В.Н.Глазков

«Физика низкоразмерных систем»

слайды к лекции 9

Одномерные спиновые системы 2: Гейзенберговская спиновая цепочка.

Гейзенберговский гамильтониан спиновой цепочки в фермионном представлении

$$\hat{H}_{XXZ} = J\sum_n \left[\frac{1}{2}\left(c_n^{+} c_{n+1} + c_n c_{n+1}^{+}\right) + \Delta\left(c_n c_n^{+} - \frac{1}{2}\right)\left(c_{n+1} c_{n+1}^{+} - \frac{1}{2}\right)\right] - g\mu_B H \sum_n \left(c_n^{+} c_n - \frac{1}{2}\right)$$

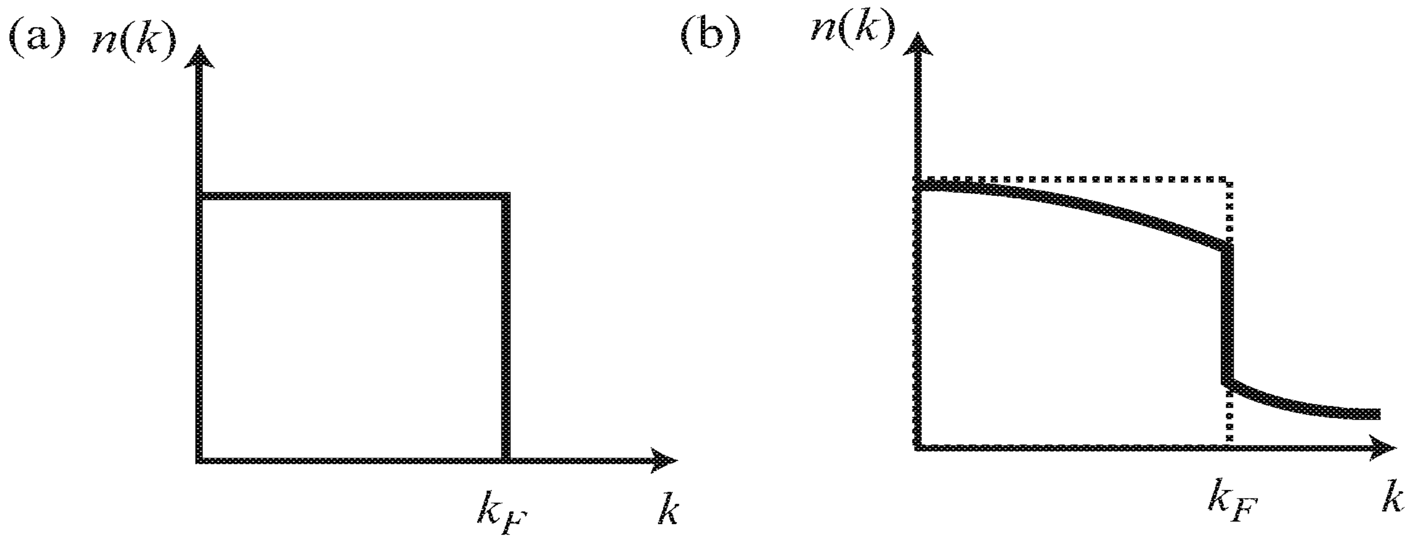
Δ=1

кинетическая
энергия

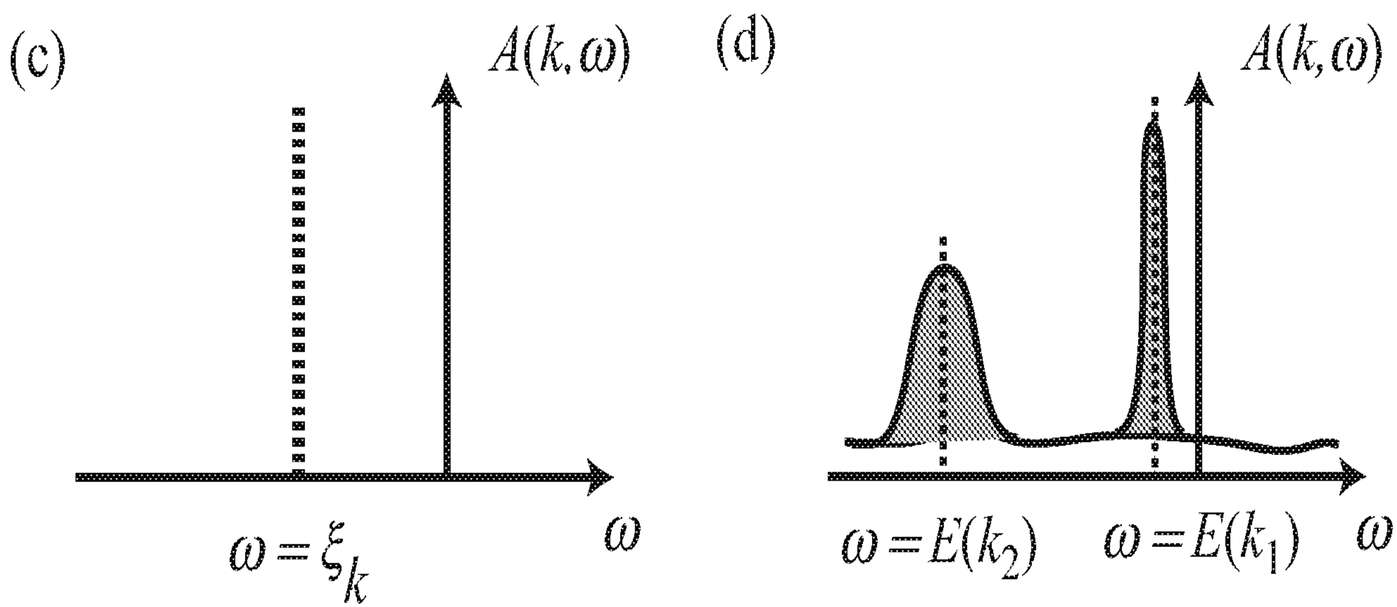
химпотенциал
+
взаимодействие

химпотенциал

Напоминание про ферми-жидкость



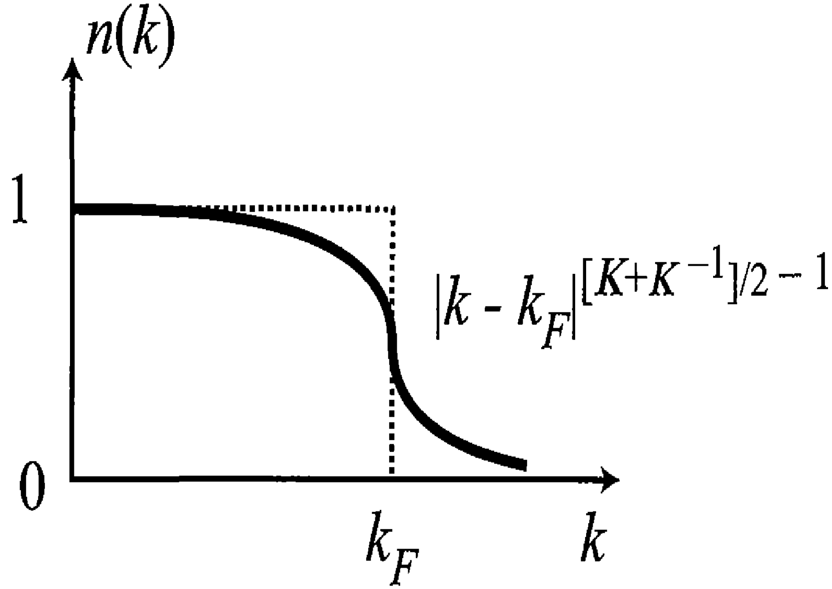
(a) Функция распределения по импульсам для идеального ферми-газа при T=0. (b) Схематическое изображение функции распределения по импульсам для ферми-жидкости при наличии взаимодействия.

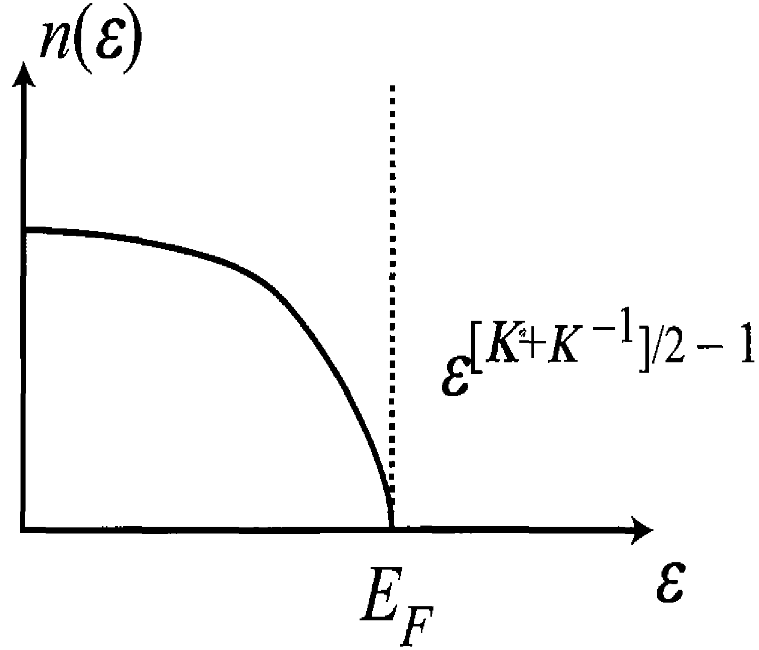


Схематическое изображение спектральной плотности для ферми-газа (c) и для ферми-жидкости (d).

Thierry Giamarchi, Quantum Physics in One Dimension, 2003

… и одномерный случай. Жидкость Томонаги-Латтинжера.





Функции распределения по импульсу (слева) и энергии (справа) в одномерной системе взаимодействующих ферми-частиц.

$$n(k)-n(k_F)\propto -sign(k-k_F)|k-k_F|^{\frac{K+K^{-1}}{2}-1}$$

$$n(\varepsilon)\propto \varepsilon^{\frac{K+K^{-1}}{2}-1}$$

