

Aula 3 - Teorias de campo médio

(1)

Na derivação do termo de dois corpos em segunda quantização, obtivemos um termo de ordem quártica na forma:

$$\hat{V}_{int} = \sum_{\substack{k_i, k_j \\ k_l, k_m}} (\hat{V})_{k_i k_j, k_l k_m} c_{k_i}^\dagger c_{k_j}^\dagger c_{k_m} c_{k_l}$$

Termas como esse introduzem correlações em um sistema de N -partículas que tornam o sistema ao mesmo tempo rico (em termos de comportamentos físicos) mas também complexo, no sentido em que soluções exatas são, em geral, inexistentes.

Em muitos casos, é possível capturar efeitos não-triviais da teoria de correlação nas propriedades físicas através de aproximações que deixam \hat{V}_{int} escrito na forma de um potencial efetivo de um corpo. Tais aproximações são denominadas, em geral, de Teoria de Campo Médio. Como o nome sugere, essas aproximações assumem que o sistema de N -partículas pode ser mapeado em " N sistemas de partícula única" com partículas sujeitas a potenciais efetivos estáticos que advêm da interação com outras partículas.



MF
⇒



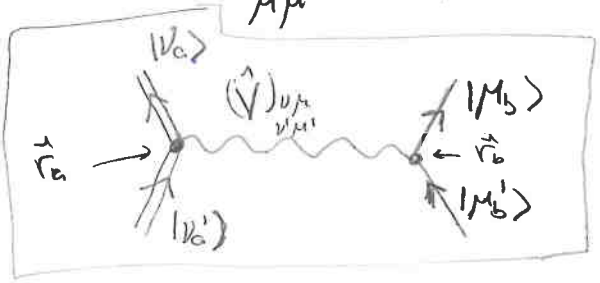
Caso 1: Interação entre partículas distinguíveis

Consideremos um sistema de dois tipos de partículas descritas pelos operadores a_ν^\dagger e b_μ^\dagger ($a_\nu^\dagger |0\rangle = |\nu_a\rangle \Rightarrow$ bósonico ou fermiônico ($[a_\nu, a_{\nu'}^\dagger]_\pm = \delta_{\nu\nu'}$; $[b_\mu, b_{\mu'}^\dagger]_\pm = \delta_{\mu\mu'}$) mas que, nesse sistema, apenas interação entre partículas diferentes sejam importantes (elétrons e buracos em um semicondutor, por exemplo). O Hamiltoniano pode ser escrito como:

$$H = H_0 + V_{int}$$

$$\hat{H}_0 = \sum_\nu \epsilon_\nu^a a_\nu^\dagger a_\nu + \sum_\mu \epsilon_\mu^b b_\mu^\dagger b_\mu$$

$$\hat{V}_{int} = \sum_{\substack{\nu\nu' \\ \mu\mu'}} (\hat{V})_{\nu\mu, \nu'\mu'} a_\nu^\dagger b_\mu^\dagger b_{\mu'} a_{\nu'}$$



$$\begin{cases} \langle \vec{r}_a | \nu \rangle = \psi_\nu^*(\vec{r}_a) \\ \langle \vec{r}_b | \mu \rangle = \psi_\mu(\vec{r}_b) \end{cases}$$

$$(\hat{V})_{\nu\mu, \nu'\mu'} = \int d^3\vec{r}_a d^3\vec{r}_b \psi_\nu^*(\vec{r}_a) \psi_\mu^*(\vec{r}_b) V(\vec{r}_a - \vec{r}_b) \psi_{\nu'}(\vec{r}_a) \psi_{\mu'}(\vec{r}_b)$$

A aproximação de campo médio em \hat{V}_{int} consiste, essencialmente, em desprezar flutuações de operadores-densidade das partículas, substituindo-as pelo seu valor médio. Ou seja, definindo os operadores densidade para as partículas a e b e as desvias ^{respectivas}:

$$\left. \begin{aligned} \hat{n}_{\nu\nu'}^a &\equiv a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \\ \hat{n}_{\mu\mu'}^b &\equiv b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} \end{aligned} \right\} \longrightarrow \begin{aligned} \Delta \hat{n}_{\nu\nu'}^a &\equiv \hat{n}_{\nu\nu'}^a - \langle \hat{n}_{\nu\nu'}^a \rangle \\ \Delta \hat{n}_{\mu\mu'}^b &\equiv \hat{n}_{\mu\mu'}^b - \langle \hat{n}_{\mu\mu'}^b \rangle \end{aligned}$$

