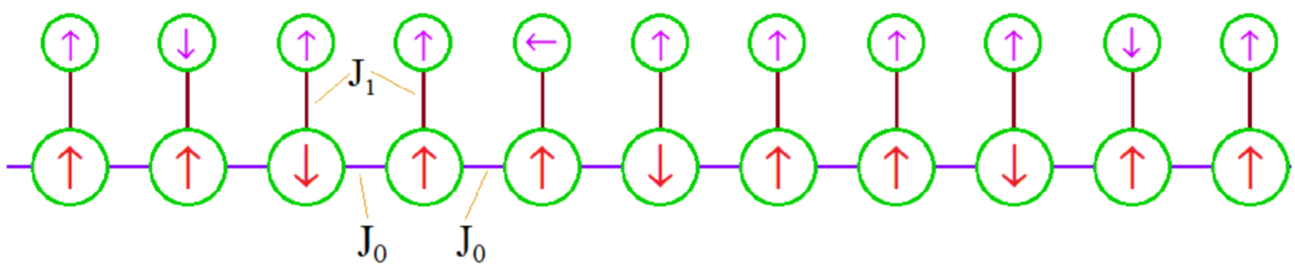
Hamiltoniano de Heisenberg con bandas planas de Magnones-

Ejercicio 9-

Consideremos un Hamiltoniano de Heisenberg de una cadena ferromagnética de iones de tipo A, pero con un recubrimiento en su parte superior con iones magnéticos de tipo B. Cada ion B sólo está conectado al ion A inmediatamente inferior. No consideraremos acoplamiento a mayor distancia. La figura inferior ilustra la configuración del sistema



El Hamiltoniano del sistema magnético es

$$\boxed{\breve{H} = -\sum_{n=1}^{N} \left[J_0\, \vec{S}_{nA} \cdot \vec{S}_{(n+1)A} + J_1\, \vec{S}_{nA} \cdot \vec{S}_{nB} \right]} \qquad (1)$$

Supondremos condiciones de borde cíclicas, $N+1 \equiv 1$. Acorde a lo antes señalado, $J_0 > 0$. Sin embargo las adherencias pueden acoplarse a la cadena tanto ferro como antiferromagnéticamente (J_1 con signo arbitrario). Notar que hemos antepuesto un signo – en la suma, lo que implica acoplamiento ferro para $J > 0$ y antiferro para $J < 0$. Los valores de estos spines son

$$\boxed{\vec{S}_A^{\,2} = S_A(S_A+1)} \qquad \boxed{\vec{S}_B^{\,2} = S_B(S_B+1)} \qquad (2)$$

Obtenga es espectro de magnones del sistema. Para ello empecemos notando que hay dos spines por celda cristalina, ello involucra el uso de dos operadores de creación de magnones para cada cuasi-momento *"k"*. Partimos definiendo un par de operadores l.i. asociados a la creación de magnones:

$$\boxed{\breve{A}(k) = \frac{1}{\sqrt{2NS_A}} \sum_{n=1}^{N} S_{nA}^{(-)} \ \mathrm{Exp}(i\,k\,n)} \quad \text{a)}$$
$$\boxed{\breve{B}(k) = \frac{1}{\sqrt{2NS_B}} \sum_{n=1}^{N} S_{nB}^{(-)} \ \mathrm{Exp}(i\,k\,n)} \quad \text{b)} \qquad (3)$$

Suponga (en primera instancia) un estado base ferromagnético,

$$\boxed{\Psi_0 = \bigotimes_{n=1}^{N} \left| S_A, M_A = S_A ; n \right\rangle \left| S_B, M_B = S_B ; n \right\rangle} \qquad (4)$$

Ahora evalúe los conmutadores

$$\left[S_{nA}^{(-)} ;\ \vec{S}_{jA} \cdot \vec{S}_{jB}\right], \left[S_{nA}^{(-)} ;\ \vec{S}_{jA} \cdot \vec{S}_{jB}\right] \text{ y } \left[S_{nA}^{(-)} ;\ \vec{S}_{jA} \cdot \vec{S}_{(j+1)A}\right].$$

