Øving 12, TFY4210 Anvendt Kvantemekanikk, Vår 2006

Oppgave 1
I denne oppgaven skal vi se på geometrisk frustrasjon på en Heisenberg modell definert på et kvadratisk gitter. Vi tar utgangspunkt i tilfellet der en kvantemekanisk ferromagnetisk Heisenberg modell med nærmeste nabo kobling J_1 modifiseres til også å inkludere en nest-nærmeste nabo anti-ferromagnetisk Ising kobling J_2. Systemet er definert ved Hamilton-operatoren

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} [S_{iz}S_{jz} + S_{i,+}S_{j,-}] - J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} S_{iz}S_{jz},$$

der $J_1 < 0; J_2 < 0$. Her betyr $\langle i,j \rangle$ at i,j er nærmeste naboer, og $\langle\langle i,j \rangle\rangle$ betyr at i,j er nest-nærmeste naboer på det kvadratiske gitteret. Modellen har den egenskapen at enhver $J_2 < 0$ destabiliserer Neel-ordningen vi finner i systemet ved $T = 0$ og $J_2 = 0$. Dette skyldes en geometrisk frustrasjon idet J_1 favoriserer ferromagnetisk ordnede nest-nærmeste nabo spinn, mens J_2 favoriserer anti-ferromagnetisk ordnede nest-nærmeste nabo spinn.
Vi ser nå på en deformasjon av modellen over, til følgende Hamilton-operator

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} [S_{iz}S_{jz} + S_{i,+}S_{j,-}] - J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} S_{i,+}S_{j,-},$$

der $J_1 < 0; J_2 < 0$. Det vil si at istedet for at vi har en anti-ferromagnetisk Ising kobling mellom nest-nærmeste naboer, har vi en anti-ferromagnetisk XY-kobling.
a) Bruk spinn-bølge analyse

$$\begin{aligned} S_{i,z} &= S - a_i^\dagger a_i, \\ S_{i,+} &= \sqrt{2S}\sqrt{1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}}\; a_i, \\ S_{i,-} &= \sqrt{2S}\; a_i^\dagger \sqrt{1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}}, \end{aligned} \tag{1}$$

i uavhengig magnon-approksimasjon, sammen med Fourier-dekomponering av magnon operatorene,

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{q}} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i a_i\; e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \\ a_{\mathbf{q}}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i a_i^\dagger\; e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \end{aligned} \tag{2}$$

til å vise at Hamilton-operatoren kan skrives på formen

$$H = \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}}\; a_{\mathbf{q}}^\dagger\; a_{\mathbf{q}}, \tag{3}$$

og bestem derved $\omega_{\mathbf{q}}$. Bestem hvor i $\mathbf{q}$-rommet $\omega_{\mathbf{q}} = 0$.
b) Er en vilkårlig liten $|J_2|$ nok til å destabilisere Neel-tilstanden vi finner ved $J_2 = 0$?
c) Beregn varmekapasiteten til systemet ved lave temperaturer.
d) Beregn magnetiseringen

$$M = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_{i,z} \rangle,$$

og undersøk hva som skjer når $|J_1| - |J_2|$ skifter fortegn.