1.13. Спиновые системы. Модель Гейзенберга

Модель Гейзенберга.

Связь между бозонными и спиновыми моделями

Модель Гейзенберга

- Анизотропная *XXZ*-модель во внешнем продольном поле:

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{\langle ij\rangle}\left(J_{\perp}\left(S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y\right) + J_{\parallel} S_i^Z S_j^Z\right) - H^Z \sum_i S_i^Z$$

- *Смена знака у поперечной компоненты обменного взаимодействия не меняет спектра системы,* если взаимодействие в системе осуществляется только между ближайшими соседями. Физические свойства системы – ферромагнетизм или антиферромагнетизм –определяются только знаком продольной составляющей
- При отсутствии внешнего поля основное состояние является ферромагнитным, все спины имеют только максимальные проекции, и энергия системы равна $E_0 = -N_a Z J_{\parallel} S^2/2$
- Для целого спина в антиферромагнитных моделях в спектре возбуждений имеется щель (*щель Холдейна*), в то время как для полуцелого спина возбуждения, как правило, – *спиновые волны* с линейным законом дисперсии

Модель Гейзенберга

- Рассмотрим *XXX*-модель без внешнего поля:

$$H = -\frac{J}{2}\sum_{\langle ij\rangle}\left(S_i^z S_j^z + \frac{1}{2}\left(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+\right)\right)$$

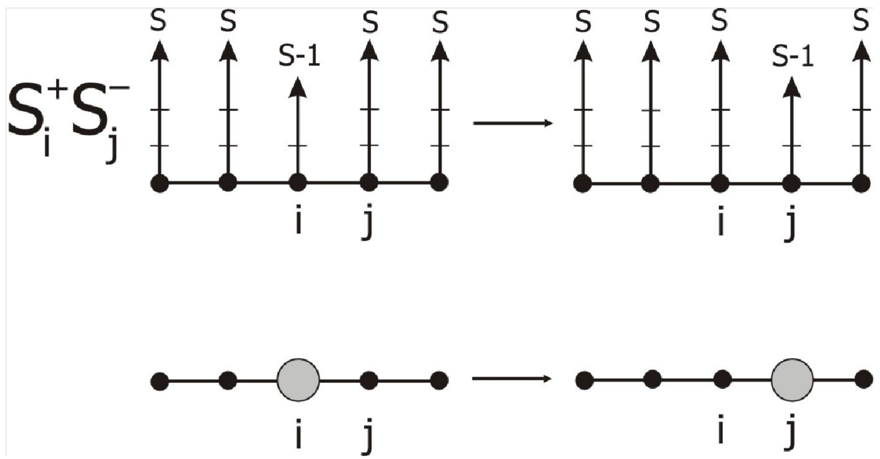
- Для описания антиферромагнитного состояния следует ввести две подрешетки, вложенные друг в друга, в одной из которых все спины направлены, в основном, вверх (подрешетка "+"), а в другой – вниз (подрешетка "–"). Суммарный спин системы будет равен нулю в основном состоянии, но в каждой из подрешеток он принимает макроскопическое значение – *неелевское состояние*
- Вклад в энергию основного состояния от поперечных компонент взаимодействия в антиферромагнитном случае будет мал, *но не равен нулю:*

$$E_0 \approx -\frac{N_a Z \left|J_{\parallel}\right| S^2}{2}$$

- Причина различий – в нулевых колебаниях элементарных возбуждений в антиферромагнетике и все большем их вкладе в основное состояние при понижении размерности

Модель Гейзенберга

- Ферромагнитная модель Гейзенберга – *магноны*:



- Для описания магнонов вводятся новые операторы:

$$a_i^+ = \frac{S_i^-}{\sqrt{2S}}; \quad a_i = \frac{S_i^+}{\sqrt{2S}}; \quad a_i^+ a_i = n_i = S - S_i^Z$$

- Спектр магнонов:

$$H = E_0 + \sum_q \hbar\omega(q) a_q^+ a_q \,; \quad \omega(q) = SJ \sum_j \left(1 - e^{i\vec{q}\vec{r}_j}\right) \approx SJa^2q^2{}_{|q\to 0}$$

