第五讲

§ 量子反铁磁的探测

反铁磁体：电子局域在格点，称为 Mott 绝缘体，由于反铁磁的相互作用形成反铁磁体.

不同于导体（金属或超导体），没法通过施加电压探测电流的方式研究

我们可以作的：标准热力学测量，如比热和磁化率

以及另外两种特定的技术手段：核磁共振（Nuclear Magnetic Resonance, NMR）

和非弹性中子散射（Inelastic Neutron scattering，INS）.

1. 对任意材料，最基本的热力学测量是其比热（c = 热容 C / 体积 L^d）随温度的变化.

热容 C 可表示成熵的导数 $C = T\frac{dS}{dT}$

因此对热容 C 的测量告诉我们熵的信息：$S(T) = \int_{T_0}^{T} \frac{C(T')}{T'} dT' + S(T_0)$

这里 T_0 是测量开始的最低温度. 当 $T_0 \to 0$，我们知道 $S(T_0) \to 0$. 根据热力学第三定律.

现实中总的热容 C 中只有一部分来自我们感兴趣的磁性系统（或自由度），其余的部分可能来自晶格振动等. 但是我们可以比较同类材料的热容，它们有一样的晶格结构. 但是磁性离子被替换为非磁性离子，从而"消去"晶格振动（声子）的贡献.

- 现在假设我们已经知道低温下磁性系统的热容 $\boxed{C \propto T^{p}}$

这其实告诉我们系统具有玻色型低能无能隙模（low energy Bosonic gapless modes）

理由如下：

考虑一种自由的玻色气体，有色散关系（能-动关系）如下：

$$\boxed{\epsilon(k) \propto k^{\alpha}}$$

计算系统的内能密度：

$$\frac{E}{L^d} = \int \frac{d^dk}{(2\pi\hbar)^d} \frac{\epsilon(k)}{e^{\beta\epsilon(k)}-1}$$ (玻色分布，以后取 $\hbar=1$)

• 我们已假设这些 Bosons 可以产生与湮灭，即不受粒子数守恒约束，如同声子，无化学势，或 $\mu=0$

在极低温度下，(β很大，积分截止于 $\beta k^\alpha \sim 1$，$k\sim(\frac{1}{\beta})^{\frac{1}{\alpha}}$)

$$\frac{E}{L^d} = \int \frac{k^{d-1}dk}{(2\pi)^d} \frac{\beta k^\alpha}{(e^{\beta k^\alpha}-1)\beta} \approx \int_0^{(\frac{1}{\beta})^{1/\alpha}} \frac{k^{d-1}dk}{(2\pi)^d} \frac{1}{\beta} \sim \frac{1}{\beta}(\frac{1}{\beta})^{d/\alpha} = T^{\frac{d}{\alpha}+1}$$

比较严格的方法是利用标度变换：令 $x=\beta k^\alpha$，$dx=\beta\alpha k^{\alpha-1}dk$，$k^{d-1}dk=\frac{dx}{\beta\alpha}k^{d-\alpha}$

$$\frac{E}{L^d} = \int_0^\infty dx \frac{k^{d-\alpha}}{\beta\alpha} \frac{x}{e^x-1} = \int_0^\infty dx \frac{(\beta k^\alpha)^{\frac{d-\alpha}{\alpha}}}{\beta\alpha\ \beta^{\frac{d}{\alpha}-1}} \frac{x}{e^x-1} \propto T^{\frac{d}{\alpha}+1}$$

因此有：

$$\boxed{c=\frac{C}{L^d} \propto T^{d/\alpha},}$$

即比热是由空间维数 d 与色散关系指数 α 决定的幂律 (power law)

因此，我们可以这样理解磁系统比热的 power law 行为：

连续对称性的自发破缺导致系统存在无能隙 Goldstone 模激发，该激发可用无能隙 Bosons 表示：服从玻色统计的特定能动关系的准粒子 从而使系统在低温下比热为 power law.

• 如果磁性系统比热低温下按指数衰减：$\boxed{\frac{C}{L^d} \propto e^{-\Delta/T}}$

就表明系统有能隙 Δ：没有比 Δ 低的激发，基态与激发态间有宽为 Δ 的 Gap.

