

Квантовые магнетики и спиновые жидкости: задачи о скрытом порядке.

Теорема Нернста (она же - 3-е начало термодинамики) сообщает, что энтропия большой системы в расчете на одну частицу должна быть равна нулю при температуре, стремящейся к абсолютному нулю. Если это система локализованных магнитных моментов (спинов) то обычно при низких температурах они выстраиваются упорядоченно: все параллельно (ферромагнетик) или антипараллельно через один (антиферромагнетик).

Однако иногда никакого столь наглядного упорядочения не наблюдается до самых низких достигнутых температур. Такие состояния вещества обобщенно называются «спиновая жидкость». Их теория еще не создана, но кое-что из того, что удалось уже понять, будет рассказано на этой лекции.

Симметрия и ее нарушение

1. Относительно простые примеры:

- Аммиак и инверсия
- Кристаллическая решетка
- Магниты: масса способов устроить жизнь спинов как им хочется
- Сверхтекучий гелий – и чем он похож на ХУ магнетик?
- Сверхпроводимость: что общего у куска свинца и банки с гелием ?

Общее свойство:

Нарушение симметрии ведёт к увеличению «степени упорядоченности» - т.е. к уменьшению ЭНТРОПИИ

При $T=0$ энтропия = 0:
«теорема Нернста» или
3-й закон термодинамики

2. Нарушение «однородности времени»

- Стёкла и «спиновые стёкла»
- Модели ассоциативной памяти
- Алгоритмы оптимизации
- Проблема генетического кода

здесь труднее говорить о «порядке» и энтропии: неравновесные системы

3. Квантовый «скрытый порядок»

- Вопрос: может ли так быть, что энтропия = 0, без нарушения симметрии ?
- Ответ: да. Это бывает в системах, называемых

«СПИНОВЫЕ ЖИДКОСТИ»

Здесь, если и есть какое-то нарушение симметрии, его очень трудно выявить - что полезно для создания квантового компьютера

Магнитный порядок

- Ферромагнетик: $E = -J \sum_{(ij)} S_i S_j$

S_i - вектор «спина» (магнитного момента) в i -ом узле

$J > 0$: энергия минимальна для $\uparrow \uparrow$

При температурах $T < T_c$ $\langle S_i \rangle \neq 0$ -

Нарушение симметрии !

А какой именно?

1. $S = +1$ или -1 «модель Изинга» Z_2
2. $\mathbf{s} = (S_x, S_y)$ XY – модель $O(2)$
3. $\mathbf{s} = (S_x, S_y, S_z)$ магнетик Гейзенберга $O(3)$

Сверхтекучесть и сверхпроводимость:

с и м м е т р и я п р о с т а , н о

н е в и д и м а

Сверхтекучесть ^4He : при $T=0$ жидкость Бозе-частиц находится в состоянии «конденсата», когда у всех частиц импульсы = 0

Похоже на когерентное состояние множества фотонов, образующих классическую световую волну

Отличие: поле Бозе-частиц описывается комплексной функцией $\Psi(\mathbf{r},t)$

Их плотность $N(\mathbf{r},t) = |\Psi(\mathbf{r},t)|^2 + n_{\text{norm}}(\mathbf{r},t)$

При $T > T_c$ $\Psi=0$ и все частицы «нормальные».

При $T < T_c$ нарушение симметрии $\Psi \rightarrow \Psi \exp(i\delta)$: по сдвигу фазы коллективной волновой функции

$T_c = 2.1 \text{ K}$ для ^4He

$O(2) = U(1)$

“ХУ” = Бозе-конд.

Магнитный порядок -2

- Антиферромагнетики $E = -J \sum_{(ij)} S_i S_j$

S_i - вектор «спина» (магнитного момента) в

i -ом узле $J < 0$: энергия минимальна для

“staggered” конфигурации $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$

Определим $\sigma_k = (-1)^k S_k$ и получим

$$E = -|J| \sum_{(ij)} \sigma_i \sigma_j \quad ???$$

Да, но лишь для “bipartite” решеток

АФМ на квадратной решетке

↑ ↓ ↑ ↓ ↑

Изменение симметрии решетки:

↓ ↑ ↓ ↑ ↓

удвоение периода

↑ ↓ ↑ ↓ ↑

Кроме того, нарушение

$O(2)$ или $O(3)$ вращений

на треугольной решетке

↑ ↓

Неизвестно, где

минимум E :

?

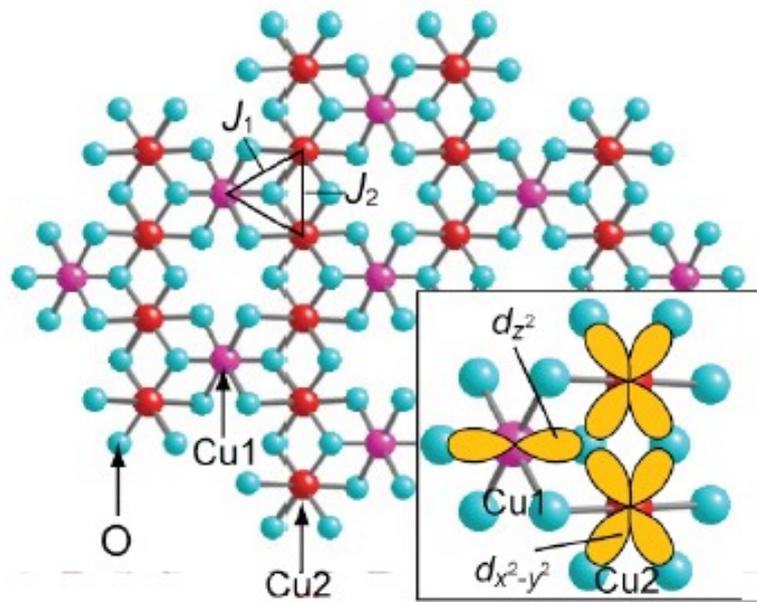
«фрастрация»