(onde $\langle \dots \rangle$ indica o valor esperado $\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{Z} \text{tr}[e^{-\beta \hat{H}} \hat{A}]$. Para $T=0$, $\langle \Psi_0 | \hat{A} | \Psi_0 \rangle$; $|\Psi_0\rangle =$ estado fundamental). Escrevendo $\hat{n}_{kk}^p = \Delta \hat{n}_{kk}^p + \langle \hat{n}_{kk}^p \rangle$ para ambas as partículas, temos:

$$\hat{V}_{int} = + \sum_{\substack{\nu\mu \\ \nu'\mu'}} (\hat{V})_{\nu\mu, \nu'\mu'} \underbrace{\hat{n}_{\nu\nu'}^a}_{+} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \underbrace{\hat{n}_{\mu\mu'}^b}_{+} b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} = \sum_{\substack{\nu\mu \\ \nu'\mu'}} (\hat{V})_{\nu\mu, \nu'\mu'} \left[\langle \hat{n}_{\nu\nu'}^a \rangle + \Delta \hat{n}_{\nu\nu'}^a \right] \left[\langle \hat{n}_{\mu\mu'}^b \rangle + \Delta \hat{n}_{\mu\mu'}^b \right]$$

$$= \sum_{\substack{\nu\mu \\ \nu'\mu'}} (\hat{V})_{\nu\mu, \nu'\mu'} \left[\langle \hat{n}_{\nu\nu'}^a \rangle \langle \hat{n}_{\mu\mu'}^b \rangle + (\hat{n}_{\nu\nu'}^a - \langle \hat{n}_{\nu\nu'}^a \rangle) \langle \hat{n}_{\mu\mu'}^b \rangle + (\hat{n}_{\mu\mu'}^b - \langle \hat{n}_{\mu\mu'}^b \rangle) \langle \hat{n}_{\nu\nu'}^a \rangle + \Delta \hat{n}_{\nu\nu'}^a \Delta \hat{n}_{\mu\mu'}^b \right] =$$

$$= \sum_{\substack{\nu\mu \\ \nu'\mu'}} (\hat{V})_{\nu\mu, \nu'\mu'} \left[\langle \hat{n}_{\nu\nu'}^a \rangle \langle \hat{n}_{\mu\mu'}^b \rangle - 2 \langle \hat{n}_{\nu\nu'}^a \rangle \langle \hat{n}_{\mu\mu'}^b \rangle + \hat{n}_{\nu\nu'}^a \langle \hat{n}_{\mu\mu'}^b \rangle + \langle \hat{n}_{\nu\nu'}^a \rangle \hat{n}_{\mu\mu'}^b \right] \leftarrow -\langle \hat{n}_{\nu\nu'}^a \rangle \langle \hat{n}_{\mu\mu'}^b \rangle$$

$$+ \sum_{\substack{\nu\mu \\ \nu'\mu'}} (\hat{V})_{\nu\mu, \nu'\mu'} \Delta \hat{n}_{\nu\nu'}^a \Delta \hat{n}_{\mu\mu'}^b$$

→ desprezando em campo médio,

$$\hat{V}_{MF}$$

Podemos então escrever (a menos de uma constante):

$$\hat{H} \approx \hat{H}_{MF} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{AF} \quad \text{onde}$$

$$\hat{V}_{AF} = \sum_{\substack{\nu, \mu \\ \nu', \mu'}} (\hat{V})_{\nu, \mu; \nu', \mu'} \left[a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \langle b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} \rangle + b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} \langle a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \rangle - \langle a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \rangle \langle b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} \rangle \right]$$

densidade

que é, essencialmente, um potencial de um corpo, de modo que \hat{H}_{MF} é "solúvel" (vide exercícios da Lista 1). Equivalentemente, podemos dizer que a aproximação de campo médio equivale a aproximar um Hamiltoniano dado pelo produto de dois operadores:

$$H_{AB} = \hat{A} \cdot \hat{B} \xrightarrow{MF} H_{AB}^{MF} = \hat{A} \langle \hat{B} \rangle + \langle \hat{A} \rangle \hat{B} - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle$$

Note, no entanto, que alguma informação sobre $\langle \hat{A} \rangle$ e $\langle \hat{B} \rangle$ deve ser fornecida como "input". Há dois métodos básicos ^{soluções de} de campo médio:

Método 1: $\langle \hat{A} \rangle$ e $\langle \hat{B} \rangle$ (ou $\langle \hat{n}_{\nu\nu'}^a \rangle$ e $\langle n_{\mu\mu'}^b \rangle$) são determinados

auto-consistentemente: $\langle \Psi | \hat{n}_{\nu\nu'}^a | \Psi \rangle \rightarrow H_{MF} \rightarrow | \Psi \rangle \rightarrow \langle \Psi | n_{\nu\nu'}^a | \Psi \rangle$
($T=0$) $\rightarrow \langle \Psi | n_{\mu\mu'}^b | \Psi \rangle \rightarrow H_{MF} \rightarrow | \Psi \rangle \rightarrow \langle \Psi | n_{\mu\mu'}^b | \Psi \rangle$

ou ainda:

$$\left. \begin{aligned} \langle n_{\nu\nu'}^a \rangle &= \frac{1}{Z_{MF}} \text{Tr} [e^{-\beta H_{MF}} n_{\nu\nu'}^a] \\ \langle n_{\mu\mu'}^b \rangle &= \frac{1}{Z_{MF}} \text{Tr} [e^{-\beta H_{MF}} n_{\mu\mu'}^b] \end{aligned} \right\} \rightarrow H_{MF} \rightarrow \begin{array}{l} \text{novos estados} \\ \text{de partícula} \\ \text{única } | \nu \rangle \\ | \mu \rangle \end{array} \rightarrow Z_{MF}' = \text{Tr} [e^{-\beta H_{MF}}]$$

Condições de convergência: $\left\{ \begin{aligned} \langle n_{\nu\nu'}^a \rangle &\stackrel{?}{=} \langle n_{\nu\nu'}^a \rangle_{MF} = \frac{1}{Z_{MF}} \text{Tr} [e^{-\beta H_{MF}} n_{\nu\nu'}^a] \\ \langle n_{\mu\mu'}^b \rangle &\stackrel{?}{=} \langle n_{\mu\mu'}^b \rangle_{MF} = \frac{1}{Z_{MF}} \text{Tr} [e^{-\beta H_{MF}} n_{\mu\mu'}^b] \end{aligned} \right.$
input output

Método 2: Princípio variacional

Por exemplo, minimização da energia livre. $F = U - TS$
 ou $F = \langle H \rangle - TS$ através da desigualdade $F \leq \langle H \rangle_0 - TS_0$

onde $\langle H \rangle_0 = \frac{\text{Tr}[e^{-\beta H_0} H]}{\text{Tr}[e^{-\beta H_0}]}$ e so também é calculado para $\underline{\rho \approx \rho_0}$.

Lembrando que, no ensemble canônico, $Z = \text{Tr}[e^{-\beta H}] \equiv e^{-\beta F}$

Queremos então encontrar as densidades $\langle n_{\nu\nu'}^a \rangle$ e $\langle n_{\mu\mu'}^b \rangle$ tais que, na aproximação de campo médio, minimizem F . Ou seja:

$$\frac{dF_{MF}}{d\langle n_{\nu\nu'}^{a(b)} \rangle} = 0$$

Tomando a derivada; por exemplo

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{dF_{MF}}{d\langle n_{\nu\nu'}^a \rangle} = \frac{d}{d\langle n_{\nu\nu'}^a \rangle} \left[-\frac{1}{\beta} \ln Z_{MF} \right] = -\frac{1}{\beta} \cdot \frac{1}{Z_{MF}} \cdot (-\beta) \cdot \text{Tr} \left[e^{-\beta H_{MF}} \frac{dH_{MF}}{d\langle n_{\nu\nu'}^a \rangle} \right] \\ &= \frac{1}{Z_{MF}} \text{Tr} \left[e^{-\beta H_{MF}} \sum_{\mu\mu'} \sum_{\nu\nu'} V_{\nu\mu} (b_{\mu}^+ b_{\mu'} - \langle b_{\mu}^+ b_{\mu'} \rangle) \right] \\ &= \sum_{\mu\mu'} \sum_{\nu\nu'} V_{\nu\mu} \left(\underbrace{\frac{1}{Z_{MF}} \text{Tr} [e^{-\beta H_{MF}} b_{\mu}^+ b_{\mu'}]}_{\langle n_{\mu\mu'}^b \rangle_{MF}} - \langle n_{\mu\mu'}^b \rangle \right) \end{aligned}$$

cuja solução é $\langle n_{\mu\mu'}^b \rangle_{MF} = \langle n_{\mu\mu'}^b \rangle$ para todo $(\mu, \mu'), (\nu, \nu')$

Derivando em relação a $\langle n_{\mu\mu'}^b \rangle$, obtém-se um conjunto de equações similares para n^a : $\langle n_{\nu\nu'}^a \rangle_{MF} = \langle n_{\nu\nu'}^a \rangle$. Note que isso é equivalente ao

método 1.

O que "jogamos fora" na aproximação de campo médio?

Em uma palavra: correlação, no sentido estatístico.

