Razmatranje Hohenberg-Mermin-Wagnerovog argumenta o 2D magnetskim uređenjima

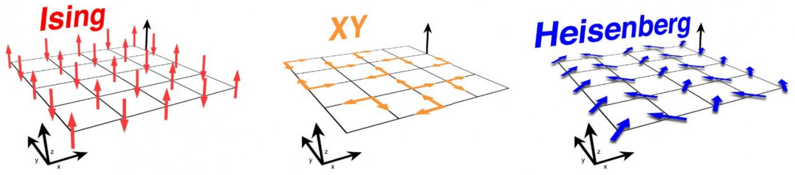
Grgur Palle
Mentor: Prof. Denis Sunko

Fizički odsjek
Prirodoslovno-matematički fakultet
Bijenička cesta 32, 10000 Zagreb

3. veljače 2020.

Uvod

- promatramo 2D magnetske sustave pri $T > 0$
- kada dolazi do spontanog magnetskog uređenja?
- odgovor ovisi o simetriji sustava!



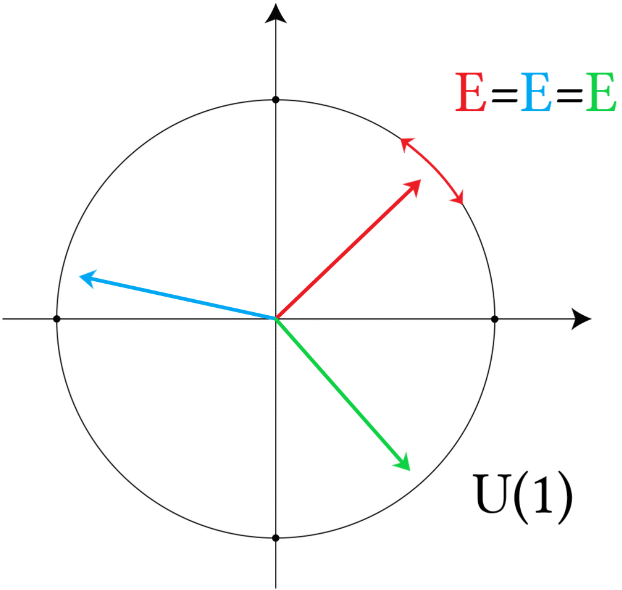
Simetrije i magnetsko uređenje

- za Isingov model koji ima diskretnu $\mathbb{Z}_2$ simetriju dolazi do magnetskog uređenja (Onsager, 1944)
- za XY i Heisenbergov model koji imaju kontinuiranu U(1) i SU(2) simetriju ne dolazi do magnetskog uređenja (Mermin i Wagner, 1966)
- razlog: u 2D pri konačnoj temperaturi ne može doći do spontanog loma kontinuirane simetrije

Nambu-Goldstoneovi bozoni

- spontani lom kontinuirane simetrije je uvijek popraćen Nambu-Goldstoneovim bozonima
- oni su fluktuacije ili pobuđenja sustava oko osnovnog spontano narušenog stanja
- nemaju energetski procijep (tj. masu) te im je disperzija $\omega_{\boldsymbol{k}} \sim k$ ili k^2
- promotrimo konkretan slučaj magnetizacije u sustavu s U(1) simetrijom

Magnetizacija U(1)-simetričnog sustava



Spinski valovi

- Nambu-Goldstoneovi bozoni su spinski valovi
- zbog simetrije svi smjerovi magnetizacije imaju istu energiju
- stoga stvaranje pobuđenja koje samo mijenja smjer magnetizacije (spinski val s $\boldsymbol{k} \to \mathbf{0}$) nema energetsku cijenu (nema energetskog procijepa)
- vanjsko magnetsko polje bi narušilo U(1) simetriju sustava i dalo masu spinskim valovima

Analiza spinskih valova u 2D

- u 2D (ali i 1D) zbroj svih doprinosa fluktuaciji magnetizacije divergira!

$$\frac{\Delta M}{M} \sim \frac{\sum_{\boldsymbol{k}} n_{\boldsymbol{k}}}{N} \sim \int_0 \frac{k \, \mathrm{d}k}{\exp(\beta \hbar \omega_{\boldsymbol{k}}) - 1} \to \infty$$

- divergencija je logaritamska ($\omega_{\boldsymbol{k}} \sim k^2$) i u infracrvenom dijelu spektra ($\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{0}$)
- fluktuacije sprječavaju nastanak magnetski uređenog stanja
- ova fizikalna analiza nije rigorozna

Teorem (Hohenberg-Mermin-Wagner)

Za XY i Heisenbergov model s kratkodosežnim međudjelovanjem u jednoj i dvjema dimenzijama pri temperaturama većim od apsolutne nule ne dolazi do spontane magnetizacije sustava u ravnini simetrije.

