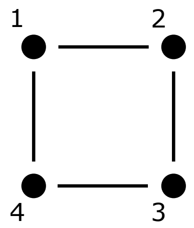
Fizika kondenzirane snovi

HEISENBERGOV MODEL

Rok Venturini

V nalogi želimo poiskati lastne funkcije in lastne energije za model štirih spinov.



Slika 1: Slika prikazuje položaj štirih spinov in njihovo medsebojno interakcijo.

Hamiltonov operator za izotropni Heisenbergov model zapišemo kot

$$H = J \sum_{i=1}^{4} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j.$$

Ker ima vsak spin dve možni konfiguraciji, se lahko sistem štirih spinov nahaja v 16 konfiguracijah. Hamiltonian bi tako lahko zapisali kot matriko velikosti 16×16 in z diagonalizacijo poiskali njegove lastne energije in lastne funkcije. Ker je tak postopek zamuden, bomo poiskali bazo, v kateri je Hamiltonian diagonalen. Poiščemo operatorje, ki komutirajo s Hamiltonovim operatorjem in delamo s tako bazo.

Najprej pokažemo, da operator celotnega spina $\mathbf{S} = \sum_{i=1}^{4} \mathbf{S}$ komutira s H

$$[H, \mathbf{S}]_{\alpha=x,y,z} = [H, S_\alpha] = [J \sum_{i=1,\beta}^{4} S_{i,\beta} S_{S_{i+1},\beta}, \sum_{j=1}^{4} S_{j,a}]$$

$$= J \sum_{i,j,\beta} \big([S_{i,\beta}, S_{j,\alpha}] S_{i+1,\beta} + S_{i,\beta} [S_{i+1,\beta}, S_{j,\alpha}] \big)$$

$$= J \sum_{i,j,\beta,\gamma} i\hbar \big(\delta_{i,j} \epsilon_{\beta\alpha\gamma} S_{i,\gamma} S_{i+1,\beta} + S_{i,\beta} \delta_{i+1,j} \epsilon_{\beta\alpha\gamma} S_{i+1,\gamma} \big)$$

$$= i\hbar J \sum_{i,\beta,\gamma} S_{i,\gamma} S_{i+1,\beta} (\epsilon_{\beta\alpha\gamma} + \epsilon_{\gamma\alpha\beta}) = 0.$$

V zgornjem izračunu smo upoštevali $[S_{\alpha,i} S_{\beta,j}] = i\hbar \epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_\gamma \delta_{ij}$ in lastnost tenzorja $\epsilon_{\beta\alpha\gamma} + \epsilon_{\gamma\alpha\beta} = 0$.

Vpeljemo še operator translacije T. Operator na stanje štirih spinov deluje tako, da premakne spine za eno mesto naprej: $T \left|\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\right\rangle = \left|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\right\rangle$. Operator translacije deluje na stanje $|\psi\rangle$ kot $T|\psi\rangle = e^{ika}|\psi\rangle$. Izberemo si take enote, da je $a = 1$ in $\hbar = 1$.

Ker je $T^4 |\psi\rangle = e^{4ik} |\psi\rangle = |\psi\rangle$, zavzame k vrednosti: $k = n\frac{\pi}{2} \in \{0, \pi/2, \pi, -\pi/2\}$, saj se omejimo na prvo Brillouinovo cono.

Lahko pokažemo, da operatorji H, S_z, S^2 in T komutirajo med seboj. Torej lahko najdemo lastne funkcije, ki so lstne funkcije vseh štirih operatorjev. Operatorji

$$\hat{S}_z |\psi\rangle = S_z |\psi\rangle ,$$

$$S^2 |\psi\rangle = S(S+1) |\psi\rangle ,$$

$$T |\psi\rangle = e^{ik} |\psi\rangle ,$$

imajo dobra kvantna števila S_z, S in k.

