

В.Н.Глазков  
«Физика низкоразмерных систем»  
слайды к лекции 10

Спиновые цепочки в магнитном поле.

# Высокотемпературное разложение

$$\langle S_i^z \rangle = \frac{\sum_n S_i^z(n) e^{-\frac{E_n}{T}}}{\sum_n e^{-\frac{E_n}{T}}} = \frac{\text{Sp} \left( \hat{S}_i^z e^{-\frac{\hat{H}}{T}} \right)}{\text{Sp} \left( e^{-\frac{\hat{H}}{T}} \right)} = \frac{\text{Sp} \left( \sum_n S_i^z \left( \frac{-\hat{H}}{T} \right)^n \frac{1}{n!} \right)}{\text{Sp} \left( \sum_n \left( \frac{-\hat{H}}{T} \right)^n \frac{1}{n!} \right)}$$

След матрицы можно вычислять в любом удобном базисе, например — в базисе с определёнными значениями  $S_z$  на узле.

Остановиться на нужном порядке по  $(1/T)$

в первом порядке  $\langle S_i^z \rangle = -\frac{1}{2^N T} \text{Sp} \left( S_i^z \sum_p \left( J S_p^z S_{p+1}^z + \frac{J}{2} (S_p^+ S_{p+1}^- + S_p^- S_{p+1}^+) - g \mu_B H S_p^z \right) \right)$

$$\langle S_i^z \rangle = \frac{g \mu_B H}{2^N T} \text{Sp} \left( (S_i^z)^2 \right) = \frac{g \mu_B H}{4T} \quad (\text{закон Кюри})$$

во втором (для цепочки)

$$\langle \delta S_i^z \rangle = \frac{g \mu_B H}{4T} - \frac{J g \mu_B H}{8T^2} = \frac{g \mu_B H}{4T} \left( 1 - \frac{J}{2T} \right) \quad (\text{закон Кюри-Вейса})$$

$$\Theta = \frac{J}{2} = 2 \frac{S(S+1)}{3} J$$

известны примеры до  $(1/T)^{10}$ , работает до  $T \sim J$

## Низкотемпературная асимптотика Эггерта-Аффлека-Тахакаши

$$\chi(T) \approx \frac{g^2 \mu_B^2}{\pi^2 J} \left( 1 + \frac{1}{2 \ln(T/T_0)} \right)$$

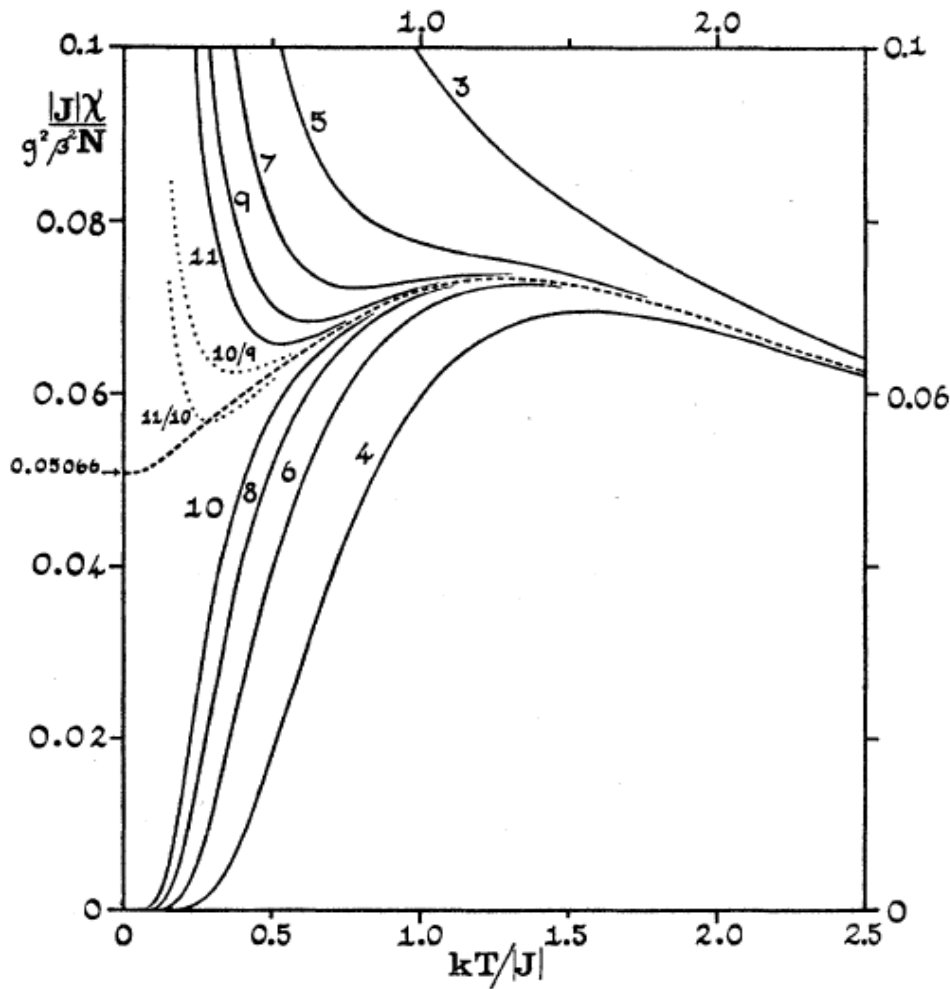
результат из модели жидкости Латтинжера  
для параметра  $T_0 = 7.7J$  из анзаца Бете

Одномерная цепочка при  $T \rightarrow 0$  парамагнетик, порядка нет. Но восприимчивость конечна:

