Quarta Lista de Exercícios de Mecânica Estatística

Fabio de Moraes Canedo
7994642

4 de dezembro de 2018

1 P1

Nesse problema, consideramos o Hamiltoniano seguinte:

$$\hat{H} = \sum_{i\in\{L,R\}} U\hat{n}_{i+}\hat{n}_{i-} - J\sum_{\sigma=\pm1}(c^{\dagger}_{L\sigma}c_{R\sigma} + c^{\dagger}_{L\sigma}c_{R\sigma}), \tag{1}$$

onde $\hat{n}_{i\sigma} = c^{\dagger}_{i\sigma}c_{i\sigma}$. E temos as relações de anticomutação típicas de um sistema fermiônico:

$$\{c^{\dagger}_{i\sigma}, c_{j\sigma'}\} = \delta_{i,j}\delta_{\sigma,\sigma'} \tag{2a}$$
$$\{c^{\dagger}_{i\sigma}, c^{\dagger}_{j\sigma'}\} = 0 \tag{2b}$$
$$\{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}\} = 0 \tag{2c}$$

Calculamos agora as seguintes relações de comutação:

$$\left[\hat{n}_{L+}, \hat{H}\right] = -J\left(c^{\dagger}_{L+}c_{R+} - c^{\dagger}_{R+}c_{L+}\right) \tag{3a}$$
$$\left[\hat{n}_{R+}, \hat{H}\right] = J\left(c^{\dagger}_{L+}c_{R+} - c^{\dagger}_{R+}c_{L+}\right) \tag{3b}$$
$$\left[\hat{n}_{L-}, \hat{H}\right] = -J\left(c^{\dagger}_{L-}c_{R-} - c^{\dagger}_{R-}c_{L-}\right) \tag{3c}$$
$$\left[\hat{n}_{R-}, \hat{H}\right] = J\left(c^{\dagger}_{L-}c_{R-} - c^{\dagger}_{R-}c_{L-}\right) \tag{3d}$$

Esses cálculos podem ser realizados com o auxílio das Equações (2). Chegamos portanto, se combinarmos (3a) e (3b), a:

$$\left[\hat{n}_{L+} + \hat{n}_{R+}, \hat{H}\right] = 0 \tag{4}$$

E, combinando (3c) e (3d), chegamos a:

$$\left[\hat{n}_{L-} + \hat{n}_{R-}, \hat{H}\right] = 0 \tag{5}$$

Portanto, os números de partículas de tipo $+$ e $-$ são quantidades conservadas. Isso nos permite restringir o problema a subespaços vetoriais específicos para achar o espectro de energia do sistema. Se definirmos o estado $|n_+, i, n_-, j\rangle$ como o estado com n_+ partículas do tipo $+$ e n_- partículas do tipo $-$, e com i partículas do tipo $+$ no sítio L e também j partículas do tipo $+$ no sítio L. Teremos então, subespaços onde diagonalizar a matriz. Por exemplo, o subespaço constituído pelo vetor $|2, 1, 2, 1\rangle$ é um subespaço unidimensional, portanto é autovetor do Hamiltoniano. O subespaço constituído por $|0, 0, 0, 0\rangle$ também é outro unidimensional e, portanto, também autovetor do Hamiltoniano. Resta, então, analisar os subespaços de dimensão maior. Estes são os casos:

A $|1, 0, 0, 0\rangle$ e $|1, 1, 0, 0\rangle$;

B $|1, 0, 1, 0\rangle$, $|1, 0, 1, 1\rangle$, $|1, 1, 1, 0\rangle$ e $|1, 1, 1, 1\rangle$;

C $|1, 1, 2, 1\rangle$ e $|1, 0, 2, 1\rangle$;

Teremos também, as reflexões $n_+ \leftrightarrow n_-$. O que nos leva a outra simetria do problema. Essa simetria é a das reflexões $R \leftrightarrow L$. Como a inversão $R \leftrightarrow L$ é um operador cujo quadrado é a identidade, seus autovalores podem ser somente ± 1. Portanto, precisamos de autoestados simétricos ou antisimétricos em relação a essa inversão. Para cada autoespaço acima, teremos os seguintes autovetores do operador P responsável por $R \leftrightarrow L$:

A
- **.1** $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1, 0, 0, 0\rangle + |1, 1, 0, 0\rangle\right)$ $(P = +1)$;
- **.2** $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1, 0, 0, 0\rangle - |1, 1, 0, 0\rangle\right)$ $(P = -1)$;

B
- **.1** $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1, 0, 1, 0\rangle + |1, 1, 1, 1\rangle\right)$ $(P = +1)$;
- **.2** $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1, 0, 1, 0\rangle - |1, 1, 1, 1\rangle\right)$ $(P = -1)$;
- **.3** $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1, 0, 1, 1\rangle + |1, 0, 1, 1\rangle\right)$ $(P = +1)$;
- **.4** $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1, 0, 1, 1\rangle - |1, 0, 1, 1\rangle\right)$ $(P = -1)$;

C **.1** $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,0,2,1\rangle + |1,1,2,1\rangle\right)$ $(P=+1)$;

.2 $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,0,2,1\rangle - |1,1,2,1\rangle\right)$ $(P=-1)$;

Com mais uma cópia de **A** e outra do subespaço **C** temos vários subespaços já diagonalizados. Para fins de completeza, listamos todos abaixo, separados pela paridade $R \leftrightarrow L$:

$n_+ = 0$, $n_- = 0$ **.1** $|0,0,0,0\rangle$ $(P=+1)$;

$n_+ = 0$, $n_- = 1$ **.1** $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0,0,1,0\rangle + |0,0,1,1\rangle\right)$ $(P=+1)$;

.2 $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0,0,1,0\rangle - |0,0,1,1\rangle\right)$ $(P=-1)$;

$n_+ = 0$, $n_- = 2$ **.1** $|0,0,2,1\rangle$ $(P=+1)$;

$n_+ = 1$, $n_- = 0$ **.1** $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,0,0,0\rangle + |1,1,0,0\rangle\right)$ $(P=+1)$;

.2 $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,0,0,0\rangle - |1,1,0,0\rangle\right)$ $(P=-1)$;

$n_+ = 1$, $n_- = 1$ **.1** $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,0,1,0\rangle + |1,1,1,1\rangle\right)$ $(P=+1)$;

.2 $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,0,1,1\rangle + |1,1,1,0\rangle\right)$ $(P=+1)$;

.3 $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,0,1,0\rangle - |1,1,1,1\rangle\right)$ $(P=-1)$;

.4 $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,0,1,1\rangle - |1,1,1,0\rangle\right)$ $(P=-1)$;

$n_+ = 1$, $n_- = 2$ **.1** $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,0,2,1\rangle + |1,1,2,1\rangle\right)$ $(P=+1)$;

.2 $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,0,2,1\rangle - |1,1,2,1\rangle\right)$ $(P=-1)$;

$n_+ = 2$, $n_- = 0$ **.1** $|2,1,0,0\rangle$ $(P=+1)$;

$n_+ = 2$, $n_- = 1$ **.1** $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2,1,1,0\rangle + |2,1,1,1\rangle\right)$ $(P=+1)$;

.2 $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2,1,1,0\rangle - |2,1,1,1\rangle\right)$ $(P=-1)$;

$n_+ = 2$, $n_- = 2$ **.1** $|2,1,2,1\rangle$ $(P=+1)$;

Para diagonalizar completamente o Hamiltoniano, precisamos ainda lidar com o subespaço $\{n_+ = 1,\, n_- = 1\}$, já que podemos combinar autoestados com a mesma paridade em relação à $L \leftrightarrow R$. Nesse subespaço, o Hamiltoniano toma a forma:

$$\begin{bmatrix} U & 2J & 0 & 0 \\ 2J & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & U & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{6}$$

Onde tomamos a base com os vetores da lista e na ordem em que aparecem na lista. Dessa forma, no subespaço $P = +1$(representado pelo bloco superior esquerdo da matriz) teremos as energias $E_{P=+1} = \frac{U \pm \sqrt{U^2+4J^2}}{2}$, e no outro subespaço($P = -1$), a matriz já está diagonal.