- rigorozan rezultat
- glavna ideja dokaza (Hohenberg, 1967): koristiti Bogoljubovljevu nejednakost kako bi se zaobišlo egzaktno rješavanje modela (do danas nisu riješeni)

Lema (Bogoljubov)

Neka su A i C proizvoljni višečestični operatori. Onda pri temperaturama većim od apsolutne nule vrijedi

$$|\langle [C, A] \rangle|^2 \leq \tfrac{1}{2}\beta \left\langle \{A, A^\dagger\} \right\rangle \left\langle \left[[C, H], C^\dagger\right] \right\rangle$$

- $\langle \cdots \rangle$ je prosjek po kanonskom ansamblu

$$\langle A \rangle := \frac{1}{Z} \operatorname{tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta H} A\right)$$
$$Z := \operatorname{tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta H}\right)$$

Dokaz Bogoljubovljeve nejednakosti

- uvodimo Bogoljubovljev skalarni produkt

$$\langle A|B\rangle := \frac{1}{Z}\int_0^1 \mathrm{d}\tau\, \mathsf{tr}\left(\mathrm{e}^{-(1-\tau)\beta H} A^\dagger \mathrm{e}^{-\tau\beta H} B\right)$$

- zatim uz $B = [H, C^\dagger]$ primjenjujemo Cauchy-Bunjakovski-Schwarzovu nejednakost

$$|\langle A|B\rangle|^2 \leq \langle A|A\rangle \langle B|B\rangle$$

Dokaz Bogoljubovljeve nejednakosti

- iz nje uklanjamo skalarni produkt u korist običnih prosjeka pomoću (ne)jednakosti

$$
\begin{aligned}
\langle A|B\rangle &= \beta^{-1}\overline{\langle [C,A]\rangle} \\
\langle A|A\rangle &\leq \tfrac{1}{2}\left\langle \{A, A^\dagger\}\right\rangle \\
\langle B|B\rangle &= \beta^{-1}\left\langle \left[[C,H], C^\dagger\right]\right\rangle
\end{aligned}
$$

- uvrstimo i QED

(detalji u pisanom dijelu seminara)

XY i Heisenbergov model

- Hamiltonijan koji obuhvaća oba modela

$$H = -\sum_{ij} J_{ij}(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) - \sum_{ij} J_{ij}^z S_i^z S_j^z$$

- za XY model je $J_{ij}^z = 0$, dok je za Heisenbergov model $J_{ij}^z = J_{ij}$
- ima U(1) simetriju rotacija oko z osi

$$\left[H, \sum_i S_i^z\right] = 0$$

Metoda Bogoljubovljevih kvaziprosjeka

- dolazi li do spontane magnetizacije ispitujemo metodom Bogoljubovljevih kvaziprosjeka
- ideja je da uvedemo malu smetnju koja se veže za magnetizaciju sustava
- ako infinitezimalna smetnja dovodi do konačne magnetizacije u termodinamičkom limesu onda dolazi do spontane magnetizacije sustava (Bogoljubov, 1960)

Dokaz Hohenberg-Mermin-Wagnerovog teorema

- uvodimo magnetizaciju

$$\boldsymbol{M} := \frac{1}{V} \sum_i \boldsymbol{S}_i$$

- i smetnju preko magnetskog polja duž x osi

$$H'_b = -V\, b\hat{\boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{M}$$

Dokaz HMW teorema

- Bogoljubovljev kvaziprosjek nam onda govori hoće li doći do spontane magnetizacije

$$\langle\langle \boldsymbol{M} \rangle\rangle := \lim_{b\to 0} \langle \boldsymbol{M} \rangle_b = \lim_{b\to 0} \frac{\mathrm{tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta(H+H'_b)}\boldsymbol{M}\right)}{\mathrm{tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta(H+H'_b)}\right)}$$

- ako uspijemo dokazati da $\langle\langle \boldsymbol{M} \rangle\rangle$ iščezava onda znamo da ne dolazi do magnetskog uređenja

Dokaz HMW teorema

- to ćemo upravo dokazati lukavim odabirom operatora A i C u Bogoljubovljevoj nejednakosti
- neka su

$$A_{\boldsymbol{k}} = \sum_i \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i} S_i^y$$

$$C_{\boldsymbol{k}} = \sum_i \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i} S_i^z$$