这是反铁磁长程序被量子涨落破坏的典型特征.

设 $E=\sum_\ell E_\ell e^{-E_\ell/T}/Z$，$Z=\sum_\ell e^{-E_\ell/T}$，设基态为 E_0，$E_1=E_0+\Delta$，简并度 Ω_1

当 $T\ll\Delta$，$E \approx \frac{E_0 e^{-\frac{E_0}{T}}+E_1\Omega_1 e^{-\frac{E_1}{T}}+\cdots}{e^{-\frac{E_0}{T}}+\Omega_1 e^{-\frac{E_1}{T}}+\cdots} = \frac{E_0+E_1\Omega_1 e^{-\frac{\Delta}{T}}}{1+\Omega_1 e^{-\Delta/T}} \approx E_0+E_1\Omega_1 e^{-\frac{\Delta}{T}}$

$$\frac{C}{L^d} \sim e^{-\frac{\Delta}{T}}$$

2. 再来看磁化率 (susceptibility): 磁化强度 $\frac{M}{L^d}$ 对外磁场 B 的响应.

$$\chi_{tot} = \frac{1}{L^d} \lim_{B\to 0} \frac{M}{B}$$

其低温行为可作类似解读: • 指数衰变 (随温度), 表明基态总自旋为零. (carries no spin)

并且, 在能隙之下的激发态都没有磁性 (spin-carring excitations)

• power law 的 χ_{tot} $\longrightarrow$ 存在 gapless spinful excitations

更细致的探测: 系统对交流磁场的响应:

外场: $\vec{B}(\vec{r},t) = \hat{z} B \cos(\vec{q}\cdot\vec{r} - \omega_0 t) = \hat{z} B \left[e^{i\vec{q}\cdot\vec{r} - i\omega_0 t} + e^{-(i\vec{q}\cdot\vec{r} - i\omega_0 t)}\right]/2$

设 B 足够小, 可用线性响应理论计算 $\vec{M}(\vec{r},t) = \hat{z} M_1 \cos(\vec{q}\cdot\vec{r} - \omega t) + \hat{z} M_2 \sin(\vec{q}\cdot\vec{r} - \omega t)$

$$H' = \sum_i B \cos(q\cdot r_i - \omega_0 t)\, S^a(r_i) = \sum_i S^a(r_i)\, \frac{B}{2}\left(e^{iq\cdot r_i - i\omega_0 t} + e^{-iqr_i + i\omega_0 t}\right)$$

对于 $S^a(r_i)$ 处的 $b(t) = \frac{B}{2}\left[e^{iqr_i - i\omega_0 t} + e^{-iqr_i + i\omega_0 t}\right]$, $\tilde{b}(\omega) = \int b(t)\, e^{i\omega t}\, dt = B\pi\left[e^{ikr_i}\,\delta(\omega-\omega_0) + e^{-ikr_i}\,\delta(\omega+\omega_0)\right]$

$$\langle S^a(r_j)\rangle(t) = \sum_i \frac{1}{2\pi}\int \tilde{b}(\omega)\, R_{ji}(\omega)\, e^{-i\omega t}\, d\omega = \sum_i \frac{B}{2}\left[e^{iqr_i - i\omega_0 t} R_{ji}(\omega_0) + e^{-iqr_i + i\omega_0 t} R_{ji}(-\omega_0)\right]$$

$$R_{ji}(t) = -i\,\theta(t)\, \langle [S_j^a(t), S_i^a(0)]\rangle = \frac{-i}{Z}\,\theta(t) \sum_{nm} e^{-\beta E_n} \langle n|S_j|m\rangle\langle m|S_i|n\rangle \left(e^{-iE_{mn}t} - e^{iE_{mn}t}\right)$$

注意 $R_{ji}(t)$ 只依赖于 $r_{ji} = |j-i|$, 同样 $R_{ji}(\omega_0)$ 只依赖于 r_{ji}

$$R_{ji}(\omega_0) = \int dt\, e^{i\omega_0 t}\, R_{ji}(t)$$

$$= \frac{-i}{Z} \int dt\, e^{i\omega_0 t}\, \theta(t) \sum_{nm} e^{-\beta E_n} \langle n|S_j|m\rangle\langle m|S_i|n\rangle \left(e^{-iE_{mn}t} - e^{iE_{mn}t}\right)$$

