \text{Veja Eqs. (43.2) e (43.3)}$$

novamente: hipótese:  $|\vec{u}_j| \ll a$ : parâmetro de rede

↳ expansão Taylor p/  $V(\vec{n} - \vec{R}_j)$ :

$$V(\vec{n} - \vec{R}_j) \approx \underbrace{V(\vec{n} - \vec{R}_j^0)}_{(I)} + \sum_{\alpha} (-u_{j\alpha}) \frac{\partial V(\vec{n})}{\partial n_{\alpha}} \bigg|_{\vec{n} = \vec{n} - \vec{R}_j^0} + O(v^2)$$

$$- \vec{u}_j \cdot \vec{\nabla}_{\vec{n}} V(\vec{n}) \bigg|_{\vec{n} = \vec{n} - \vec{R}_j^0}$$

(II)

notas (I): interação elétrons c/ íons em suas posições de equilíbrio: potencial periódico;

lambdas: sistema  $N$  elétrons livres  $\oplus$  potencial periódico  $\rightarrow$  estados de Bloch;

nesse caso, considera-se que (II)  $\rightarrow 0$ :

ou a aproximação de Born-Oppenheimer. (106.2)

$$\text{notação: } - \vec{u}_j \cdot \vec{\nabla}_{\vec{n}} V(\vec{n}) \bigg|_{\vec{n} = \vec{n} - \vec{R}_j^0} \equiv - \vec{u}_j \cdot \vec{\nabla} V(\vec{n} - \vec{R}_j^0) \quad (106.3)$$

: considerando apenas o termo (II):

$$H_{e-ph} = \sum_j e \int d^3\vec{n} \rho(\vec{n}) \vec{u}_j \cdot \vec{\nabla} V(\vec{n} - \vec{R}_j^0) \quad (106.4)$$

: interação elétron-fônon:

: veja Fig. 3.8(b), Bruus.

Transformada de Fourier potencial  $V(\vec{r})$ :

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad \text{A los } \vec{q}'s!$$

$$\hookrightarrow \vec{\nabla} V(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (i\vec{q}) V_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\vec{q} \in \text{BZ}} \sum_{\vec{G}} i(\vec{q} + \vec{G}) V_{\vec{q} + \vec{G}} e^{i(\vec{q} + \vec{G}) \cdot \vec{r}} \quad (107.1)$$

↑  
vectores rede recíproca!

Eqs. (106.4) e (107.1):

$$\text{He-ph} = \frac{1}{N} \sum_j \sum_{\vec{q}, \vec{G}} i e \int d^3r \hat{p}(\vec{r}) (\vec{q} + \vec{G}) \cdot \vec{u}_j V_{\vec{q} + \vec{G}} e^{i(\vec{q} + \vec{G})(\vec{r} - \vec{R}_j^0)}$$

como:

$$\sum_j \vec{u}_j e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_j^0} e^{-i\vec{G} \cdot \vec{R}_j^0} = \text{Eq. (105.1) p/ } t=0$$

$$= \sum_s \sum_{\vec{k} \in \text{BZ}} \frac{\hbar}{2mN\omega_s(\vec{k})} \hat{E}^s(\vec{k}) (a_{\vec{k}s} + a_{-\vec{k}s}^\dagger) \sum_j e^{i(\vec{q} - \vec{k}) \cdot \vec{R}_j^0}$$

$N \delta_{\vec{q}, \vec{k}}$

$$\int d^3r \hat{p}(\vec{r}) e^{i(\vec{q} + \vec{G}) \cdot \vec{r}} = \hat{p}(-\vec{q} - \vec{G}) = \sum_{\vec{k}, \sigma} C_{\vec{k} + \vec{q} + \vec{G}, \sigma}^\dagger C_{\vec{k}, \sigma} = \text{Eq. (42.3)}$$

$$\hookrightarrow \text{He-ph} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \vec{G}} \sum_{s, \sigma} i e \frac{\hbar N}{2m\omega_s(\vec{q})} (\vec{q} + \vec{G}) \cdot \hat{E}^s(\vec{q}) V_{\vec{q} + \vec{G}} +$$