- sada malo raspisujemo

Raspisivanje

$$[C_{\boldsymbol{k}}, A_{\boldsymbol{k}}] = (-\mathrm{i}) \sum_i S_i^x = (-\mathrm{i}) V M_x$$

$$\{A_{\boldsymbol{k}}, A_{\boldsymbol{k}}^\dagger\} = \sum_{ij} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)} \{S_i^y, S_j^y\}$$

$$\left[[C_{\boldsymbol{k}}, H], C_{\boldsymbol{k}}^\dagger\right] = \sum_{ij} J_{ij}(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) \cdot 2\{1 - \cos[\boldsymbol{k} \cdot (\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)]\}$$

$$\left[[C_{\boldsymbol{k}}, H_b'], C_{\boldsymbol{k}}^\dagger\right] = b \sum_i S_i^x = V b M_x$$

Još raspisivanja

$$\left|\sum_{\boldsymbol{k}} \tfrac{1}{2}\beta \left\langle \{A_{\boldsymbol{k}}, A_{\boldsymbol{k}}^\dagger\} \right\rangle_b \right| \leq \beta N^2 S(S+1)$$

$$\left|\left\langle \left[[C_{\boldsymbol{k}}, H + H_b'], C_{\boldsymbol{k}}^\dagger\right] \right\rangle_b \right| \leq N\rho \boldsymbol{k}^2 + V \left| b \left\langle M_x \right\rangle_b \right|$$

$$\rho := \frac{S(S+1)}{N} \sum_{ij} |J_{ij}| \left(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j\right)^2$$

$$|\langle S_i^y S_i^y \rangle| \leq |\langle S_i^y S_i^y + S_i^z S_i^z \rangle| \leq S(S+1)$$

$$[\boldsymbol{k} \cdot (\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)]^2 \leq \boldsymbol{k}^2 (\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)^2$$

$$2(1 - \cos x) \leq x^2$$

$$\sum_{\boldsymbol{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)} = N\delta_{ij}$$

I još raspisivanja

$$|\langle[C_{\boldsymbol{k}}, A_{\boldsymbol{k}}]\rangle_b|^2 \leq \tfrac{1}{2}\beta \left\langle\{A_{\boldsymbol{k}}, A_{\boldsymbol{k}}^\dagger\}\right\rangle_b \left\langle\left[[C_{\boldsymbol{k}}, H + H_b'], C_{\boldsymbol{k}}^\dagger\right]\right\rangle_b$$

$$\sum_{\boldsymbol{k}\in 1\mathrm{BZ}} \frac{|\langle[C_{\boldsymbol{k}}, A_{\boldsymbol{k}}]\rangle_b|^2}{\left\langle\left[[C_{\boldsymbol{k}}, H + H_b'], C_{\boldsymbol{k}}^\dagger\right]\right\rangle_b} \leq \sum_{\boldsymbol{k}\in 1\mathrm{BZ}} \tfrac{1}{2}\beta \left\langle\{A_{\boldsymbol{k}}, A_{\boldsymbol{k}}^\dagger\}\right\rangle_b$$

$$\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}} \longrightarrow \frac{d}{k_0^d}\int_0^{k_0} \mathrm{d}k k^{d-1}$$

(detalji u pisanom dijelu seminara)

Dokaz HMW teorema

- konačna nejednakost

$$\left|\langle M_x \rangle_b\right|^2 \leq \frac{\beta \rho k_0^2}{\log\left(1 + \frac{n\rho k_0^2}{\left|b \langle M_x \rangle_b\right|}\right)} \cdot n^2 S(S+1)$$

- iz nje slijedi HMW teorema (tj. $\langle\langle M_x \rangle\rangle = 0$)
- dokaz: pretpostavimo suprotno, uzmimo limes $b \to 0$ s obije strane, kontradikcija i QED

Osjetljivost HMW argumenta na smetnje

- vrijedi za idealan XY i Heisenbergov model
- što ako dodamo smetnju u Hamiltonijan?

$$H_{\mathrm{uk}} = H + H'_b + \delta H$$

- divergencija u nazivniku može biti pripitomljena

$$\int_0 \frac{k\,\mathrm{d}k}{\rho \boldsymbol{k}^2 + \Delta_b(\boldsymbol{k}) + \left| b \langle M_x \rangle_{b,\delta} \right|} < \infty \quad \text{kako } b \to 0$$

Osjetljivost HMW argumenta na smetnje

- napravili smo analizu za smetnje oblika

$$\delta H = -\sum_i \boldsymbol{h}_i \cdot \boldsymbol{S}_i$$

- tada je član iz nazivnika neovisan o $\boldsymbol{k}$

$$\Delta_b := \frac{1}{V} \left| \left\langle \left[[C_{\boldsymbol{k}}, \delta H], C_{\boldsymbol{k}}^\dagger \right] \right\rangle_{b,\delta} \right| = \frac{\left| \langle \delta H \rangle_{b,\delta} \right|}{V}$$

