Heisenberg modell med geometrisk frustrasjon.

Vi skal se på en ~~anti~~ ferromagnetisk Heisenberg modell med nest-nærmeste nabo vekselvirkning: anti-ferromagnetisk vekselvirkning av Ising-type

$$H = -J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S_i} \cdot \vec{S_j} - J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} S_{iz} \cdot S_{jz}$$

$J_1 > 0$; $J_2 < 0$; $\langle ij \rangle$: nn
$\langle\langle i,j \rangle\rangle$: nnn

Spinn-bølge analyse av ferromagnetisk ordnet tilstand:

$$\left.\begin{aligned} S_{iz} &= S - a_i^+ a_i \\ S_i^- &\cong \sqrt{2S}\, a_i^+ \\ S_i^+ &\cong \sqrt{2S}\, a_i \end{aligned}\right\}$$ Magnon-representasjon av spinn-fluktuasjonene.

$$\vec{S_i} \cdot \vec{S_j} = S_{iz} S_{jz} + S_i^+ S_j^-$$

$$S_{iz} S_{jz} = (S - a_i^+ a_i)(S - a_j^+ a_j)$$

$$= S^2 - S(a_i^+ a_i + a_j^+ a_j)$$

$$= S^2 - 2S\, a_i^+ a_i$$

$$S_i^+ S_j^- = 2S\, a_i a_j^+ = 2S\, a_i^+ a_j$$

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \left(S^2 - 2S\, a_i^+ a_i + 2S\, a_i^+ a_j \right)$$

$$+ |J_2| \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} (S - a_i^+ a_i)(S - a_j^+ a_j)$$

$$= -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S^2 + |J_2| \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} S^2$$

$$+ 2J_1 S \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^+ a_i - 2J_1 S \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^+ a_j$$