$\equiv M_s(\vec{q}, \vec{G})$

$$* C_{\vec{k} + \vec{q} + \vec{G}, \sigma}^\dagger C_{\vec{k}, \sigma} (a_{\vec{q}s} + a_{-\vec{q}s}^\dagger) \quad (107.2)$$

Definiçõ: processo normal:  $\vec{G} = 0$   
 processos de Umklapp:  $\vec{G} \neq 0$ ; (108.1)

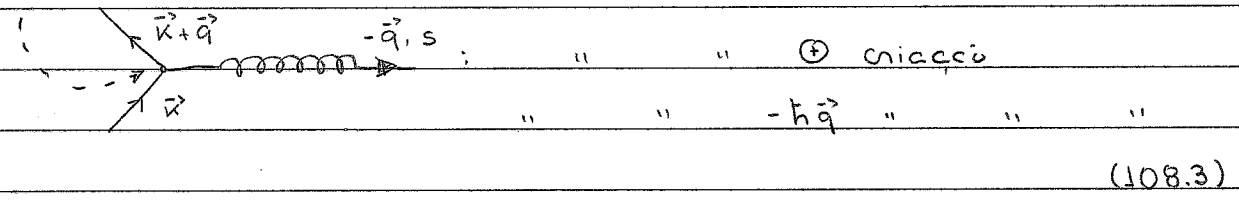
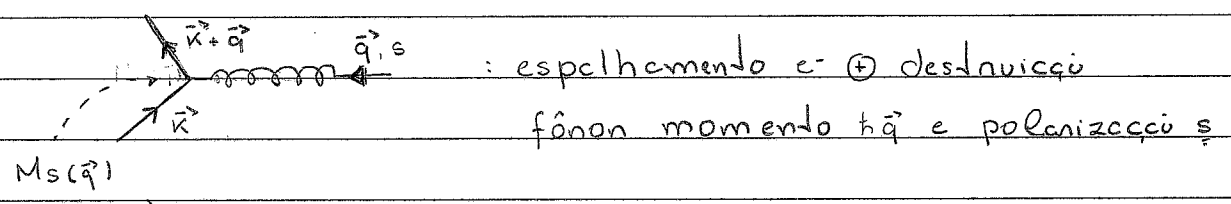
em geral, Umklapp  $\ll$  normal, pois  $v_{\vec{q} + \vec{G}} \propto \frac{1}{|\vec{q} + \vec{G}|^2}$ ;

considerando apenas processos normais, temos que

$$H_{e-ph} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \sum_{s, \sigma} M_s(\vec{q}) C_{\vec{k} + \vec{q}, \sigma}^{\dagger} C_{\vec{k}, \sigma} (a_{\vec{q}s} + a_{-\vec{q}s}^{\dagger}) \quad (108.2)$$

onde  $M_s(\vec{q}) = M_s(\vec{q}, \vec{G} = 0)$

esquemáticamente:



(108.3)

notas: conservaçõ momento nos dois tipos de vértices!

• p/ cristal iõnico (sistema formado por iõns c/ cargas positivas e negativas), o acoplamento dominante: elétrons e fõnons óticos longitudinais (LO);  
 nesse caso, considerando  $\omega_{LO}(\vec{q}) \approx \omega_{LO} = cte$ ,  
 verifico-se que (veja Sec. 1.3.5, Mchcn):

$$M_{LO}(\vec{q}) = M_{LO} \Rightarrow M_{LO}^2 = 4\pi\alpha\hbar \frac{(\hbar\omega_{LO})^{3/2}}{(2M)^{1/2}} \quad (108.4)$$

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar} \left( \frac{m}{2\hbar\omega_{LO}} \right)^{1/2} \left( \frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) : cte (adimensional)$$

do polaron

cte dielétricas: obtidas exp.