В результате возникают «экзотические» фазы вещества

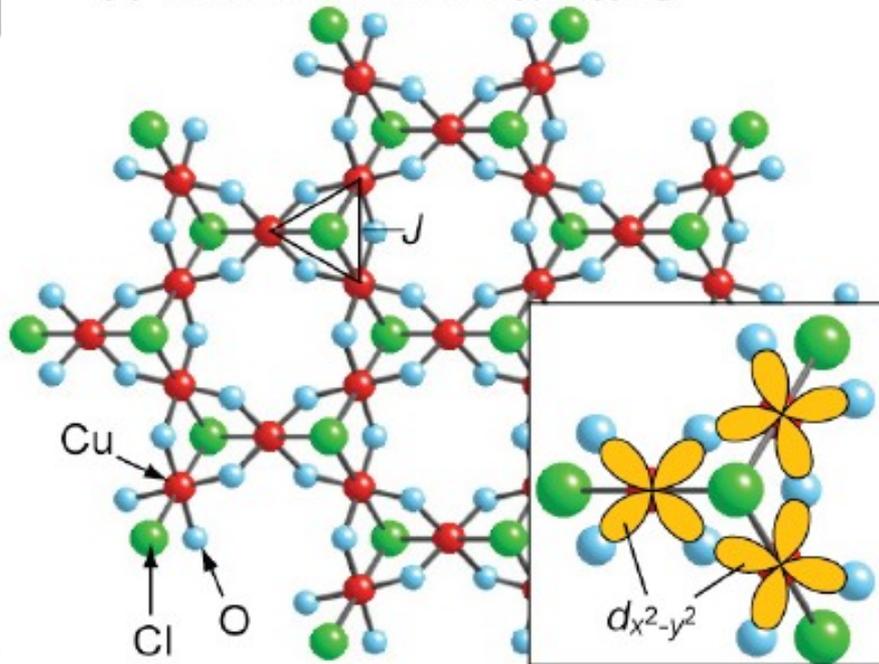
- стекла, спиновые жидкости...

Попытка АФМ на решетке кагоме

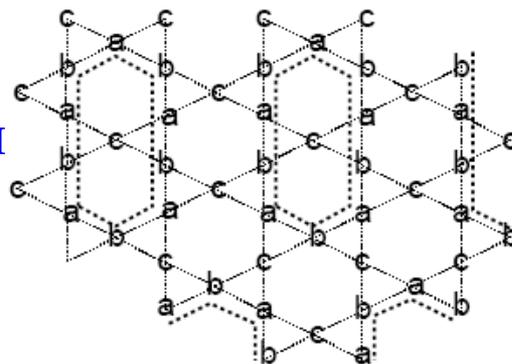
(a) Volborthite $\text{Cu}_3\text{V}_2\text{O}_7(\text{OH})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$



(b) Herbertsmithite $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$



↑
↓
? фрастрация



Kapellasite: a kagome quantum spin liquid

B. Fåk,¹ E. Kermarrec,² L. Messio,³ B. Bernu,⁴ C. Lhuillier,⁴ F. Bert,² P. Mendels,^{2,5} B. Koteswararao,²
F. Bouquet,² J. Ollivier,⁶ A. D. Hillier,⁷ A. Amato,⁸ R. H. Colman,⁹ and A. S. Wills⁹

¹SPSMS, UMR-E CEA/UJF-Grenoble-1, INAC, F-38054 Grenoble Cedex 9, France

Magnetic susceptibility, NMR, μ SR, and inelastic neutron scattering measurements show that kapellasite, $\text{Cu}_3\text{Zn}(\text{OH})_6\text{Cl}_2$, a geometrically frustrated spin-1/2 kagomé antiferromagnet polymorphous with the herbertsmithite mineral, is a gapless spin liquid with frustrated interactions showing unusual dynamic short-range correlations of non-coplanar cuboc2 type which persist down to 20 mK. The Hamiltonian is determined from a fit of a high-temperature series expansion to thermodynamical data. The experimental data are compared to theoretical calculations using the Schwinger-boson approach.

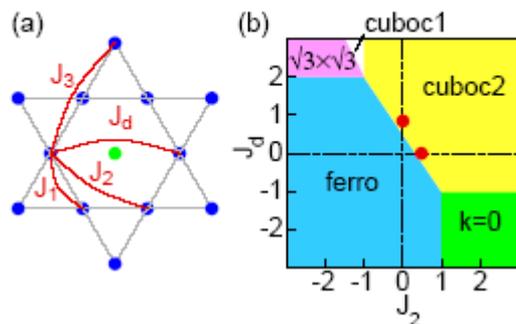


FIG. 2: (Color online) (a) Kagomé plane of kapellasite with Cu^{2+} $S = 1/2$ spins (blue), non-magnetic Zn^{2+} ion (green), and exchange interactions (red). (b) Classical J_2 - J_d phase diagram for ferromagnetic nearest-neighbor coupling, $J_1 = -1$, and $J_3 = 0$. The best two-parameter HT-series fits to susceptibility data are shown with red points (see text).

