Ograniczenia przybliżenia liniwych fal spinowych.

Krzysztof Wohlfeld, Damian Włodzyński, Krzysztof Jodłowski,
Piotr Wrzosek, Adam Kłosiński

Opiekun:
Krzysztof Wohlfeld

3 sierpnia 2018

Streszczenie

Celem projektu było zbadanie załamywania się przybliżenia liniowych fal spinowych (LSW) w modelu XXZ. Metody jakie zastosowano do zbadania dyspersji magnonów w modelu XXZ to dokładna dniagonalizacja (ED) oraz procedura Lanczos. Wynyki wskazują na załamywanie się przybliżenia liniowych fal spinowych już dla wartości α bardzo zbliżonych do 1. Wynika to z faktu, że ciągła symetria obecna w modelu Heisenberga (XXZ dla $\alpha = 1$) nie jest obecna w modelu XXZ dla $\alpha \neq 1$.

Rozdział 1 Załamywanie się przybliżenia LSW w modelu XXZ z $\alpha < 1$

1.0.1 Model

Interesujący nas model XXZ opisywany jest Hamiltonianem

$$H = J \sum_i \alpha \, S_i^z S_{i+1}^z + S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y, \tag{1.1}$$

gdzie $J < 0$.

Przypadek $\alpha = 1$ nazywamy modelem Heisenberga (ferromagnetycznym), natomiast przypadek $\alpha = 0$ to tzw. model XY. W ogólnym przypadku $0 \leq \alpha \leq 1$ Hamiltonian ten można zdiagonalizować korzystając z przybliżenia LSW. W wyniku dostajemy równanie dyspersji magnonów

$$\omega_q = s \, J \, (\cos(q) - \alpha) + const. \tag{1.2}$$

gdzie s to całkowity spin na każdym atomie w sieci. Jak widać zmiana parametru α nie prowadzi do zmian jakościowych w dyspersji magnonów w przybliżeniu LSW.

Rozdział 2 Dokładna diagonalizacja

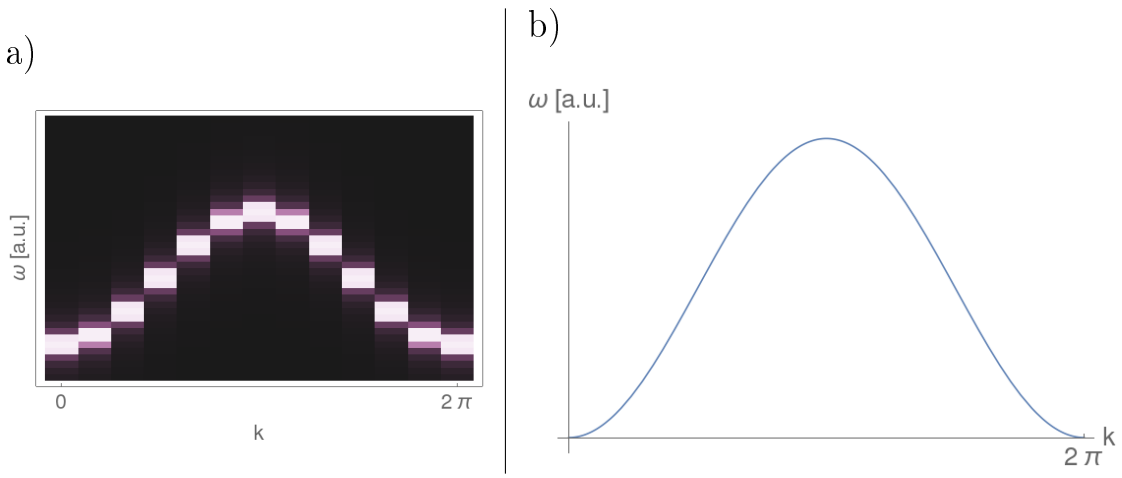
2.0.1 Metody

Wstępną procedurę dokładnej diagonalizacji dla małych układów (do 12 atomów) zaimplementowano w programie Wolfram Mathematica. Następnie, bazując na działającym programie, napisano w C++ program pozwalający na pracę z większymi układami, również na klastrze obliczeniowym.