Multiplicando por las constantes adecuadas, y sumando sobre los índices *n, j*, obtenga

$$\left[\breve{A}(k), \breve{H}\right]\Psi_0 \quad \text{y} \quad \left[\breve{B}(k), \breve{H}\right]\Psi_0 . \quad \text{Concluya}$$

$$\boxed{\begin{aligned}\left[\breve{A}(k), \breve{H}\right]\Psi_0 = {} & -2\, J_0\, S_A \left[1 - \mathrm{Cos}(k)\right] \breve{A}(k)\, \Psi_0 \ + \\ & + J_1 \left[\sqrt{S_A\, S_B}\ \breve{B}(k) - S_B\ \breve{A}(k)\right] \Psi_0\end{aligned}} \qquad (5)_a$$

$$\boxed{\left[\breve{B}(k), \breve{H}\right]\Psi_0 = J_1 \left[\sqrt{S_A\, S_B}\ \breve{A}(k) - S_A\ \breve{B}(k)\right] \Psi_0} \qquad (5)_b$$

Realice una combinación lineal adecuada de los operadores $\breve{A}(k)$ y $\breve{B}(k)$ de modo que las relaciones $(5)_{a,\,b}$ tomen una "forma diagonal"; más concretamente, defina

$$\boxed{\check{C}(k) = \alpha\ \check{A}(k) + \beta\ \check{B}(k)} \qquad (6)$$

Ahora imponga

$$\boxed{[\check{C}(k), \check{H}]\Psi_0 \ = \ -\mathcal{E}(k)\Psi_0} \qquad (7)$$

Ello lleva a una ecuación de autovalores; concluya que ella posee la forma

$$\boxed{\begin{bmatrix} 2\,J_0\,S_A[1-\mathrm{Cos}(k)] + J_1\,S_B & -J_1\sqrt{S_A\ S_B} \\ -J_1\sqrt{S_A\ S_B} & J_1\,S_A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \mathcal{E}(k) \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}} \qquad (8)$$

<u>Observación:</u> Para obtener esta expresión, note que al definir los operadores $\check{A}(k)$ y $\check{B}(k)$, la suma $(3)_a$ tiene un prefactor diferente al que aparece en Rel. $(3)_b$. Ello da lugar al factor $\sqrt{S_A\ S_B}$ en la matriz (8).

A partir de Rel. (7) concluya

$$\boxed{\check{H}\ \Psi(k) = [E_0 + \mathcal{E}(k)]\ \Psi(k)} \qquad (9)_a$$

con

$$\boxed{\Psi(k) = \check{C}(k)\Psi_0} \qquad (9)_b$$

Acá E_0 es la energía base del Ferromagneto. De este modo, podemos asociar la energía $\mathcal{E}(k)$ a una excitación elemental del ferromagnético, siempre que se cumpla $\mathcal{E}(k) > 0$.

Por otro lado, como la ecuación (8) posee dos autovalores, tendremos dos bandas de magnones. Analice estas bandas. Concluya:

(*i*) Si $J_0 > 0$, $J_1 > 0$, entonces ambas bandas son positivas, de modo que efectivamente son excitaciones del estado base ferromagnético.

(*ii*) Si $J_0 > 0$, $J_1 < 0$, entonces la banda inferior es siempre negativa. Como nuestro análisis es exacto, esto nos permite asegurar que el ferromagnético no corresponde al estado base del sistema, pues $\Psi(k)$ posee una energía inferior a Ψ_0.

(*iii*) En el caso favorable, $J_0 > 0$, $J_1 > 0$, grafique las dos bandas magnónicas. En especial, grafique el caso $J_1 \gg J_0 > 0$. Interprete la banda superior (relativamente estrecha) como un "modo magnónico óptico", y la banda inferior (más ancha) como un "modo acústico"; esto, en la nomenclatura típica usada inicialmente para fonones. Interprete el Gap entre ambas bandas (aproximadamente) como la energía de excitación del dímero $J_1 \vec{S}_A \cdot \vec{S}_B$

****