Отсутствие хорошо определённых квазичастиц;
Линейный спектр возбуждений на малых волновых векторах;
Для заряженных частиц — разделение зарядовой и спиновой степени свободы
(хороший обзор arXiv: 9807366)

Thierry Giamarchi, Quantum Physics in One Dimension, 2003

Построение волновой функции основного состояния.

$$\hat{H}=\sum_m J_{ij}\left(\hat{S}_m^z \hat{S}_{m+1}^z+\frac{1}{2}\left(\hat{S}_m^+ \hat{S}_{m+1}^-+\hat{S}_m^- \hat{S}_{m+1}^+\right)\right)$$

«вакуум» = поляризованное состояние

$$\psi_0=|\ldots------------\ldots\rangle \qquad E_0=NJ/4$$

одночастичное состояние

$$\psi_k=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_n}\hat{S}_n^+\psi_0$$

$$E(\vec{k})=\langle\psi_k|\hat{H}|\psi_k\rangle=\frac{1}{N}\sum_{n,n'} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_n-\vec{r}_{n'})}\langle\psi_0|\hat{S}_{n'}^-\hat{H}\hat{S}_n^+|\psi_0\rangle$$

частично вычислено для XY модели, осталась только ZZ-часть гамильтониана

$$\hat{S}_m^z\hat{S}_n^+=\hat{S}_n^+\left(\hat{S}_m^z+\delta_{mn}\right)$$

$$\boxed{\begin{aligned}E(\vec{k})&=J\cos(ka)+\frac{J}{N}\sum_{n,m}\langle\psi_0|\hat{S}_n^-\hat{S}_m^z\hat{S}_{m+1}^z\hat{S}_n^+|\psi_0\rangle=J\cos(ka)+\\&+\frac{J}{N}\sum_{n,m}\langle\psi_0|\left(\hat{S}_m^z+\delta_{mn}\right)\left(\hat{S}_{m+1}^z+\delta_{m+1,n}\right)|\psi_0\rangle=J\cos(ka)+\frac{NJ}{4}-J=E_0-J\left(1-\cos(ka)\right)\end{aligned}}$$

