Kolektivní a kooperativní jevy – 4. sada příkladů

1. Paramagnetismus neinteragujících magnetických momentů

Izolovaný atom s částečně zaplněnou valenční slupkou se v magnetickém poli řídí hamiltoniánem

$$\Delta\mathcal{H} = -\hat{\boldsymbol{m}} \cdot \boldsymbol{B} \ ,$$

přičemž magnetický moment slupky je dán výrazem $\hat{\boldsymbol{m}} = -g\mu_B \hat{\boldsymbol{J}}$. Zde $\hat{\boldsymbol{J}}$ operátor celkového momentu hybnosti slupky a g je Landého faktor.
(a) Statistickým středováním určete střední magnetický moment atomu při teplotě T. Odtud vypočtěte teplotní závislost magnetické susceptibility souboru neinteragujících atomů s koncentrací n. Ukažte, že za vysokých teplot je susceptibilita nepřímo úměrná teplotě (Curieův zákon).
(b) Vypočtěte energii E, tepelnou kapacitu C a entropii S vztaženou na jednotku objemu.
(c) Zjednodušte výsledky bodů (a) a (b) pro případ $J = 1/2$, $g = 2$ a vykreslete teplotní závislost magnetizace M a veličin E, C a S. Teplotu přitom charakterizujte veličinou $k_BT/\mu_B B$.

2. Weissův model a spinová susceptibilita antiferomagnetu

V rámci přiblížení středního pole prozkoumejte chování antiferomagnetu popsaného Heisenbergovým hamiltoniánem pro spiny o velikosti S umístěné v uzlech bipartitní mřížky

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle ij\rangle,\, i\in A,\, j\in B} \hat{\boldsymbol{S}}_i \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_j \ .$$

Interagují pouze sousední spiny, které v případě bipartitní mřížky vždy sídlí v různých podmřížkách (označeny A a B). Magnetický moment efektivního spinu je dán výrazem $\hat{\boldsymbol{m}} = -g\mu_B \hat{\boldsymbol{S}}$.
(a) Najděte závislost magnetizace podmřížek na teplotě a určete Néelovu teplotu T_N.
(b) Vypočtěte magnetickou susceptibilitu pro případ $T > T_N$ a ukažte tak, že platí Curieův-Weissův zákon ve tvaru $\chi \sim 1/(T + T_N)$.
(c) Vypočtěte magnetickou susceptibilitu pro $T < T_N$. Zde je třeba odlišit případ, kdy je magnetické pole $\boldsymbol{B}$ rovnoběžné se směrem magnetizace, a případ, kdy je na něj kolmé.

Pozn.: Ve zjednodušené variantě úlohy počítejte se spiny o velikosti $S = 1/2$ a vynechejte část (c).

3. Heisenbergův hamiltonián jako efektivní hamiltonián Hubbardova modelu

Pomocí poruchové teorie druhého řádu ukažte, že efektivním hamiltoniánem Hubbardova modelu pro molekulu H_2

$$\mathcal{H} = t \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (c^+_{1\sigma}c_{2\sigma} + c^+_{2\sigma}c_{1\sigma}) + U(n_{1\uparrow}n_{1\downarrow} + n_{2\uparrow}n_{2\downarrow})$$

v limitě $t/U \ll 1$ (poruchou jsou členy s t) je antiferomagnetický Heisenbergův hamiltonián

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = J\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$$

s výměnnou konstantou $J = 4t^2/U$.
Podrobný návod: Jednotlivé stavy systému zapíšeme pomocí kreačních operátorů. Jsou to stavy s elektrony nacházejícími se v různých orbitalech: singlet $|S\rangle = (1/\sqrt{2})(c^+_{1\uparrow}c^+_{2\downarrow} - c^+_{1\downarrow}c^+_{2\uparrow})|\text{vac}\rangle$ a tripletní stavy $|T_{-1}\rangle = c^+_{1\downarrow}c^+_{2\downarrow}|\text{vac}\rangle$, $|T_0\rangle = (1/\sqrt{2})(c^+_{1\uparrow}c^+_{2\downarrow} + c^+_{1\downarrow}c^+_{2\uparrow})|\text{vac}\rangle$, $|T_{+1}\rangle = c^+_{1\uparrow}c^+_{2\uparrow}|\text{vac}\rangle$ a dále stavy, kdy se oba elektrony nacházejí v jednom orbitalu: $|S_1\rangle = c^+_{1\uparrow}c^+_{1\downarrow}|\text{vac}\rangle$ a $|S_2\rangle = c^+_{2\uparrow}c^+_{2\downarrow}|\text{vac}\rangle$.
Efektivní hamiltonián pracuje v podprostoru vymezeném stavy $|S\rangle$, $|T_{-1}\rangle$, $|T_0\rangle$ a $|T_{+1}\rangle$. Kvůli spinové symetrii musí být efektivní hamiltonián vyjádřený v bázi sestavené z těchto stavů diagonální. Stačí tedy určit jeho diagonální maticové elementy pomocí poruchové teorie druhého řádu

$$\langle\psi|\mathcal{H}_{\text{eff}}|\psi\rangle = -\sum_n \frac{\langle\psi|\mathcal{H}|n\rangle\langle n|\mathcal{H}|\psi\rangle}{E_{\text{exc},n}} \ ,$$

kde $|\psi\rangle$ jsou jednotlivé nízkoenergiové stavy $|S\rangle$, $|T_{-1}\rangle$, $|T_0\rangle$ a $|T_{+1}\rangle$ a $|n\rangle$ jsou stavy s dvojnásobným obsazením $|S_1\rangle$ a $|S_2\rangle$ a excitační energií U. Výsledek porovnáme s maticovými elementy Heisenbergova hamiltoniánu a určíme J.

4. Základní stav Heisenbergova čtverce

Najděte základní stav miniaturního Heisenbergova antiferomagnetu se čtyřmi spiny $S = 1/2$ umístěnými v rozích čtverce. Předpokládejte, že interagují jen nejbližší sousedé.

- Základní stav vyjádřete jako lineární kombinaci společných vlastních stavů operátorů $\left\{\hat{S}_i^z\right\}_{i=1\ldots4}$.
- Jaký podíl na základním stavu mají Néelovy konfigurace?
- Ukažte, že výsledek je možné zapsat jako superpozici dvou možných pokrytí čtverce dvojicí singletních párů spinů.
- Najděte energii základního stavu pro případ obecné hodnoty S.

Nápověda: $(\hat{S}_1 + \hat{S}_3) \cdot (\hat{S}_2 + \hat{S}_4) = \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 + \hat{S}_2 \cdot \hat{S}_3 + \hat{S}_3 \cdot \hat{S}_4 + \hat{S}_4 \cdot \hat{S}_1$