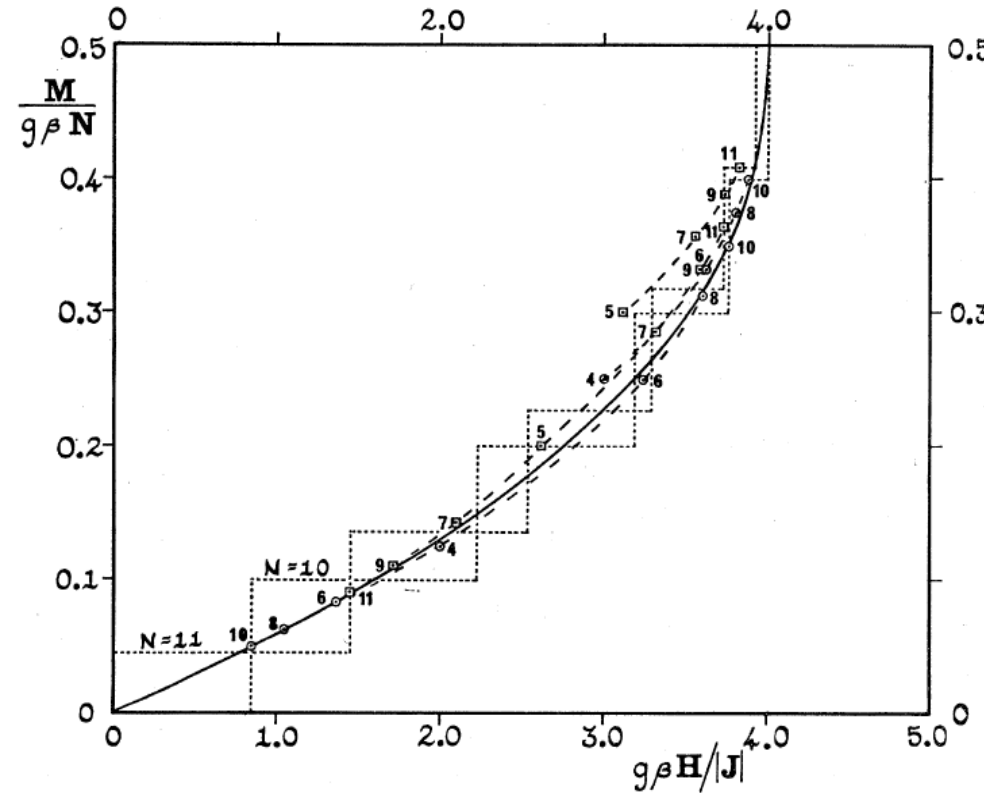
$$0.1 g^2 \mu_B^2 / J$$

Это примерно соответствует восприимчивости парамагнетика невзаимодействующих спинов при  $T \sim 2.5J$

# Численные методы: точная диагонализация для конечных цепочек.

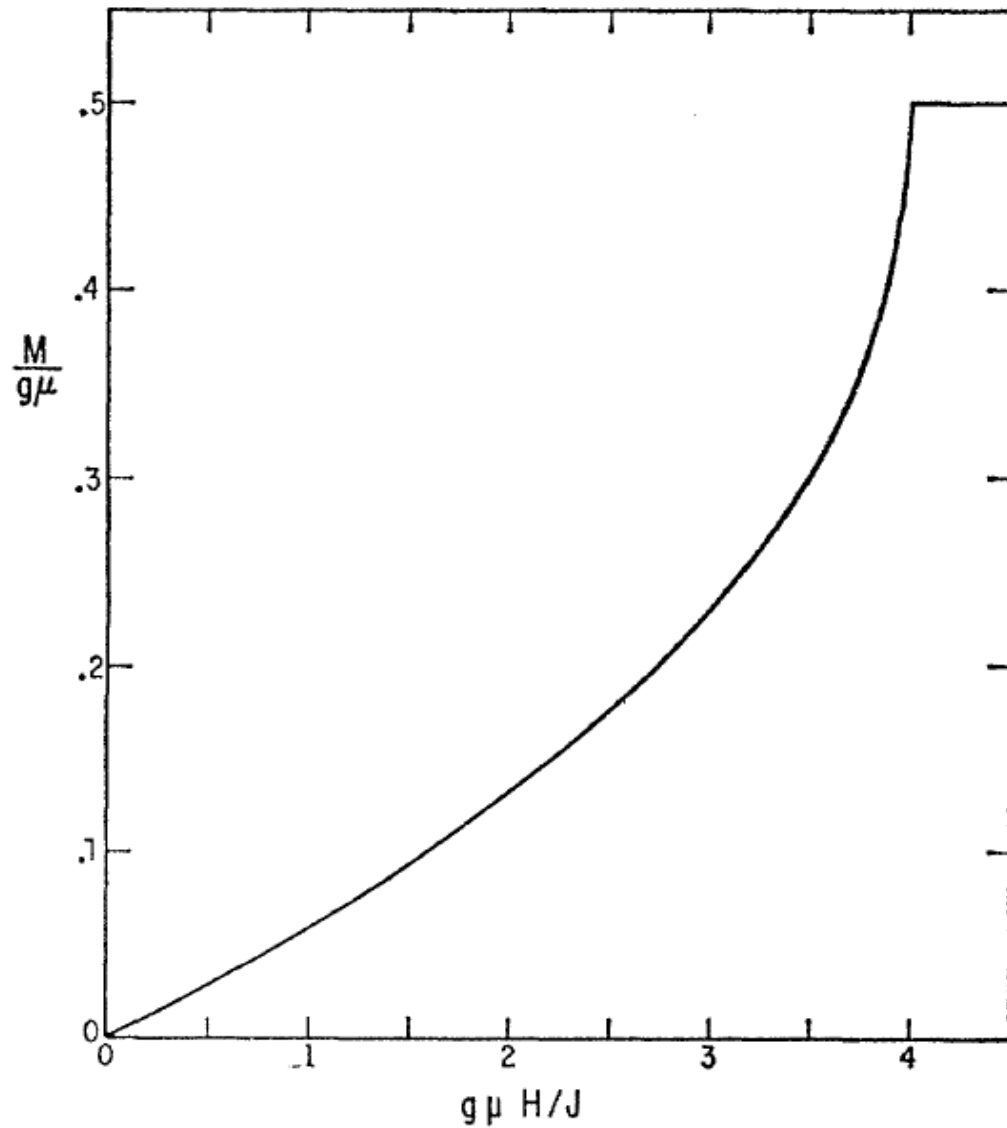


Результаты численного счёта (точная диагонализация) для колец из разного числа спинов. В принятых в цитируемой работе обозначениях обменный интеграл  $J$  вдвое меньше, чем в обозначениях нашего курса.



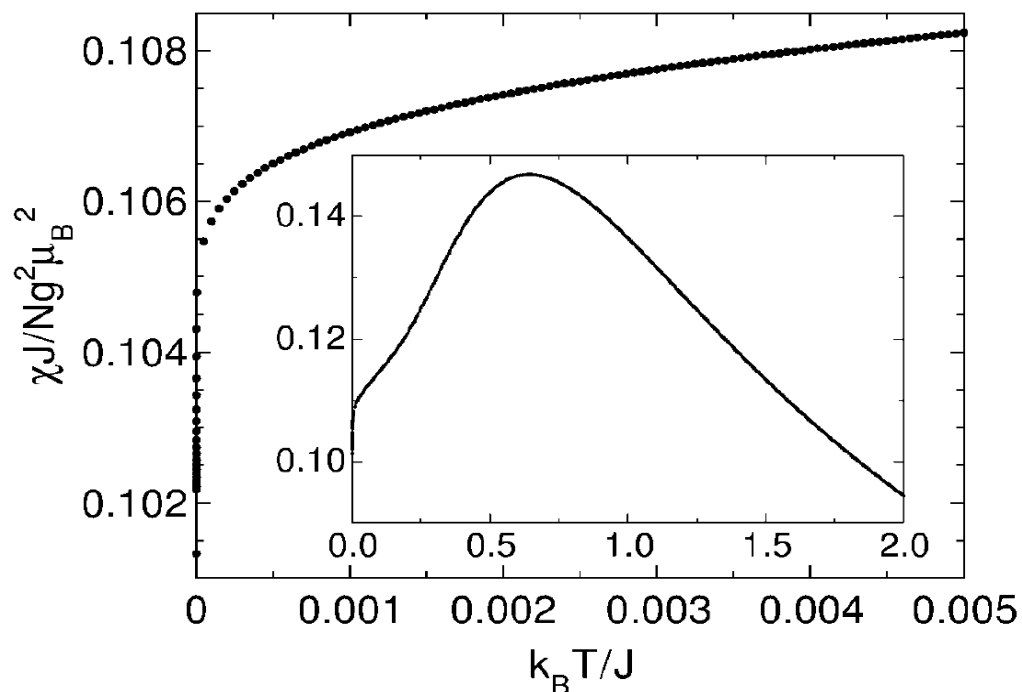
Кривая намагниченности при нулевой температуре, построенная по результатам точной диагонализации колец из конечного числа спинов. Символы - данные численного счёта, цифра рядом с символом показывает длину кольца. В принятых в цитируемой работе обозначениях обменный интеграл  $J$  вдвое меньше, чем в обозначениях нашего курса.

