Mecánica Estadística II

Año 2020

Prof. T. S. Grigera
JTP N. Nessi

Práctica 6 — Excitaciones en sólidos: fonones y magnones

Ejercicio 1. Modos ópticos en $d = 1$. Estudie (en la aproximación armónica) las vibraciones de una cadena unidimensional de partículas con masas M y m dispuestas equiespaciada y alternadamente. Considere interacciones sólo hasta primeros vecinos. Llamando $R_i = ia$ y $r_i = (i + 1/2)a$ a las posiciones de equilibrio, escriba el Hamiltoniano en términos de las transformadas discretas de Fourier de cada variable. Obtendrá así una expresión donde los modos de distinto k están desacoplados, pero resta desacoplar los dos tipos de partículas; esto último podrá hacerlo diagonalizando una matriz de 2×2. Muestre que finalmente se puede escribir un Hamiltoniano armónico totalmente desacoplado en donde para cada valor de k hay dos posibles frecuencias, dadas por

$$\omega_k^{\pm} = \sqrt{\frac{A}{\sqrt{Mm}}} \left[\sqrt{\cosh u + \operatorname{sen}|ka/2|} + \mp\sqrt{\cosh u - \operatorname{sen}|ka/2|}\right]. \tag{6.1}$$

Observe que para $k \to 0$, una de las dos frecuencias *(rama acústica)* se comporta como $\sim ck$, mientras que la otra *(rama óptica)* tiende a una constante (ver Balian, 1991, ej. 11e).

Ejercicio 2. Fonones en el continuo. Estudie el Hamiltoniano cuántico de la cuerda vibrante,

$$\hat{H} = \int dx \left[\frac{\hat{\pi}^2(x)}{2m} + \frac{\alpha^2}{2}\left(\frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x}\right)^2\right]. \tag{6.2}$$

a) Diagonalícelo introduciendo las transformadas de Fourier de $\hat{\pi}(x)$ y $\hat{\phi}(x)$, la frecuencia $\omega(k) = \sqrt{\alpha/m}|k|$ para llevarlo a la forma

$$\hat{H} = \int \frac{dk}{2\pi} \left[\frac{1}{2m}\hat{\pi}(k)\pi(-k) + \frac{m\omega^2(k)}{2}\hat{\phi}(k)\hat{\phi}(-k)\right], \tag{6.3}$$

(observe que $\hat{\pi}^\dagger(k) = \hat{\pi}(-k)$ y $\hat{\phi}^\dagger(k) = \hat{\phi}(-k)$). Defina los operadores

$$a_k = \sqrt{\frac{m\omega(k)}{2\hbar}} \left[\hat{\phi}(k) + \frac{i}{m\omega(k)}\hat{\pi}(k)\right], \tag{6.4}$$

y su adjunto $a_k^\dagger$ y muestre que cumplen las relaciones de conmutación de operadores de creación y aniquilación bosónicos, y que el Hamiltoniano se puede escribir como

$$\hat{H} = \int \frac{dk}{2\pi}\, \hbar\omega(k) \left[a_k^\dagger a_k + 1/2\right], \tag{6.5}$$

que tiene la forma de un Hamiltoniano de partículas independientes con espectro de energías $E(k) = \hbar\omega(k)$ en segunda cuantificación.

b) Muestre que $a_{\boldsymbol{k}}^\dagger$ crea una excitación vibracional (fonón) deslocalizada. Para eso exprese $\hat{\phi}(x)$ y $\hat{\pi}(x)$ en función de a_k y $a_k^\dagger$ y calcule $\left\langle \hat{\phi}(x) \right\rangle$, $\left\langle \hat{\phi}^2(x) \right\rangle$, $\langle \hat{\pi}(x) \rangle$ y $\left\langle \hat{\pi}^2(x) \right\rangle$ y compruebe que son independientes de la posición.

c) Defina ahora

$$a(x) = \int \frac{dk}{2\pi}\, e^{ikx} a_k \tag{6.6}$$

y el correspondiente $a^\dagger(x)$ y calcule $\left\langle \hat{\phi}^2(x) \right\rangle$ en el estado $a^\dagger(x_0)|0\rangle$. Muestre así que $a^\dagger(x)$ crea una excitación localizada en torno a x_0.

Ejercicio 3. Cristalización en distintas dimensiones. Considere un cristal armónico utilizando un modelo de Debye para el espectro vibracional y estudie la amplitud de las vibraciones locales, $u^2 = \left\langle (\delta R_i)^2 \right\rangle$, en el caso cuántico (ver Khomskii, 2010, §4.4.4).

a) Trabajando a $T = 0$, muestre que u^2 es divergente en $d = 1$, de modo que no es posible la existencia de un cristal con orden de largo alcance en $d = 1$.

b) Considerando ahora T finita, muestre que las vibraciones térmicas dan un u^2 divergente también en $d = 2$, de modo que a T finita sólo puede existir orden cristalino de largo alcance en $d \geq 3$.