Sedaj bomo pokazali, da je Hamiltonian v bazi $|SS_zk\rangle$ diagonalen. Matrični elementi med stanji, ki se razlikujejo v vsaj enem kvantnem številu, so enaki nič. Pokažemo zgolj za spremembo kvantnega števila S_z, podobno bi lahko pokazali še za kvantni števili S in k z operatorjema S^2 in T:

$$\langle SS_zk| [H, S_z] |S'S'_zk'\rangle = \langle SS_zk| HS_z |S'S'_zk'\rangle - \langle SS_zk| S_zH |S'S'_zk'\rangle$$

$$= (S'_z - S_z) \langle SS_zk| H |S'S'_zk'\rangle = 0.$$

Celoten izraz je enak 0, saj je komutator $[H, S_z] = 0$. Torej je matrični element za različni vrednosti S_z in S'_z enak nič.

Poglejmo si stanja v produktni bazi, ki že imajo dober celoten S_z

$$\begin{aligned}
&S_z = 2 : |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\
&S_z = 1 : |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle , |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle , |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle , |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\
&S_z = 0 : |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle , |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle , |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle , |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle , |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle , |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \\
&S_z = -1 : |\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle , |\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle , |\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle , |\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \\
&S_z = -2 : |\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle
\end{aligned}$$

Ker je za stanje $|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ $S_z = 2$, vrednost S ne more biti manjša od 2, poleg tega S tudi ne more biti večji od 2, saj imamo le štiri spine. Stanje $|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ ima tako dober $S = 2$. Stanje $|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ ima tudi dober $k = 0$, saj je $T |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$. Torej lahko stanje $|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ v bazi $|SS_zk\rangle$ zapišemo kot: $|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = |220\rangle$.

Ostala stanja z $S = 2$ in dobrim S_z in k dobimo tako, da na stanje $|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ delujemo z operatorjem S_-. Operator je definiran kot $S_- = S_x - iS_y$ in deluje na stanja kot: $S_- |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$ in $S_- |\downarrow\rangle = 0$. Tako dobimo novo stanje

$$S_- |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = \sum_{i=1}^{4} S_{i,-} |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$$

$$= S_- |220\rangle = \sqrt{S(S+1) - S_z(S_z - 1)}\, |210\rangle = 2 |210\rangle$$

$$|210\rangle = \frac{1}{2}(|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle).$$

V izračunu smo predpostavili, da operator S_- ne spremeni kvantnih števil S in k stanja na katerega deluje, torej imata stanji $|SS_zk\rangle$ in $S_- |SS_zk\rangle$ enak S in k. To predpostavko bomo upravičili nekoliko kasneje. Na podoben način iz stanja $|210\rangle$ z operatorjem S_- ustvarimo novo stanje

$$S_- |210\rangle = \sqrt{2(2+1) - 1(1-1)}\, |200\rangle = \sqrt{6}\, |200\rangle =$$

$$= |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$$

$$|200\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle).$$

Slično dobimo še stanji

$$|2,-1,0\rangle = \frac{1}{2}(|\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle),$$

$$|2,-2,0\rangle = |\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle .$$

Poiskali smo 5 stanj, potrebujemo jih še 11.

Sedaj bomo pokazali, da sta energiji stanj $|SS_zk\rangle$ in $|S,S_z-1,k\rangle$ enaki. Ker je $[H,S_-]=[H,S_x-iS_y]=0$, lahko zapišemo

$$[H,S_-]\,|SS_zk\rangle = 0 = HS_-\,|SS_zk\rangle - S_-H\,|SS_zk\rangle = H(S_-\,|SS_zk\rangle) - E(SS_zk)(S_-\,|SS_zk\rangle).$$

Za zadnjim enačajem prepoznamo Schrödingerjevo enačbo. Iz zgornje enačbe lahko vidimo, da je stanje $S_-\,|SS_zk\rangle$ spet lastno stanje H z enako energijo kot stanje $|SS_zk\rangle$, torej sta energiji obeh stanj enaki. Ker ima tako vseh 5 izračunanih stanj enako energijo, izračun $H\,|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ zadošča tudi za ostale

$$H\,|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = J\sum_{i=1}^{4}[S_i^zS_{i+1}^z + \frac{1}{2}\cancel{(S_i^+S_{i+1}^- + S_i^-S_{i+1}^+)}]\,|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = J\sum_{i=1}^{4}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\,|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = J\,|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle .$$

Podobno kot sta enaki energiji stanj $|SS_zk\rangle$ in $S_-\,|SS_zk\rangle$, imata stanji tudi enaki vrednosti S in k, kar sledi iz $[T,S_-]=0$ in $[S^2,S_-]=0$. S tem smo sedaj opravičili predpostavko, da kvantni števili S in k ostaneta nespremenjeni, ko smo z operatorjem S_- ustvarili nova stanja.

