# Lista VII: Segunda Quantização

① Construa explicitamente as matrizes $4 \times 4$ que representam os operadores de criação e aniquilação de fermions $a_0$, $a_0^\dagger$, $a_1$ e $a_1^\dagger$ para um sistema de dois níveis. Confira as relações de anticomutação.

② Considere dois elétrons em estados de onda plana uma caixa. Calcule em primeira ordem da interação de Coulomb a diferença de energia para spins alinhados paralelos e anti-paralelos (interação de troca como vimos em MQ I).

③ Suponha que a função de onda de um sistema de N-férmions é um determinante de Slatter de funções ortonormais $\phi_i$. Usando o formalismo de segunda quantização mostre que as funções de correlação par dos estados fatoriza como para ondas planas. Dica: Considere os operadores $a_i = \int d^3r\, \phi_i^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$.

④ Suponha que operadores de aniquilação e criação satisfaçam a regra de comutação padrão $[a, a^\dagger] = 1$.

(a) Mostre que a transformação de Bogliubov

$$b = a \cosh\eta + a^\dagger \sinh\eta$$

preserva a relação de comutação entre os operadores de aniquilação e criação $[b, b^\dagger] = 1$.

(b) Use esse fato para obter os autovalores do seguinte Hamiltoniano

$$H = \hbar\omega a^\dagger a + \frac{1}{2}V(aa + a^\dagger a^\dagger)\,.$$

Existe um limite superior para $V$ que permite que isso seja feito.

(c) Mostre que o operador unitário

$$U = e^{(aa - a^\dagger a^\dagger)\eta/2}$$

pode relacionar dois conjunto de operadores $b = UaU^{-1}$.

(d) Escreva o estado fundamental do Hamiltoniano $H$ em termos dos estados $|n\rangle$, $a^\dagger a|n\rangle = n|n\rangle$.

⑤ Considere o Hamiltoniano da aproximação de ligação-forte, que é uma versão extrema de um potencial periódico onde as posições são restritas aos sítios da rede por um potencial degrau

$$H = \sum_{<i,j>} t\,(c_j^\dagger c_i + c_i^\dagger c_j)\,,$$

com $[c_i, c_j^\dagger] = \delta_{ij}$ e $< i, j >$ significa que estamos somando sobre todos os primeiros vizinhos na rede, aqui $t$ é um parâmetro (não é o tempo). Mostre que os estados de partícula-única

$$\sum c_k^\dagger e^{ik\kappa}|0\rangle\,,$$

são autoestados de $H$. Assuma que o espaço é unidimensional.

⑥ Na representação de bosons de Schwinger, o operador de spin é representado em termos de dois operadores bosônicos $a$ e $b$ da forma

$$S_+ = a^\dagger b \qquad S_- = (S_+)^\dagger$$

$$S_z = \frac{1}{2}(a^\dagger a - b^\dagger b)$$

(a) Mostre que essas definições são consistentes com as relações de comutação para o spin $[S_+, S_-] = 2S_z$

(b) Usando as relações de comutação para bosons mostre que

$$|sm\rangle = \frac{(a^\dagger)^{s+m}}{\sqrt{(s+m)!}}\frac{(b^\dagger)^{s-m}}{\sqrt{(s-m)!}}|\Omega\rangle\,,$$

é compatível com a definição de um autoestado do momento angular total $\mathbf{S}^2$ e $S_z$. Aqui $|\Omega\rangle$ é o vácuo dos bósons de Schwinger, e o spin total $s$ define o subespaço físico $\{|n_a n_b\rangle | n_a + n_b = 2s\}$.

⑦ O chamado efeito Kondo é baseado na observação que, quando pequenas quantidades de impurezas magnéticas iônicas são incorporadas a um hospedeiro metálico (como manganês no cobre ou ferro em ligas de CuAu) a resistividade desenvolve um mínimo pronunciado na sua dependência com a temperatura. Anderson propôs um Hamiltoniano para modelar o fenômeno como uma banda de estados eletrônicos itinerantes interagindo com momentos magnéticos locais diluídos associados com as impurezas iônicas,