## Численные методы: точная диагонализация для конечных цепочек.

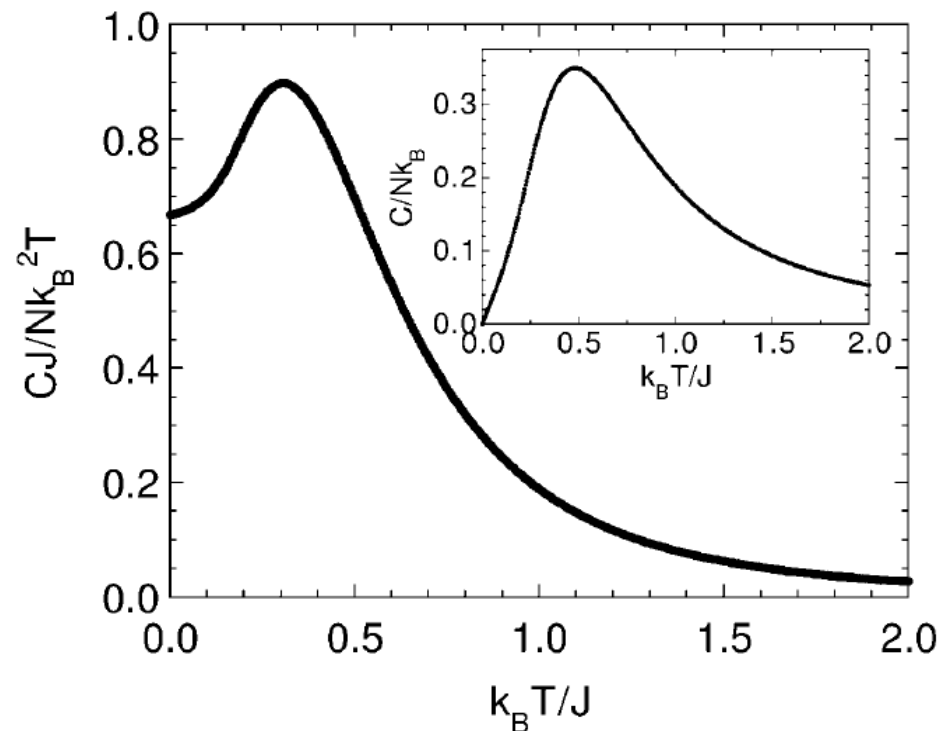


Кривая намагниченности антиферромагнитной гейзенберговской цепочки при нулевой температуре. В принятых в цитируемой работе обозначениях обменный интеграл  $J$  вдвое меньше, чем в обозначениях нашего курса.

## Численные методы: DMRG.



Магнитная восприимчивость гейзенберговской цепочки спинов 1/2. Численный расчёт методом DMRG.



(вставка) Зависимость удельной теплоёмкости гейзенберговской цепочки спинов 1/2 от температуры. (главная панель) Зависимость отношения  $C/T$  от температуры. Результаты численного расчёта методом DMRG

$$\chi_{max} = 0.146926279(1) \frac{g^2 \mu_B^2}{J}$$

$$T(\chi_{max}) = 0.6408510(4) J$$

$$C_{max} = 0.3497121235(2)$$

$$T(C_{max}) = 0.48028487(1) J$$

= способ независимого  
определения  
обменного интеграла

## Высокополевым предел

$$E_0 = \frac{NJ}{4} - g\mu_B |H| \frac{N}{2} \quad \text{энергия поляризованного состояния в поле}$$

$$E(k) = \frac{NJ}{4} - J(1 - \cos(ka)) - g\mu_B |H| \left( \frac{N}{2} - 1 \right) \quad \text{энергия состояния с одним возбуждением в поле}$$

$$H_c = 2J / (g\mu_B)$$

$$\chi(H \rightarrow 0) \approx 0.1 \frac{g^2 \mu_B^2}{J} < \frac{g^2 \mu_B^2}{4J} \quad \longrightarrow \quad \chi(H \rightarrow 0) H_c < M_{sat} = \frac{g\mu_B}{2}$$

должна быть нелинейность

## Высокополевого предел: вычисление

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

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

взаимодействием можно пренебречь при малой концентрации возбуждений вблизи  $H_c$

$$\hat{H}_{XXZ} = J \sum_n \left[ \frac{1}{2} (c_n^+ c_{n+1} + c_n c_{n+1}^+) \right] - g \mu_B (H + H_c) \sum_n c_n^+ c_n + \frac{NJ}{4} + \frac{N}{2} g \mu_B H$$

$$\epsilon(k) = J \cos(ka)$$

$$\mu = g \mu_B (H + H_c) = g \mu_B (H_c - |H|)$$

Вблизи  $H_c$  фермионы заполняют минимум спектра до уровня химпотенциала

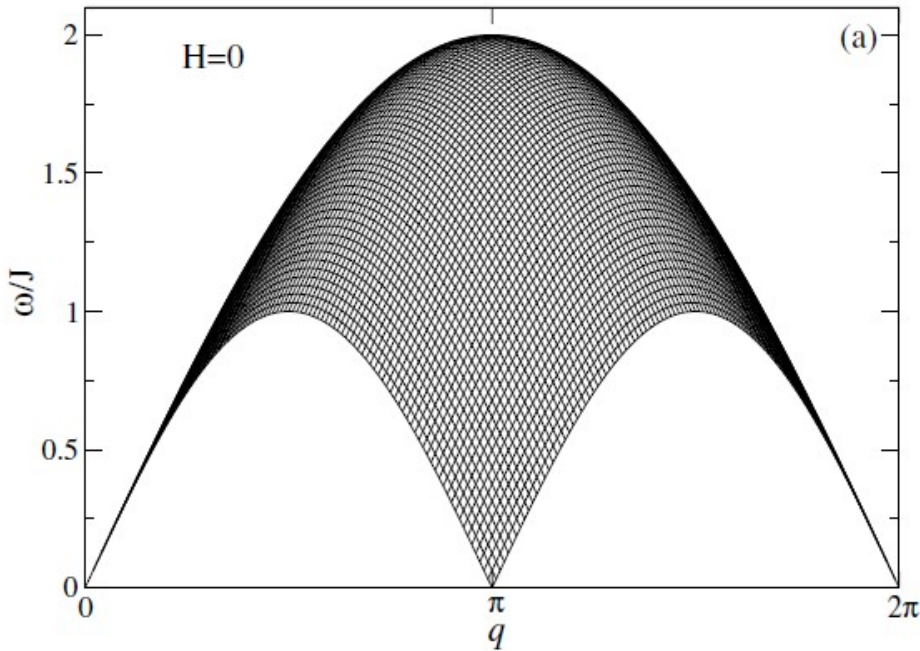
$$\epsilon(q) = J \frac{(qa)^2}{2} \quad q_F = \frac{1}{a} \sqrt{\frac{2g \mu_B (H_c - |H|)}{J}}$$