O espectro de energia será, portanto:

$\{n_+ = 0, n_- = 0\}$ $E = 0$;

$\{n_+ = 0, n_- = 1\}$
- $E = -J$;
- $E = +J$;

$\{n_+ = 0, n_- = 2\}$ $E = 0$;

$\{n_+ = 1, n_- = 0\}$
- $E = -J$;
- $E = +J$;

$\{n_+ = 1, n_- = 1\}$
- $E = \frac{U+\sqrt{U^2+4J^2}}{2}$;
- $E = \frac{U-\sqrt{U^2+4J^2}}{2}$;
- $E = U$;
- $E = 0$;

$\{n_+ = 1, n_- = 2\}$
- $E = U - J$;
- $E = U + J$;

$\{n_+ = 2, n_- = 0\}$ $E = 0$;

$\{n_+ = 2, n_- = 1\}$
- $E = U - J$;
- $E = U + J$;

$\{n_+ = 2, n_- = 2\}$ $E = 2U$;

Podemos, agora, para cada número de partículas, calcular a função equipartição:

$\{n_+ = 0, n_- = 0\}$ $Z = 1$;

$\{n_+ = 0, n_- = 1\}$ $Z = 2\cosh \beta J$;

$\{n_+ = 0, n_- = 2\}$ $Z = 1$;

$\{n_+ = 1, n_- = 0\}$ $Z = 2\cosh \beta J$;

$\{n_+ = 1,\, n_- = 1\}$ $Z = 2e^{-\beta\frac{U}{2}}\left\{\cosh\beta\frac{U}{2} + \cosh\beta\frac{\sqrt{U^2+4J^2}}{2}\right\}$;

$\{n_+ = 1,\, n_- = 2\}$ $Z = 2e^{-\beta U}\cosh\beta J$;

$\{n_+ = 2,\, n_- = 0\}$ $Z = 1$;

$\{n_+ = 2,\, n_- = 1\}$ $Z = 2e^{-\beta U}\cosh\beta J$;

$\{n_+ = 2,\, n_- = 2\}$ $Z = e^{-2\beta U}$;

Daqui podemos tirar cinco funções equipartições distintas:

$$Z_1 = 1 \tag{7a}$$
$$Z_2 = 2\cosh\left(J\beta\right) \tag{7b}$$
$$Z_3 = 2\left(\cosh\left(\frac{U\beta}{2}\right) + \cosh\left(\frac{\beta\sqrt{4J^2+U^2}}{2}\right)\right)e^{-\frac{U\beta}{2}} \tag{7c}$$
$$Z_4 = 2e^{-U\beta}\cosh\left(J\beta\right) \tag{7d}$$
$$Z_5 = e^{-2U\beta} \tag{7e}$$

Podemos tirar os potenciais termodinâmicos dessas:

$$F_1 = 0 \tag{8a}$$
$$F_2 = -\frac{\log\left(2\cosh\left(J\beta\right)\right)}{\beta} \tag{8b}$$
$$F_3 = -\frac{-\frac{U\beta}{2} + \log\left(\cosh\left(\frac{U\beta}{2}\right) + \cosh\left(\frac{\beta\sqrt{4J^2+U^2}}{2}\right)\right) + \log\left(2\right)}{\beta} \tag{8c}$$
$$F_4 = U - \frac{\log\left(2\cosh\left(J\beta\right)\right)}{\beta} \tag{8d}$$
$$F_5 = 2U \tag{8e}$$