Em estatística, a ^{função de} correlação entre duas variáveis estocásticas X, Y é definida como $G(X, Y) = \langle XY \rangle - \langle X \rangle \langle Y \rangle$. Se as variáveis não são correlacionadas ($G(X, Y) = 0$) então $\langle XY \rangle = \langle X \rangle \langle Y \rangle$.

Em campo médio, fazemos essencialmente a aproximação de que as partículas a e b são interagentes mas não correlacionadas:

EXATO: $\langle \hat{V}_{int} \rangle = \sum_{\substack{\nu\nu' \\ \mu\mu'}} (\hat{V})_{\nu\mu, \nu'\mu'} \langle a_{\nu}^{\dagger} b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} a_{\nu'} \rangle = \sum_{\substack{\nu\nu' \\ \mu\mu'}} (\hat{V})_{\nu\mu, \nu'\mu'} \langle a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \rangle \langle b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} \rangle$

CAMPO MÉDIO: $\langle \hat{V}_{int} \rangle_{MF} = \sum_{\substack{\nu\nu' \\ \mu\mu'}} (\hat{V})_{\nu\mu, \nu'\mu'} \langle a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \rangle_{MF} \langle b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} \rangle_{MF}$

ou seja $\langle \hat{V}_{\nu\nu'}^a \hat{V}_{\mu\mu'}^b \rangle \approx \langle \hat{V}_{\nu\nu'}^a \rangle \langle \hat{V}_{\mu\mu'}^b \rangle \Rightarrow \underline{G(\hat{V}_{\nu\nu'}^a, \hat{V}_{\mu\mu'}^b) \approx 0}$

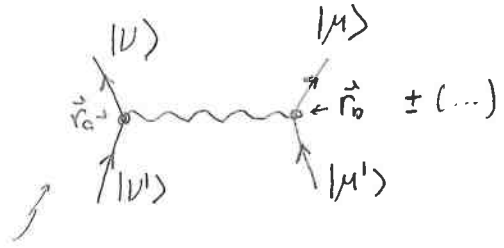
Caso 2: Interação entre partículas indistinguíveis
(Aproximação de Hartree - Fock)

Considere agora o seguinte Hamiltoniano para um tipo de partícula apenas: $([a_\nu, a_{\nu'}^\dagger]_\pm = \delta_{\nu\nu'})$

$$H = \hat{H}_0 + \hat{V}_{int}$$

$$\hat{H}_0 = \sum_\nu \epsilon_\nu a_\nu^\dagger a_\nu$$

$$\hat{V}_{int} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\nu, \mu \\ \nu', \mu'}} (V)_{\nu\mu, \nu'\mu'} a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger a_{\mu'} a_{\nu'}$$



Nesse caso, utilizaremos o seguinte resultado: se as partículas idênticas puderem ser tratadas como independentes (= não-interagantes) então: (*)

$$\langle a_\nu^\dagger a_{\mu'}^\dagger a_{\mu'} a_{\nu'} \rangle_{\text{Non-int}} = \langle a_\nu^\dagger a_{\nu'} \rangle_{\text{NI}} \langle a_{\mu'}^\dagger a_{\mu'} \rangle_{\text{NI}} \pm \langle a_\nu^\dagger a_{\mu'} \rangle_{\text{NI}} \langle a_{\mu'}^\dagger a_{\nu'} \rangle_{\text{NI}}$$

bosons
 ↓
 fermions
 ↑
 Termo de troca.

Na aproximação de campo médio as partículas são tratadas como independentes então a aproximação vale. Note o aparecimento do termo de troca que vem da indistingüibilidade das partículas. Por exemplo:

$$a_\nu^\dagger a_{\mu'}^\dagger a_{\mu'} a_{\nu'} = \pm a_\nu^\dagger a_{\mu'}^\dagger a_{\nu'} a_{\mu'} = \underbrace{a_\nu^\dagger a_{\nu'}}_{\delta_{\nu\nu'} = a_\nu a_\nu^\dagger} a_{\mu'}^\dagger a_{\mu'} \pm a_\nu^\dagger a_{\mu'}^\dagger a_{\mu'} a_{\nu'} = \underbrace{a_\nu^\dagger a_{\nu'}}_{\delta_{\nu\nu'}} a_{\mu'}^\dagger a_{\mu'} \pm a_\nu^\dagger a_{\mu'}^\dagger a_{\mu'} a_{\nu'}$$

↑
 TROCA

Para a interação de campo médio no caso de partículas indistinguíveis é necessário incluir o termo de troca.