• Eqs. (105.2), (108.2), (108.4) e hipótese  $\omega_{L0}(\vec{q}) = \omega_{L0} = c/c$  :

$$H = \sum_{\vec{k}, \sigma} E(\vec{k}) C_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} C_{\vec{k}, \sigma} + \hbar \omega_{L0} \sum_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{q}} +$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \sigma} \frac{M_{L0}}{q} C_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger} C_{\vec{k}, \sigma} (a_{\vec{q}, s} + a_{-\vec{q}, s}^{\dagger}) :$$

(109.1)

: hamiltoniano de Fröhlich :

: descrição polaron : elétron  $\oplus$  fônons

Ex. 7: teoria de ondas de spin.

(p/ detalhes, veja Sec. 3.4, Modelung e Sec. 8.3, Yosida)

considerar: modelo de Heisenberg FM (8.1.2) em uma rede  
c/  $N$  sítios e apenas acoplamentos entre  
primeiros vizinhos, i.e.:

$$J_{ij} = \begin{cases} J, & \text{se } \langle ij \rangle; J > 0 \\ 0, & \text{c.c.} \end{cases}$$

(110.1)

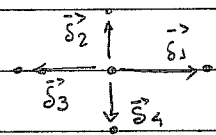
$$H = - \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -J \sum_{i, \vec{\delta}} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+\vec{\delta}}$$

onde:  $\vec{S}_i$ : op. spin  $S$  localizado no sítio  $i$  da rede  
e vetores  $\vec{\delta}$ :  $\pm$  primeiros vizinhos sítio  $i$ .

e.g., p/ rede quadnode:

$$\vec{\delta} = \pm a\hat{x}, \pm a\hat{y}$$

$a$ : parâmetro  
de rede



(110.2)

Obs.: notar  $\neq$  definição vetores  $\vec{\delta}$  em (78.1)!

nesse caso, temos que:

$$\vec{S}_T = \sum_{i=1}^N \vec{S}_i : \text{op. spin total}$$

$$S_T^z = \sum_{i=1}^N S_i^z : \text{componente-z op. spin total.}$$

verifica-se que (exercício)  $[H, \vec{S}_T] = 0 \rightarrow \vec{S}_T$  é uma cte de  
movimento: gerador de rotações globais de spin;

$\hookrightarrow H, S_i^z$  e  $S_T^z$ : diagonalização simultânea.



• p/ cada sítio  $i$  da rede, podemos considerar os estados:

$$S_i^z |s_m\rangle_i = m\hbar |s_m\rangle_i \equiv m |m_i\rangle; \quad h=1 \tag{111.1}$$

$$\text{e } m_i = -s, -s+1, \dots, s-1, s : (2s+1) \text{ valores}$$

• como  $-J < 0$ , o estado fundamental do hamiltoniano (110.1):  
 : estado completamente spin-polarizado, e.g.:

$$|\psi_0\rangle = \prod_{i=1}^N |m_i = s\rangle \tag{111.2}$$

nesse caso, temos que  $S_T^z |\psi_0\rangle = (Ns)(Ns+1) |\psi_0\rangle$   
 (verificar) :  $S_T^z |\psi_0\rangle = (Ns) |\psi_0\rangle$

• é interessante escrever (110.1) em termos ops

$$S_i^+ = S_i^x + iS_i^y \quad \text{e} \quad S_i^- = S_i^x - iS_i^y$$

$$\hookrightarrow S_i^+ S_j^- = (S_i^x + iS_i^y)(S_j^x - iS_j^y)$$

$$S_i^- S_j^+ = (S_i^x - iS_i^y)(S_j^x + iS_j^y)$$

$$\hookrightarrow S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ = 2(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y)$$

$$\hookrightarrow \text{Eq. (110.1): } H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \tag{111.3}$$