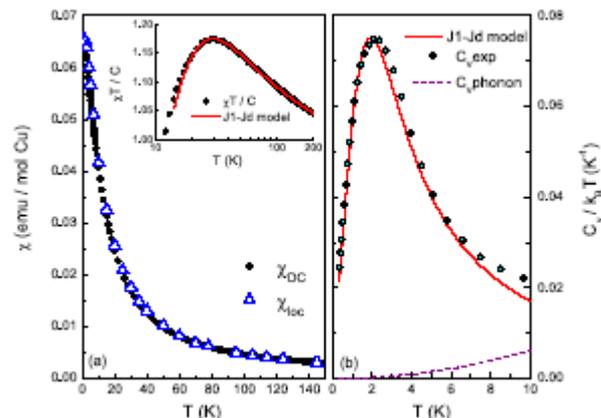


FIG. 3: (Color online) (a) Local χ_{loc} and macroscopic χ_{DC} magnetic susceptibilities from NMR and DC SQUID measurements, respectively. Inset: Fit of high-temperature series expansion (red line) down to 20 K. (b) Total specific heat per spin C_V^{exp} measured in zero field (symbols), magnetic specific heat calculated with the J_1 - J_d model (red solid line) rescaled by a factor 0.88 to account for mass uncertainties and missing entropy. The phonon contribution estimated from a high- T fit (purple dashed line) is negligible below 10 K.

П о п ы т к а н е у д а л а с ь :

- $E = J \sum_{(ij)} S_i S_j \quad J \sim 100 \text{ K}$

но никакого магнитного порядка не найдено
вплоть до температур T порядка 100 mK

Эти системы выбирает какой-то другой способ
занулить энтропию

То же самое - на треугольной решетке

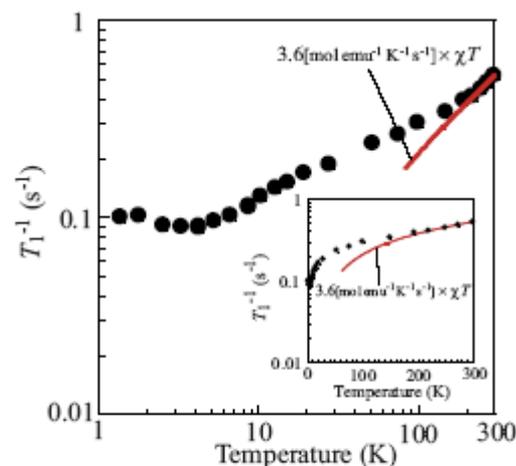
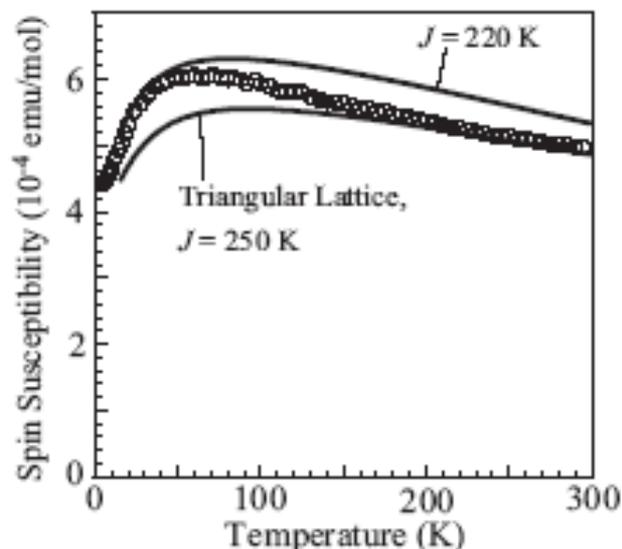
Quantum spin liquid in the spin-1/2 triangular antiferromagnet $\text{EtMe}_3\text{Sb}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ T. Itou,¹ A. Oyamada,¹ S. Maegawa,¹ M. Tamura,² and R. Kato²

FIG. 3. (Color online) Temperature dependence of ^{13}C nuclear spin-lattice relaxation rate of $\text{EtMe}_3\text{Sb}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$. The transverse axis in the inset is linear so that data at high temperatures can be clearly illustrated, while it is logarithmic in the main figure. The

this system does not have an appreciable spin gap more than 1 K either with nodes or without nodes, because the estimated T_1^{-1} does not show any sign of decreasing. It is surprising that the paramagnetic state remains down to 1.37 K despite the growth of the antiferromagnetic correlations from much higher temperatures around 200 K.