A aproximação é feita de modo similar ao caso anterior:

$$\begin{aligned} \hat{V}_{int} &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{\nu\mu \\ \nu\mu'}} (\hat{V})_{\nu\mu, \nu'\mu'} a_{\nu}^{\dagger} a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu'} a_{\nu'} \approx \sum_{\substack{\nu\mu \\ \nu\mu'}} (\hat{V})_{\nu\mu, \nu'\mu'} \left[\hat{n}_{\nu\nu'} \hat{n}_{\mu\mu'} \pm \hat{n}_{\nu\mu'} \hat{n}_{\mu\nu'} \right] \\ &= \left(\begin{array}{l} \Delta_{\nu\nu'} \equiv \hat{n}_{\nu\nu'} - \langle n_{\nu\nu'} \rangle_{HF} \\ \hat{n}_{\nu\nu'} = \Delta_{\nu\nu'} + \langle n_{\nu\nu'} \rangle_{HF} \end{array} \right) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\nu\mu \\ \nu\mu'}} (\hat{V})_{\nu\mu, \nu'\mu'} \left[(\Delta_{\nu\nu'} + \langle n_{\nu\nu'} \rangle) (\Delta_{\mu\mu'} + \langle n_{\mu\mu'} \rangle) \right. \\ &\quad \left. \pm (\Delta_{\nu\mu'} + \langle n_{\nu\mu'} \rangle) (\Delta_{\mu\nu'} + \langle n_{\mu\nu'} \rangle) \right] \\ &\approx \frac{1}{2} \sum_{\substack{\nu\mu \\ \nu\mu'}} (\hat{V})_{\nu\mu, \nu'\mu'} \left[(\hat{n}_{\nu\nu'} \langle n_{\mu\mu'} \rangle + \hat{n}_{\mu\mu'} \langle n_{\nu\nu'} \rangle - \langle n_{\nu\nu'} \rangle \langle n_{\mu\mu'} \rangle) \right. \\ &\quad \left. \pm (\hat{n}_{\nu\mu'} \langle n_{\mu\nu'} \rangle + \hat{n}_{\mu\nu'} \langle n_{\nu\mu'} \rangle - \langle n_{\mu\nu'} \rangle \langle n_{\nu\mu'} \rangle) \right] \end{aligned}$$

$$\hat{V}_{int} = V_{int}^{Hartree} + V_{int}^{Fock} \quad \text{com} \quad V_{\nu\mu, \nu'\mu'} = \int d^3r_a d^3r_b \psi_{\nu}^{\dagger}(\vec{r}_a) \psi_{\mu}^{\dagger}(\vec{r}_b) V_{ab} \psi_{\nu'}(\vec{r}_a) \psi_{\mu'}(\vec{r}_b)$$

$$\begin{aligned} V_{int}^{Hartree} &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{\nu\mu \\ \nu\mu'}} V_{\nu\mu, \nu'\mu'} \left[\hat{n}_{\nu\nu'} \langle n_{\mu\mu'} \rangle + \hat{n}_{\mu\mu'} \langle n_{\nu\nu'} \rangle - \langle n_{\mu\mu'} \rangle \langle n_{\nu\nu'} \rangle \right] \\ V_{int}^{Fock} &= \pm \frac{1}{2} \sum_{\substack{\nu\mu \\ \nu\mu'}} V_{\nu\mu, \nu'\mu'} \left[\hat{n}_{\nu\mu'} \langle n_{\mu\nu'} \rangle + \hat{n}_{\mu\nu'} \langle n_{\nu\mu'} \rangle - \langle n_{\mu\nu'} \rangle \langle n_{\nu\mu'} \rangle \right] \end{aligned}$$

Simetrias (ou Quebra de simetrias)

Uma das aplicações de campo médio é poder identificar transição de fase (ou a possibilidade de) em diferentes sistemas. Isso implica identificar mudanças de simetria no estado do sistema. Na prática, isso significa que as soluções de campo médio terão simetrias diferentes dependendo da fase (e, conseqüentemente, dos parâmetros iniciais) e essas possibilidades devem ser incorporadas nas densidades.

Por exemplo, se o sistema tem simetria translacional e os operadores são $C_k^\dagger |0\rangle = |\vec{k}\rangle \Rightarrow \langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ então

$$\langle C_k^\dagger C_{k'} \rangle = \frac{1}{V} \int d\vec{r} d\vec{r}' e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \langle \Psi^\dagger(\vec{r}) \Psi(\vec{r}') \rangle$$

onde $\Psi^\dagger(\vec{r}) = \sum_{\nu} \langle \vec{r} | \psi_{\nu} \rangle^* a_{\nu}^\dagger$ é um operador de campo atuando na posição \vec{r} .