• como  $S_i^+ |\psi_0\rangle = 0$ , temos que:

$$H |\psi_0\rangle = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z |\psi_0\rangle = \left( -J S^z \sum_i \sum_j 1 \right) |\psi_0\rangle = -J S^z N |\psi_0\rangle$$

energia estado fundamental :  $E_0$

• consideramos o estado excitado

$$|\psi_n\rangle = S_n^- |\psi_0\rangle \quad (112.1)$$

$$\hookrightarrow S_i^z |\psi_n\rangle = (N-1)S_i^z |\psi_n\rangle = (NS-1) |\psi_n\rangle$$

$$\hookrightarrow H |\psi_n\rangle = H S_n^- |\psi_0\rangle = S_n^- H |\psi_0\rangle + [H, S_n^-] |\psi_0\rangle$$

$$E_0 |\psi_n\rangle$$

O comutador  $[H, S_n^-]$  pode ser determinado via a álgebra dos ops. de spin:

$$[S_i^+, S_j^-] = 2\delta_{ij} S_i^z; \quad [S_i^z, S_j^+] = \delta_{ij} S_i^+ \quad \text{e} \quad [S_i^z, S_j^-] = -\delta_{ij} S_i^- \quad (112.2)$$

e da identidade:

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B;$$

$$\cdot [S_i^z S_j^z + \frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+); S_n^-] =$$

$$= S_i^z [S_j^z, S_n^-] + [S_i^z, S_n^-] S_j^z + \frac{1}{2} [S_i^+, S_n^-] S_j^- + \frac{1}{2} S_i^- [S_j^+, S_n^-]$$

$$\quad \quad \quad -\delta_{jn} S_i^z \quad \quad -\delta_{in} S_i^- \quad \quad 2\delta_{in} S_i^z \quad \quad 2\delta_{jn} S_j^z$$

$$\hookrightarrow [H, S_n^-] = -J \sum_{i,s} \delta_{in} (S_i^z S_{i+s}^- - S_i^- S_{i+s}^z)$$

$$-J \sum_{j,s} \delta_{jn} (S_{j+s}^- S_j^z - S_{j+s}^z S_j^-)$$

$$= J \sum_s (S_n^- S_{n+s}^z + S_{n+s}^z S_n^- - S_n^z S_{n+s}^- - S_{n+s}^- S_n^z)$$

$$\hookrightarrow [H, S_n^-] |\psi_0\rangle = 2JS \sum_s (|\psi_n\rangle - |\psi_{n+s}\rangle), \text{ i.e. :}$$

$$H |\psi_n\rangle = E_0 |\psi_n\rangle + 2JS \sum_s (|\psi_n\rangle - |\psi_{n+s}\rangle) \quad (112.3)$$



Eq. (112.3): estado excitado  $|\psi_n\rangle$  não é autoestado do hamiltoniano (110.1)!

é possível obter autoestado (110.1) via uma combinação linear estados (112.3): ondas de spin:

$$|\psi_{\vec{k}}\rangle = \sum_n e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} |\psi_n\rangle; \quad \vec{R}_n: \text{vetores da rede} \quad (113.1)$$

$\vec{k} \in \text{BZ}$

notas:

$$H|\psi_{\vec{k}}\rangle = \sum_n e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} H|\psi_n\rangle$$

Eq. (112.3)

$$\begin{aligned} &= E_0 \sum_n e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} |\psi_n\rangle + 2J_s \sum_{\delta} \sum_n e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} |\psi_n\rangle - 2J_s \sum_{\delta} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}} \sum_n e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_n + \vec{\delta})} |\psi_{n+\delta}\rangle \\ &\quad \underbrace{\hspace{10em}}_{|\psi_{\vec{k}}\rangle} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{z} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{= z} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{|\psi_{\vec{k}}\rangle} \end{aligned}$$

$$= (E_0 + 2J_s z (1 - \gamma_{\vec{k}})) |\psi_n\rangle \quad (113.3)$$

onde  $\gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\delta} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}} = \frac{1}{z} \sum_{\delta} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}}$

↑  
veja Eq. (116.2)

$\hookrightarrow E_{\vec{k}} = E_0 + 2J_s z (1 - \gamma_{\vec{k}})$  : energia estado excitado  $|\psi_{\vec{k}}\rangle$  (113.2)

em particular, p/  $|\vec{k}| \ll 1$ , temos que (verificam):

$$E_{\vec{k}} - E_0 \approx J_s \sum_{\delta} (\vec{k} \cdot \vec{\delta})^2 : \text{dispensão} \propto k^2 : \text{característica FM}$$

notas:  $E_{\vec{k}} \xrightarrow{\vec{k} \rightarrow 0} 0 \sim$  teorema de Goldstone: estado fundamental

c/ onde m FM de longo alcance  $\sim$  quebra espontânea simetria (continua) de notação de spin;

comparar Eq. (97.3)!