каждый фермион уменьшаем полный спин на 1

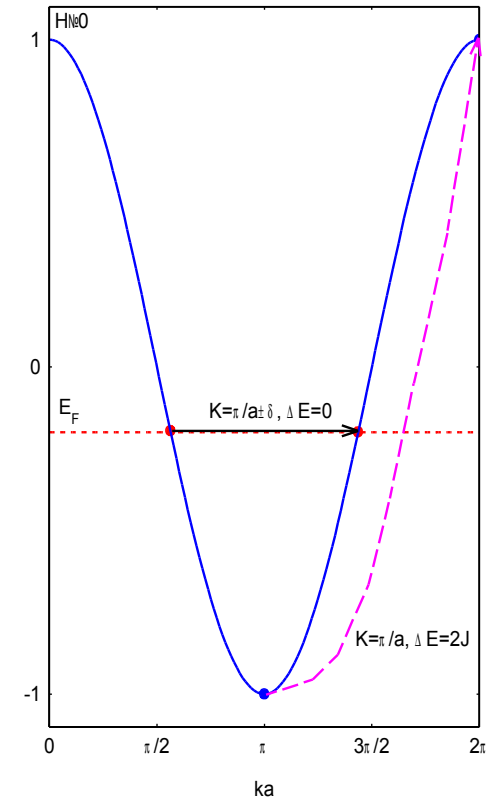
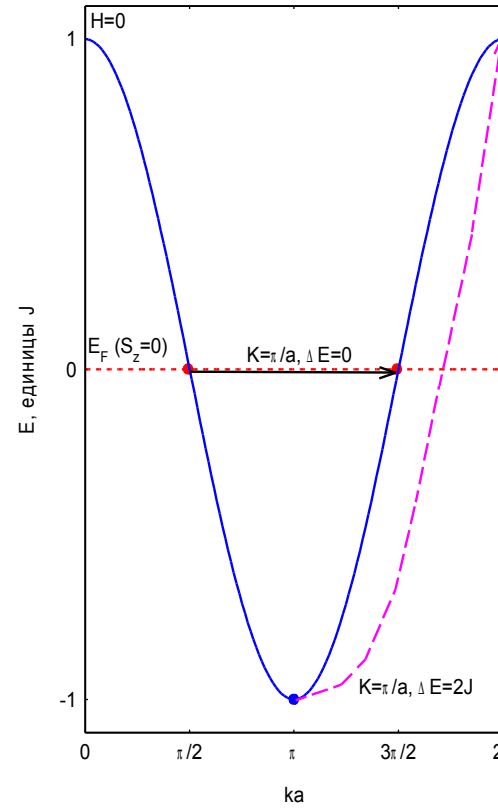
$$n = \frac{2q_F}{2\pi/(Na)} = N \frac{\sqrt{2}}{\pi} \sqrt{\frac{g \mu_B (H_c - |H|)}{J}} \quad \langle S \rangle = \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{2}}{\pi} \sqrt{\frac{g \mu_B (H_c - |H|)}{J}}$$



# Спектр возбуждений XY-модели: нули и максимумы.



Спектр возбуждений XY-гамильтониана в подпространстве  $S_z=0$ . Этот спектр соответствует нулевому магнитному полю.



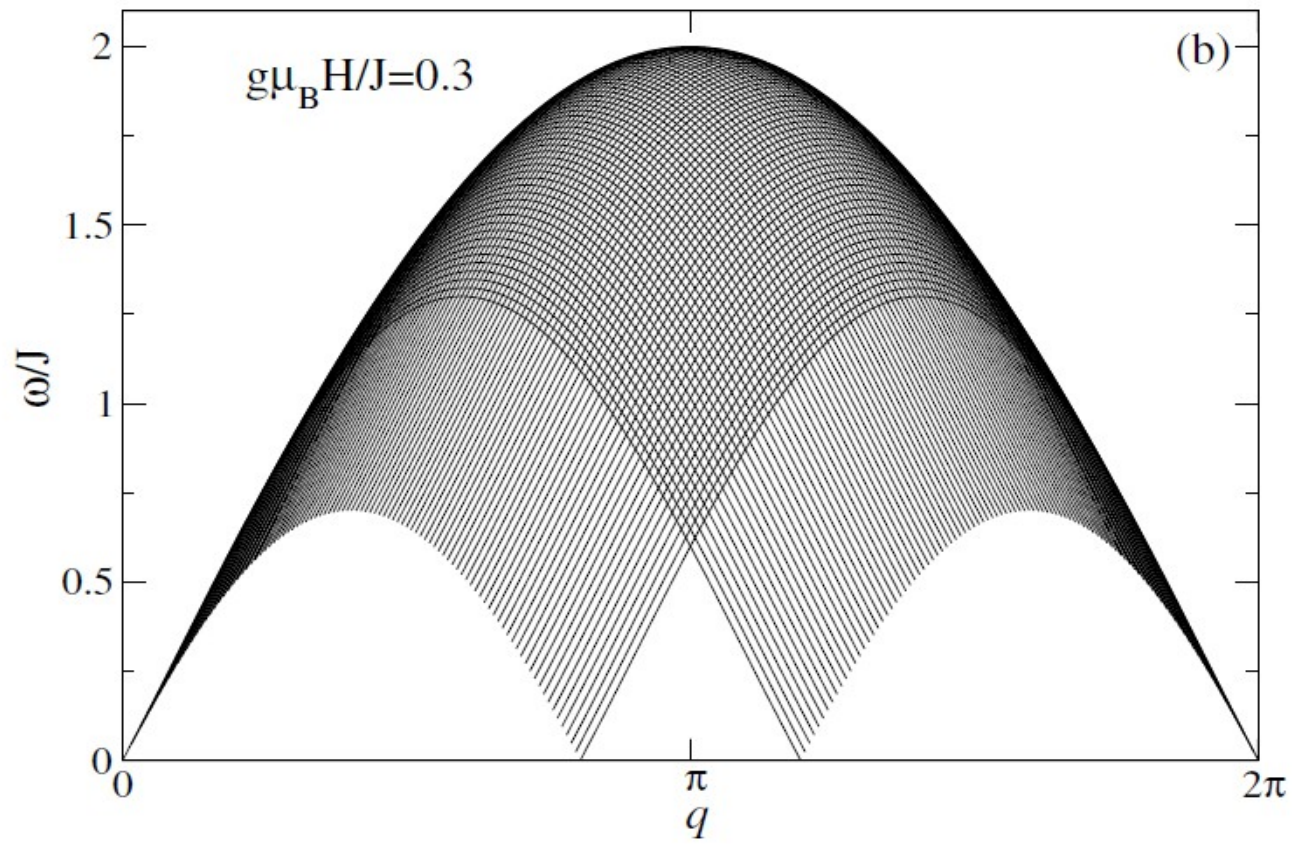
Положение возбуждений, соответствующих максимальной энергии и смягчению спектра на спектре XY модели без поля (слева) и в поле (справа) для сектора возбуждений  $S_z=0$ .

