Teoria de ondas de spin

Tomemos o modelo de Heisenberg e vamos tenta[r] analisar suas propriedades físicas. Vamos nos concentrar primeiramente no caso ferromagnético (FM)

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \qquad (J > 0)$$

Primeiramente, é óbvio que $\sum_k \vec{S}_k = \vec{S}_T$ spin total comuta com H:

$$[H, \sum_k \vec{S}_k] = 0$$

pois $\vec{S}_T$ gera as rotações globais dos spins do sistema e o Hamiltoniano H é obviamente invariante sob rotações globais de spin (Prove a relação acima diretamente). Portanto, o spin total e uma de suas componentes, S_z^T p. ex., são bons números quânticos. Podemos, portanto, diagonalizar H nos sub-espaços de S_z^T bem definidos. Os valores possíveis de S_{Tz} são (para uma rede de N sítios):

$$S_{Tz} = \frac{N}{2} \quad \text{(todos os spins } \uparrow \text{, não-degenerado)}$$

$$S_{Tz} = \frac{N}{2} - 1 \quad \text{(todos os spins } \uparrow \text{ menos um, degenerescência } N\text{)}$$

$$S_{Tz} = \frac{N}{2} - 2 \quad \left[\text{degenerescência} = \frac{N(N-1)}{2}\right]$$

$$\vdots$$

Claramente a configuração de menor energ
ocorre quando todos os spins apontam ~~e~~ na direção $\hat{z}$ (ou $-\hat{z}$, ou em qualquer outra direção). Nesse caso:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \left[S_{iz} S_{jz} + \frac{1}{2}\left(S_i^+ S_j^- + S_j^+ S_i^- \right) \right]$$

aplicado a $|\uparrow\uparrow\uparrow \cdots \uparrow\rangle \equiv |0\rangle$ dá:

$$H|0\rangle = \left(-J \sum_{\langle ij \rangle} S_{iz} S_{jz} \right) |0\rangle = -\frac{J N Z}{2} \frac{1}{4} |0\rangle \equiv E_0 |0\rangle$$

onde Z é o número de primeiros vizinhos. Esse é o estado fundamental. Note que o termo

$$\left(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ \right)$$

permuta os spins dos sítios <u>i</u> e <u>j</u> <u>se</u> os spins são anti-paralelos e dá zero se os spins são paralelos. Portanto, no sub-espaço com um spin flip, a ação desse termo equivale a transferir o spin down para um primeiro vizinho. Essa parte transversal de H, tende, portanto, a delocalizar o spin flip. Com mais de um spin-flip, começa a haver "interação" entre os spins down (por quê?) e a interação é mais complicada. Entretanto, para os primeiros estados excitados, o número de spin flips é pequeno, eles formam um "gás diluído" e a interação entre eles pode ser desprezada.

Uma maneira conveniente de se implementa esse quadro é através da representação de Holstein-Primakoff. Consideremos spins gerais S e definamos o desvio de uma configuração saturada ($S_z =$

$$\delta_i = S - S_{iz}$$

Como:

$$S^{\pm}|m\rangle = \sqrt{(S \mp m)(S \pm m + 1)}\,|m \pm 1\rangle$$

segue que:

$$|\delta\rangle \equiv |m\rangle \quad \text{se} \quad \delta = S - m$$

$$S^{+}|m\rangle = S^{+}|\delta\rangle = \sqrt{(S-m)(S+m+1)}\,|m+1\rangle$$

$$= \sqrt{\delta}\,\sqrt{S+m+1}\,|\delta - 1\rangle \quad (\text{pois } m-1 \to S-m-1 = \delta - 1$$

$$= \sqrt{\delta}\,\sqrt{2S - (\delta - 1)}\,|\delta - 1\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{S^{+}|\delta\rangle = \sqrt{2S}\,\sqrt{1 - \frac{(\delta-1)}{2S}}\,\sqrt{\delta}\,|\delta - 1\rangle}$$