próximo etapa: descrição das ondas de spin, i.e., as excitações elementares acima do estado fundamental FM (111.2) em segunda quantização

ideia:  $|4_0\rangle$ :  $S_T^z = NS$ : valor máximo;  
 estados excitados:  $S_T^z = NS - n = NS - \sum_{i=1}^N n_i$

onde  $n_i = 0, 1, \dots, 2S$ : # unidades spin sítio  $i$   
 difere valor máximo  $S$ , i.e., autoestados hamiltoniano (110.1) podem ser escritos em termos de números de ocupação:

$$|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle; \tag{114.1}$$

como  $n_i \geq 1 \rightarrow$  ondas de spin  $\sim$  bósons!

Eq. (111.1):  $S_i^z |m_i\rangle = m_i |m_i\rangle$ ;

identificando:  $m_i = S - n_i \rightarrow |m_i\rangle = |S - n_i\rangle = |n_i\rangle$

e  $m_i \pm 1 = S - n_i \pm 1 = S - (n_i \mp 1) \rightarrow |m_i \pm 1\rangle = |S - (n_i \mp 1)\rangle = |n_i \mp 1\rangle$

como:  $S_i^\pm |m_i\rangle = (S(S+1) - m_i(m_i \pm 1))^{1/2} |m_i \pm 1\rangle$ , temos que:

$$S_i^+ |n_i\rangle = (S(S+1) - (S-n_i)(S-n_i+1))^{1/2} |n_i-1\rangle,$$

$$S_i^- |n_i\rangle = (S(S+1) - (S-n_i)(S-n_i-1))^{1/2} |n_i+1\rangle,$$

que podem ser escritas como:

$$S_i^+ |n_i\rangle = (2s - (n_i - 1))^{1/2} \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle$$

$$S_i^- |n_i\rangle = \sqrt{n_i + 1} (2s - n_i)^{1/2} |n_i + 1\rangle \quad (115.1)$$

$$S_i^z |n_i\rangle = (s - n_i) |n_i\rangle$$

Lembran Eq. (24.4):  $a_i^+ |n_i\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_i + 1\rangle$  e  $a_i |n_i\rangle = \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle$

↳ Eq. (115.1) assume a forma:

$$S_i^+ |n_i\rangle = (2s - \hat{n}_i)^{1/2} a_i |n_i\rangle$$

$$S_i^- |n_i\rangle = a_i^+ (2s - \hat{n}_i)^{1/2} |n_i\rangle$$

$$S_i^z |n_i\rangle = (s - \hat{n}_i) |n_i\rangle \quad ; \quad \hat{n}_i = a_i^+ a_i$$

como  $|n_i\rangle$  : elemento de base, temos que

$$S_i^+ = (2s - \hat{n}_i)^{1/2} a_i \quad ; \quad S_i^- = a_i^+ (2s - \hat{n}_i)^{1/2} \quad (115.1)$$

e  $S_i^z = s - \hat{n}_i$  : representaçõ de Holstein-Primakoff  
p/ ops. de spin

$$\text{onde } [a_i, a_j] = [a_i^+, a_j^+] = 0 \quad \text{e} \quad [a_i, a_j^+] = \delta_{ij} \quad (115.2)$$

Exercício: verifiquem que Eqs. (115.1) e (115.2)

↳ álgebra ops. de spin (112.2).

notar: em princípio,  $n_i = 0, 1, 2, \dots$ ;

entretanto fõton  $(2s - n_i)^{1/2} \rightarrow n_i \leq 2s$  : OK c/ Eq. (114.1),

i.e. : espaço Hilbert bósons = espaço Hilbert spins!