Двухчастичные и далее состояния

наивно: $\cancel{\psi'_{k,k'} = A\sum_{n,n'} e^{ikna}\, e^{ik'n'a}\, \hat{S}_n^+ \hat{S}_{n'}^+ \psi_0}$

нельзя,
избыточность базиса

$$\boxed{\psi_{k,k'} = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} f_{ij}\, \hat{S}_i^+ \hat{S}_j^+ \psi_0}$$

$$f_{ij} = f_{ji}$$

диагональные элементы физического смысла не имеют — можно доопределить по математическому удобству

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$\langle \psi_0 | \hat{S}_i^- \hat{S}_j^- \hat{H} | \psi_{k,k'} \rangle = E \langle \psi_0 | \hat{S}_i^- \hat{S}_j^- | \psi_{k,k'} \rangle$$

$$J \left\langle \psi_0 \left| \hat{S}_i^- \hat{S}_j^- \sum_m \left(\hat{S}_m^z \hat{S}_{m+1}^z + \frac{\hat{S}_m^+ \hat{S}_{m+1}^- + \hat{S}_m^- \hat{S}_{m+1}^+}{2} \right) \sum_{n\neq n'} f_{nn'}\, \hat{S}_n^+ \hat{S}_{n'}^+ \right| \psi_0 \right\rangle = E\left(f_{ij} + f_{ji} \right)$$

для вычисления следим, чтобы на каждом узле повышающие и понижающие операторы встречались одинаковое число раз вычисляем....

произведение Z-компонент ¼, кроме тех случаев, когда до S_z был переворот спина.

ZZ: нужно совпадение пар (i, j) и (n,n')

$$\sum_{n\neq n'}\left(\delta_{in}\delta_{jn'}+\delta_{in'}\delta_{jn}\right)f_{nn'}\sum_m\left(\frac{1}{4}-\frac{1}{2}\left(\left(\delta_{mn}+\delta_{m+1,n'}\right)\left(1-\delta_{n+1,n'}\right)+\left(\delta_{mn'}+\delta_{m+1,n}\right)\left(1-\delta_{n'+1,n}\right)\right)\right)=$$
$$=\left(f_{ij}+f_{ji}\right)\left(\frac{N}{4}-2+\delta_{i+1,j}+\delta_{j+1,i}\right)$$

«+-» слагаемое

m+1 должно быть n или n' и т.д.

$$\frac{1}{2}\sum_{n\neq n',m}f_{nn'}\hat{S}_i^-\hat{S}_j^-\hat{S}_m^+\hat{S}_{m+1}^-\hat{S}_n^+\hat{S}_{n'}^+=$$
$$=\frac{1}{2}\sum_{n\neq n',m}f_{nn'}\left(\delta_{im}\left(\delta_{jn}\delta_{m+1,n'}+\delta_{jn'}\delta_{m+1,n}\right)+\delta_{jm}\left(\delta_{in}\delta_{m+1,n'}+\delta_{in'}\delta_{m+1,n}\right)\right)=$$
$$=\frac{1}{2}\left(f_{j,i+1}\big|_{j\neq i+1}+f_{i+1,j}\big|_{j\neq i+1}+f_{i,j+1}\big|_{j\neq i-1}+f_{j+1,i}\big|_{j\neq i-1}\right)$$

«-+» слагаемое

$$\frac{1}{2}\left(f_{j,i-1}\big|_{j\neq i-1}+f_{i-1,j}\big|_{j\neq i-1}+f_{i,j-1}\big|_{i\neq j-1}+f_{j-1,i}\big|_{i\neq j-1}\right)$$

… и наконец

$$\boxed{(E-E_0+2J)f_{ij}-\frac{J}{2}\left(f_{i,j+1}\big|_{i\neq j+1}+f_{i,j-1}\big|_{i\neq j-1}+f_{i+1,j}\big|_{i\neq j-1}+f_{i-1,j}\big|_{i\neq j+1}\right)=J f_{ij}(\delta_{i+1,j}+\delta_{j+1,i})}$$

от исключений слева избавляемся, добавляя исключённые члены справа

$$(E-E_0+2J)f_{ij}-\frac{J}{2}\left(f_{i,j+1}+f_{i,j-1}+f_{i+1,j}+f_{i-1,j}\right)=J f_{ij}(\delta_{i+1,j}+\delta_{j+1,i})-$$

$$-\frac{J}{2}\left(f_{ii}\delta_{i,j+1}+f_{ii}\delta_{i,j-1}+f_{jj}\delta_{i,j-1}+f_{jj}\delta_{i,j+1}\right)=J\left(\delta_{i+1,j}+\delta_{j+1,i}\right)\left(f_{ij}-\frac{f_{ii}+f_{jj}}{2}\right)$$

так как диагональные члены нефизичны — выбираем их по удобству
(работает только для S=1/2!)

$$\boxed{2f_{i,i+1}=f_{ii}+f_{i+1,i+1}}$$

и тогда:

$$\boxed{(E-E_0+2J)f_{ij}-\frac{J}{2}\left(f_{i,j+1}+f_{i,j-1}+f_{i+1,j}+f_{i-1,j}\right)=0}$$