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

в XY модели  $\Delta=0$

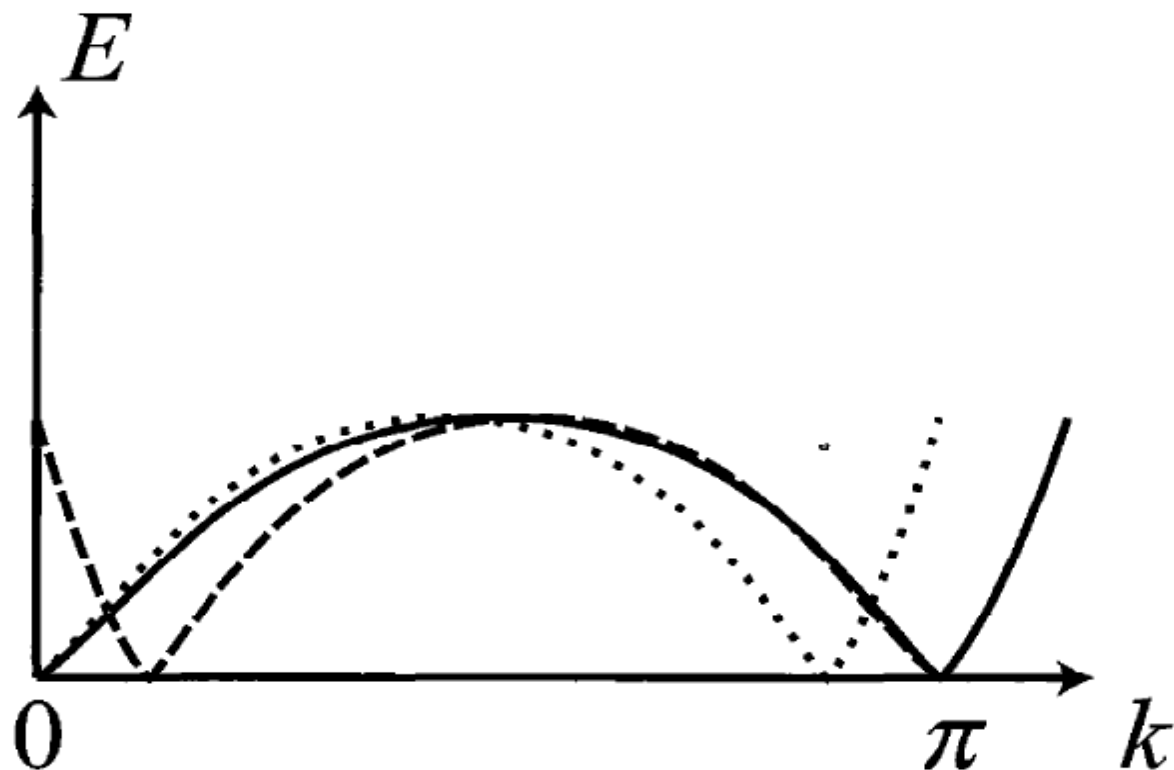
химпотенциал

# Спектр ХУ-модели в магнитном поле



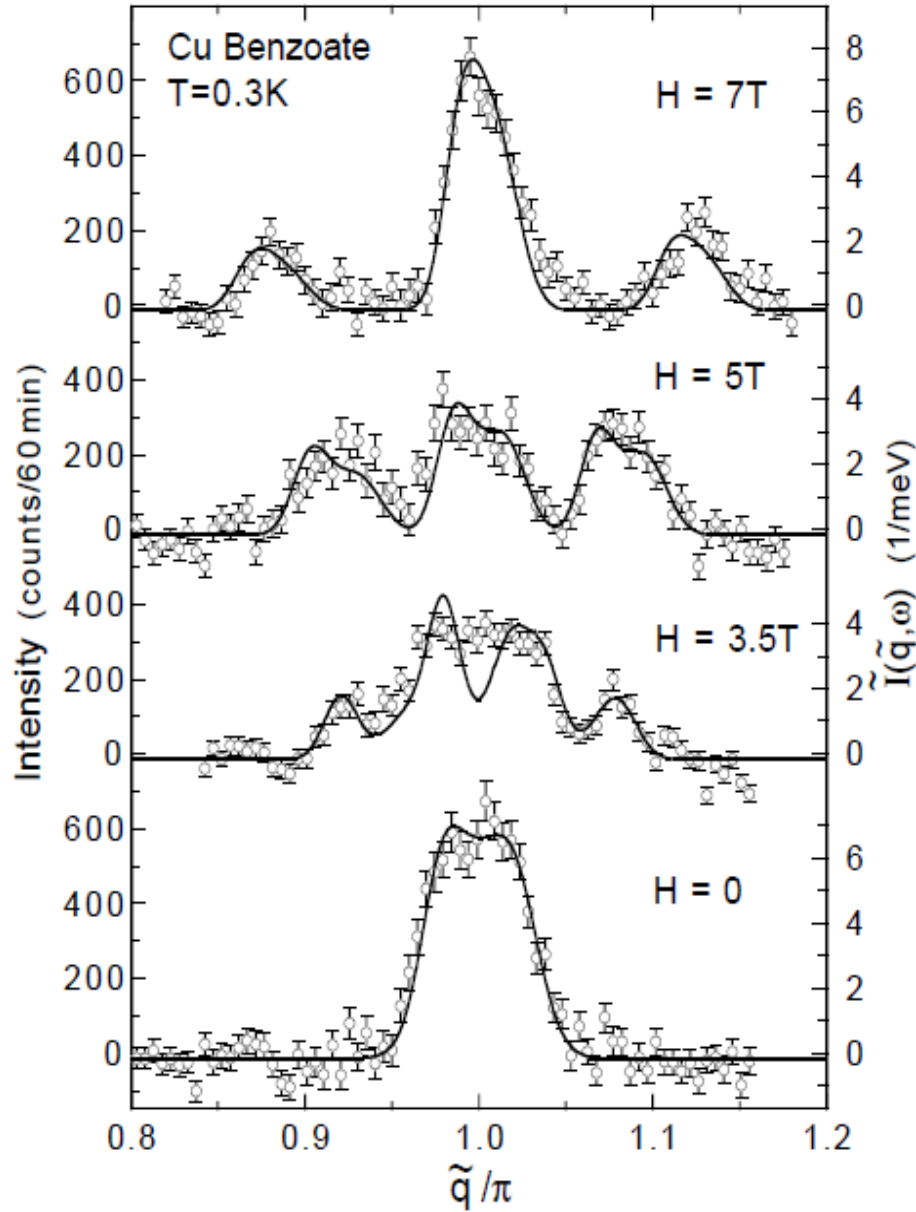
Спектр возбуждений в секторе  $\Delta S_z = 0$  для ХУ-модели в магнитном поле.