Se o sistema é homogêneo:
(correlação depende da distância)

$$\langle \Psi^\dagger(\vec{r}) \Psi(\vec{r}') \rangle = f(\vec{r} - \vec{r}') \\ \Rightarrow \langle C_k^\dagger C_{k'} \rangle = \langle n_{\vec{k}} \rangle \delta_{\vec{k}\vec{k}'}$$

Se o sistema tem menor simetria que um sistema homogêneo, por ex. um cristal que se repete então

$$\langle \Psi^\dagger(\vec{r}) \Psi(\vec{r}') \rangle = h(\vec{r}, \vec{r}') \quad \text{por exemplo } h(\vec{r}, \vec{r}') = h(\vec{r} + \vec{R}, \vec{r}' + \vec{R})$$

de modo que temos que assumir que a densidade de $\langle C_k^\dagger C_{k'} \rangle$ admite a possibilidade

$$\langle C_k^\dagger C_{k' = \vec{k} + \vec{Q}} \rangle \neq 0 \quad \text{onde } \vec{R} \cdot \vec{Q} = 2\pi$$

Para que soluções de simetria reduzida ocorram, é preciso que haja uma quebra espontânea de simetria do Hamiltoniano original. Caso contrário podemos até "provar" que um cristal "não existe"! Por exemplo, se pertencer de um Hamiltoniano com simetria translacional, sendo que o momento \vec{P} comuta com H , podemos escrever

$$\vec{P} = \hbar \sum_{\vec{k}} \vec{k} c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}} \Rightarrow H|\vec{P}\rangle = E_{\vec{P}}|\vec{P}\rangle \quad ([H, \vec{P}] = 0)$$

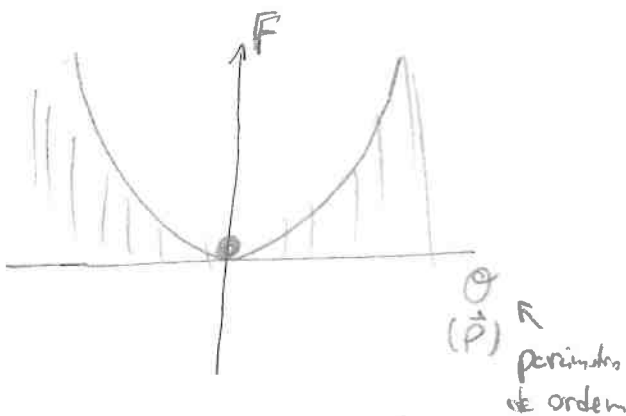
Nesse caso $\langle c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}+\vec{Q}} \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} [e^{-\beta H} c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}+\vec{Q}}] =$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{\vec{P}} e^{-\beta E_{\vec{P}}} \langle \vec{P} | c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}+\vec{Q}} | \vec{P} \rangle$$

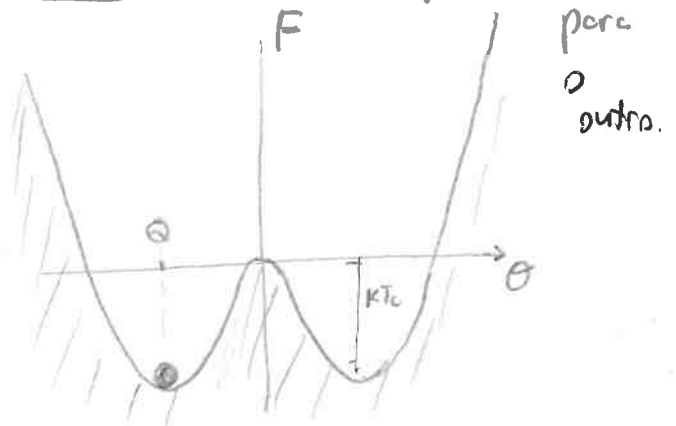
$$= \frac{1}{Z} \sum_{\vec{P}} e^{-\beta E_{\vec{P}}} \langle \vec{P} | \vec{P} - \vec{k} - \vec{Q} + \vec{k} \rangle = 0 \text{ se } \vec{Q} \neq 0 \quad (?)$$

$\delta_{\vec{P}, \vec{P}-\vec{Q}}$

A "prova" não se sustenta se a soma em \vec{P} puder ser "quebrada", de modo que apenas certas regiões do Espaço de Hilbert possam ser acessíveis determinada permissão e em um determinado intervalo de temperatura. Nesse caso \vec{P} não comuta "localmente" com determinados estados de H . Embora estados de "região" diferentes possam ser degenerados, não há como passar de um para o outro.



um mínimo acessível de F



dois mínimos de F acessíveis (quebra espontânea de simetria)