2.0.2 Wyniki

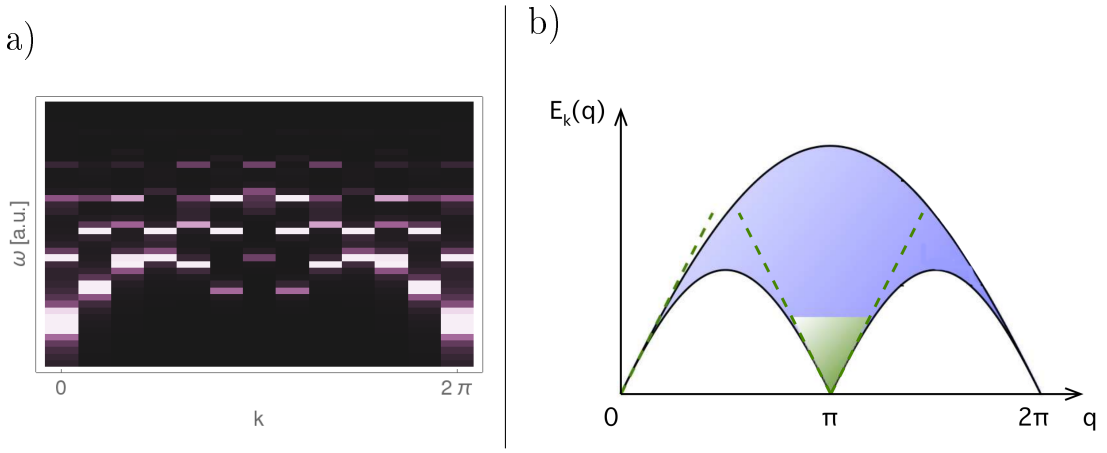
Poniżej zaprezentowano wyniki w dwóch przypadkach: dla ferromagnetycznego modelu Heisenberga oraz dla ferromagnetycznego modelu XXZ z wartością parametru $\alpha = 0.01$, czyli przypadek bliski modelowi XY.

Model Heisenberga



Rysunek 2.1: Funkcja spektralna magnonów w ferromagnetycznym modelu Heisenberga. a) Wynik procedury ED dla łańcucha 12 atomów. Jaśniejszy kolor oznacza większą wagę spektralną. b) Dokładne rozwiązanie analityczne.

Model XXZ, $\alpha = 0.01$



Rysunek 2.2: Porównanie funkcji spektralnej magnonów w modelu XXZ, $\alpha = 0.01$ i w modelu XY. a) Wynik procedury ED dla łańcucha 12 atomów, model XXZ, $\alpha = 0.01$. Jaśniejszy kolor oznacza większa wagę spektralną. b) Dokładne rozwiązanie analityczne dla modelu XY (XXZ, $\alpha = 0$). [Zaadaptowano z [1]]