Модель Гейзенберга

- Антиферромагнитная модель Гейзенберга:

$$\text{для подрешетки } "+": \quad a_i^+ = \frac{S_i^-}{\sqrt{2S}}; \quad a_i = \frac{S_i^+}{\sqrt{2S}};$$

$$\text{для подрешетки } "-": \quad a_i^+ = \frac{S_i^+}{\sqrt{2S}}; \quad a_i = \frac{S_i^-}{\sqrt{2S}}$$

- С учетом малости возбуждений,

$$H = E_0 + \sum_q \left[\hbar\omega(q)\left(a_q^+ a_q + \frac{1}{2}\right) - \hbar A_q\right]$$

$$\omega(q) = \sqrt{A_q^2 - B_q^2} \approx \frac{SJZaq}{\sqrt{3}}\bigg|_{q\to 0}; \quad A_q = SJZ; \quad B_q = SJ\sum_j e^{i\vec{q}\vec{r}_j}$$

- Бозевские возбуждения для антиферромагнетика имеют при малых значениях импульса линейный спектр, их называют *спиновыми волнами*
- Скорость спиновых волн:

$$v = SJZa/\sqrt{3}$$

Спиновая цепочка со спином 1

$$H = -\frac{J_\perp}{2}\sum_{\langle ij\rangle}\left(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+\right) + J_\parallel \sum_{\langle ij\rangle} S_i^Z S_j^Z + U\sum_i \left(S_i^Z\right)^2$$

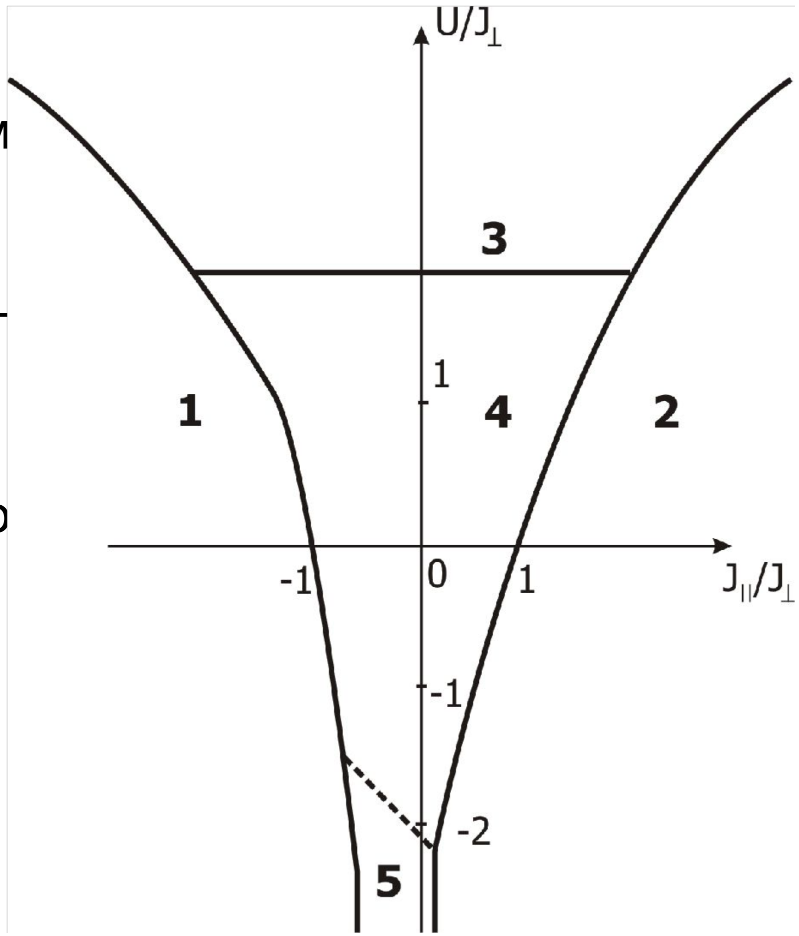
- **1** – ферромагнетик:

$$\langle S^Z\rangle = \pm N_a$$

- **2** – антиферромагнетик: и в основном и в первом возбужденном состоянии

- **3** – щель Холдейна: состояние со щел в спектре; в первом возбужденном состоянии $\langle S^Z\rangle = \pm 1$
- **4** – спиновая *XY*-жидкость: бесщелево состояние; в первом возбужденном состоянии $\langle S^Z\rangle = \pm 1$
- **5** – *spin-1/2-like XY*-фаза: в основном состоянии $\langle S^Z\rangle = 0$ в первом возбужденном состоянии

$$\langle S^Z\rangle = \pm 2$$



Связь между бозонной и спиновыми моделями

- Одним из предельных случаев бозонной модели Хаббарда является *XXZ*-модель
- Гамильтониан hard-core-модели:

$$H = -\sum_{i\neq j} t_{ij} a_i^+ a_j + \sum_{i\neq j} V_{ij} n_i n_j - \mu \sum_k n_k$$