Ejercicio 4. Modelo de Heisenberg cuántico. El modelo de Heisenberg está definido por el Hamiltoniano

$$\hat{H} = -J \sum_{\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}'} \hat{\boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{R}} \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{R}'}. \tag{6.7}$$

donde los $\hat{\boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{R}}$ son operadores de espín asociados a los sitios de una red cristalina. Se utiliza para describir objetos localizados con momento magnético no nulo, de modo que los $\hat{\boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{R}}$ pueden ser en realidad operadores de momento angular total (orbital y de espín), y S puede tomar cualquier valor entero o semientero. Lo esencial es que los objetos están localizados espacialmente de modo que pueden ser considerados distinguibles, y que valen las reglas de conmutación del momento angular,

$$[\hat{S}^{\alpha}_{\boldsymbol{R}}, \hat{S}^{\beta}_{\boldsymbol{R}}] = i\hbar \delta_{\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}'} \epsilon^{\alpha\beta\gamma} \hat{S}^{\gamma}_{\boldsymbol{R}}. \tag{6.8}$$

a) Definamos $|\Omega\rangle = \otimes_{\boldsymbol{R}} |S\rangle$ (con $|S\rangle$ el autoestado de partícula individual con máxima proyección del espín en z). Muestre que $|\Omega\rangle$ es autoestado de $\hat{H}$. Para ello conviene introducir los operadores escalera,

$$\hat{S}^{\pm}_{\boldsymbol{R}} = \hat{S}^{x}_{\boldsymbol{R}} \pm i \hat{S}^{y}_{\boldsymbol{R}}. \tag{6.9}$$

b) En el caso $J > 0$ (ferromagnético) se puede demostrar que $|\Omega\rangle$ es un estado fundamental (Ashcroft y Mermin, 1976, Cap. 33). El estado fundamental es altamente degenerado: muestre que $\exp(i\theta \boldsymbol{n} \cdot \hat{\boldsymbol{S}})|\Omega\rangle$ tiene la misma energía que $|\Omega\rangle$ ($\hat{\boldsymbol{S}} = \sum_n \hat{\boldsymbol{S}}_n$ y $\boldsymbol{n}$ es un vector unitario).

c) Si $J < 0$ (caso antiferromagnético), el estado fundamental es mucho más difícil de encontrar. En $d = 1$, un candidato naive es $|\Theta\rangle = |S\rangle \otimes |-S\rangle \otimes |S\rangle \otimes |-S\rangle \ldots$ (que corresponde al *estado de Néel* clásico). Muestre que sin embargo en el caso cuántico $|\Theta\rangle$ *no es* autoestado de $\hat{H}$.

Ejercicio 5. Magnones en el Hesinberg ferromagnético unidimensional. Estudie el Hamiltoniano (Altland y Simons, 2010, §2.2)

$$\hat{H} = -J \sum_n \hat{\boldsymbol{S}}_n \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_{n+1}, \qquad J > 0. \tag{6.10}$$

a) Muestre que $\hat{\boldsymbol{S}}_n$ se puede representar en términos de operadores de creación y aniquilación bosónicos como (transformación de Hosltein-Primakoff)

$$\hat{S}^z_n = \hbar(S - a^\dagger_n a_n), \tag{6.11}$$

$$\hat{S}^+_n = \hbar(S - a^\dagger_n a_n)^{1/2} a_n, \tag{6.12}$$

$$\hat{S}^z_n = \hbar a^\dagger_n (S - a^\dagger_n a_n)^{1/2}. \tag{6.13}$$

Para ello muestre que las reglas de conmutación de a_n y $a^\dagger_n$ garantizan que se cumplen las reglas de conmutación de $\hat{S}^z_n$ con los operadores escalera,

$$[\hat{S}^z_n, \hat{S}^{\pm}_m] = \pm \delta_{nm} \hbar \hat{S}^{\pm}_n, \qquad [\hat{S}^+_n, \hat{S}^-_m] = 2\delta_{nm} \hbar \hat{S}^z_n. \tag{6.14}$$

b) Aplicando la transformación al Hamiltoniano obtenga a $O(S)$

$$\hat{H} = NJ\hbar^2 S^2 + JS\hbar^2 \sum_n \left(2a^\dagger_n a_n - a_n a^\dagger_{n+1} - a^\dagger_n a_{n+1} \right). \tag{6.15}$$

c) Finalmente desacople los distintos sitios mediante una transformada de Fourier y muestre que se obtiene un Hamiltoniano de bosones no interactuantes con relación de dispersión *cuadrática* a k pequeño,

$$\hat{H} = \sum_k \hbar \omega_k a^\dagger_k a_k, \qquad \omega_k = 4JS\hbar \operatorname{sen}^2 k/2, \quad k = 2\pi n/N. \tag{6.16}$$

Observe que $\omega_k \to 0$ para $k \to 0$ (modos de Goldstone).