2.0.3 Wnioski

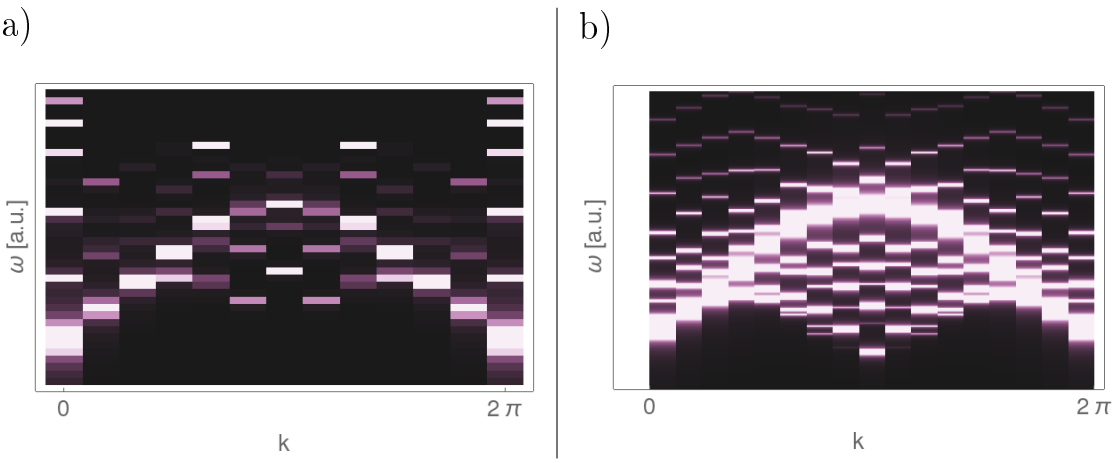
Jak widać procedura dokładnej diagonalizacji została zaimplementowana poprawnie. Wyniki otrzymane dla łańcucha 12 atomów są jakościowo zbliżone do dokładnych wyników analitycznych dla nieskończonego łańcucha.

Rozdział 3 Procedura Lanczos

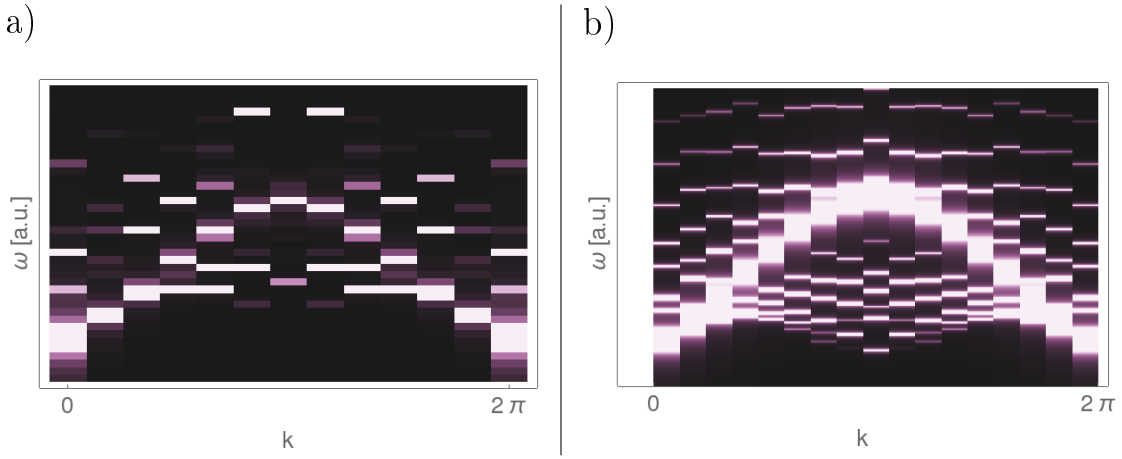
W ramach Zespołowego Projektu Studenckiego (ZPS) napisano program wyliczający funkcję spektralną dla modelu XXZ korzystając z algorytmu Lanczos. Jest to metoda przybliżona, pozwalająca rozwiązywać problemy dla większych układów niż w przypadku ED. W tym rozdziale przedstawiamy porównanie wyników otrzymanych obydwiema metodami.