Quantum phase transition in the diopside magnetic lattice "C. Gros, P. Lemmens, K.-Y. Choi, G. G"

untherodt, M. Baenitz, H.H. Otto

Europhys. Lett. 60, 276 (2002)

the crystal green diopside $\text{Cu}_6\text{Si}_6\text{O}_{18}\cdot 6\text{H}_2\text{O}$, known to the ancient Roman as the gem of Venus

The gem-stone diopside $\text{Cu}_6\text{Si}_6\text{O}_{18}\cdot 6\text{H}_2\text{O}$ is a transparent green mineral build up from Si_6O_{18} single rings on a lattice, which sandwiches six-membered water rings down the (crystallographic) c -direction [2–4]. The magnetic Cu(II) ions are located between the Si_6O_{18} rings

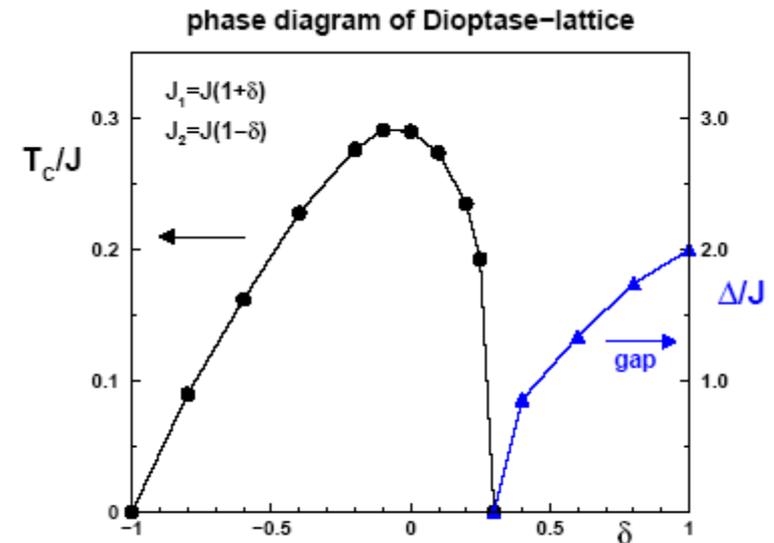
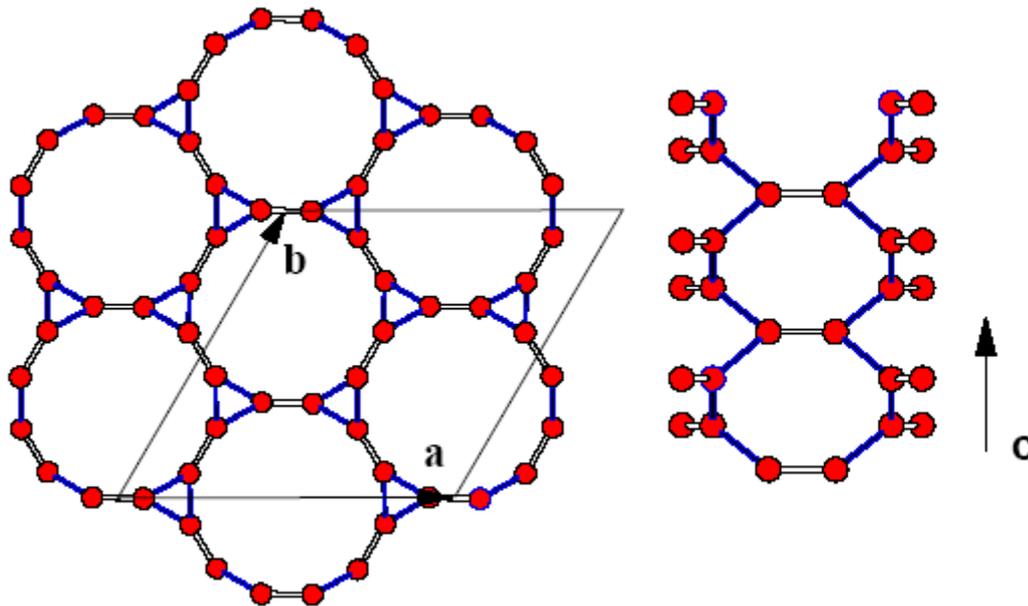


Fig. 3 – Phase diagram of the diopside magnetic sublattice as obtained by Quantum Monte Carlo simulations. The lines are guides to the eye. The magnetic coupling constants are $J_{1,2} = J(1 \pm \delta)$

Large quantum fluctuations in the strongly coupled spin-1/2 chains of green diopside: a hidden message from birds and trees

O. Janson, A. A. Tsirlin, M. Schmitt, H. Rosner

Phys. Rev. B **82**, 014424 (2010)