угадываем $f_{nn'}=e^{i(kan+k'an'+\xi/2)}+e^{i(kan'+k'an-\xi/2)},\qquad n>n'$

граничные условия и уравнение «на диагональ» определяют k, k', ξ

$$\boxed{2f_{n,n+1}=f_{nn}+f_{n+1,n+1}}$$

$$2\left(e^{i(kan+k'a(n+1)+\xi/2)}+e^{i(ka(n+1)+k'an-\xi/2)}\right)=\left(e^{i((k+k')an+\xi/2)}+e^{i((k+k')an-\xi/2)}\right)+$$

$$+\left(e^{i((k+k')a(n+1)+\xi/2)}+e^{i((k+k')a(n+1)-\xi/2)}\right)$$

$$2\left(e^{i(k'a+\xi/2)}+e^{i(ka-\xi/2)}\right)=e^{i\xi/2}+e^{-i\xi/2}+e^{i((k+k')a+\xi/2)}+e^{i((k+k')a-\xi/2)}\quad\Big|:e^{i(k+k')a/2}$$

$$4\cos((k'-k)a/2+\xi/2)=2\cos(\xi/2)\cdot 2\cos((k+k')a/2)$$

$$\cos\left(\frac{(k-k')a}{2}\right)\cos\frac{\xi}{2}-\sin\left(\frac{(k-k')a}{2}\right)\sin\frac{\xi}{2}=\cos\frac{\xi}{2}\cos\left(\frac{(k+k')a}{2}\right)$$

$$-\left(\sin\frac{ka}{2}\cos\frac{k'a}{2}-\cos\frac{ka}{2}\sin\frac{k'a}{2}\right)\sin\frac{\xi}{2}=-2\cos\frac{\xi}{2}\sin\frac{ka}{2}\sin\frac{k'a}{2}$$

$$\underline{2\,ctg\frac{\xi}{2}=ctg\frac{k'a}{2}-ctg\frac{ka}{2}}$$

$$\boxed{f_{nN}=f_{0n}}$$

$$e^{i(kan+k'aN+\xi/2)}+e^{i(kaN+k'an-\xi/2)}=e^{i(k'an+\xi/2)}+e^{i(kan-\xi/2)}$$

$$kaN-\xi/2=\xi/2+2\pi p;\qquad k'aN+\xi/2=-\xi/2+2\pi p'$$

$$\underline{k=\frac{2\pi p+\xi}{aN};}\qquad \underline{k'=\frac{2\pi p'-\xi}{aN}}$$

два числа p, p' (от 1 до N)
задают двухчастичное состояние

$$\boxed{E-E_0=-J(2-\cos(ka)-\cos(k'a))}$$

ограничения на p, p': нужна вещественность k и k'

частный пример:

$$p' = p + 1$$

$$\cos\left(\frac{2p+1}{N}\pi\right) > 0$$

$$\Rightarrow \quad \xi = \pi + i\delta$$

$$k = \frac{(2\mathrm{p}+1)\pi}{aN} + i\frac{\delta}{aN}$$

$$k' = \frac{(2\mathrm{p}+1)\pi}{aN} - i\frac{\delta}{aN}$$

$$(k'-k)a + \xi = \pi + i\delta - 2\mathrm{i}\frac{\delta}{N}$$

$$\cos((k'-k)a/2 + \xi/2) = \cos(\xi/2)\cdot\cos((k+k')a/2)$$

$$\cos\left(\frac{\pi}{2} + i\frac{\delta}{2} - i\frac{\delta}{N}\right) = \cos\left(\frac{\pi}{2} + i\frac{\delta}{2}\right)\cdot\cos\left(\frac{2\mathrm{p}+1}{N}\pi\right)$$

$$sh\left(\frac{\delta}{2} - \frac{\delta}{N}\right) = sh\frac{\delta}{2}\cdot\cos\left(\frac{2\mathrm{p}+1}{N}\pi\right)$$

разрешимо на δ

Можно строго доказать, что проблем нет, если $\quad |p - p'| > 1$

обобщение на n-частичный случай

$$\psi_{k_1, k_2, \ldots, k_n} = \sum_{m_1, m_2, \ldots, m_n} f_{m_1, m_2, \ldots, m_n} \hat{S}^+_{m_1} \hat{S}^+_{m_2} \ldots \hat{S}^+_{m_n} \psi_0$$

$$f_{m_1, m_2, \ldots, m_n} = e^{i\left(k_1 m_1 a + k_2 m_2 a + \ldots + k_n m_n a + \frac{1}{2}\sum_{r<t}^{n} \xi_{k_r k_t}\right)} + \langle \textit{всевозможные перестановки} \rangle$$

$$\xi_{kk'} = -\xi_{k'k}$$

$$\boxed{\begin{gathered} 2\,ctg\frac{\xi_{kk'}}{2} = ctg\frac{ka}{2} - ctg\frac{k'a}{2} \\ k = \frac{2\pi p + \sum_{1}^{n}\xi_{kk'}}{aN} \end{gathered}}$$

$$\boxed{E - E_0 = -J\sum_{1}^{n}\left(1 - \cos k_i a\right)}$$

основное состояние: n=N/2 чисел p, не соседние.
То есть: 1,3,5,7,...,(N-1)

Энергия основного состояния. Путём несложных вычислений....

$$E-E_0=-J\sum_1^n(1-\cos k_i a)=-J\sum_{p=\{1,3,\ldots,N-1\}}\left(1-\cos\left(\frac{2\pi p+\sum\xi_{kk'}}{N}\right)\right)=$$
$$=-\frac{JN}{2}\int_0^1(1-\cos k(x))\,dx=-J\,N\int_0^1\sin^2\frac{k(x)}{2}\,dx$$

$$k(x)=2\pi x+\frac{1}{2}\int_0^1\xi(x,y)\,dy$$
$$2\,ctg\,\frac{\xi(x,y)}{2}=ctg\,\frac{k(x)}{2}-ctg\,\frac{k(y)}{2}$$

$$k(x)=2\pi x+\int_0^1 arcctg\left[\frac{ctg(k(x)/2)-ctg(k(y)/2)}{2}\right]dy$$

$$A=ctg\,\frac{k(x)}{2}\qquad\qquad B=ctg\,\frac{k(y)}{2}$$

$$f(A)=-\left(\frac{dA}{dx}\right)^{-1}\qquad\qquad f(B)=-\left(\frac{dB}{dy}\right)^{-1}$$