将 $\langle S_j^a\rangle(t)$ 写成 $\langle S^a(r_j)\rangle(t) = \sum_i \frac{B}{2}\left[e^{iq(r_i - r_j)} R_{ji}(\omega)\, e^{iqr_j - i\omega_0 t} + e^{-iq(r_i - r_j)} R_{ji}(-\omega_0)\, e^{-iqr_j + i\omega_0 t}\right]$

由于 $R_{ji}(\omega)$ 只依赖于 r_{ji} $\Rightarrow$ $\sum_i = \frac{1}{N}\sum_{ji}$ $\qquad S_q = \sum_i e^{iqr_i} S(r_i)$

$$\langle S^a(r_j)\rangle(t) = \frac{B}{2}\frac{1}{N}\left[R_{q-q}(\omega_0)\, e^{iqr_j - i\omega_0 t} + R_{-qq}(-\omega_0)\, e^{-iqr_j + i\omega_0 t}\right]$$

$$R_{q-q}(\omega_0) = \frac{-i}{Z}\int dt\, e^{i\omega_0 t}\, \theta(t) \sum_{nm} e^{-\beta E_n} \langle n|S_{-q}|m\rangle\langle m|S_q|n\rangle \left(e^{-iE_{mn}t} - e^{iE_{mn}t}\right)$$

$$\langle n|S_{-q}|m\rangle\langle m|S_q|n\rangle = |\langle n|S_q|m\rangle|^2$$

再考虑到：

$$R_{q\text{-}q}(\omega_0)=R'_{q\text{-}q}(\omega_0)+iR''_{q\text{-}q}(\omega_0),\quad R'_{q\text{-}q}(\omega_0)=R'_{q\text{-}q}(-\omega_0),\quad R''_{q\text{-}q}(\omega_0)=-R''_{q\text{-}q}(-\omega_0)$$

我们有

$$\langle S^z(r_j)\rangle(t)=\frac{B}{2N}\left[\cos(qr_j-\omega_0 t)\,R'_{q\text{-}q}(\omega_0)-\sin(qr_j-\omega_0 t)\,R''_{q\text{-}q}(\omega_0)\right]$$

其中 $R_{q\text{-}q}(\omega_0)$ 的虚部

$$R''_{q\text{-}q}(\omega_0)=-\frac{\pi}{Z}\sum_{nm}\langle n|S_q|m\rangle\langle m|S_{-q}|n\rangle e^{-\beta E_n}\left(\delta(\omega_0-E_{mn})-\delta(\omega_0+E_{mn})\right)$$

将 $\langle S^z(r_j)\rangle(t)$ 写成： $\hat{z}M_1\cos(qr_j-\omega_0 t)+\hat{z}M_2\sin(qr_j-\omega_0 t)$

定义： $\chi'_{zz}(\vec{q},\omega_0)=\lim_{B\to0}\frac{M_1}{B}$， $\chi''_{zz}(\vec{q},\omega_0)=\lim_{B\to0}\frac{M_2}{B}$.

得到

$$\chi''_{zz}(\vec{q},\omega_0)=-\frac{\pi}{Z}\frac{1}{N}\sum_{mn}|\langle n|S^z(\vec{q})|m\rangle|^2e^{-\beta E_n}\left[\delta(\omega_0-E_{mn})-\delta(\omega_0+E_{mn})\right]$$

$$\chi'_{zz}(\vec{q},\omega_0)=\Pr\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{\pi}\frac{\chi''_{zz}(\omega')}{\omega'-\omega}$$

其中 M_1 部分是响应函数的实部给出，M_2 部分由响应函数的虚部给出.

动态磁化率依赖于 ω，波矢 $\vec{q}$ 和温度 T. 通过其虚部提供磁性激发 (spin-carrying) 的详细谱信息. 特别是考虑 $T\to0$.

$$\chi''_{zz}(\vec{q},\omega)=-\frac{\pi}{L^d}\sum_m|\langle m|S^z(\vec{q})|0\rangle|^2\left[\delta(\omega-E_{m0})-\delta(\omega+E_{m0})\right]$$

给出低能磁性激发谱.