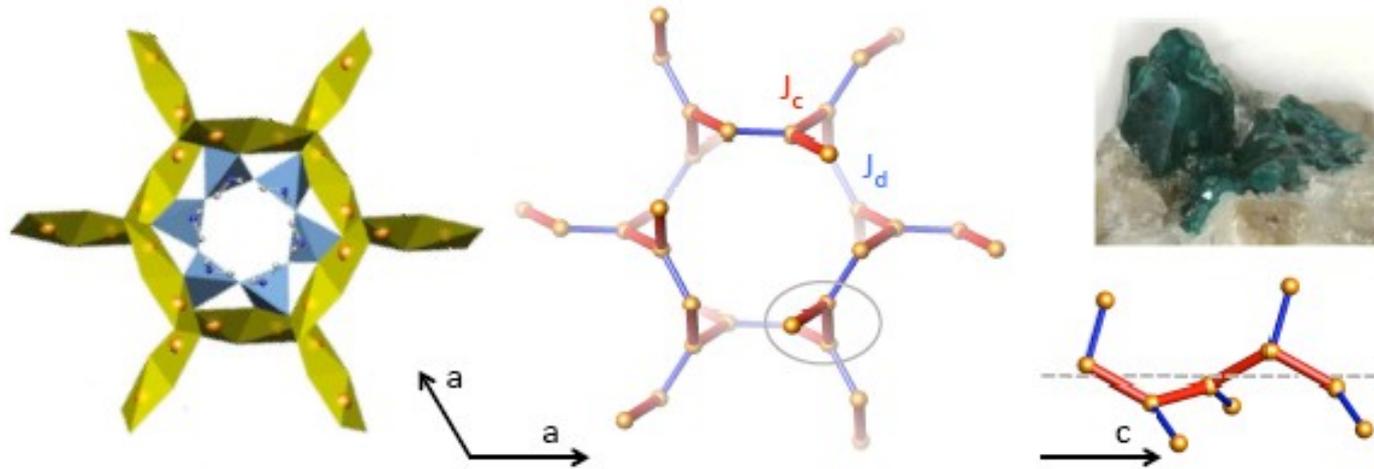


FIG. 1. (Color online) Left: Crystal structure of the green diopside. The Cu_2O_6 dimers are shown in yellow and form a 3D network. SiO_4 tetrahedra are shown blue. The crystal water is depicted by O (blue) and H (gray) atoms with O–H bonds. Middle: the magnetic model of the green diopside. Cu atoms are depicted as orange spheres, other atoms are not shown. The leading antiferromagnetic coupling J_c (red) forms spiral chains running along c perpendicular to the projection plane. The ferromagnetic coupling J_d (blue) within the structural Cu_2O_6 dimers couples the chains into a three-dimensional framework. Right: section of the spiral chain along c (bottom) and a natural sample of green diopside grown on calcite (top).

С п и н о в ы е ж и д к о с т и:

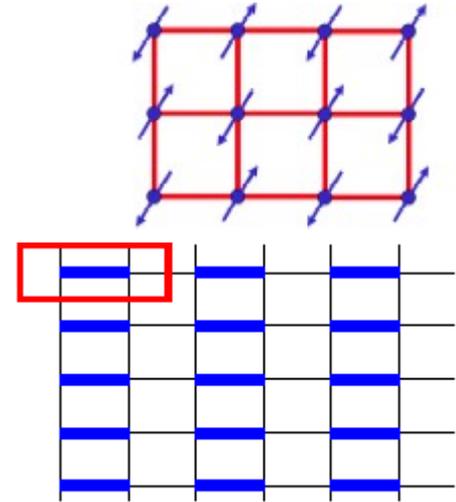
п о р я д о к и д е а л ь н ы й,
н о н е у л о в и м ы й

- Обычного «локального» параметра порядка нет
- Есть загадочная зависимость свойств от **топологии** решетки

(круг, цилиндр, тор)

2D lattice with AFM interaction of spins $S=1/2$: possible phases

- Néel state: magnetic order
- Valence bond state: breaking of translational symmetry
- Spin liquids



$$\text{—} = |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle$$

1) Topological

- Ground state degeneracies on a torus
- Gapped excitations with fractional statistics

2) Critical

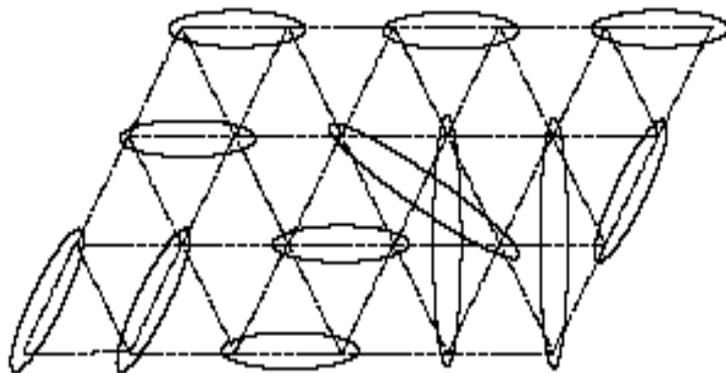
Stable gapless phase, no broken symmetries

3) “Spin metal”

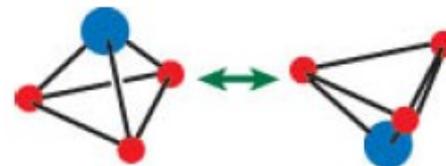
Correlation functions singular along surfaces in momentum space

«Резонансные валентные связи»

(P.W.Anderson 1973)



Вспомним аммиак:



$$|0\rangle = (|+\rangle + |-\rangle)/\sqrt{2}$$

Здесь

«димер»:



Объект со спином = 0

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_i \downarrow_j\rangle - |\downarrow_i \uparrow_j\rangle)$$

Как рассадить димеры по решетке?

Число димерных покрытий и

Пфаффиа́н

Для любой антисимметричной матрицы A существует

$$\text{Пфаффиа́н } (\text{Pfaff } A)^2 = \text{Det } A$$

$$Z = \int \prod_i da_i \exp \left[\sum_{ij} a_i A_{ij} a_j \right] = \text{Pfaff}(A_{ij}),$$

where i and j label the lattice sites, and the fermionic variables a_i obey the conventional rules: $a_i a_j = -a_j a_i$, $\int da_i = 0$, $\int a_i da_i = 1$. The “hopping amplitudes” A_{ij} take values ± 1 on nearest-neighbor sites and 0 otherwise, and form an antisymmetric matrix: $A_{ij} = -A_{ji}$. The signs of A_{ij} must be adjusted so that all terms in the expansion of the exponent in (2) give positive weight. Such terms in the expansion of the exponent are in one-to-one correspondence to the dimer coverings of the lattice.