• Eqs. (110.1) e (115.1) : hamiltoniano em termos ops.  
bosõnicos  $a_i^+$  e  $a_i$ ;



hipótese:  $\langle n_i \rangle \ll 2s$ : # excitações  $\ll 1$

(gás diluído de bósons);

temos que:

$$\begin{aligned} \bullet S_i^z S_j^z &= (s - a_i^\dagger a_i)(s - a_j^\dagger a_j) \\ &= s^2 - s(a_i^\dagger a_i + a_j^\dagger a_j) + \underbrace{a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j}_{a_i^\dagger a_j^\dagger a_i a_j, \text{ pois } i \neq j} \end{aligned}$$

$$\bullet S_i^- S_j^+ = a_i^\dagger (2s - \hat{n}_i)^{1/2} (2s - n_j)^{1/2} a_j$$

$$= 2s a_i^\dagger \left(1 - \frac{\hat{n}_i}{2s}\right)^{1/2} \left(1 - \frac{\hat{n}_j}{2s}\right)^{1/2} a_j \approx 2s a_i^\dagger \left(1 - \frac{\hat{n}_i}{4s}\right) \left(1 - \frac{\hat{n}_j}{4s}\right) a_j$$

$$= 2s \left( a_i^\dagger a_j - \frac{1}{4s} a_i^\dagger n_j a_j - \frac{1}{4s} a_i^\dagger \hat{n}_i a_j \right) + O(a^6)$$

(116.1)

$$\bullet S_i^+ S_j^- = (2s - \hat{n}_i)^{1/2} a_i a_j^\dagger (2s - \hat{n}_j)^{1/2}$$

$$= 2s \left(1 - \frac{\hat{n}_i}{2s}\right)^{1/2} a_i a_j^\dagger \left(1 - \frac{\hat{n}_j}{2s}\right)^{1/2} \approx 2s \left(1 - \frac{\hat{n}_i}{4s}\right) a_i a_j^\dagger \left(1 - \frac{\hat{n}_j}{4s}\right)$$

$$= 2s \left( a_i a_j^\dagger - \frac{1}{4s} \hat{n}_i a_i a_j^\dagger - \frac{1}{4s} a_i a_j^\dagger \hat{n}_j \right) + O(a^6)$$

$$\hookrightarrow H \approx -J \sum_{\langle ij \rangle} s^2 - s(a_i^\dagger a_i + a_j^\dagger a_j) + \frac{1}{2} \cdot 2s(a_i^\dagger a_j + a_i a_j^\dagger)$$

$$+ H_3 + O(a^6)$$

(116.2)

considerando apenas termos de e quadrático do hamiltoniano

(116.2): teoria de ondas de spin linear, verifica-se (que)

$H \approx$  (116.2) é similar ao  $H$  (tight-binding (76.2))

$\hookrightarrow$  hamiltoniano (116.2) pode ser diagonalizado via uma transf. de Fourier!

considerando:

$$a_i^\dagger = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\vec{k} \in BZ} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} a_{\vec{k}}^\dagger \quad a_i = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\vec{k} \in BZ} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} a_{\vec{k}} \quad (117.1)$$

temos que:

$$\sum_{\langle ij \rangle} a_i^\dagger a_j = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \sum_s \sum_i \underbrace{e^{-i(\vec{k}-\vec{q}) \cdot \vec{R}_i}}_{N \delta_{\vec{k}, \vec{q}}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{q}} = z \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}$$

$$\sum_{\langle ij \rangle} a_i^\dagger a_j = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \sum_s \sum_i \underbrace{e^{-i(\vec{k}-\vec{q}) \cdot \vec{R}_i}}_{N \delta_{\vec{k}, \vec{q}}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{S}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{q}} = z \sum_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}$$

↳ Eqs. (116.2) e (117.1):

$$H = \underbrace{-JS_z^2 N}_{= E_0} + \sum_{\vec{k}} \underbrace{2JS_z (1 - \gamma_{\vec{k}})}_{\equiv \hbar \omega_{\vec{k}}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \quad (117.2)$$

notas:

• estado fundamental e (117.2): vácuo  $|0\rangle$  p/ bósons  $a$ :

$$|0\rangle = | \psi_0 \rangle : \text{Eq. (113.2)} \quad a_{\vec{k}} |0\rangle = 0$$