E também:

$$U_1 = 0 \tag{9a}$$
$$U_2 = -J\tanh(J\beta) \tag{9b}$$
$$U_3 = -\frac{-U\left(\cosh\left(\frac{U\beta}{2}\right) + \cosh\left(\frac{\beta\sqrt{4J^2+U^2}}{2}\right)\right) + U\sinh\left(\frac{U\beta}{2}\right) + \sqrt{4J^2+U^2}\sinh\left(\frac{\beta\sqrt{4J^2+U^2}}{2}\right)}{2\cosh\left(\frac{U\beta}{2}\right) + 2\cosh\left(\frac{\beta\sqrt{4J^2+U^2}}{2}\right)} \tag{9c}$$
$$U_4 = -J\tanh(J\beta) + U \tag{9d}$$
$$U_5 = 2U \tag{9e}$$

E, por fim:

$$S_1 = 0 \tag{10a}$$
$$S_2 = J\beta\tanh(J\beta) - \log(2\cosh(J\beta)) \tag{10b}$$
$$S_3 = \beta\left(\frac{\left(-\frac{Ux_2(2x_3+2x_6)}{2} + x_2(U\sinh(x_1) + x_4\sinh(x_5))\right)e^{x_1}}{2x_7} - \frac{\log(2x_2x_7)}{\beta}\right) \tag{10c}$$
$$S_4 = J\beta\tanh(J\beta) - \log(2\cosh(J\beta)) \tag{10d}$$
$$S_5 = 0 \tag{10e}$$

Onde definimos:

$$x_0 = \frac{\beta}{2} \tag{11a}$$
$$x_1 = Ux_0 \tag{11b}$$
$$x_2 = e^{-x_1} \tag{11c}$$
$$x_3 = \cosh(x_1) \tag{11d}$$
$$x_4 = \sqrt{4J^2+U^2} \tag{11e}$$
$$x_5 = x_0x_4 \tag{11f}$$
$$x_6 = \cosh(x_5) \tag{11g}$$
$$x_7 = x_3 + x_6 \tag{11h}$$

Assim, temos todas as propriedades termodinâmicas do sistema determinadas analiticamente. Agora, introduzimos o *grand canonical ensemble* para colocar o sistema em contato com um banho com potencial químico μ. Dessa maneira, teremos a função equipartição do sistema fica:

$$Z = \sum_{N=0}^{4} z^N Z(N) \text{ onde: } \begin{cases} Z(N) & \text{é a função para número de partículas igual a } N \\ z^N & \text{é a fugacidade } e^{\beta\mu} \end{cases} \tag{12}$$

Podemos escrever as funções $Z(N)$ em termos das equações (7). Explicitamente, elas ficam:

$$Z(0) = 1 \tag{13a}$$
$$Z(1) = 4\cosh \beta J \tag{13b}$$
$$Z(2) = 2 + 2 + 2\left(\cosh\left(\frac{U\beta}{2}\right) + \cosh\left(\frac{\beta\sqrt{4J^2+U^2}}{2}\right)\right)e^{-\frac{U\beta}{2}} \tag{13c}$$
$$Z(3) = 4e^{-\beta U}\cosh \beta J \tag{13d}$$
$$Z(4) = e^{-2\beta U} \tag{13e}$$
$$\tag{13f}$$

Aplicando então a definição, podemos tirar daí a função equipartição do sistema, e dela todos os potenciais termodinâmicos. Em particular,podemos tirar N o número médio de partículas no sistema. A definição é:

$$N = \frac{\partial \log(Z)}{\partial z} \tag{14}$$

Podemos, da expressão de N, plotar seu comportamento em relação às variáveis termodinâmicas, em relação à β e a μ, podemos ver esse comportamento ilustrado na Figura 1.0.1. Os valores escolhidos de U e J foram pensados de maneira a aumentar a dependência do *ground state* em relação à μ. Para compreender melhor o comportamento observado a alto β. Que pode ser observado na Figura 1.0.2.