$$E(\mathbf{k}) = 2 (\cos^2 k_1 + \cos^2 k_2 + \cos^2 k_3)^{1/2}$$

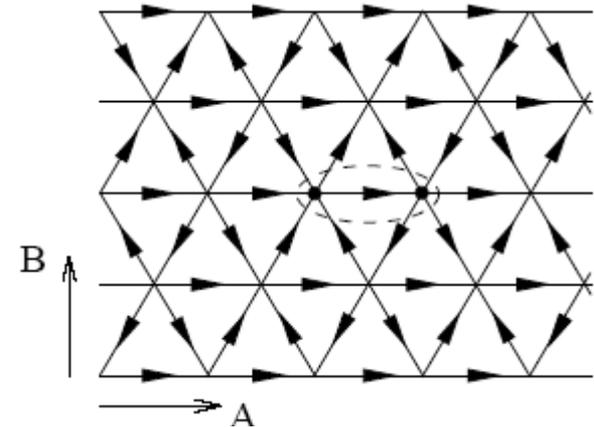
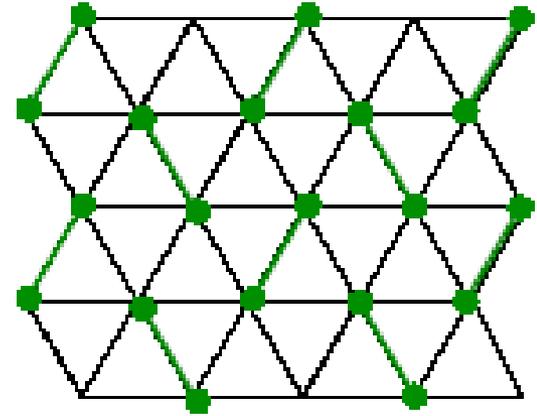


FIG. 2: One possible choice of the amplitudes A_{ij} . This choice of amplitudes is periodic with a unit cell containing two lattice sites (marked by a dashed ellipse). The arrow directions correspond to the signs of A_{ij} : A_{ij} equals 1 if the arrow points from i to j , and equals -1 if it points from j to i . Also shown are A and B directions: parallel and perpendicular to the lattice lines, respectively.

Жидкость квантовых димеров

- Треугольная решетка

$$\hat{H} = -t\hat{T} + v\hat{V} = \sum_{i=1}^{N_p} \left\{ -t \sum_{\alpha=1}^3 \left(|\nabla_{\alpha}\rangle \langle \nabla_{\alpha}| + h.c. \right) + v \sum_{\alpha=1}^3 \left(|\nabla_{\alpha}\rangle \langle \nabla_{\alpha}| + |\nabla_{\alpha}\rangle \langle \nabla_{\alpha}| \right) \right\}.$$

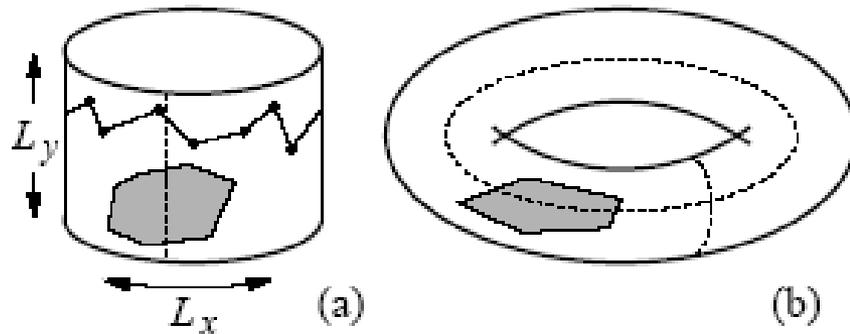


е расстановки димеров входят с равными весами: полное «квантовое равноправие»

линдре таких состояний - 2. На торе - то увидеть?

тной решетки их бесконечно много - как целое

Топологические классы димерных конфигураций



Ground-state properties
of the Rokhsar-Kivelson
dimer model on the triangular
lattice [A.Ioselevich](#), [D.A.Ivanov](#),
[M.V.Feigelman](#)
Phys. Rev. B 66, 174405 (2002)

FIG. 1: Topological sectors on a cylinder and on a torus. Dimer coverings may be classified according to the parities of the number of dimers intersecting the reference lines (dashed lines). Dimer configurations differing by a rearrangement in contractible domains (shaded areas) belong to the same topological sector and contribute with the same sign to the partition function (2). To change the topological sector, a circular permutation of dimers along a topologically nontrivial contour (shown in a zig-zag line in the case of the cylinder) is necessary.

КАК ЧТО-ТО
СОСЧИТАТЬ ДЛЯ
СПИНОВОЙ
ЖИДКОСТИ?