# Спектр гейзенберговской цепочки в поле.

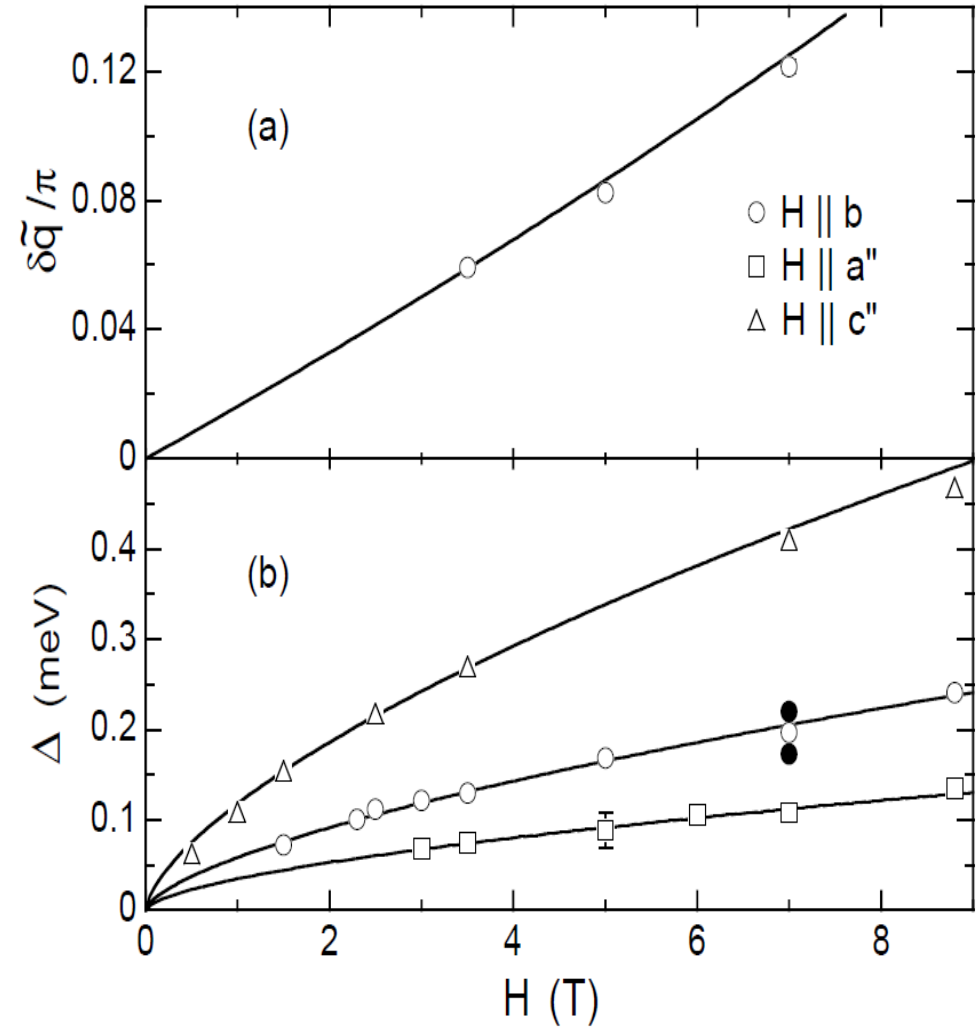


Схематическое изображение нижней границы континуума в отсутствие магнитного поля (сплошная линия) и при наличии поля. Пунктирная кривая соответствует возбуждениям, поляризованным перпендикулярно к полю, точечная кривая - возбуждениям, поляризованным параллельно к полю.

# Эксперимент: трансформация спектра в поле

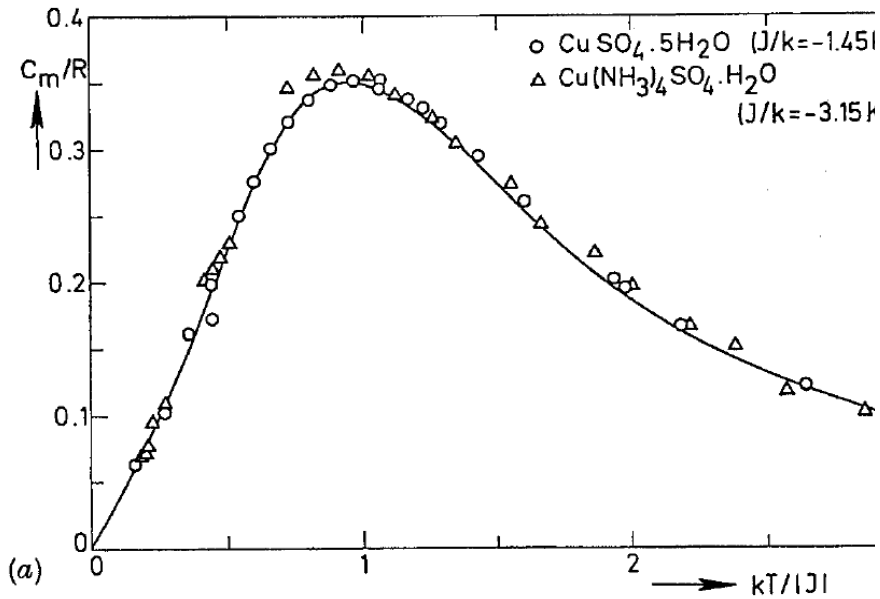


Интенсивность рассеяния в бензоате меди в разных магнитных полях. Кривые — теоретический расчёт.

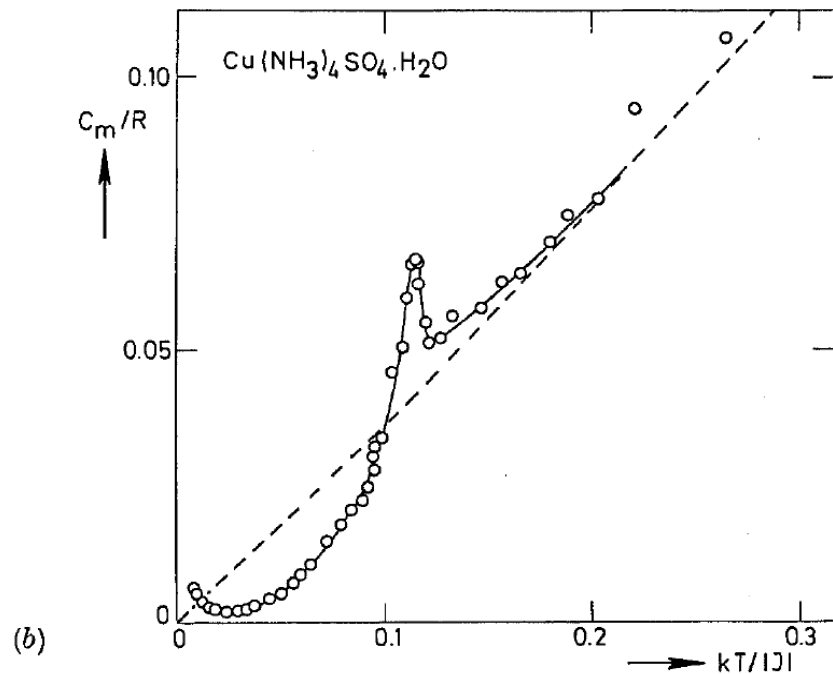


(вверху) Зависимость сдвига мягких мод в бензоате меди от магнитного поля. Символы - эксперимент, прямая линия - теоретический расчёт. (внизу) Зависимость щели в спектре от магнитного поля. Открытые символы - оценка щели из измерения теплоёмкости, закрашенные - непосредственное измерение щели по рассеянию нейтронов в поле 7 Тл на волновом векторе  $\pi$  и  $1.12\pi$ . Кривые соответствуют эмпирическому степенному закону  $H^{0.65}$ .

