Zadania z Kwantowej Teorii Ciała Stałego

Zestaw V - na 11.12.2001

12. Pokazać bezpośrednim rachunkiem, że operatory spinowe w reprezentacji Holsteina-Primakoffa:

$$S_i^+ = \left(2S - a_i^\dagger a_i\right)^{1/2} a_i, \qquad S_i^- = \left(S_i^+\right)^\dagger, \qquad S_i^z = S - a_i^\dagger a_i \tag{5}$$

spełniają kanoniczne relacje komutacji:

$$\left[S_i^z, S_i^\pm\right] = \pm S_i^\pm, \qquad \left[S_i^+, S_i^-\right] = 2S_i^z.$$

O operatorach a_i, $a_i^\dagger$ zakładamy, że spełniają bozonowe relacje komutacji:

$$[a_i, a_j] = \left[a_i^\dagger, a_j^\dagger\right] = 0, \qquad \left[a_i, a_j^\dagger\right] = \delta_{ij}.$$

13. Rozważyć Hamiltonian Heisenberga:

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \tag{6}$$

dla sieci trójwymiarowej w przypadku ferromagnetycznym $J < 0$.

a) Sprowadzić Hamiltonian (6) do postaci diagonalnej:

$$H = -|J| z S^2 N + \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}, \tag{7}$$

gdzie N jest liczbą węzłów sieci, z-liczbą koordynacyjną (liczbą *najbliższych sąsiadów*), zaś enegią wzbudzeń magnonowych.

b) Obliczyć wielką funkcję rozdziału Z_G i potencjał termodynamiczny Ω dla Hamiltonianu (7).

c) Poprzez różniczkowanie potencjału Ω obliczyć średnią liczbę magnonów w danym stanie pędowym $\mathbf{k}$: $\langle n_{\mathbf{k}} \rangle$, oraz, korzystając z unitarności sieciowej transformaty Fouriera, średnią magnetyzację na węzeł $\langle S_i^z \rangle$.
Wskazówka: Wyliczając całkę po energiach dokonać takiej zamiany zmiennych, aby było możliwe zastosowanie wzoru:

$$\int_0^\infty dx \frac{x^{n-1}}{e^x - 1} = \Gamma(n)\zeta(n).$$

d) Obliczyć energię wewnętrzną U, entropię S i ciepło wlaściwe c_V pochodzące od magnonów.

14. Pokazać, że transformacja Bogoliubowa:

$$\begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}} \\ b^{\dagger}_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh\theta_{\mathbf{k}} & \sinh\theta_{\mathbf{k}} \\ \sinh\theta_{\mathbf{k}} & \cosh\theta_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k}} \\ \beta^{\dagger}_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \tag{8}$$

zachowuje relacje komutacji dla operatorów bozonowych $a_{\mathbf{k}}$, $b_{\mathbf{k}}$, o ile operatory $\alpha_{\mathbf{k}}$, $\beta_{\mathbf{k}}$ je spełniają. Jak będzie wyglądać analogiczna transformacja dla operatorów fermionowych? Zastanowić się również, jakie znaczenie *fizyczne* ma fakt, że $\det B = 1$, gdzie B jest macierzą definiującą transformacje Bogoliubowa (17b).

15. Rozważyć Hamiltonian Heisenberga (6) dla sieci trójwymiarowej w przypadku antyferromagnetycznym $J > 0$.

    a) Transformację Holsteina-Primakoffa (5) należy zdefiniować oddzielnie dla poszczególnych podsieci ($i \in A$, $j \in B$), w przybliżeniu harmonicznym:

$$\begin{cases} S^{+}_i = \sqrt{2S}a_i \\ S^{-}_i = \sqrt{2S}a^{\dagger}_i \\ S^{z}_i = S - a^{+}_i a_i \end{cases} \text{dla } i \in A, \qquad \begin{cases} S^{+}_j = \sqrt{2S}b^{\dagger}_j \\ S^{-}_j = \sqrt{2S}b_j \\ S^{z}_j = -S + b^{+}_i b_j \end{cases} \text{dla } j \in B; \tag{9}$$

    co sprowadza Hamiltonian (6) do postaci:

$$H = 2JS \sum_{\langle ij \rangle} \left(a^{\dagger}_i a_i + b^{\dagger}_j b_j + a_i b_j + b^{\dagger}_j a^{\dagger}_i \right) - JzS^2 N. \tag{10}$$

    b) Następnie zdiagonalizować Hamiltonian (10) przy pomocy sieciowej transformaty Fouriera (niezależnie dla każdej podsieci) i transformacji Bogoliubowa (17b), tj. zapisać go w postaci:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \left(E_{\mathbf{k}\alpha} \alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}\beta} \beta^{\dagger}_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}} \right) - JzS^2 N + E_0. \tag{11}$$

    Wielkości $E_{\mathbf{k}\alpha}$, $E_{\mathbf{k}\beta}$, E_0 należy jawnie wyliczyć.

    c) Znając postać diagonalną Hamiltonianu (11) obliczyć energię wewnętrzną $U(T)$, ciepło wlaściwe c_V oraz średnią liczbę magnonów na węzeł $\langle n_i \rangle$.