第十四讲

§ QRM 的 Neel state，由量子与热涨落带来的失稳

前面讨论 magnon 激发的出发点是：1. 基态 $\vec{n}_i$ 指向同一方向，没有了方向。

2. magnon 导致的偏离是"小"的

现在我们来看看我们的理论是否自洽。

即：如果我们运用 spin wave 理论计算 $\langle\phi^2\rangle$，它应该是个"小"量。（$\phi_x\to n_x,\ \phi_y\to n_y,\ n_z=1$）

$\pi_x\to L_y,\ \pi_y\to -L_x,\ L_z\approx 0$

由于 $\omega(\vec{q})=\sqrt{\frac{Jc}{I}}\left(2d-2\cos(q_x a)-2\cos(q_y a)-\cdots\right)^{\frac{1}{2}}\propto|\vec{q}|$ 线性

$$\boxed{H=\frac{1}{N_s}\sum_{\vec{q}}\left[\frac{|\vec{\pi}(\vec{q})|^2}{2I}+\frac{1}{2}I\omega^2(\vec{q})|\phi(\vec{q})|^2\right]}$$

当 $|\vec{q}|\to 0$，有 $\omega(\vec{q})\to 0$，意味着 magnon 非常容易激发（by quantum, or thermal fluctuations）

反应了非常普适的原理：破缺连续对称性的基态有无能隙的激发，←通过我们之前讨论过的所谓"Goldstone modes"。

$$\boxed{H=\sum_{\vec{q},\alpha}\omega(\vec{q})\left(n_\alpha(\vec{q})+\tfrac{1}{2}\right)}$$

这种 gapless excitations 使得我们的分析比较容易。结论会告诉我们

在给定空间维数下，连续对称性能否破缺。

· 首先，$T=0$ 的情况，计算 $\langle\phi^2\rangle=\frac{1}{N_s}\sum_j\langle\phi^2(j)\rangle$

$$\langle\phi^2\rangle=\frac{1}{N_s}\sum_j\frac{1}{N_s^2}\sum_{\vec{q}_1}\sum_{\vec{q}_2}e^{i\vec{q}_1\cdot\vec{x}_j+i\vec{q}_2\cdot\vec{x}_j}\langle\vec{\phi}(\vec{q}_1)\cdot\vec{\phi}(\vec{q}_2)\rangle$$

$$=\frac{1}{N_s^2}\sum_{\vec{q},\alpha}\langle\phi_\alpha(\vec{q})\phi_\alpha(-\vec{q})\rangle=\frac{1}{N_s^2}\sum_{\vec{q}}\langle|\phi(\vec{q})|^2\rangle$$

谐振子 即使在 GS，$\langle x^2\rangle=\frac{\hbar}{2m\omega}$

如果 $\omega\to 0$"软模"，$\langle x^2\rangle\to\infty$。

注意：

$$\boxed{\begin{aligned}a_\alpha(\vec{q})&=\frac{1}{\sqrt{2N_s}}\left(\sqrt{I\omega(\vec{q})}\,\phi_\alpha(\vec{q})+i\frac{\pi_\alpha(-\vec{q})}{\sqrt{I\omega(\vec{q})}}\right)\\ a^\dagger_\alpha(\vec{q})&=\frac{1}{\sqrt{2N_s}}\left(\sqrt{I\omega(\vec{q})}\,\phi_\alpha(\vec{q})-i\frac{\pi_\alpha(\vec{q})}{\sqrt{I\omega(\vec{q})}}\right)\end{aligned}}\Rightarrow\boxed{\begin{aligned}2\phi_\alpha(\vec{q})&=\left[a_\alpha(\vec{q})+a^\dagger_\alpha(-\vec{q})\right]\sqrt{\frac{2N_s}{I\omega(\vec{q})}}\\ 2\phi_\alpha(-\vec{q})&=\left[a_\alpha(-\vec{q})+a^\dagger_\alpha(\vec{q})\right]\sqrt{\frac{2N_s}{I\omega(\vec{q})}}\end{aligned}}$$

$$\langle\phi^2\rangle=\frac{1}{N_s^2}\frac{N_s}{2I}\sum_{\vec{q},\alpha}\frac{1}{\omega(\vec{q})}\left\langle\left(a_\alpha(\vec{q})+a^\dagger_\alpha(-\vec{q})\right)\left(a_\alpha(-\vec{q})+a^\dagger_\alpha(\vec{q})\right)\right\rangle$$