… вычисляем

$$E-E_0=-J\,N\int_0^1 \sin^2\frac{k(x)}{2}\,dx=-JN\int_0^1 \frac{1}{\dfrac{\cos^2(k(x)/2)}{\sin^2(k(x)/2)}+1}\,dx=$$

$$=-JN\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(A)\,dA}{1+A^2}$$

$$\frac{d\,k(x)}{dx}=2\pi+\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(B)/f(A)}{1+(A-B)^2/4}\,dB$$

тождество $\quad f(A)\dfrac{dk(x)}{dx}=\dfrac{2}{1+A^2}$

$$\frac{2}{1+A^2}=2\pi f(A)+\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{1+(A-B)^2/4}f(B)\,dB$$

добавляем Фурье-преобразование $\quad F_k=\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,e^{ikx}\,dx$

замена A'=A-B

$$\boxed{2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{ikA}}{1+A^2}\,dA=2\pi F_k+\iint_{-\infty}^{\infty} f(B)\frac{e^{ikA}}{1+(A-B)^2/4}\,dB\,dA}$$

… вычисляем

$$2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{ikA}}{1+A^2}dA=2\pi F_k+F_k\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{ikA'}}{1+\left(A'\right)^2/4}dA'$$

фурье-образ лоренциана - экспонента

$$\boxed{F_k=\frac{1}{2\mathrm{ch}\,k}}$$

$$E-E_0=-JN\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(A)\,dA}{1+A^2}=\frac{-JN}{2\pi}\iint_{-\infty}^{\infty}\frac{F(k)\,e^{-ikA}}{1+A^2}dA\,dk$$

И наконец:

$$\boxed{E-E_0=-JN\ln 2}$$

$$\left\langle\left(\hat{\vec{S}}_n\cdot\hat{\vec{S}}_0\right)\right\rangle\propto(-1)^n\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\frac{\sqrt{\ln n}}{n}$$

возбуждения гейзенберговскогом магнетика.

континуум, нижняя граница
$$\epsilon(q)=\frac{\pi J}{2}|\sin q|$$

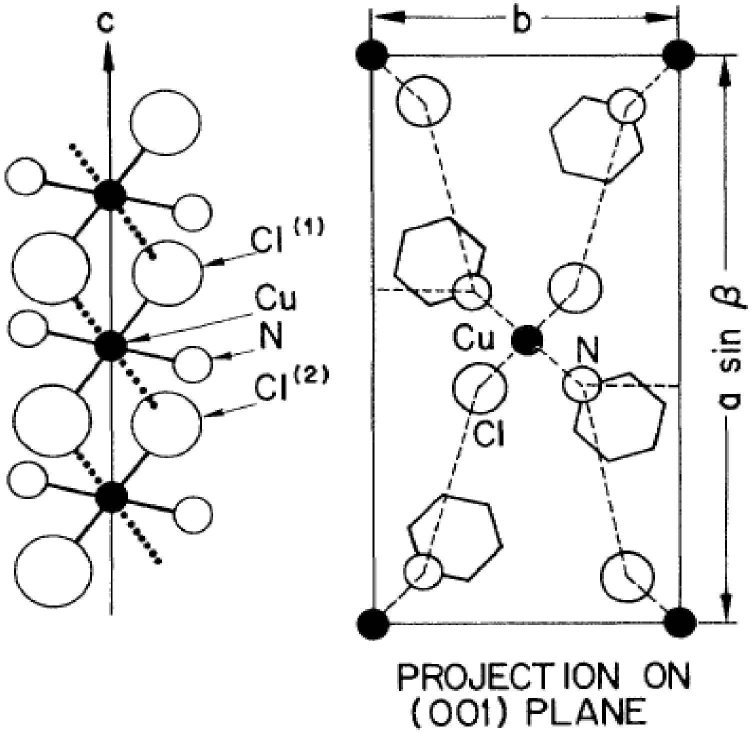
в π/2 раз жёстче обычных спиновых волн

верхняя граница
$$E_{max}=2\epsilon\left(\frac{q}{2}\right)=\pi J\left|\sin\frac{q}{2}\right|$$

плотность состояний вычисляема, имеет острый максимум на нижней границе

формально может быть описан введением частицы *спинона* со спином ½, при взаимодействии с внешним миром спиноны всегда рождаются парами.