Analogamente:

$$\boxed{S^{-}|\delta\rangle = \sqrt{2S}\,\sqrt{1 - \frac{\delta}{2S}}\,\sqrt{\delta + 1}\,|\delta + 1\rangle}$$

e:

$$S_z|m\rangle = m|m\rangle \Rightarrow \boxed{S_z|\delta\rangle = (S-\delta)|\delta\rangle}$$

A forma de $S^{\pm}$ sugere que definamos operadores bosônicos, a_i, a_i^{+} tais que:

$$a_i|\delta_i\rangle = \sqrt{\delta_i}\,|\delta_i - 1\rangle$$
$$a_i^{+}|\delta_i\rangle = \sqrt{\delta_i + 1}\,|\delta_i + 1\rangle$$
$$a_i^{+}a_i|\delta_i\rangle = \delta_i|\delta_i\rangle$$

Assim:

$$S_i^{+} = \sqrt{2S}\sqrt{1 - \frac{a_i^{+}a_i}{2S}}\; a_i = \sqrt{2S - a_i^{+}a_i}\; a_i$$

$$S_i^{-} = \sqrt{2S}\; a_i^{+}\sqrt{1 - \frac{a_i^{+}a_i}{2S}} = a_i^{+}\sqrt{2S - a_i^{+}a_i}$$

$$S_{iz} = S - a_i^{+}a_i$$

(Prove que as relações de comutação de spin são satisfeitas pelos operadores acima). Segue que:

$$\sum_{\langle ij\rangle} S_z^i S_z^j = \sum_{\langle ij\rangle}\left[S^2 - S(a_i^{+}a_i + a_j^{+}a_j) + a_i^{+}a_i a_j^{+}a_j\right]$$

$$= N\frac{Z}{2}S^2 - SZ\sum_i a_i^{+}a_i + \sum_{\langle ij\rangle} a_i^{+}a_i a_j^{+}a_j$$

$$\sum_{\langle ij\rangle}\left(S_i^+S_j^- + S_i^-S_j^+\right) = \sum_{\langle ij\rangle}\left[2S\left(1-\frac{a_i^\dagger a_i}{2S}\right)^{1/2} a_i a_j^\dagger\left(1-\frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} + \right.$$

$$\left. + 2S\left(1-\frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} a_j a_i^\dagger\left(1-\frac{a_i^\dagger a_i}{2S}\right)^{1/2}\right]$$

$$\Rightarrow H = -JNzS^2 + JSz\sum_i a_i^\dagger a_i - J\sum_{\langle ij\rangle} a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j$$

$$-JS\sum_{\langle ij\rangle}\left\{\left(1-\frac{a_i^\dagger a_i}{2S}\right)^{1/2} a_i a_j^\dagger\left(1-\frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} + a_i^\dagger\left(1-\frac{a_i^\dagger a_i}{2S}\right)^{1/2}\left(1-\frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} a\right.$$

A forma do Hamiltoniano sugere claramente uma expansão em $\frac{1}{S}$, que equivale a assumir nos operadores $S_z, S^\pm$ que $\langle a_i^\dagger a_i\rangle \ll S$ (gás diluído de excitações). Temos em primeira ordem não trivial (teoria de ondas de spin linear):

$$H_0 \simeq -JNzS^2 + JSz\sum_i a_i^\dagger a_i - JS\sum_{\langle ij\rangle}\left(a_i a_j^\dagger + a_i^\dagger a_j\right)$$

$$= -JNzS^2 + JSz\sum_i a_i^\dagger a_i - JS\sum_{\langle ij\rangle}\left(a_i^\dagger a_j + H.c.\right)$$

A diagonalização é agora imediata. Note como o termo em $S_i^+S_j^- + S_i^-S_j^+$ realmente tem a interpretação de termo de "hopping".