Exemplos de quebra espontânea de simetria

<u>Fenômeno</u>	<u>Parâmetro de ordem</u>	
Cristal	Onda de densidade	$\sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}+\mathbf{0}} \rangle$
Ferromagneto	Magnetização $\langle \hat{n}_{\uparrow} \rangle - \langle \hat{n}_{\downarrow} \rangle$	$\sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow})$
Condensado de Bose-Einstein	População do estado $\vec{k} = 0$	$\langle a_{\mathbf{k}=0}^{\dagger} \rangle$
Supercondutor	Correlação de pares de Cooper	$\langle c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle$

A quebra espontânea de simetria é definida pelo aparecimento de um parâmetro de ordem, uma quantidade que vai caracterizar as diferentes fases presentes no sistema. Em teorias de campo médio, é importante que o parâmetro de ordem seja incluído "à mão" para diferenciar as soluções resultante.

Ferromagnetismo: Modelo de Heisenberg na aprox. de campo médio.

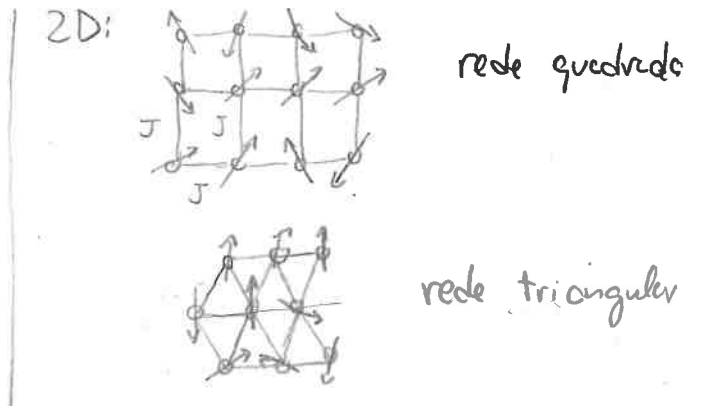
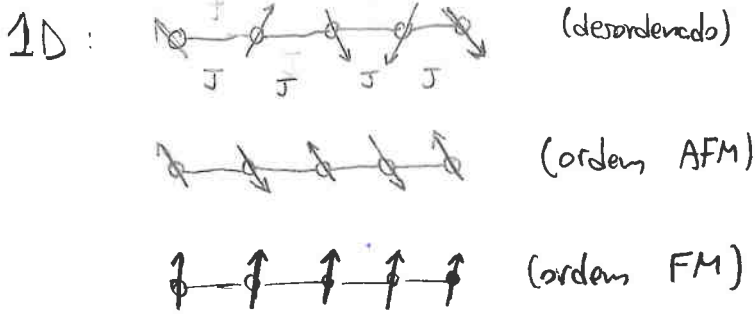
Consideremos o Hamiltoniano de Heisenberg para ferromagnetos iônicos

$$H = \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

$\vec{S}_i \rightarrow$ operador de spin para o íon no sítio i
 $\vec{S}_i = (S_{xi}, S_{yi}, S_{zi})$

Em geral, consideramos o caso de interações de primeira vizinhança (curto alcance) de modo que $J_{ij} = \begin{cases} J & \text{se } i, j \text{ são vizinhos} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases}$

$$\Rightarrow H = J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$



Note que $\begin{cases} J > 0 & \text{favorece estados com } \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j < 0 \text{ (alinhamento AFM)} \\ J < 0 & \text{favorece estados com } \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j > 0 \text{ (alinhamento FM)} \end{cases}$

Nota: alguns autores escrevem " $H = -\bar{J} \sum \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ "

Aproximaç es de campo m edio: ($J < 0 \rightarrow \underline{FM}$)

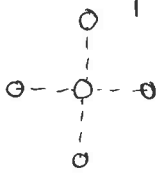
$$H \approx H_{MF} = -|J| \sum_{\langle ij \rangle} \langle \vec{S}_i \rangle \cdot \vec{S}_j + \vec{S}_i \cdot \langle \vec{S}_j \rangle - \langle \vec{S}_i \rangle \cdot \langle \vec{S}_j \rangle$$

"Simetria": $\langle \vec{S}_i \rangle = 0$? \mapsto assume quebra espont nea de simetria:

- $\langle \vec{S}_i \rangle \neq 0 \rightarrow$ escolhe uma dire es

Par metro de ordem, $\langle \vec{S}_i \rangle = \langle S_z \rangle \hat{e}_z \rightarrow$ total igual (FM)