Экспериментальные примеры



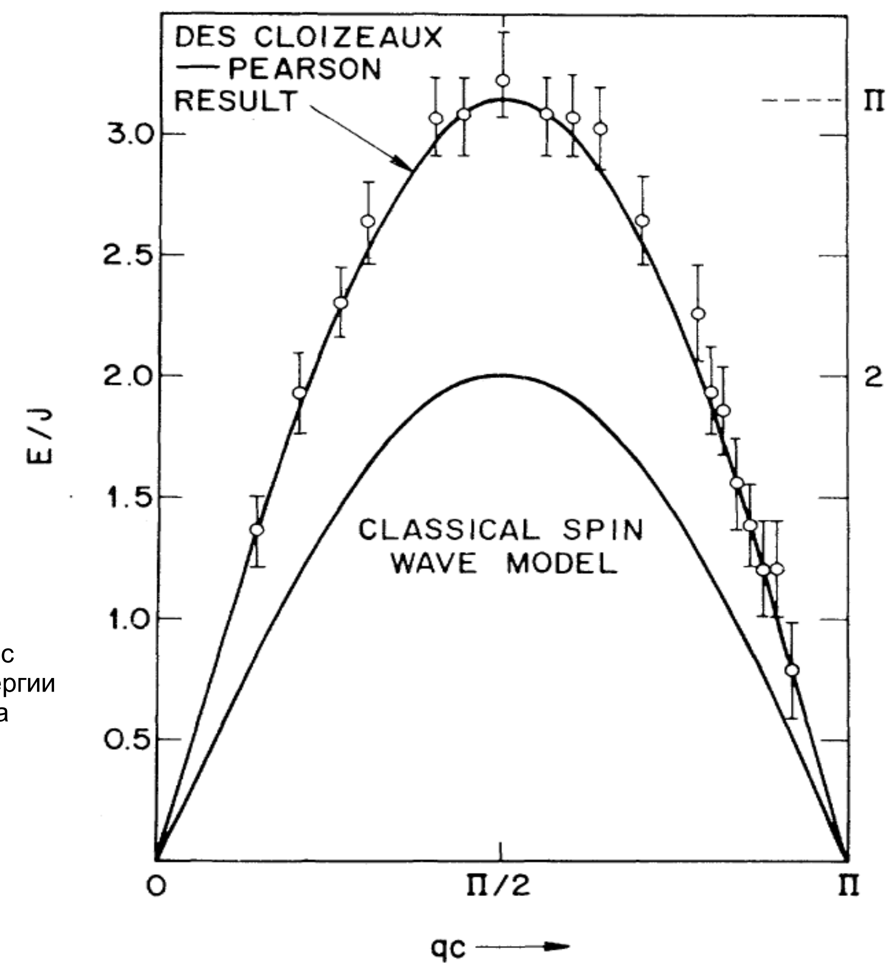
Кристаллическая структура CPC

$CuCl_2 \cdot 2N(C_5D_5)$ (сокращённо CPC)

$$a = 17.00\text{Å}$$
$$b = 8.59\text{Å}$$
$$c = 3.87\text{Å}$$
$$\beta = 91^0 52'$$

$$J = 26.8\text{K}$$

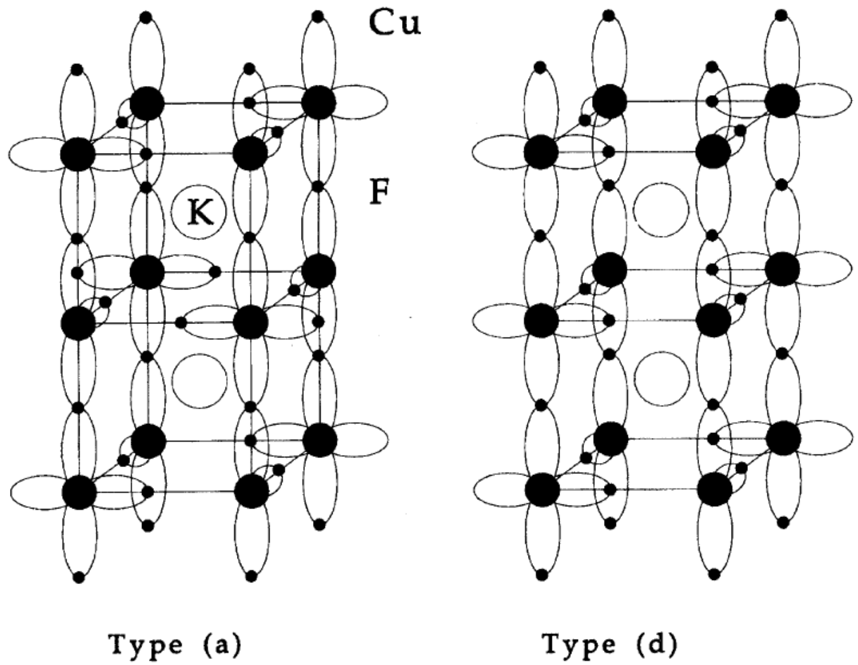
может быть определён независимо из магнитных измерений



Измеренный спектр возбуждений в одномерном антиферромагнетике CPC и сравнение с результатом классической теории и теории де Клуазо-Пирсона. Из работы. Единицы энергии отличаются вдвое от принятых в нашем курсе из за другой формы записи гамильтониана

Y. Endoh, G. Shirane, R. J. Birgeneau, Peter M. Richards, and S. L. Holt, Dynamics of an S=1/2, One-Dimensional Heisenberg Antiferromagnet, Physical Review Letters, 32, 170 (1974)

Экспериментальные результаты



Схематическое изображение структуры и ориентации электронных орбиталей на ионах меди для соединения $KCuF_3$ в двух политипных структурах (a) и (d).