Iščemo nova lastna stanja H. Iz produktnih stanj z $S_z=1$ tvorimo stanje z dobrim k:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}(|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + e^{ik}\,|\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + e^{2ik}\,|\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + e^{3ik}\,|\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle).$$

Temu stanju pravimo Blochovo stanje. Ker smo to stanje uganili, preverimo, da je to stanje res lastno stanje operatorja translacije

$$T\,|\psi\rangle = e^{ik}\,|\psi\rangle .$$

Tako smo za različne vrednosti k dobili tri nova stanja (stanje z $k=0$ že imamo: $|210\rangle$):

$$|1,1,-\pi/2\rangle = \frac{1}{2}(|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - i\,|\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + i\,|\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle),$$
$$|1,1,\pi/2\rangle = \frac{1}{2}(|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + i\,|\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - i\,|\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle),$$
$$|1,1,\pi\rangle = \frac{1}{2}(|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle).$$

Stanje z nižjim S_z spet dobimo tako, da delujemo z S_-:

$$S_-\,|11k\rangle = \sqrt{2}\,|10k\rangle$$

$$= \frac{1}{2}\big[(1+e^{ik})(|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + e^{ik}\,|\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + e^{2ik}\,|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + e^{3ik}\,|\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) + (1+e^{2ik})(|\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + e^{ik}\,|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle)\big].$$

Tako dobimo še tri stanja:

$$\begin{aligned}
|1,0,-\pi/2\rangle &= \frac{1}{2}(|{\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow}\rangle - i\,|{\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}\rangle - |{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow}\rangle + i\,|{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow}\rangle) \\
|1,0,\pi/2\rangle &= \frac{1}{2}(|{\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow}\rangle + i\,|{\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}\rangle - |{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow}\rangle - i\,|{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow}\rangle) \\
|1,0,\pi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}\rangle - |{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}\rangle).
\end{aligned}$$

Če z operatorjem S_- delujemo na stanja $|10k\rangle$, dobimo še stanja: $|1,-1,-\pi/2\rangle$, $|1,-1,\pi/2\rangle$ in $|1,-1,\pi\rangle$. Tako imamo sedaj skupaj 5+9 stanj, potrebujemo še 2. Stanjem z $S_z=-1,0,1$ pravimo enomagnonska vzbujena stanja feromagneta. Kot vemo že od prej, imajo ta stanja enako energijo. Ta je

$$E(S=1,S_z,k) = E(S=2,S_z,0) - J\sin^2\frac{k}{2} = J\Big(1-\sin^2\frac{k}{2}\Big),$$

ki zavzame vrednosti: 0 za $k=\pi$ in $J/2$ za $k=\pm\pi/2$.

Preostali dve stanji imata $S_z=0$ (imamo že $|200\rangle$, $|1,0,-\pi/2\rangle$, $|1,0,\pi/2\rangle$ in $|10\pi\rangle$). Iz šestih produktnih stanj z $S_z=0$ lahko tvorimo sistem stanj z dobrim k:

$$\begin{aligned}
|a\rangle &= \frac{1}{2}(|{\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow}\rangle + |{\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}\rangle + |{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow}\rangle + |{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow}\rangle), \quad k=0 \\
|b\rangle &= \frac{1}{2}(|{\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow}\rangle + i\,|{\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}\rangle - |{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow}\rangle - i\,|{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow}\rangle), \quad k=\frac{\pi}{2} \to |1,0,\pi/2\rangle \\
|c\rangle &= \frac{1}{2}(|{\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow}\rangle - |{\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}\rangle + |{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow}\rangle - |{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow}\rangle), \quad k=\pi \to |00\pi\rangle \\
|d\rangle &= \frac{1}{2}(|{\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow}\rangle - i\,|{\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}\rangle - |{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow}\rangle + i\,|{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow}\rangle), \quad k=-\frac{\pi}{2} \to |1,0,-\pi/2\rangle \\
|e\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}\rangle + |{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}\rangle), \quad k=0 \\
|f\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}\rangle - |{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}\rangle), \quad k=\pi \to |10\pi\rangle\,.
\end{aligned}$$