(FM) Magnetiza es: $\rightarrow n N \langle S_z \rangle$ por spin



$n \rightarrow$ no de 1^{os} vizinhos

$N \rightarrow$ n mero de spins

Spin 1/2

$$\hat{H}_{MF} = -2|J|n \langle S_z \rangle \sum_i S_{zi} + |J|nN \langle S_z \rangle^2$$

$$S_z^2 |S_z^i\rangle = \pm \frac{1}{2} |S_z^i\rangle$$

Fun es de parti  o: $Z_{MF} = \text{Tr} [e^{-\beta H_{MF}}] = \sum_{S_{zi}=\pm} \langle S_{z1}, S_{z2}, \dots | e^{-\beta H_{MF}} | S_{z1}, S_{z2}, \dots, S_{zN} \rangle$

$$e^{-\beta H_{MF}} = e^{+2|J|\beta n \langle S_z \rangle \sum_i S_{zi}} e^{-\beta |J| n \langle S_z \rangle^2 N} = \prod_i e^{2|J|\beta n \langle S_z \rangle S_{zi}} e^{-\beta |J| n \langle S_z \rangle^2}$$

chamo $m \equiv |J| n \langle S_z \rangle$ logo:

$$Z_{MF} = (e^{+\beta m} + e^{-\beta m})^N (e^{-\beta m^2 / |J|})^N \Rightarrow \frac{\partial F}{\partial m} = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z_{MF}}{\partial m} = 0$$

$$\frac{\partial F}{\partial m} = -\frac{N}{\beta} \left[e^{-\frac{\beta m^2}{|J|}} (e^{+\beta m} - e^{-\beta m}) \beta + (e^{+\beta m} + e^{-\beta m}) \left(-\frac{2\beta m}{|J|} \right) e^{-\frac{\beta m^2}{|J|}} \right] = 0$$

$$\Rightarrow \frac{2m}{|J|} - \frac{e^{\beta m} - e^{-\beta m}}{e^{\beta m} + e^{-\beta m}} = 0 \quad m = |J| n \langle S_z \rangle$$

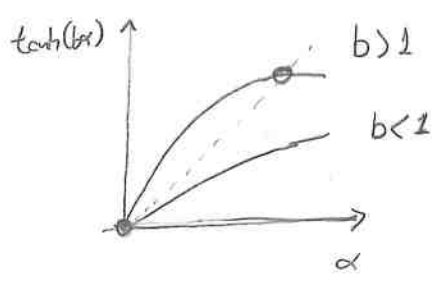
Eq. Transcendental

Soluções da Eq. Transcendental \leftrightarrow auto-consistência

$$\alpha = \tanh(b\alpha)$$

$$\alpha = \frac{2m = 2\langle S_z \rangle}{n|J|}$$

$$\frac{n|J|\beta}{2} = b$$



$\alpha = 0$ ($\langle S_z \rangle = 0$) é sempre solução

para $b > 1 \Rightarrow \beta > \frac{2}{n|J|}$ ou $T_c < \frac{n|J|}{2k_B} = T_c$

existe uma outra solução $\langle S_z \rangle \neq 0$

Magnetizações espontâneas:

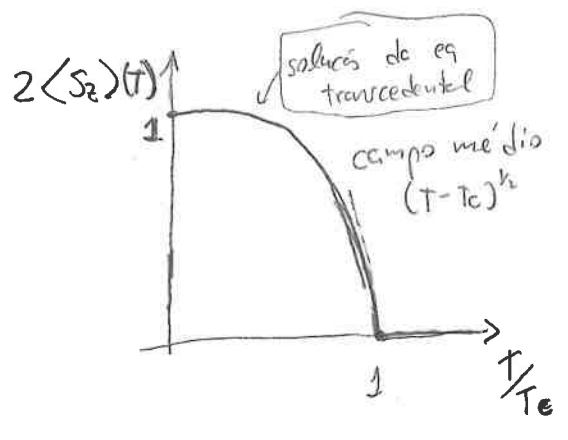
Expansões para α pequeno:

$$\alpha \approx b\alpha - \frac{1}{3}(b\alpha)^3$$

Soluções: $\alpha \approx \frac{1}{b} \sqrt{3(b-1)/b}$

$$b = T_c/T$$

$$1/b = T/T_c$$



ou $\langle S_z \rangle(T) \approx \frac{T}{2T_c} \sqrt{3(1-T/T_c)^{1/2}}$

próximo a T_c : $\alpha(T) \sim (T_c - T)^{1/2}$

Parâmetro de ordem

$$\langle S_z \rangle(T) \sim (T_c - T)^\beta$$

$$\beta = 1/2$$

campo médio

$$T = 0 \quad b \rightarrow \infty$$

$$\alpha \rightarrow 1$$

$$T \approx T_c \quad \langle S_z \rangle(T) \sim (T - T_c)^\beta$$

Modelo de Ising em 2D $\beta = 1/8$
(Onsager, 1944 \rightarrow "tour de force")