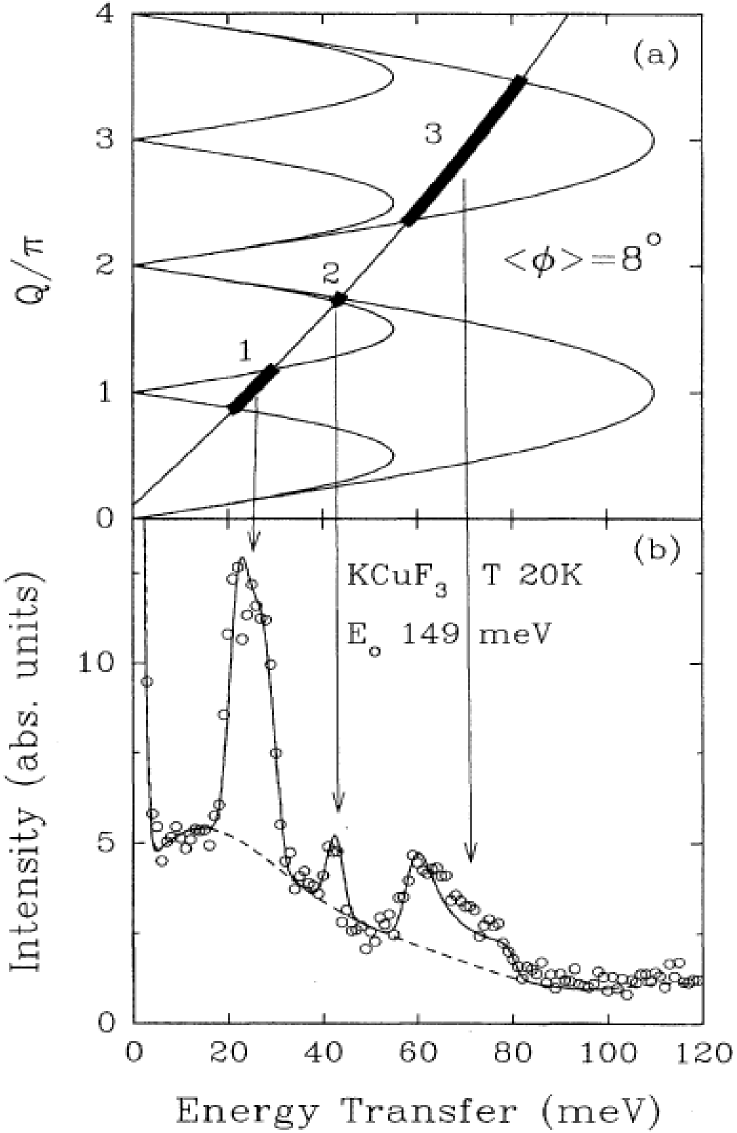
$$c = 3.914\text{Å}$$

$$a = b = 4.126\text{Å}$$

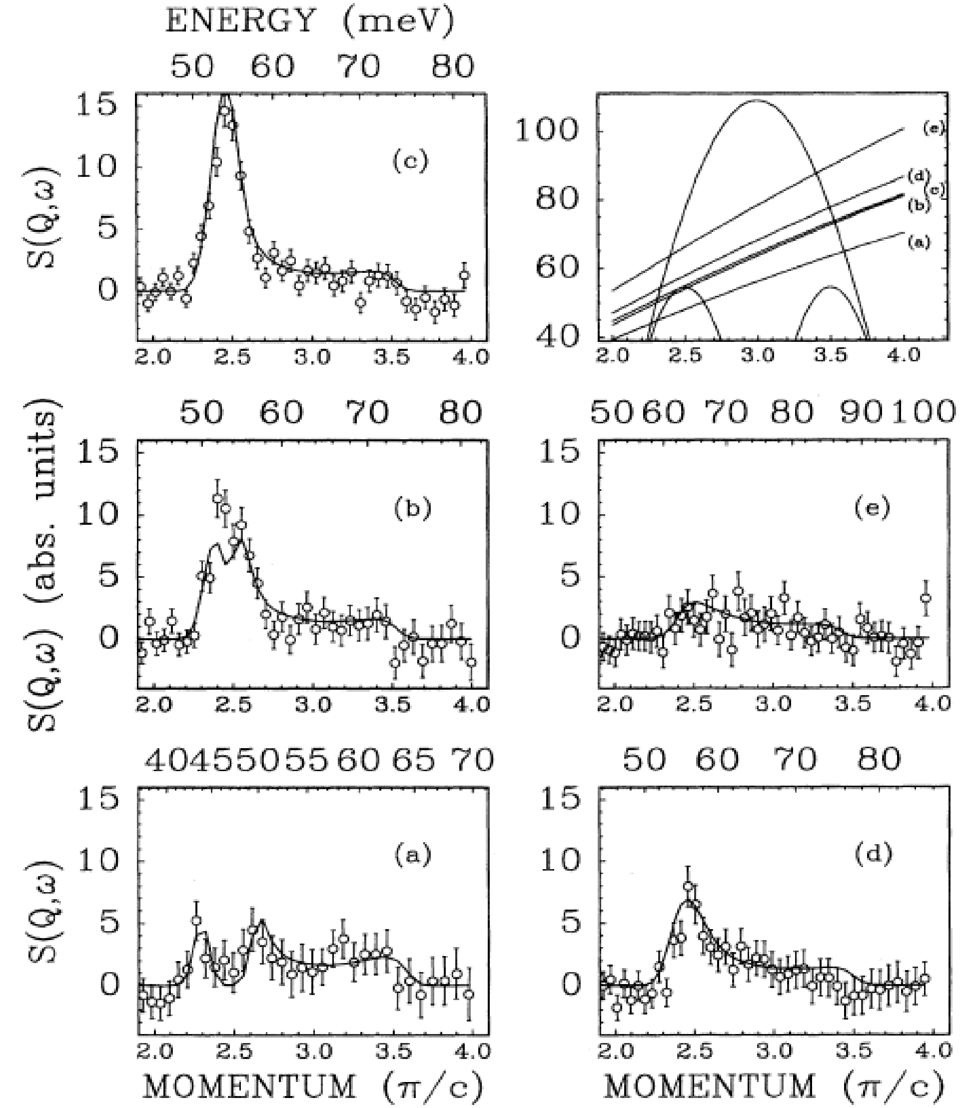
Обменный интеграл (антиферромагнитного знака) вдоль цепочки равен примерно 35 мэВ (около 380К). Из-за слабого межцепочечного (ферромагнитного в случае $KCuF_3$) взаимодействия наступает дальний магнитный порядок при температуре 39К для структуры вида (a) и 22К для структуры вида (d).

D. Alan Tennant and Roger A. Cowley, Stephen E. Nagler, Alexei M. Tsvelik, Measurement of the spin-excitation continuum in one-dimensional KCuF3 using neutron scattering, Physical Review B, (1995)

Экспериментальные результаты



а) Траектория по которой исследуется передача энергии и импульса. (b) Профиль интенсивности рассеяния вдоль этой траектории. Символы - эксперимент, сплошная кривая - теоретическое описание в двухспинонной модели, пунктирная кривая - фон.