$$- 2S|J_2| \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} a_i^+ a_i$$

$$= E_0 + 2J_1 S z_1 \sum_{\vec{q}} a_q^+ a_q$$

$$- 2J_1 S \sum_{\vec{q}} \gamma_q\, a_q^+ a_q$$

$$- 2S |J_2| z_2 \sum_q a_q^+ a_q$$

z_1: # nærmeste nabor
z_2: # næst-nærmeste nabor

$$= E_0 + \sum_{q} \omega_q\, a_q^+ a_q$$

$$\omega_q = 2J_1 S (z_1 - \gamma_q) - 2S |J_2| z_2$$

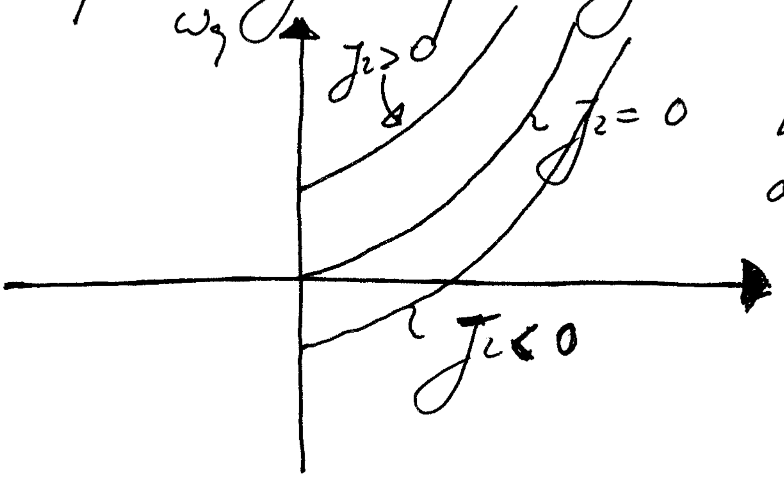
$$\gamma_q = 2(\cos q_x + \cos q_y)$$

$$z_1 = 4$$

$$z_1 - \gamma_q = 4 - 2\left(2 - \frac{q^2}{2}\right)$$

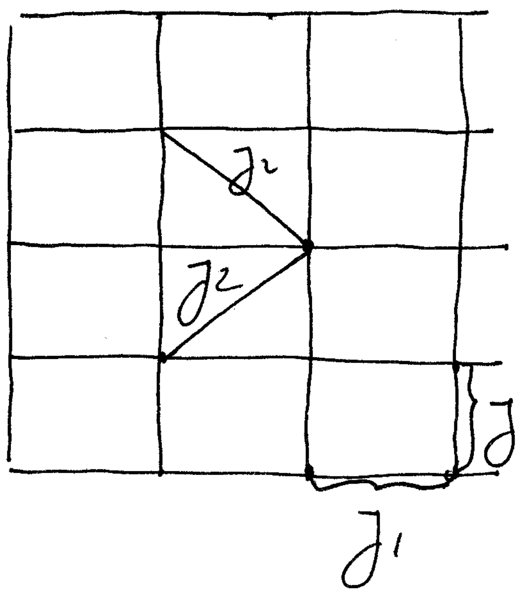
$$= q^2$$

$$\omega_q = 2J_1 S q^2 - 2|J_2| S z_2$$



En antiferromagnetisk Ising kobling J_2 destabiliserer Néel.
En ferromagnetisk J_2 stabiliserer Néel

Så fort $J_2 < 0$ får vi en ustabilitet i z-ordningen ved $T=0$ i Heisenberg ferromagneten.



Vi ser nå på det tilfellet at J_2 representerer en XY-kobling

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j\rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + |J_2| \sum_{\langle\langle i,j\rangle\rangle} S_i^{+} \cdot S_j^{-}$$

Vi innfører magnon-operatorene igjen, for å undersøke stabiliteten til den ferromagnetisk ordnede grunntilstanden vi finner når $J_2 = 0$.

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j\rangle} S^2$$

$$+ 2J_1 S \sum_{\langle i,j\rangle} a_i^{+} a_i - 2J_1 S \sum_{\langle i,j\rangle} a_i^{+} a_j$$

$$+ 2S|J_2| \sum_{\langle\langle i,j\rangle\rangle} a_i^{+} a_j$$

$$= E_0 + 2J_1 S z_1 \sum_{\vec{q}} a_q^{+} a_q - 2J_1 S \sum_{\vec{q}} \gamma_q a_q^{+} a_q$$

$$+ 2|J_2| S \sum_{\vec{q}} b_q a_q^{+} a_q$$

$$\gamma_q = 2\left(\cos q_x + \cos q_y\right)$$

$$b_q = 4 \cos(q_x) \cos(q_y)$$

$$H = E_0 + \sum_q \omega_q a_q^+ a_q$$

$J_2 < 0$:

$$\omega_q = 2J_1 S(z_1 - \gamma_q) + 2|J_2| S b_q$$

$J_2 > 0$:

$$\omega_q = 2J_1 S(z_1 - \gamma_q) - 2|J_2| S b_q$$

i) Antiferromagnetisk XY-kobling styrker (J_2)
Neél ordningen

ii) Ferromagnetisk ~~kobling~~ J_2 <u>destabiliserer</u>
Neél-ordningen.

I tilfelle i) vil vi vinne energi ved $q \to 0$
å minimalisere XY-komponenten av
spinn, og „føre" den inn i Z-komponenten.

I tilfelle ii) vil vi vinne energi ($q \to 0$)
ved å destabilisere Neél ordning.
Men vi kan få ustabilitet for
endelige $\vec{q}$ i begge tilfeller!!

$J_2 < 0$:

$$\omega_q = 2J_1 S z_1 - 2J_1 S(\gamma_q - \Delta b_q)$$

$$\Delta = \frac{|J_2|}{J_1}$$

$$\gamma_q - \Delta b_q$$

$$= (2(\cos q_x + \cos q_y) - 4\Delta \cos q_x \cos q_y)$$

$$= 4(1-\Delta) - q^2 \qquad ; \Delta > 0$$

$$\omega_q = 2J_1 S \cdot 4 - 2J_1 S[4(1-\Delta) - q^2]$$

$$= 8J_1 S\Delta + 2J_1 S q^2 \qquad ; \Delta > 0$$

$J_2 > 0$:

$$\omega_q = -8J_1 S\Delta + 2J_1 S q^2 \; ; \quad \Delta > 0$$

For generelle q, $J_2 > 0$:

$$\omega_q = 2J_1 S z_1 - 2J_1 S(\gamma_q + \Delta b_q) \; ; \Delta > 0$$

Vi kan sammenfatte ω_q for $J_2 > 0$ og $J_2 < 0$ i ett uttrykk:

$$\omega_q = 2J_1 S z_1 - 2J_1 S(\gamma_q + \Delta b_q);$$

$$\Delta = \frac{J_2}{J_1}$$

$$\boxed{\begin{aligned}\gamma_q &= 2(\cos q_x + \cos q_y)\\ b_q &= 4\cos q_x \cdot \cos q_y\end{aligned}}$$

$$\omega_q = 0 \Rightarrow$$

$$z_1 = \gamma_q + \Delta b_q$$

$$4 = z_1 = 2(\cos q_x + \cos q_y) + 4\Delta \cos q_x \cos q_y$$

$$2 = \cos q_x + \cos q_y + 2\Delta \cos q_x \cos q_y$$

$$2 = \cos q_x (1 + \Delta \cos q_y) + \cos q_y (1 + \Delta \cos q_x)$$

$$2 = x + y + \Delta xy \quad ; \quad |x| \le 1; |y| \le 1$$

1. kvadrant: $0 < q_x < \pi$

$0 < q_y < \pi$

Dette uttrykket kan vi analysere slik.

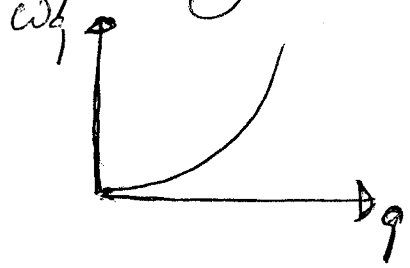
La først $\Delta = 0$

$$2 = \cos q_x + \cos q_y$$

Eneste mulige løsning: $\vec{q} = 0$

Dette reflekteres dit spektrum i /

$$\omega_q = 2 J_1 S(z_1 - \gamma_q) \qquad (\Delta = 0)$$



Δ liten og negativ:

$$2 = 1 - \frac{q_x^2}{2} + 1 - \frac{q_y^2}{2} - |\Delta| + \dots$$

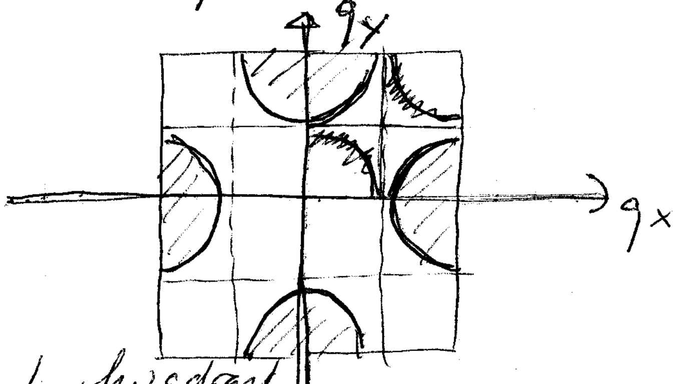
$$0 = -\Delta - \frac{q^2}{2} \Rightarrow \omega_q > 0 \quad \text{for } q \to 0$$

Ingen løsning i nærheten av $|\vec{q}| = 0$.

Fysisk betyr dette at en anti-ferromagnetisk J_2 XY-kobling gjør at XY-spinnkomponentene elimineres og „føres" inn i z-komponenten: Néel-ordningen styrkes.

$|\Delta|$ veldig stor

$$2 = \cos q_x + \cos q_y - |\Delta| \cos q_x \cos q_y$$



1 kvadrant

Rekkeutvikling rundt $q_x, q_y = \frac{\pi}{2}$

$$2 = \delta_x + \delta_y - |\Delta| \delta_x \delta_y$$

$$2 - \delta_y = \delta_x (1 - |\Delta| \delta_y)$$

$$2 - \delta_x = \delta_y (1 - |\Delta| \delta_x)$$

$$\delta_y = \frac{2 - \delta_x}{1 - |\Delta| \delta_x} = \frac{\delta_x - 2}{|\Delta| \delta_x - 1}$$

Linjene som angir nullpunktene for ω_q er gitt i figuren over

De skraverte lommene dukker først opp når $|\Delta| = 2$ ⟹: $\underline{\underline{|J_2| \geq 2 J_1}}$

Det kreves altså en minste-verdi på $|J_2|$ for å destabilisere Néel-ordnet tilstand. Vår analyse kan ikke bevare hvilken tilstand som er ny grunntilstand i det Néel-tilstanden blir ustabil. Generelt representerer spinnbølge-analysen kun en stabilitets-analyse av en ~~[illegible]~~ antatt grunntilstand.