Iz stanj $|a\rangle$ in $|e\rangle$ sestavimo novo stanje

$$|200\rangle = \frac{2\,|a\rangle + \sqrt{2}\,|e\rangle}{\sqrt{6}}.$$

To stanje že imamo. Novo stanje naredimo tako, da zapišemo stanje orotognalno na $|200\rangle$

$$|000\rangle = \frac{\sqrt{2}\,|a\rangle - 2\,|e\rangle}{\sqrt{6}} = \frac{1}{\sqrt{12}}(|{\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow}\rangle+|{\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}\rangle+|{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow}\rangle+|{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow}\rangle) - \frac{1}{\sqrt{3}}(|{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}\rangle+|{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}\rangle).$$

Stanje $|000\rangle$ ima dobra S_z in $k=0$, saj smo ga sestavili iz stanj $|a\rangle$ in $|e\rangle$, ki imata dobra S_z in k. To stanje ima zagotovo tudi vrednost kvantnega števila $S=0$, saj bi za vrednost $S=1$ dobili tri stanja, vendar jih toliko ne potrebujemo.

Stanje $|c\rangle$ se ne meša s stanjema $|a\rangle$ in $|e\rangle$, saj ima drugačen k. Dobili smo novo stanje $|00\pi\rangle$. Tudi za to stanje je $S=0$ iz istega razloga kot prej.

Izračunajmo še energiji stanj $|200\rangle$ in $|000\rangle$:

$$H\,|{\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow}\rangle = J\Big(\frac{1}{4}-\frac{1}{4}+\frac{1}{4}-\frac{1}{4}\Big) + \frac{1}{2}J\big(\,|{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}\rangle + |{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}\rangle\,\big).$$

Enako dobimo za $H\left|\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\right\rangle$, $H\left|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\right\rangle$ in $H\left|\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\right\rangle$. Izračunamo še za:

$$H\left|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\right\rangle = J\Big(-\frac{1}{4}-\frac{1}{4}-\frac{1}{4}-\frac{1}{4}\Big)+\frac{1}{2}J\big(\left|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\right\rangle+\left|\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\right\rangle+\left|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\right\rangle+\left|\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\right\rangle\big).$$

Enako dobimo za $H\left|\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\right\rangle$. Torej velja

$$\begin{aligned} H\left|a\right\rangle &= \sqrt{2}J\left|e\right\rangle, \\ H\left|e\right\rangle &= -J\left|e\right\rangle+\sqrt{2}J\left|a\right\rangle. \end{aligned}$$

Zapišemo matriko

$$\begin{pmatrix} \left\langle a\right|H\left|a\right\rangle & \left\langle a\right|H\left|e\right\rangle \\ \left\langle e\right|H\left|a\right\rangle & \left\langle e\right|H\left|e\right\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}J \\ \sqrt{2}J & -J \end{pmatrix},$$

ki ima lastni vrednosti J in $-2J$, ki jima pripadata lastna vektorja $(2,\sqrt{2})$ in $(\sqrt{2},-2)$. Stanje $\left|200\right\rangle$ ima tako energijo J, stanje $\left|000\right\rangle$ pa energijo $-2J$.

Za $J<0$ je sistem spinov feromagnet, saj ima v tem primeru osnovno stanje energijo $E=J$ in je oblike $\left|\psi\right\rangle = \left|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\right\rangle = \left|220\right\rangle$. To je sicer petkrat degenerirano.

Za $J>0$ je antiferomagnet, osnovno stanje ima energijo $E=-2J$ in je oblike $\left|\psi\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{12}}(\left|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\right\rangle+\left|\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\right\rangle+\left|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\right\rangle+\left|\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\right\rangle)-\frac{1}{\sqrt{3}}(\left|\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\right\rangle+\left|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\right\rangle)$. Zanimivo je, da osnovno stanje antiferomagneta nima le kombinacije stanj $\left|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\right\rangle$ in $\left|\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\right\rangle$, temveč tudi ostale člene, ki jih ne bi ravno pripisali feromagnetu.