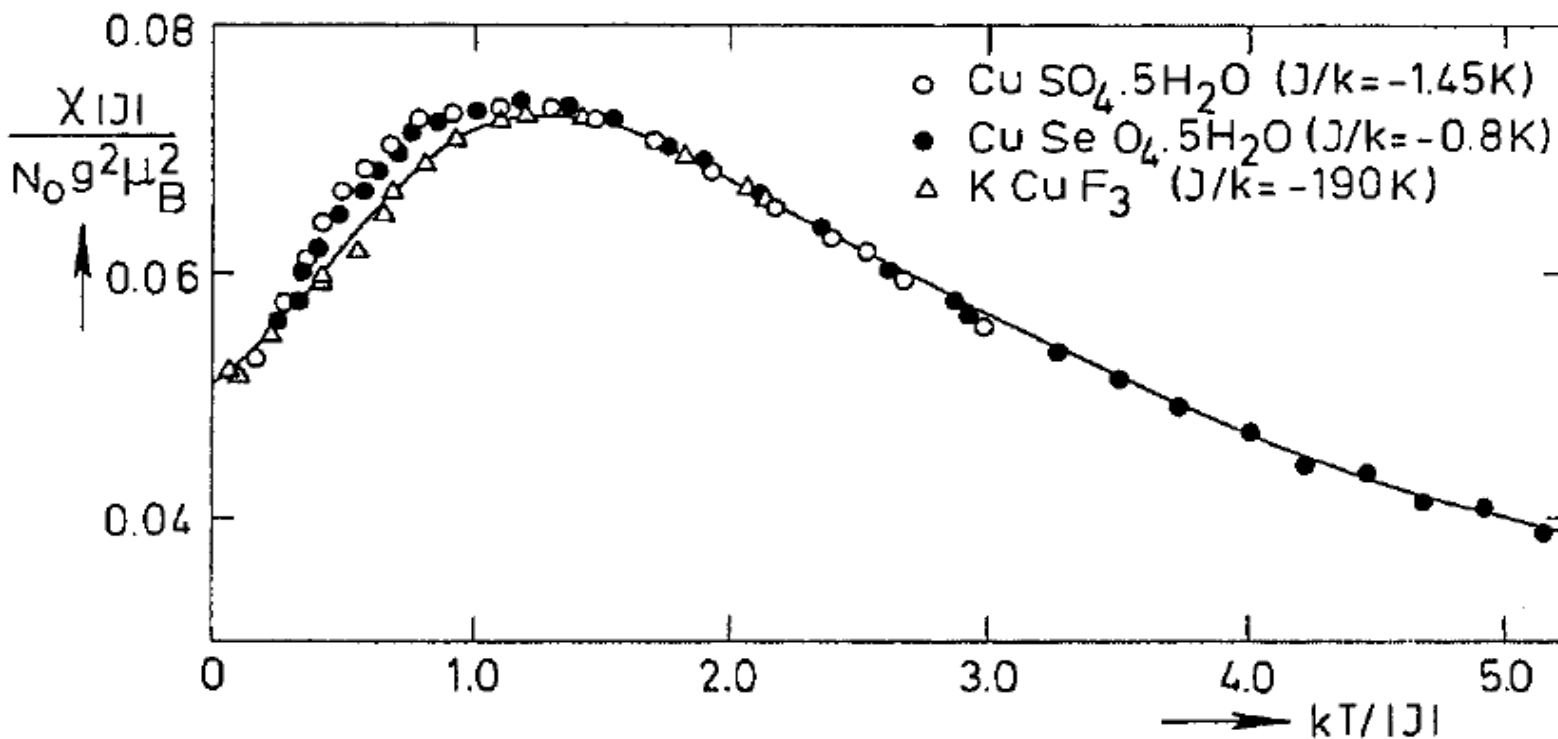
# Эксперимент: теплоёмкость и намагниченность



Зависимости теплоёмкости от температуры для двух квазиодномерных гейзенберговских антиферромагнетиков. Параметры обменного взаимодействия равны 2.90K для  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  и 6.30 K для  $\text{Cu}(\text{NH}_3)_4\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (отличие в знаке и множителе 2 в надписи на рисунке связано с принятой в оригинальной работе формой записи гамильтониана). Кривая на верхнем рисунке — теоретический расчёт