• energia ondas de spin  $\hbar \omega_{\vec{k}}$ : O.K. c/ Eq. (113.2)!  
(magnons)

Obs. 1: expansão (116.1): expansão em termos ordem  $\frac{1}{S}$ ;

Obs. 2: termo  $H_4$  em (116.2): interação entre ondas de spin ou interação entre magnons:

$$H_4 = -J \sum_{\langle ij \rangle} a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j - \frac{1}{4} (a_i^\dagger a_i^\dagger a_i a_j + a_i^\dagger a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_j + a_i^\dagger a_i a_i a_i^\dagger a_j^\dagger + a_i a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_j) \quad (118.1)$$

• sobre a energia dos magnons:

em particular, por rede quadrada, temos que:

Eqs. (110.2) e (113.1):

$$\begin{aligned} \chi_{\vec{k}} &= \frac{1}{2} \sum_{\delta} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}} = \frac{1}{4} (e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_y a}) \\ &= \frac{1}{2} (\cos k_x a + \cos k_y a) \end{aligned}$$

$$\hookrightarrow \hbar \omega_{\vec{k}} = 4JS (2 - \cos k_x a - \cos k_y a) \quad (118.2)$$

$$= 4JS \cdot \frac{1}{2} ((k_x a)^2 + (k_y a)^2) = 2JS (ka)^2, \quad ka \ll 1.$$

• sobre o calor específico;

similar ao gás de bósons interagentes, é possível determinar o calor específico do sistema ~ magnons por  $T \ll T_c$ ,

veja pg. 70:

temperatura de Curie  $\rightarrow$

considerando  $\hbar \omega_{\vec{k}} \approx \hbar D k^2$ , temos que:

$$\text{Eq. (117.2): } U = \langle H \rangle = E_0 + \sum_{\vec{k}} \hbar \omega_{\vec{k}} \langle a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \rangle$$

$$\frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_{\vec{k}}} - 1}; \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

$$\hookrightarrow U = E_0 + \frac{4\pi N}{8\pi^3} \int k^2 dk \frac{\hbar D k^2}{e^{\beta \hbar D k^2} - 1}$$

$$x = \beta \hbar D k^2$$

$$\frac{1}{4\pi^2} N \frac{(k_B T)^{5/2}}{(\hbar D)^{3/2}} \int \frac{dx x^{3/2}}{e^x - 1} = 1.783$$

$$\hookrightarrow U \approx E_0 + \frac{0.045 N (k_B T)^{5/2}}{(\hbar D)^{3/2}} : U \propto T^{5/2} \quad (119.1)$$

$$\hookrightarrow C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = 0.113 N k_B \left(\frac{k_B T}{\hbar D}\right)^{3/2} : C_V \propto T^{3/2}$$

Sobre a magnetização do sistema;  
nesse caso:

$$M = \mu \langle S_T^z \rangle = \mu \sum_{i=1}^N \langle S_i^z \rangle = \mu \sum_i (S - \langle a_i^\dagger a_i \rangle) \quad \text{Eq. (115.1)}$$

$$\hookrightarrow M = M(T) = \mu N S - \mu \sum_i \langle a_i^\dagger a_i \rangle ; \mu = cte$$

$$M(T=0) - \sum_{\vec{k}} \langle a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \rangle : \text{veja pg. 117}$$

$$\hookrightarrow \Delta M \equiv M(T=0) - M(T) = \mu \sum_{\vec{k}} \langle a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \rangle : \quad (119.2)$$