- Главная проблема:
что собой
представляют
квазичастицы –
возбуждения над
состоянием спиновой
жидкости?
- Самый простой пример
– одномерная цепочка
УУ-спинов

Jordan-Wigner transformation:

Hamiltonian of a 1D chain

$$\hat{H} = J \sum_{\langle ij \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{n}_{ij})(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{n}_{ij}),$$

$$S_i^+ = a_i^+ \exp \left\{ i\pi \sum_{j=1}^{i-1} a_j^+ a_j \right\}, \quad S_i^- = (S_i^+)^+ = \exp \left\{ -i\pi \sum_{j=1}^{i-1} a_j^+ a_j \right\} a_i, \quad S_i^z = a_i^+ a_i - 1/2.$$

$$S_i^+ S_{i+1}^+ = a_i^+ \exp \left\{ i\pi \sum_{j=1}^{i-1} a_j^+ a_j \right\} a_{i+1}^+ \exp \left\{ i\pi \sum_{j=1}^i a_j^+ a_j \right\} = a_i^+ \exp \{ i\pi a_i^+ a_i \} a_{i+1}^+ = a_i^+ a_{i+1}^+ \quad S_i^+ S_{i+1}^- = a_i^+ \exp \left\{ i\pi \sum_{j=1}^i a_j^+ a_j \right\} \exp \left\{ -i\pi \sum_{j=1}^i a_j^+ a_j \right\} a_{i+1} = a_i^+ \exp \{ -i\pi a_i^+ a_i \} a_{i+1} = a_i^+ a_{i+1}$$

$$S_i^- S_{i+1}^- = \exp \left\{ -i\pi \sum_{j=1}^{i-1} a_j^+ a_j \right\} a_i \exp \left\{ -i\pi \sum_{j=1}^i a_j^+ a_j \right\} a_{i+1} = a_i \exp \{ -i\pi a_i^+ a_i \} a_{i+1} = -a_i a_{i+1} \quad S_i^- S_{i+1}^+ = \exp \left\{ -i\pi \sum_{j=1}^{i-1} a_j^+ a_j \right\} a_i a_{i+1}^+ \exp \left\{ i\pi \sum_{j=1}^i a_j^+ a_j \right\} = a_i a_{i+1}^+ \exp \{ i\pi a_i^+ a_i \} = -a_i a_{i+1}^+$$

$$S_i^x = (1/2)(S_i^+ + S_i^-), \quad S_i^x S_{i+1}^x = (1/4)(a_i^+ a_{i+1}^+ - a_i a_{i+1} + a_i^+ a_{i+1} - a_i a_{i+1}^+)$$

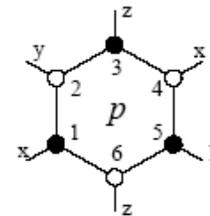
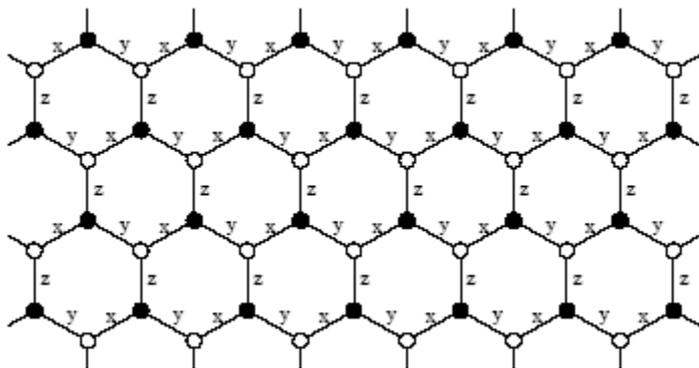
$$S_i^y = (1/2i)(S_i^+ - S_i^-), \quad S_i^y S_{i+1}^y = (1/4)(-a_i^+ a_{i+1}^+ + a_i a_{i+1} + a_i^+ a_{i+1} - a_i a_{i+1}^+).$$

$$S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+ = a_i^+ a_{i+1} - a_i a_{i+1}^+$$

A. Kitaev's honeycomb model

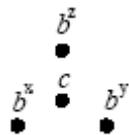
Ann.Phys. **321**, 2 (2006)

$$H = -J_x \sum_{x\text{-links}} \sigma_j^x \sigma_k^x - J_y \sum_{y\text{-links}} \sigma_j^y \sigma_k^y - J_z \sum_{z\text{-links}} \sigma_j^z \sigma_k^z,$$



$$W_p = \sigma_1^x \sigma_2^y \sigma_3^z \sigma_4^x \sigma_5^y \sigma_6^z$$

all W_p commute with H



$$\tilde{\sigma}^x = ib^x c,$$

$$\tilde{\sigma}^y = ib^y c,$$

$$\tilde{\sigma}^z = ib^z c$$

$$c_j^2 = 1, \quad c_j c_l = -c_l c_j \text{ if } j \neq l.$$

$$\tilde{\sigma}^x \tilde{\sigma}^y \tilde{\sigma}^z = ib^x b^y b^z c = iD.$$

$$\hat{u}_{jk} = ib_j^{\alpha_{jk}} b_k^{\alpha_{jk}}. \quad u_{jk} = \pm 1. \quad \text{!!!!}$$

Spins $\frac{1}{2}$ are fractionalized into Majorana fermions

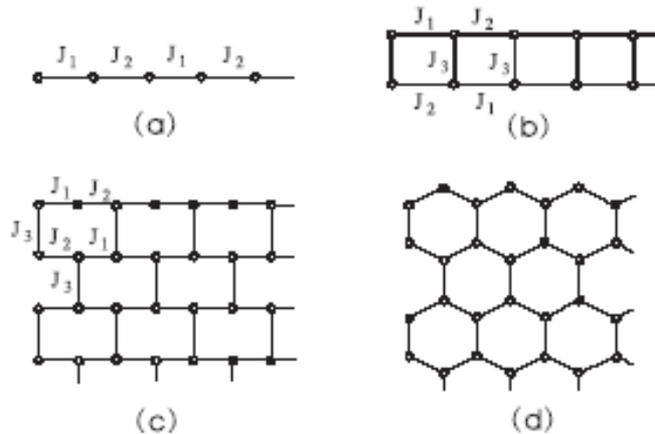
$$\sigma_j^\alpha \mapsto \tilde{\sigma}_j^\alpha = ib_j^\alpha c_j \text{ is gauge-equivalent to } \sigma_j^x \mapsto -ib_j^y b_j^z, \quad \sigma_j^y \mapsto -ib_j^z b_j^x, \quad \sigma_j^z \mapsto -ib_j^x b_j^y.$$