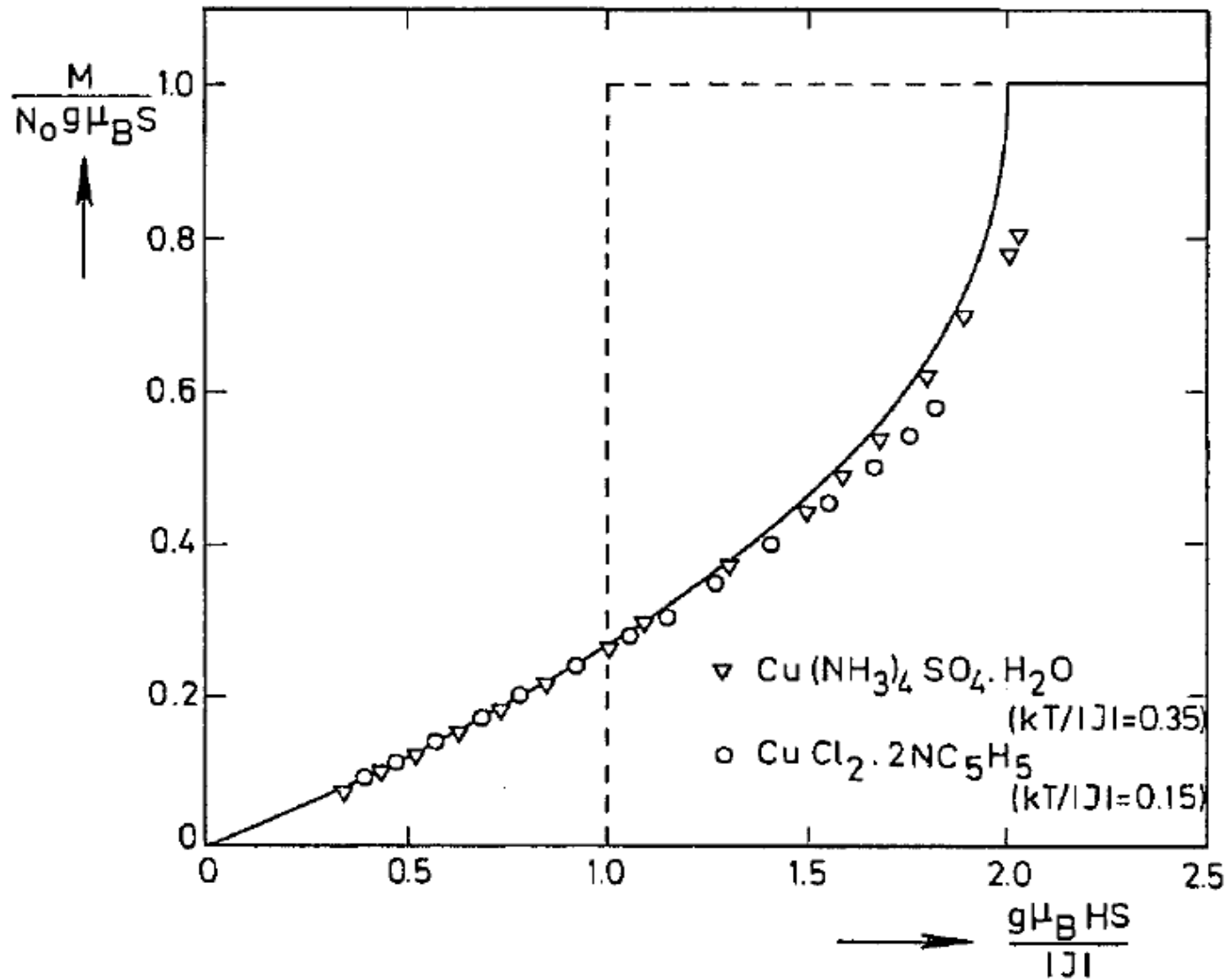


## Эксперимент: теплоёмкость и намагниченность



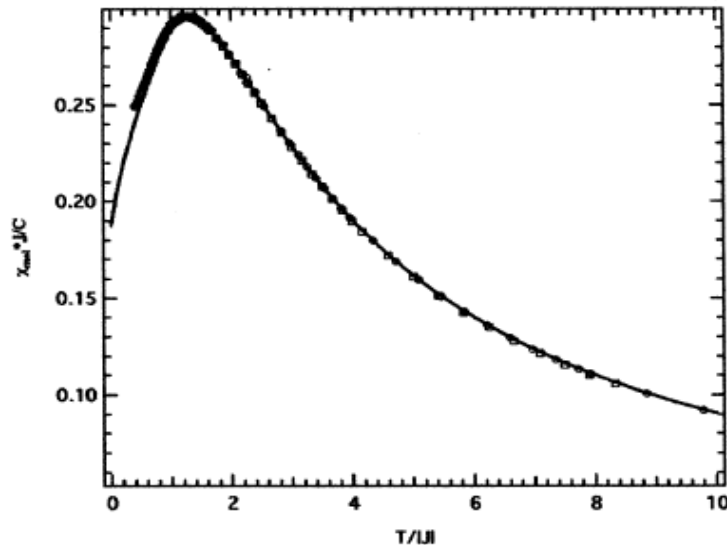
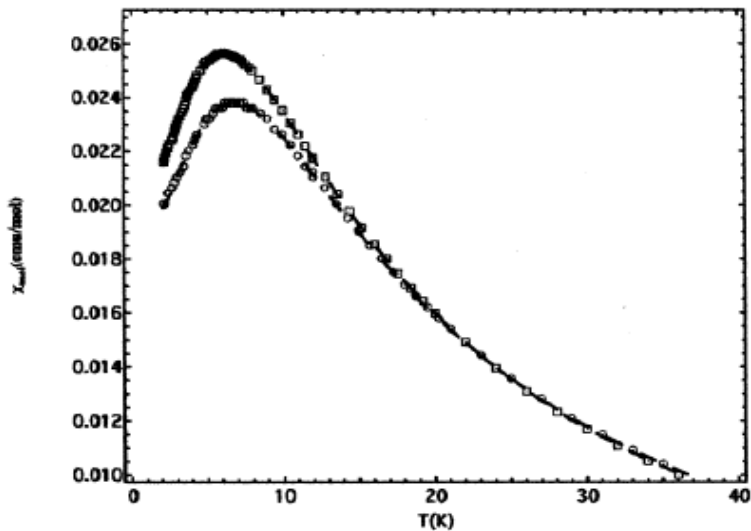
Пример сравнения кривых восприимчивости для нескольких соединений с теоретической кривой. Приведённые на рисунке значения обменных интегралов отличаются знаком и множителем 2 из за принятой в оригинальной работе формы записи гамильтониана. В обозначениях настоящего курса обменный интеграл должен быть удвоен.

# Эксперимент: теплоёмкость и намагниченность

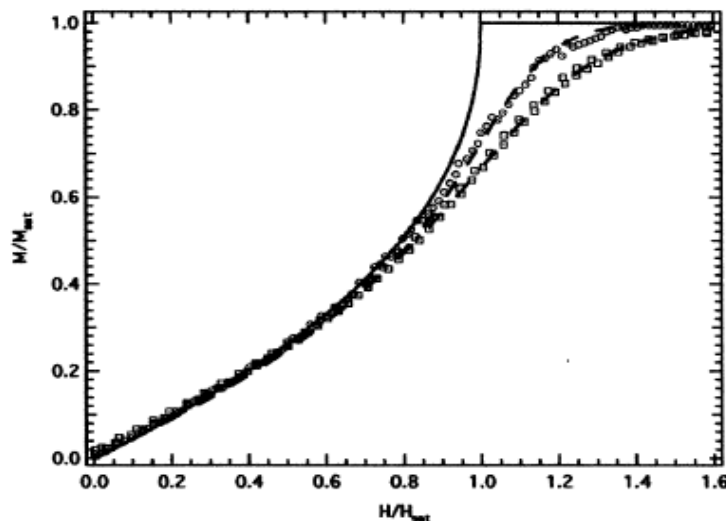
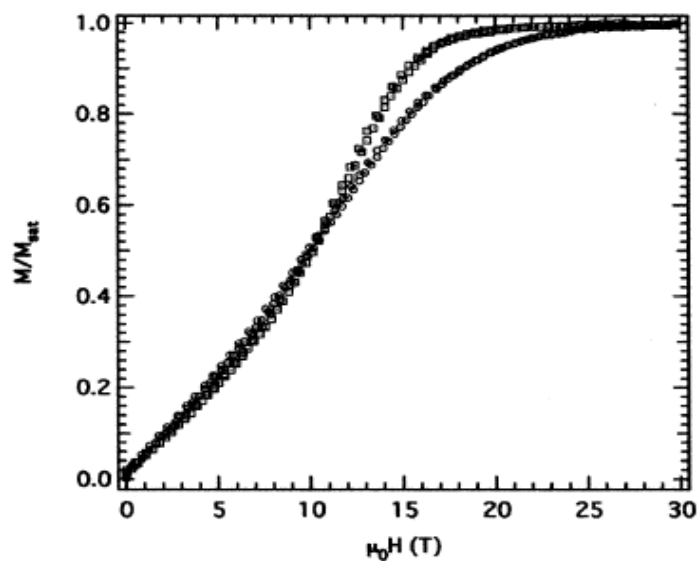


Пример сравнения кривых намагниченности для нескольких соединений с теоретической кривой. Пунктирная кривая соответствует модели Изинговского антиферромагнетика. Приведённые на рисунке значения обменных интегралов отличаются знаком и множителем 2 из за принятой в оригинальной работе формы записи гамильтониана. В обозначениях настоящего курса обменный интеграл должен быть удвоен.

# Эксперимент: теплоёмкость и намагниченность



Кривые восприимчивости для двух квазиодномерных соединений меди (2-метилпиразин нитрат меди и пиразин нитрат меди). Используемые на правом рисунке значения обменных интегралов отличаются множителем 2 из за принятой в оригинальной работе формы записи гамильтониана. В обозначениях настоящего курса обменный интеграл должен быть удвоен.



Левый рисунок: Кривые намагниченности для 2-метилпиразин динитрата меди при 2K и 4.2K. Правый рисунок: сравнение с теоретической кривой для 2-метилпиразин динитрата меди и пиразин динитрата меди.