Varmekapasiteten:

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T}$$

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z$$

der Z er partisjonsfunksjon til den frie magnon-„gassen", som er en boson-gass.

$$Z = \prod_k \frac{1}{1 - e^{-\beta\omega_q}}$$

$$\ln Z = -\sum_{\vec{k}} \ln\left(1 - e^{-\beta\omega_q}\right)$$

$$U = \sum_k \frac{\omega_q}{e^{\beta\omega_q} - 1} = \sum_{\vec{q}} \omega_q \, n_B(\vec{q})$$

der $n_B(\vec{q}) = \frac{1}{e^{\beta\omega_q} - 1}$ er

Bose-fordelingen

$$C_V = +\frac{1}{4 k_B T^2} \sum_{\vec{q}} \frac{\omega_q^2}{\sinh^2\left(\frac{\beta\omega_q}{2}\right)}$$

Siden vi har et gap i spekteret, er integralet dominert av små q, slik at vi har

$$C_V = \frac{1}{4 k_B T^2} \frac{N \cdot 4\pi}{(2\pi)^3} \int dq \; q^2 \frac{(2|J_2|S)^2}{\frac{1}{4} e^{2|J_2|S\beta} e^{\beta J' q^2}}$$

$$= \frac{1}{k_B T^2} \frac{N}{4\pi^2} (2|J_2|S)^2 \, e^{-2\beta|J_2|S}$$

$$\cdot \underbrace{\int_0^\infty dq \, \frac{q^2}{e^{\eta q^2}}}_{\left(\frac{1}{\eta}\right)^{3/2} \cdot \text{ constant}}$$

$$\sim T^{3/2}$$

$$C_V \sim T^{-\frac{1}{2}} \, e^{-\frac{2|J_2|S}{k_B T}}$$

Magnetisering med geometrisk frustrasjon:

$$M = \frac{1}{N}\langle \sum_i S_i \rangle$$

$$= \langle S_i \rangle$$

$$= S - \frac{1}{N}\sum_i \langle a_i^+ a_i \rangle$$

$$= S - \frac{1}{N}\sum_q \langle a_q^+ a_q \rangle$$

$$= S - \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} \frac{1}{e^{\beta\omega_q}-1}$$

$|J_2| < |J_1| \Rightarrow$

$\min_q(\omega_q)$ for $\vec{q} = 0$

Store $\beta \Rightarrow$ vi ser på en rekkeutvikling i q:

$$\omega_q = 2J_1 S z_1 - 2J_1 S(\gamma_q - \Delta b_q)$$

$$= 2J_1 S(z_1 - \gamma_q) + 2|J_2| S\, b_q$$

$$= J_1 S q^2 + 2|J_2| S\, b_q$$

$$\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} \frac{1}{e^{\beta\omega_q}-1} \simeq \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^\infty dq \frac{q^2}{e^{\beta C_0} e^{\beta J_1 S q^2}}$$

$$= \frac{1}{4\pi^2} e^{-2\beta|J_2|S} \int_0^\infty dq \frac{q^2}{e^{\eta q^2}}$$

$$x = \sqrt{\eta}\, q$$

$$\frac{1}{4\pi^2}\, e^{-2\beta |J_2| S}\, \frac{1}{\eta^{3/2}} \cdot C$$

$$= \frac{A\, T^{\frac{3}{2}}\, e^{-\frac{2|J_2|S}{k_B T}}}{M = S - A\, T^{\frac{3}{2}}\, e^{-\frac{2|J_2|S}{k_B T}}}$$

ɔ: eksponensielt små T-korreksjoner til $T=0$ resultatet, ettersom $|J_2|$ framtvinger et gap i magnonspekteret for $q=0$, som gjør det „vanskeligere" å destabilisere den ordnede, fullt polariserte, Néel-tilstanden.