由于 $\langle a_\alpha(\vec{q})\rangle_{GS}=\langle a_\alpha(-\vec{q})\rangle_{GS}=0$

$$\boxed{\langle\phi^2\rangle=\frac{1}{2N_sI}\sum_{\vec{q},\alpha}\frac{1}{\omega(\vec{q})}\langle n_\alpha(-\vec{q})+n_\alpha(\vec{q})+1\rangle}$$

master-formula

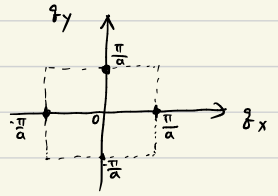
其实就是对 $\frac{1}{2I\omega(\vec{q})}\longrightarrow$ 基态下 $\langle|\phi(\vec{q})|^2\rangle$ 求和。

考虑热力学极限：$N_s \to \infty$ （d维 QRM）

将 $\frac{1}{N_s}\sum_{\vec q,\alpha}$ 改成积分 $\sum_\alpha \int_{BZ} \frac{d^d q}{(2\pi)^d}$， BZ 指 Brillouin zone of d-维正方晶格.

- $\vec q+\vec G$ 等价于 $\vec q$，$\vec G = m\vec b_1 + n\vec b_2$，$\vec b_1 = \frac{2\pi}{a}\hat e_x$，$\vec b_2 = \frac{2\pi}{a}\hat e_y$
- BZ 中 $\vec q$ 点的间距 $(\Delta q_x, \Delta q_y) = \frac{2\pi}{L}(1,1)$ ← 由于周期边界

例如：d=2.



$$\boxed{\frac{1}{N_s}\sum_{\vec q} = \int \frac{dq_x\, dq_y}{(\frac{2\pi}{L})^2}\frac{1}{N_s}}$$

- T=0 时系统处于基态(GS)，那么 $n_\alpha(\vec q) = 0$，for all $\vec q$ and α

$$\boxed{\langle \phi^2 \rangle = \frac{1}{2I}\int_{BZ}\frac{d^d q}{(2\pi)^d}\frac{1}{\omega(\vec q)} = \frac{1}{\sqrt{J_e I}}\int_{BZ}\frac{d^d q}{(2\pi)^d}\frac{1}{\sqrt{2d-2\cos(q_x a)-\cdots}}} \quad ①$$

已代入 $\omega(\vec q) = \sqrt{\frac{J_e}{I}}\sqrt{2d-2\cos(q_x a)-2\cos(q_y a)-\cdots}$

- 之前讨论过：$\frac{L^2}{2I} - J_e \vec n_i \cdot \vec n_j = J_e\left(\frac{L^2}{2IJ_e} - \vec n_i \cdot \vec n_j\right)$，即 $IJ_e \gg 1$ 时有序（重要的是 $\vec n$ 方向相同）

因此只要①中积分收敛(有限)，$\langle \phi^2 \rangle$ 就会远小于 1.

从而：Quantum Rotor Model 在 $\sqrt{J_e I}$ 很大时存在有序态，其低能性质可由自旋波理论自洽地描述

然而，该积分并不总是收敛！

原因是 $\omega(\vec q)$ 随 $|\vec q|$ 线性地趋于零. 并且，由于问题出在 $|\vec q| \sim 0$ 的地方，Brillouin Zone 的形状，$|\vec q| \sim 0$ 以外 $\omega(\vec q)$ 的形式，就不重要了.

因此 我们可以用 $\boxed{\int^\Lambda \frac{d^d q}{(2\pi)^d}\frac{1}{|\vec q|}}$ ② 代替①中的 BZ 积分.

可近似看成半径为 $\Lambda \approx \frac{\pi}{a}$ 的 d维球积分.（在 $\vec q$ 空间）

- 显然，d=1 时，②是发散 $= \frac{\ln|\vec q|}{2\pi}\Big|_0^\Lambda$
- d=2 时，② $= \int_0^\Lambda \frac{|\vec q|\, d|\vec q|}{2\pi}\frac{1}{|\vec q|} = \frac{1}{2\pi}\Lambda$ 有限
- d>2 时 同样收敛.
- 破缺 O(3) 旋转对称性的有序态 在 $d \geq 2$ T=0 时，是可能的. 但在 d=1 时是不可能的，不论 $J_e I$ 有多大！
- 由于 T=0，涨落来自量子涨落：$\vec n$ 与 $\vec L$ 的不对易，才有零点涨落 $\frac{\hbar}{2m\omega} = \langle x^2 \rangle$

现在讨论 $T\neq 0$，热涨落（n率分布）的效果. 从 master-formula 出发：

$$\langle \phi^2\rangle = \frac{1}{N_s}\sum_j \langle \phi^2(j)\rangle = \frac{1}{2N_s I}\sum_{q,\alpha}\langle n_\alpha(-q) + n_\alpha(q) + 1\rangle$$

magnons 遵从 Bose-Einstein 统计：$(\mu=0)\leftarrow$ 化学势

$$\boxed{\langle \phi^2\rangle = \frac{1}{2I}\int_{BZ}\frac{d^d q}{(2\pi)^d}\frac{1}{\omega(q)}\left(1+\frac{2}{e^{\omega(q)/T}-1}\right)}$$