: nota similaridade c/ thermal depletion of the condensate: pg. 71

novamente, p/  $T \ll T_c$ :

$$\Delta M = \mu N \cdot \frac{1}{2\pi^2} \int k^2 dk \frac{1}{e^{\beta \hbar D k^2} - 1} =$$



$$\hookrightarrow \Delta M = \mu_N \cdot \frac{1}{4\pi^2} \left( \frac{k_B T}{\hbar D} \right)^{3/2} \int dx \frac{x^{1/2}}{e^{x^2} - 1}$$

$$= 2.315$$

$$= 0.0586 \mu_N \left( \frac{k_B T}{\hbar D} \right)^{3/2} \quad ; \quad \Delta M \propto T^{3/2} \quad (120.1)$$

em geral, p/  $d$  dimensões espaciais, temos que:

$$\Delta M \propto \int k^{d-1} dk \frac{-1}{e^{\beta \hbar D k^2} - 1} \approx \int dk \frac{k^{d-1}}{k^2} \propto \int dk k^{d-3} :$$

$$p/ \quad k \ll 1$$

$$(120.2)$$

: similar Eq. (71.1) : indicações flutuações térmicas  
destroem a ordem magnética FM de longo alcance  
p/  $d \leq 2$  !

Obs.: Lembra que, p/ elétron, momento magnético

$$\vec{\mu} = g \frac{e}{2mc} \vec{S} = 2 \cdot \frac{e\hbar}{2mc} \frac{\vec{S}}{\hbar} = -2 \underbrace{\frac{e\hbar}{2mc}}_{\mu_B} \frac{\vec{S}}{\hbar}$$

$\mu_B$  : magneton de

Bohr

=  $\mu$  : etc !



sobre a teoria de ondas de spin p/ o modelo de Heisenberg AFM (9.2);  
similar Eq. (110.1), vamos considerar o hamiltoniano

$$H = +J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad ; \quad J > 0 \quad (121.1)$$

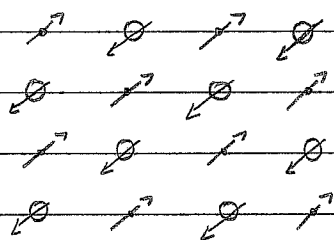
em uma rede bipartida (e.g., redes quadrada e honeycomb);

em 1ª aproximação, estado fundamental  $| \psi_0 \rangle$  do hamiltoniano

(121.1) = estado de Néel : spins subrede A

antiparalelos " " B;

e.g., p/ rede quadrada:



subrede A : •

" B : ○

(121.2)

entretanto, ≠ sistema FM, aqui  $| \psi_0 \rangle$  não é autovetor de (121.1)!  
(verificar)

é possível determinar a energia do estado fundamental e a energia dos magnons do modelo de Heisenberg AFM (121.1) via a representação de Holstein-Primakoff; nesse caso, é necessário identificar as operadores:

$\vec{S}_{iA}$  : op. spin  $\vec{S}$  localizado sítio  $i$  subrede A ;

$\vec{S}_{iB}$  : " " " " " " " B ;

similar sistema FM, o estado (semiclássico) de Néel é considerado como o estado de referência

↳ ops.  $\vec{S}_{iA}$ : expansão em termos bósons  $a_i^+$  e  $a_i$   
definidos pela Eq. (115.1)

≡ ops.  $\vec{S}_{iB}$ : " " " "  $b_i^+$  e  $b_i$   
definidos por:

$$S_{iB}^+ = b_i^+ (2s - b_i^+ b_i)^{1/2}; \quad S_{iB}^- = (2s - b_i^+ b_i)^{1/2} b_i$$

$$\text{e } S_{iz} = -(s - b_i^+ b_i) \quad (122.1)$$

· nesse caso, verifica-se que a energia dos magnons é  
dada por:

$$\hbar \omega_{\vec{k}} = 2JS_z (1 - \gamma_{\vec{k}})^{1/2} \quad ; \text{ comparem Eq. (117.2)} \quad (122.2)$$

$$\gamma_{\vec{k}} : \text{ Eq. (113.1)}$$

e a energia do estado fundamental:

$$E_0 = -2NzJS(s+1) + 2JS_z \sum_{\vec{k} \in BZ} (1 - \gamma_{\vec{k}})^{1/2} \neq -2NJ_z s^2$$

energia estado  
semiclássico (121.2)

em particular, p/  $|\vec{k}| \ll 1$ , temos que

$$\hbar \omega_{\vec{k}} \propto |\vec{k}| \quad ; \text{ comparem c/ FM} \quad (122.3)$$

Eq. (113.2)