Wstęp do Kwantowej Teorii Wielu Ciał

Zestaw 5. Hamiltonian Heisenberga.

5.1. Niech $\hat{S}^x, \hat{S}^y, \hat{S}^z$ to operatory spinu elektronowego, które zdefiniowane są następująco (założono $\hbar = 1$)

$$\hat{S}^x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$
$$\hat{S}^y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$
$$\hat{S}^z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Proszę pokazać, że spełniają one następujące reguły komutacji

$$[\hat{S}^x, \hat{S}^y] = i\hat{S}^z,$$
$$[\hat{S}^y, \hat{S}^z] = i\hat{S}^x,$$
$$[\hat{S}^z, \hat{S}^x] = i\hat{S}^y.$$

5.2. W oparciu o operatory z zadania 5.1 wprowadźmy operatory zwiększania i zmniejszania spinu (ladder operators)

$$\hat{S}^+ = \hat{S}^x + i\hat{S}^y,$$
$$\hat{S}^- = \hat{S}^x - i\hat{S}^y.$$

Proszę pokazać, że:

1) dla spinu $S = 1$ spełniają one równania

$$\hat{S}^+|-\rangle = |+\rangle, \quad \hat{S}^+|+\rangle = 0,$$
$$\hat{S}^-|-\rangle = 0, \quad \hat{S}^-|+\rangle = |-\rangle$$

gdzie $|\pm\rangle$ to stany własne operatora $\hat{S}^z$.

2) podlegają regułą komutacji

$$[\hat{S}^+, \hat{S}^-] = 2\hat{S}^z,$$
$$[\hat{S}^z, \hat{S}^+] = \hat{S}^+,$$
$$[\hat{S}^z, \hat{S}^-] = -\hat{S}^-.$$

5.3. Hamiltonian Heisenberga ma postać

$$\hat{H} = -J \sum_{j,\delta} \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+\delta} = -J \sum_{j,\delta} \left[S_j^x S_{j+\delta}^x + S_j^y S_{j+\delta}^y + S_j^z S_{j+\delta}^z \right],$$

gdzie i numeruje węzły sieci, zaś δ określa pozycję najbliższych sąsiadów. Wprowadzając anizotropię energii wymiany Hamiltonian ten możemy zapisać w postaci

$$\hat{H} = -J_{||} \sum_{j,\delta} S_j^z S_{j+\delta}^z - J_{\perp} \sum_{j,\delta} S_j^+ S_{j+\delta}^-.$$

gdzie pierwsza cześć stanowi tzn. Hamiltonian Isinga, zaś druga to tzn. Hamiltonian XY.
Dla Hamiltonianu Isinga w postaci

$$\hat{H}_I = -J_{||} \sum_{j,\delta} S_j^z S_{j+\delta}^z$$

zastosuj model pola średniego i wyznacz energię swobodną $\Omega = -k_B T \ln(Z)$, gdzie $Z = Tr[\exp(-\beta \hat{H}_I)]$. Minimalizując energie swobodną wyznacz równanie na średnie namagnesowanie na węzeł.
Rozpatrz przypadki: (a) $S = \frac{1}{2}$, (b) S dowolne

5.4. Hamiltonian XY ma postać

$$\hat{H}_{XY} = -J_{\perp} \sum_{j,\delta} S_j^+ S_{j+\delta}^-.$$

- Proszę wyprowadzić reguły antykomutacji dla operatorów $\hat{S}_l^+$ oraz $\hat{S}_j^-$, tzn. policzyć $\{\hat{S}_l^+, \hat{S}_j^+\}$. Czy tak zdefiniowane operatory spełniają fermionowe reguły antykomutacji ?
- Aby rozwiązać problem z Hamiltonianem XY w 1D dokonaj transformaty Wignera-Jordana, tzn.

$$\hat{d}_j = e^{i\phi_j} \hat{S}_j^-,$$
$$\hat{d}_j^\dagger = e^{-i\phi_j} \hat{S}_j^+,$$

gdzie

$$\phi_j = \pi \sum_{l=1}^{j-1} \left(\frac{1}{2} + \hat{S}_l^z \right).$$

Pokaż, że operatory $\hat{d}_l$ oraz $\hat{d}_j^\dagger$ spełniają fermionowe reguły antykomutacji, a następnie zapisz Hamiltonian H_{XY} w języku tych operatorów.
- Oblicz energię układu dokonując przejścia do przestrzeni wektora falowego

$$\hat{d}_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikR_j} \hat{d}_k,$$
$$\hat{d}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikR_j} \hat{d}_j.$$

5.5. Rozpatrzmy Hamiltonian Heisenberga w postaci

$$\hat{H} = -\sum_{ij,i\neq j} J_{ij}\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j - g\mu_B H_{ext}\sum_i \hat{S}_i^z.$$

Transformata Holsteina - Primakoffa (założono $\hbar = 1$)

$$\begin{aligned}
\hat{S}_i^+ &= \sqrt{2S}\sqrt{1-\frac{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i}{2S}}\hat{a}_i, \\
\hat{S}_i^- &= \sqrt{2S}\hat{a}_i^\dagger\sqrt{1-\frac{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i}{2S}}, \\
\hat{S}_i^z &= S - \hat{n}_i = S - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i
\end{aligned}$$

pozwala na wyznaczenie wzbudzeń magnonowych opisanych operatorami kreacji i anihilacji $\hat{a}_i^\dagger(\hat{a}_i)$, które podlegają bozonowym regułom komutacji.
Dla $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \ll 2S$ występujący w powyższych równaniach pierwiastek kwadratowy możemy przybliżyć rozwinięciem

$$\left(1-\frac{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i}{2S}\right) = 1 - \frac{1}{2}\frac{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i}{2S} + \frac{1}{8}\left(\frac{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i}{2S}\right)^2 + \ldots$$

Ograniczając się do pierwszego z wyrazów rozwinięcia (spin wave approximation) transformata Holsteina - Primakoffa przyjmuje postać

$$\begin{aligned}
\hat{S}_i^+ &= \sqrt{2S}\hat{a}_i, \\
\hat{S}_i^- &= \sqrt{2S}\hat{a}_i^\dagger, \\
\hat{S}_i^z &= S - \hat{n}_i = S - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i.
\end{aligned}$$

Posługując się zredukowaną transformata Holsteina - Primakoffa:

- proszę pokazać, że operatory $\hat{a}_i^\dagger(\hat{a}_i)$ spełniają bozonowe reguły komutacji,
- proszę zapisać Hamiltonian Heisenberga w reprezentacji operatorów $\hat{a}_i^\dagger(\hat{a}_i)$,
- dokonując przejścia do przestrzeni odwrotnej (analogicznie jak w zad. 5.4) proszę wyznaczyć energie wzbudzeń fal spinowych (magnonów),
- proszę wyprowadzić formułę na magnetyzację z uwzględnieniem wzbudzeń magnonowych.

P. Wójcik,