同样，一但积分收敛，有序态与自旋波理论相容；而如果不收敛，则有序态与自旋波不自洽！

此时，对 Bose function 的积分贡献多一个 $\frac{1}{\omega(q)}$，$\boxed{当 |q|\to 0.\quad e^{\frac{\omega(q)}{T}}-1 \approx \frac{\omega(q)}{T}}$

即我们要看 $\boxed{\int^{\Lambda}\frac{d^d q}{(2\pi)^d}\frac{1}{|q|^2}}$ ③ $\left(\frac{1}{q^2}\text{ 更大！}\right)$

是否收敛！

显然 ③ 式在 $d=1$ 与 $d=2$ 发散. 但在 $d\geq 3$ 收敛.

结论： 热涨落不允许 $d=1$ 与 $d=2$ 时，破缺 $O(3)$ 对称性

这样 $\boxed{\begin{array}{l}d=2\text{ 情况比较特殊，在 } T=0\text{ 时，其 GS，可以有长程序，}\\ \text{但一旦 } T>0\text{，不论多低的温度，长程序立即破坏.}\end{array}}$

但是以上讨论基于长程序如果存在，然后用 spin wave 算涨落，看是否自洽. 这并不严格.

严格的证明有：Mermin-Wagner theorem

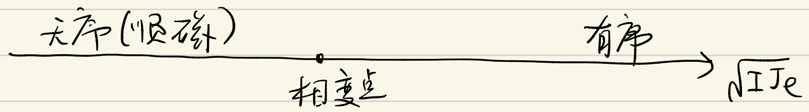
- 那么 $\sqrt{IJe} \gg 1$，涨落不允许有序时，什么态？

准长程序，local 有序，代数衰减.

另一极端：$\sqrt{IJ_e}\ll 1$. $\frac{L^2}{2I} - J_e \vec{n}_i\vec{n}_j = J_e\left(\frac{L^2}{2IJ_e} - \vec{n}_i\cdot\vec{n}_j\right)$，动能项重要！

GS是 $l=0$ 的 Y_{00}. $\vec{n}_i$ 涨落巨大，无视 $\vec{n}_{i\pm1}$

这称为量子顺磁态 (Quantum paramagnet)

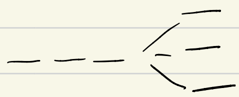


其低能激发是什么？

- 第一激发态：$E_1 = \frac{1}{I}$，← Gap 巨大 $3N_s$ 重简并：任意一个 rotor $l=1$, $m=0,\pm1$ 其余 $l=0$.

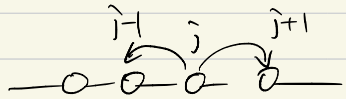
交换能 $H' = -J_e\sum_{\langle jk\rangle}\vec{n}_j\cdot\vec{n}_k$ 视作微扰，由于Gap巨大，基态对于H'稳定.

对于第一激发态：H'使简并态能级劈裂



$|E\rangle=\sum_j c_j|j\rangle$

在 $3N_s$ 个简并态子空间中，



$\langle i,m'|H'|j,m\rangle\neq 0$，当 $|j,m\rangle = |(0,0),\cdots,(1,m)_j,\cdots\rangle$

$|i,m'\rangle = |(0,0),\cdots,(1,m')_{j\pm1},(0,0)\cdots\rangle$

且正比于 J_e. ← hop 振幅.

我们把 $|1,m\rangle_j$ 态的 rotor 看作一个 triplet magnon，带自旋 S=1，H'使它从 j hop 到 j±1.

$$H' = \sum_{ij} H'_{ij}\,|i\rangle\langle j| = \sum_{ij} H'_{ij}\,(a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i)$$

第一激发态形成一个 triplet magnon 且有某个动量 $\vec{k}$，能量 $\omega(\vec{k})$ 的能带

但基态仍是 singlet，$\vec{n}_i$ 关联非常短.

★ 总的结论：QAF：两个 phases：

1. 顺磁，featureless GS、三重态 gapped magnon 激发。 可存在于任意维度

2. Néel 序（长程序），二重大能隙自旋波激发。 $q=0$ 附近线性色散，

但是，$d=1$ $T=0$ 或 $d=2$，$T\neq 0$ 不可能存在

★ 以上讨论可描述 $d\geq 2$ 任意 S 反铁磁，或 $d=1$ $S=$ 整数反铁磁，因为 θ-term 忽略。

$S=\frac{1}{2}$，$d\geq 2$，Berry phase 可改变顺磁相

→ 非平凡顺磁相，如 RVB (Resonant Valence Bond)
VBS (Valence Bond Solid)

可改变相变性质，→ Deconfine Quantum criticality