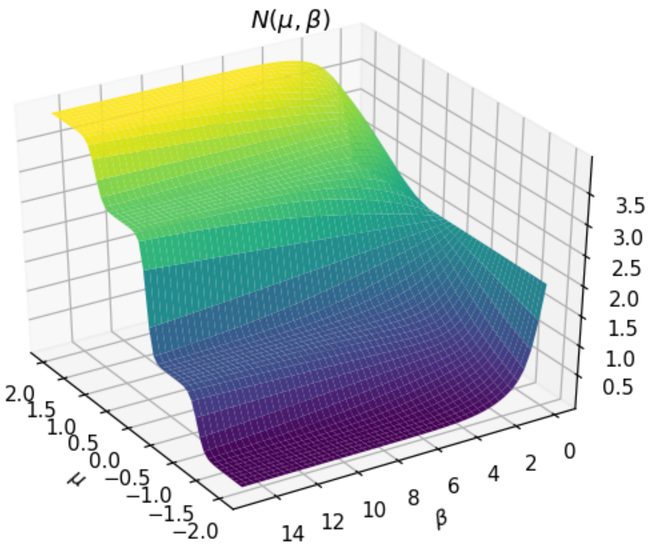

Figura 1.0.1: Comportamento de $\langle N \rangle$ em relação a β e μ. Esolhemos os valores $U = 0$ e $J = 1$.

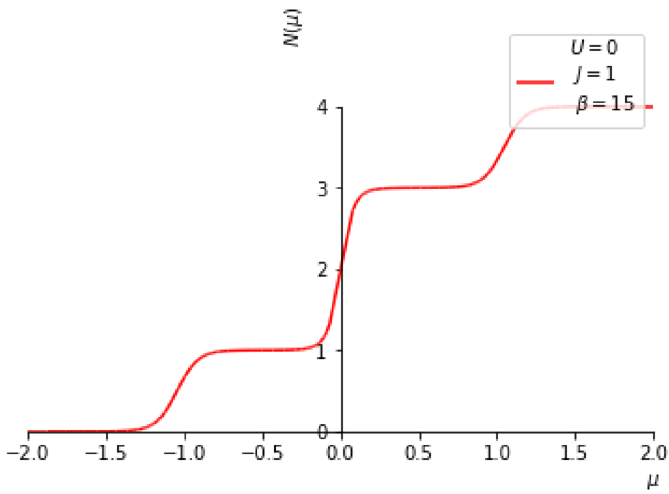

Figura 1.0.2: Comportamento de $\langle N \rangle$ em relação a μ. Esolhemos os valores $U = 0$, $\beta = 15$ e $J = 1$.

2 P2

O Hamiltoniano do problema em questão é dado por:

$$H = \sum_{i=1}^{L} \epsilon_a a_i^\dagger a_i + \epsilon_b b_i^\dagger b_i - J \sum_{i=1}^{L} (a_{i+1}^\dagger a_i + a_i^\dagger a_{i+1}) - J \sum_{i=1}^{L} (b_{i+1}^\dagger b_i + b_i^\dagger b_{i+1}) \\ - J_{ab} \sum_{i=1}^{L} (a_i^\dagger b_i + b_i^\dagger a_i) \quad (15)$$

Para esse problema, começamos com a expansão:

$$a_j = \sum_{m=-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{i(mj)} \tilde{a}_m \quad (16)$$

Devido à condição de contorno $a_j = a_{j+L}$, teremos:

$$m = \frac{2\pi n}{L} \text{ onde: } n \in \mathbb{Z} \quad (17)$$

Multiplicando a equação (16) por e^{-ijk} e somando em j de 1 a L, obteremos:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{L} e^{-ijk} a_j &= \sum_{j=1}^{L} \sum_{m=-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{-ijk} e^{i(mj)} \tilde{a}_m \\ &= \sum_{m=-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \tilde{a}_m \sum_{j=1}^{L} e^{ij(m-k)} \\ &= \sum_{m=-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \tilde{a}_m \delta_m^k L \\ &= L\tilde{a}_k \end{aligned} \quad (18)$$

Portanto:

$$\tilde{a}_k = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^{L} e^{-ijk} a_j \quad (19)$$