3.1 Wyniki

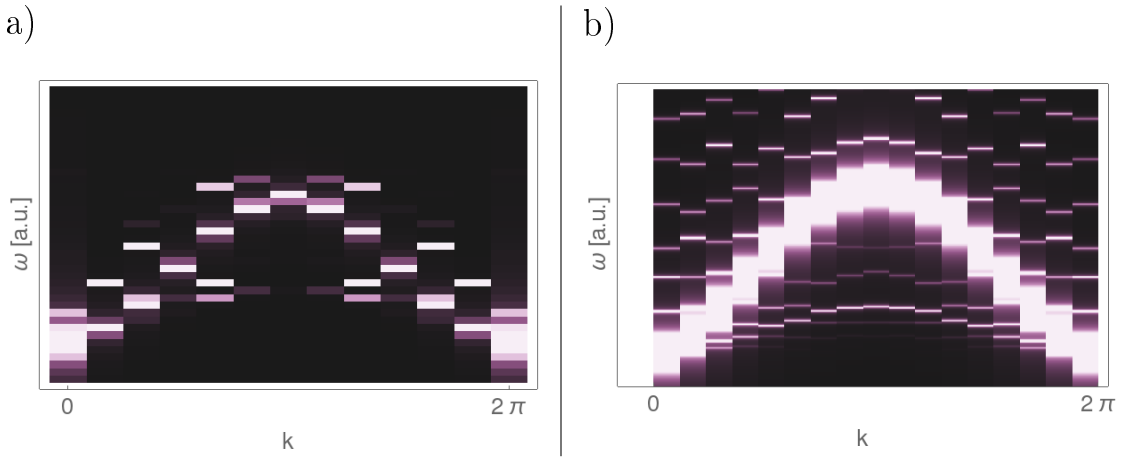
Poniżej przedstawiono wyniki dla ferromagnetycznego modelu XXZ dla różnych wartości parametru anizotropii α, patrz równanie (1.1).



Rysunek 3.1: Funkcja spektralna magnonów w modelu XXZ, $\alpha = 0.3$. Jaśniejszy kolor oznacza większą wagę spektralną. a) Wynik procedury ED dla łańcucha 12 atomów. b) Wynik procedury Lanczos dla łańcucha 16 atomów.



Rysunek 3.2: Funkcja spektralna magnonów w modelu XXZ, $\alpha = 0.6$. Jaśniejszy kolor oznacza większą wagę spektralną. a) Wynik procedury ED dla łańcucha 12 atomów. b) Wynik procedury Lanczos dla łańcucha 16 atomów.



Rysunek 3.3: Funkcja spektralna magnonów w modelu XXZ, $\alpha = 0.9$. Jaśniejszy kolor oznacza większą wagę spektralną. a) Wynik procedury ED dla łańcucha 12 atomów. b) Wynik procedury Lanczos dla łańcucha 16 atomów.

Rozdział 4 Wnioski

Oststecznym celem jaki postawiliśmy sobie w ramach ZPS było zrozumienie powodów załamywania się przybliżenia LSW przy opisie łańcuchów spinowych opisywanych Hamiltonianem XXZ (1.1) w przypadku $\alpha < 1$. Wyniki otrzymane numerycznie w poprzednich rozdziałach pokazują, że przybliżenie LSW nie opisuje kontinuum widocznego w wynikach ED i Lanczos nawet dla wartości parametru α bardzo zbliżonych do 1 ($\alpha = 0.9$).

Wynik ten można zrozumieć jako konsekwencję dodatkowej, ciągłej symetrii obecnej w modelu (1.1) w przypadku $\alpha = 1$. Dla $\alpha = 1$ Hamiltonian (1.1) ma symetrię polegającą na tym, że wyraz $\sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}$ nie zmienia się przy jednoczesnym obrocie spinu na wszystkich atomach sieci. W tym przypadku twierdzenie Goldstone'a [2] gwarantuje istnienie kwazicząstek (bozonów) opisujących stany wzbudzone modelu o najniższych energiach. Te kwazicząstki to właśnie magnony. Stąd obserwowane spektrum jest koherentne.

Kiedy $\alpha \neq 1$ model nie posiada ciągłej symetrii opisanej powyżej. W związku z tym spektrum magnonów nie jest koherentne.

Bibliografia

[1] R. G. Pereira, Ph.D. thesis, University of British Columbia, 2008.

[2] J. Goldstone, A. Salam, and S. Weinberg, Physical Review **127**, 965 (1962).