- Преобразование Холстейна – Примакова:

$$S_i^Z = \frac{1}{2} - a_i^+ a_i; \quad a_i^+ = S_i^X - iS_i^Y; \quad a_i = S_i^X + iS_i^Y$$

- Новые операторы выражаются через матрицы Паули:

$$S^X = \frac{1}{2}\sigma^X; \quad S^Y = \frac{1}{2}\sigma^Y; \quad S^Z = \frac{1}{2}\sigma^Z$$

- рождение или уничтожение бозона на узле i эквивалентно, соответственно, уменьшению или увеличению z-проекции спина на узле i, т.е.

$$S_i^- = a_i^+; \quad S_i^+ = a_i$$

Связь между бозонной и спиновыми моделями

- Гамильтониан hard-core-модели переходит в *XXZ*-гамильтониан:

$$H = -\sum_{i \neq j} t_{ij}(S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y) + \sum_{i \neq j} V_{ij} S_i^Z S_j^Z + \sum_{i \neq j} V_{ij}\left(\frac{1}{4} - S_i^Z\right) - \mu \sum_i \left(\frac{1}{2} - S_i^Z\right)$$

- С некоторыми переобозначениями:

$$H = -t\sum_{i \neq j}(S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y) + V\sum_{i \neq j} S_i^Z S_j^Z - \mu' \sum_i \left(\frac{1}{2} - S_i^Z\right)$$

- Гамильтониан является *XXZ*-моделью для спина 1/2 с амплитудой взаимодействия t в плоскости xy, и V – по оси z. При t=–V модель описывает изотропный гейзенберговский ферромагнетик; если t>0, V>0, то модель описывает ферромагнитное упорядочение в xy-плоскости и антиферромагнитное – по оси z.

Соответствие между моделью Хаббарда и спиновыми моделями

- Соответствие между моделью Хаббарда и спиновыми моделями справедливо только в пределе сильного отталкивания на узле:

$$H = -t \sum_{i \neq j, \sigma} a_{i\sigma}^{+} a_{j\sigma} + U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}; \quad t/U \ll 1$$

- Разделим гамильтониан на несколько слагаемых:

$$H = T_d + T_h + T_{mix} + V$$

$$V = U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow};$$

$$T_d = -t \sum_{i \neq j, \sigma} \left(n_{i,-\sigma} a_{i\sigma}^{+} a_{j\sigma} n_{j,-\sigma} + h.c. \right);$$

$$T_h = -t \sum_{i \neq j, \sigma} \left((1 - n_{i,-\sigma}) a_{i\sigma}^{+} a_{j\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + h.c. \right);$$

$$T_{mix} = -t \sum_{i \neq j, \sigma} \left((1 - n_{i,-\sigma}) a_{i\sigma}^{+} a_{j\sigma} n_{j,-\sigma} + n_{i,-\sigma} a_{i\sigma}^{+} a_{j\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + h.c. \right)$$

Соответствие между моделью Хаббарда и спиновыми моделями

- Эффективный гамильтониан:

$$H_{eff} = e^{-iQ} H e^{iQ};$$

$$H_{eff} = -t \sum_{i \neq j, \sigma} \left((1 - n_{i,-\sigma}) a_{i\sigma}^{+} a_{j\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + h.c. \right) + \frac{2t^2}{U} \sum_{ij} \left(\vec{S}_i \vec{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right)$$

- Эффективный гамильтониан – предельный случай гамильтониана Хаббарда при больших U. Его называют также t-J-*моделью*, характеризующейся тем, что в узельном базисе этой модели отсутствуют конфигурации с двойным заполнением узла
- При половинном заполнении, когда на каждый узел приходится один электрон, первое слагаемое в становится равным нулю, и модель становится точной изотропной антиферромагнитной моделью Гейзенберга для спина 1/2:

$$H_{eff} = \frac{2t^2}{U} \sum_{ij} \left(\vec{S}_i \vec{S}_j - \frac{1}{4} \right)$$