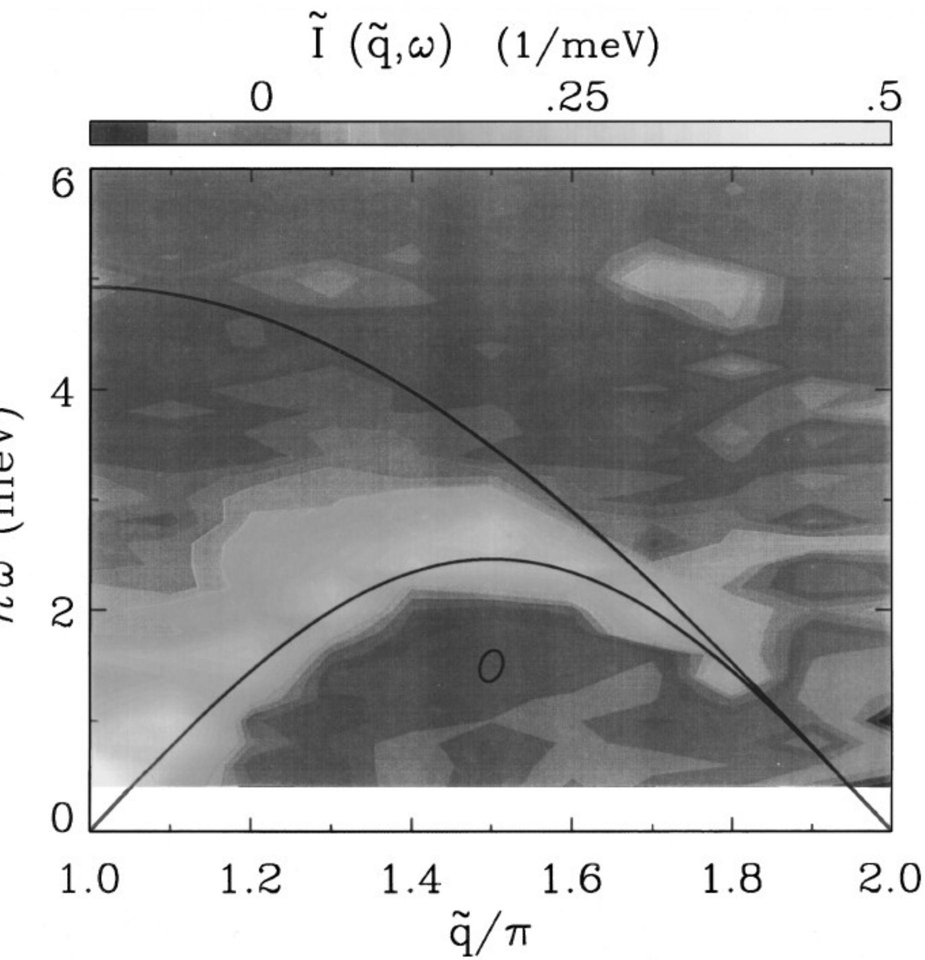
Набор траекторий для измерения передачи импульса и энергии при неупругом рассеянии нейтронов и соответсвующие профили рассеяния. T=50K. Сплошные линии — расчёт в двухспинонной модели.

D. Alan Tennant and Roger A. Cowley, Stephen E. Nagler, Alexei M. Tsvelik, Measurement of the spin-excitation continuum in one-dimensional KCuF3 using neutron scattering, Physical Review B, (1995)

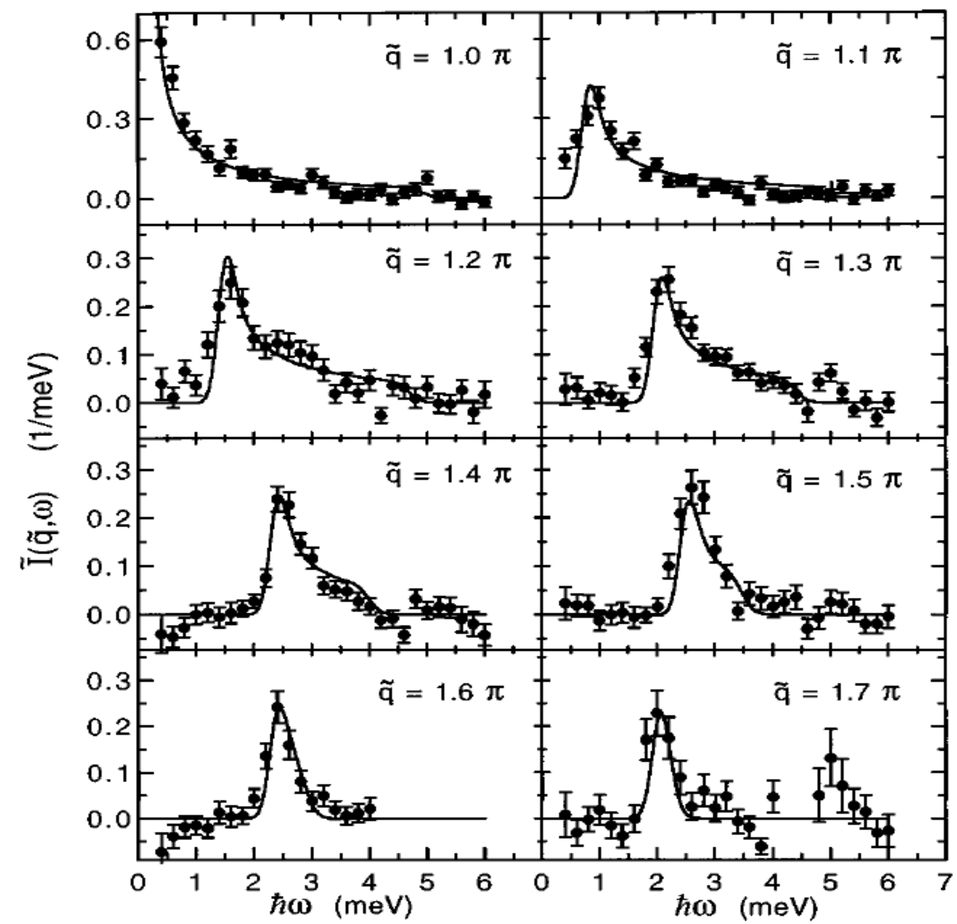
Экспериментальные результаты

$Cu(C_6D_5COO)_2 \cdot 3D_2O$

Определённый по кривым восприимчивости обменный интеграл равен 1.57мэВ (18.2К), слабое межцепочечное взаимодействие приводит к упорядочению при 0.76К.



D. C. Dender, D. Davidovic, Daniel H. Reich, and Collin Broholm, Kim Lefmann, G. Aeppli, Magnetic properties of a quasi-one-dimensional S=1/2 antiferromagnet: Copper benzoate, Physical Review B, 53, 2583 (1996)



Профили рассеяния с постоянной передачей импульса. Кривые — модельный расчёт в двухспинонной модели.