Além disso, queremos que:

$$a_j^* = a_j \quad (20)$$

Substituindo a Equação (16) e mudando a variável de soma do lado esquerdo($m \to -m$), obtemos:

$$\sum_{m=-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{i(mj)}\tilde{a^*}_{-m} - e^{i(mj)}\tilde{a}_m = 0 \tag{21}$$

Essa soma somente vale zero se:

$$\tilde{a}^*_m = \tilde{a}_{-m} \tag{22}$$

Agora, é possível demonstrar que:

$$\sum_{j=1}^{L} a_j^\dagger a_j = L \sum_{m=-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \tilde{a}_m^\dagger \tilde{a}_{-m} \tag{23a}$$

$$\sum_{j=1}^{L} a_{j+1}^\dagger a_j = L \sum_{m=-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \tilde{a}_m^\dagger \tilde{a}_{-m} e^{im} \tag{23b}$$

$$\sum_{j=1}^{L} a_j^\dagger a_{j+1} = L \sum_{m=-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \tilde{a}_m^\dagger \tilde{a}_{-m} e^{-im} \tag{23c}$$

$$\sum_{j=1}^{L} a_j^\dagger b_j = L \sum_{m=-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \tilde{a}_m^\dagger \tilde{b}_{-m} \tag{23d}$$

Substituindo essas identidades em (15), obtemos:

$$\begin{aligned} H = L \sum_{m=-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \Bigg\{ & \epsilon_a \tilde{a}_m^\dagger \tilde{a}_{-m} + \epsilon_b \tilde{b}_m^\dagger \tilde{b}_{-m} - 2J\cos(m)\left(\tilde{a}_m^\dagger \tilde{a}_{-m} + \tilde{b}_m^\dagger \tilde{b}_{-m}\right) \\ & - 2J_{ab}\left(\tilde{a}_m^\dagger \tilde{b}_{-m} + \tilde{b}_m^\dagger \tilde{a}_{-m}\right) \Bigg\} \end{aligned} \tag{24}$$

Se definirmos as matrizes:

$$\tilde{c}_m := \begin{bmatrix} \tilde{a}_m \\ \tilde{b}_m \end{bmatrix} \tag{25a}$$

$$\tilde{c}_m^\dagger := \begin{bmatrix} \tilde{a}_m^\dagger & \tilde{b}_m^\dagger \end{bmatrix} \tag{25b}$$

$$Q_m := \begin{bmatrix} \epsilon_a - 2J\cos(m) & -2J_{ab} \\ -2J_{ab} & \epsilon_b - 2J\cos(m) \end{bmatrix} \tag{25c}$$

Se substituirmos essas definições em (24), podemos reescrevê-lo como:

$$H = L \sum_{m=-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \tilde{c}_m^\dagger Q_m \tilde{c}_{-m} \tag{26}$$

Diagonalizando essa nova matriz Q_m obteremos uma nova base como combinação linear dos operadores $\tilde{a}_m$, $\tilde{a}_m^\dagger$, $\tilde{b}_m$ e $\tilde{b}_m^\dagger$. Nessa base, o Hamiltoniano será diagonal, e teremos dois tipos de excitação diferentes da rede, representadas pelos dois autovetores dessa matriz, cada qual com sua relação de dispersão. Os autovalores dessa nova matriz serão:

$$\lambda_{\mu,m} = \frac{\epsilon_a + \epsilon_b}{2} + 2J\cos(m) - \sqrt{2J_{ab}^2 + \left(\frac{\epsilon_a - \epsilon_b}{2}\right)^2} \tag{27a}$$

$$\lambda_{\nu,m} = \frac{\epsilon_a + \epsilon_b}{2} + 2J\cos(m) + \sqrt{2J_{ab}^2 + \left(\frac{\epsilon_a - \epsilon_b}{2}\right)^2} \tag{27b}$$

Essas são, portanto, as relações de dispersão desse Hamiltoniano.