Definindo, como já usual:

$$a_k^{+} = \sum_i \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i}}{\sqrt{N}} a_i^{+}$$

$$a_i^{+} = \sum_k \frac{e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_i}}{\sqrt{N}} a_k^{+}, \text{ etc.}$$

$$H = -JNZS^2 + JSZ\sum_k a_k^{+} a_k - JS\sum_k \gamma_k a_k^{+} a_k$$

onde $\gamma_k = \left(\sum_\delta e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_\delta} + c.c.\right)$ e a soma é sobre os primeiros vizinhos

Para uma rede cúbica: $\gamma_k = 2(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)$.
Podemos escrever:

$$H = -JNZS^2 + \sum_k \epsilon_k a_k^{+} a_k$$

onde: $\epsilon_k = JSZ\left[1 - \frac{1}{Z}\gamma_k\right]$

Realmente, a descrição é essencialmente aquela de um gás ideal de Bose (não há condensação de Bose-Einstein pois o número de bósons não é fixo. Para uma rede cúbica e pequenos comprimentos de onda

$$\epsilon_k \cong JSZ\left[1 - \frac{1}{6}\times 2\sum_i \cos k_i\right] \simeq JS\sum_i (k_i)^2$$

$\boxed{\epsilon_k \cong JS(\vec{k})^2}$ $\Rightarrow$ A dispersão quadrática é característica de FM.

Podemos calcular agora a magnetização como função da temperatura. Para bósons livres:

$$\langle n_k \rangle = \langle a_k^+ a_k \rangle = \frac{1}{e^{+\beta\epsilon_k} - 1} \equiv b(\epsilon_k)$$

e a magnetização é:

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

$$= N\mu - \frac{\mu}{S} \sum_k \langle a_k^+ a_k \rangle$$

$$= N\mu - \frac{\mu N}{S} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta\epsilon_k} - 1}$$

Quando $T \ll JS$, apenas os comprimentos de onda longos são apreciavelmente excitados e $\epsilon_k \simeq JSk^2$ e o desvio da magnetização de saturação é:

$$\frac{\Delta M}{S} = -\frac{\langle M \rangle}{S} + N\mu \cong \frac{\mu N}{S} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta JSk^2} - 1}$$

Fazendo $\vec{x} \equiv \sqrt{\beta JS}\,\vec{k}$:

$$\Delta M = \frac{\mu N}{S} \frac{1}{(\beta JS)^{3/2}} \int \frac{d^3x}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{x^2} - 1} \propto T^{3/2}$$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta M(T) \sim T^{3/2} \qquad (T \ll JS)}$$

Analogamente a energia total é:

$$\Delta U = \sum_k \epsilon_k \langle a^\dagger_k a_k \rangle = N \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\epsilon_k}{e^{\beta\epsilon_k} - 1}$$

$$\Delta U \simeq NJS \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{k^2}{e^{\beta JS k^2} - 1}$$

$$= NJS \, (\beta JS)^{-5/2} \int \frac{d^3x}{(2\pi)^3} \frac{x^2}{e^{x^2} - 1} \propto T^{5/2}$$

Segue que o calor específico é:

$$C_V = \frac{dU}{dT} \propto T^{3/2}$$

Teoria de ondas de spin

Note que a correção à magnetização ($T \ll JS$)

$$\Delta M \cong V \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{1}{e^{\beta J S k^2} - 1}$$

A integral acima na região de $|\vec{k}|$ pequenos é:

$$\Delta M \propto V \int_0^{\Lambda} \frac{k^{D-1}\, dk}{k^2} \propto \int_0^{\Lambda} k^{D-3}\, dk$$

Ela é finita em $D=3$ mas diverge em $k=0$ em $D=2$ (logaritmicamente) e em $D=1$ (como $\frac{1}{0}$). Isso nos dá uma indicação de que não há ordem de longo alcance à $T>0$ em $D=1,2$, o que é verdade.