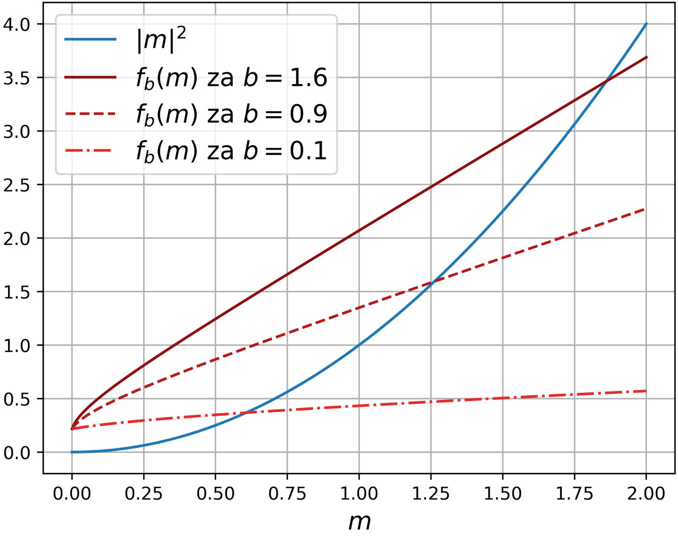
Osjetljivost HMW argumenta na smetnje

- konačna nejednakost se modificira

$$\left|\langle M_x\rangle_{b,\delta}\right|^2 \leq \frac{\beta\rho k_0^2}{\log\left(1+\frac{n\rho k_0^2}{\Delta_b+\left|b\langle M_x\rangle_{b,\delta}\right|}\right)}\cdot n^2 S(S+1)$$

- u limesu $b \to 0$ dobivamo gornju među na spontanu magnetizaciju $\langle\langle M_x\rangle\rangle$

Skica, $f_b(m) = 1/\log[1 + 1/(|bm| + 0.01)]$



Osjetljivost HMW argumenta na smetnje

- rješavanjem odgovarajuće transcendentalne jednadžbe uz par procjena dobivamo

$$\frac{|\langle\langle M_x \rangle\rangle|^2}{n^2 S(S+1)} \leq \frac{\beta \rho k_0^2}{\text{konst.} - \log\left(\sqrt{\frac{\beta \langle h \rangle^2}{\rho k_0^2}} + \frac{\kappa \beta \sigma_h^2}{\rho k_0^2}\right)}$$

- ovo rješenje vrijedi u režimu

$$\langle h \rangle \sim \sigma_h \ll \rho k_0^2 \sim J \ll k_B T$$

Osjetljivost HMW argumenta na smetnje

- možemo ocijeniti koliko je velika temperatura faznog prijelaza T_c tako što zahtijevamo da je $\langle\langle M_x \rangle\rangle \approx$ gornjoj međi
- tako dolazimo do ocjene (konstanta $a \sim 1$)

$$k_B T_c \approx \frac{J}{a - \log(\sigma_h / J)}$$

- čak i iznimno mala smetnja (npr. $\sigma_h / J \sim 10^{-6}$) dovodi to $T_c \sim J / k_B$

Zaključak

- Hohenberg-Mermin-Wagnerov teorem je iznimno osjetljiv na smetnje
- prijelazi pri $T_c \sim J/k_B$ se uistinu opažaju
- ocjena temperature prijelaza je dosljedna s literaturom
- u eksperimentu obično imamo više slojeva koji se slabu vežu, tad je $\sigma_h \sim J_\perp$

Hvala na pažnji!

Bibliografija

- N. D. Mermin, H. Wagner. *Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models*. Phys. Rev. **17**, 22 (1966) 1133–1136. `https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.17.1133`.
- P. C. Hohenberg. *Existence of Long-Range Order in One and Two Dimensions*. Phys. Rev. **158**, 2 (1967) 383–386. `https://doi.org/10.1103/PhysRev.158.383`.

Bibliografija

- N. N. Bogoljubov (1970). *Lectures on Quantum Statistics, Volume 2, Quasi-averages*. Gordon and Breach Science Publishers. ISBN-10: 0-677-20570-8.

- A. Gelfert, W. Nolting. *The absence of finite-temperature phase transitions in low-dimensional many-body models: a survey and new results*. J. Phys. Condens. Matter **13**, 27 (2001) R505–R524. `https://doi.org/10.1088/0953-8984/13/27/201`.

Bibliografija

L. J. De Jongh, A. R. Miedema. *Experiments on simple magnetic model systems*. Advances in Physics **50**, 8 (2001) 947–1170. `https://doi.org/10.1080/00018730110101412`.

(glavne reference, ostatak možete pronaći u pisanom dijelu seminara)