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma}[\epsilon_{\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} + (V_{\mathbf{k}} d^\dagger_\sigma c_{\mathbf{k}\sigma} + \text{h.c.})] + \sum_\sigma \epsilon_d n_{d\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \,,$$

onde os operadores $c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}$ criam elétrons itinerantes de spin $\sigma$ e energia $\epsilon_{\mathbf{k}}$ no hospedeiro metálico enquanto que os operadores $d^\dagger_\sigma$ criam elétron de spin $\sigma$ na impureza local na posição $\mathbf{r} = 0$. Aqui usamos $n_{d\sigma} = d^\dagger_\sigma d_\sigma$ para denotar o operador de número. Enquanto elétrons na banda são considerados ter um comportamento como um líquido de Fermi, aqueles associados ao estado de impureza experimentam uma interação de Coulomb local cuja intensidade é caracterizada pela energia de Hubbard U. De acordo com a fenomenologia experimental, o nível de Fermi $\epsilon_F$ deve estar entre o nível de impureza de partícula-única $\epsilon_d$ e $\epsilon_d + U$, de forma que em média a ocupação da impureza no sítio é um. No entanto, o elemento de matriz acoplando o momento local com os estados eletrônicos itinerantes $V_{\mathbf{k}} = L^{-d/2} \int d\mathbf{r}\, V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ admite a existência de processos virtuais para os quais a ocupação do sítio pode flutuar entre zero e dois. Essas flutuações virtuais permitem que o spin no sítio da impureza possa *flipar* através de troca.

É útil transformar o Hamiltoniano de Anderson em uma teoria efetiva que expõe o conteúdo de baixa energia do sistema. Com esse propósito vamos expressar o vetor de estado total do Hamiltoniano de muitos corpos $|\Psi\rangle$, como a soma dos termos $|\Psi_0\rangle$ ,$|\Psi_1\rangle$ e $|\Psi_2\rangle$ onde o sub-escrito denota a ocupação do sítio da impureza. Com essa decomposição a equação de Schrödinger para o Hamiltoniano pode ser escrita na forma matricial

$$\sum_{n=0}^{2} H_{mn} |\Psi_n\rangle = E|\Psi_m\rangle \,,$$

onde $H_{mn} = P_m H P_n$ e os operadores $P_m$ projetam no sub-espaço com $m$ elétrons na impureza (i.e. $P_0 = \prod_\sigma (1 - n_{d\sigma})$, etc. ).

(a) Construa explicitamente os operadores $H_{mn}$ e explique porque $H_{20} = H_{02} = 0$.

(b) Como estamos interessados no efeito de excitações virtuais do sub-espaço $|\Psi_1\rangle$, podemos formalmente eliminar $|\Psi_0\rangle$ e $|\Psi_2\rangle$ da equação de Schrödinger. Mostre que isso implica que a equação para $|\Psi_1\rangle$ pode ser escrita como

$$\left[H_{10}\frac{1}{E-H_{00}}H_{01}+H_{11}+H_{12}\frac{1}{E-H_{22}}H_{21}\right]|\Psi_1\rangle = E|\Psi_1\rangle\,.$$

(c) Até aqui a equação para $|\Psi_1\rangle$ é exata. Mostre que quando substituirmos nessa expressão, uma expansão em mais baixa em $1/U$ e $1/\epsilon_d$ leva a

$$H_{10}\frac{1}{E-H_{00}}H_{01}+H_{12}\frac{1}{E-H_{22}}H_{21} \approx \\ -\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}\sigma\sigma'} V_{\mathbf{k}}V^*_{\mathbf{k}'}\left(\frac{c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}c_{\mathbf{k}'\sigma}d_\sigma d^\dagger_{\sigma'}}{U+\epsilon_d-\epsilon_{\mathbf{k}'}}+\frac{c_{\mathbf{k}'\sigma'}c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}d^\dagger_{\sigma'}d_\sigma}{\epsilon_{\mathbf{k}}-\epsilon_d}\right)$$

Para obter o primeiro termo da expressão considere a comutação de $(E-H_{22})^{-1}$ com $H_{21}$ e utilize o fato que o operador total atua sobre o sub-espaço com uma única ocupação. Um raciocínio semelhante levará ao segundo termo. Aqui $U+\epsilon_d-\epsilon_{\mathbf{k}'}$ e $\epsilon_{\mathbf{k}}-\epsilon_d$ denotam as duas energias de excitação dos estados virtuais.

(d) Faça uso da identidade $\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\gamma\delta} = 2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}-\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}$ para mostrar que

$$\sum_{\sigma\sigma'} c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}c_{\mathbf{k}'\sigma}d^\dagger_{\sigma'}d_\sigma = 2\boldsymbol{s}_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\cdot\boldsymbol{S}_d+\frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'}c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}c_{\boldsymbol{k}'\sigma}n_{d\sigma'}$$

onde $\boldsymbol{S}_d=\sum_{\alpha\beta}d^\dagger_\alpha\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}d_\beta/2$ denota o grau de liberdade de spin 1/2 associado com a impureza e $\boldsymbol{s}_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}=\sum_{\alpha\beta}c^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}c_{\boldsymbol{k}'\beta}/2$.

⑧ Gottfried Ex.2, cap. 11.