Jordan-Wigner representation

Phys Rev Lett
98, 087204 (2007)

Topological characterization of quantum phase transitions in a S=1/2 spin model

Xiao-Yong Feng¹, Guang-Ming Zhang², and Tao Xiang¹



$$H = \sum_{j+l=\text{even}} (J_1 \sigma_{j,l}^x \sigma_{j+1,l}^x + J_2 \sigma_{j-1,l}^y \sigma_{j,l}^y + J_3 \sigma_{j,l}^z \sigma_{j,l+1}^z)$$

$$\sigma_{jl}^{\dagger} = 2a_{jl}^{\dagger} e^{i\pi (\sum_{i,k < l} a_{ik}^{\dagger} a_{ik} + \sum_{i < j} a_{il}^{\dagger} a_{il})}$$

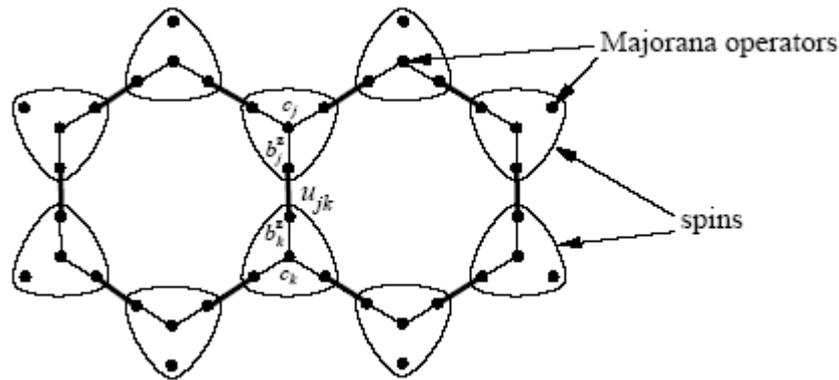
For each pair of fermion operators (a, a^{\dagger}) , we can further define two Majorana fermion operators (c, d) : $c_{jl} = i(a_{jl}^{\dagger} - a_{jl})$ and $d_{jl} = a_{jl}^{\dagger} + a_{jl}$ when $j + l = \text{even}$, and $c_{jl} = a_{jl}^{\dagger} + a_{jl}$ and $d_{jl} = i(a_{jl}^{\dagger} - a_{jl})$ when $j + l = \text{odd}$.

$$H = -i \sum_{j+l=\text{even}} (J_1 c_{j,l} c_{j+1,l} - J_2 c_{j-1,l} c_{j,l} + J_3 D_{jl} c_{j,l} c_{j,l+1}),$$

where $D_{jl} = id_{j,l}d_{j,l+1}$ is defined on each vertical bond. Since there are no direct connections between any two vertical bonds, all D_{jl} are *good quantum numbers*. Each D_{jl} acts like a local static Z_2 gauge field. They commute with each other and with the Hamiltonian.

Kitaev model: free fermions

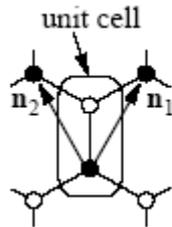
Kitaev model:



$$\hat{u}_{jk} = i b_j^{\alpha_{jk}} b_k^{\alpha_{jk}}$$

$$u_{jk} = \pm 1.$$

$$\tilde{H} = \frac{i}{4} \sum_{j,k} \hat{A}_{jk} c_j c_k, \quad \hat{A}_{jk} = \begin{cases} 2J_{\alpha_{jk}} \hat{u}_{jk} & \text{if } j \text{ and } k \text{ are connected,} \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases}$$



$$i\tilde{A}(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} 0 & if(\mathbf{q}) \\ -if(\mathbf{q})^* & 0 \end{pmatrix}, \quad \varepsilon(\mathbf{q}) = \pm|f(\mathbf{q})|,$$

$$f(\mathbf{q}) = 2(J_x e^{i(\mathbf{q}, \mathbf{n}_1)} + J_y e^{i(\mathbf{q}, \mathbf{n}_2)} + J_z),$$

$$\mathbf{n}_1 = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad \mathbf{n}_2 = \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right)$$

Квантовый компьютер и спиновые жидкости: что общего?

- К в а н т о в ы й к о м п ь ю т е р – э т о б о л ь ш а я с и с т е м а, п о в е д е н и е к о т о р о й н е п о д ч и н я е т с я з а к о н а м к л а с с и ч е с к о й ф и з и к и.
- С п и н о в ы е (д и м е р н ы е) ж и д к о с т и – б о л ь ш и е к в а н т о в ы е с и с т е м ы, у с т о й ч и в ы е к в н е ш н и м

Сверхтекучесть и кристалл:

Бывает ли что-то
между ними («просто
жидкость») при $T=0$?

- ^4He - сверхтекучая
жидкость при $T < 2.1 \text{ K}$
- Под давлением он
кристаллизуется
(фазовый переход 1-ого
рода)
- Может ли быть и кристалл
и сверхтекучесть