

УДК 537.621
© 1990

СПЕКТР ВОЗБУЖДЕНИЙ ДИМЕРИЗОВАННОЙ АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОЙ ЦЕПочки

В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, О. Г. Петраковский

Гамильтониан одномерной цепочки представлен в виде системы димеров с взаимодействием между ними. Используя это представление, мы исследовали щели в спектре возбуждений системы в зависимости от величины спина S . Показано, что случай $S=1/2$ принципиально отличается от $S \geq 1$, качественного отличия для полуцелых и целых спинов при $S > 1$ нет.

Интерес к экспериментальному и теоретическому изучению низкоммерных магнетиков обусловлен их аномальными свойствами. Одним из фундаментальных вопросов, не имеющих пока ответа, является гипотеза Холдейна [1] о качественном отличии основного состояния антиферромагнетиков с целым и полуцелым значением спина. Эта гипотеза проверялась аналитически методами теории возмущений [2] и численно методом Монте-Карло [3]. В работе [4] при экспериментальном исследовании квазиодномерного антиферромагнетика с $S=1$ была обнаружена щель в спектре элементарных возбуждений. Для одного из возможных объяснений этой щели авторы [4] используют гипотезу Холдейна. Недавно [5] было предложено димерное описание антиферромагнитной цепочки с $S=1$.

Вопрос о поведении цепочек с величинами спина, отличными от $1/2$ и 1 , оставался открытым. В настоящей работе мы сообщаем результаты димерного описания антиферромагнитной цепочки с произвольной величиной S . Как и в [5], одномерная цепочка разбивается на димеры из двух спинов с обменом I , а взаимодействие между димерами равно ξI , где $0 < \xi < 1$. В пределе $\xi \rightarrow 1$ получаем обычную цепочку.

Гамильтониан антиферромагнитной ($I > 0$) цепочки представим в виде

$$\mathcal{H} = I \sum_{f=0}^{\frac{N-1}{2}} S_{2f} S_{2f+1} + \xi I \sum_{f=0}^{\frac{N-1}{2}} S_{2f+1} S_{2f+2}. \quad (1)$$

Здесь N — число узлов, f — номер димера. Первый член в (1) описывает невзаимодействующие димеры и точно диагонализует. В результате для любой величины S получаем синглетное основное состояние изолированного димера и набор возбужденных: триплет, квинтет и т. д., отделенных от основного состояния щелью I . Поскольку основное состояние димера невырождено, то снимаются трудности, связанные с использованием теории возмущений для вырожденного случая. Поэтому для описания спектра возбуждений слабо связанных димеров с $\xi \ll 1$ можно воспользоваться стандартными методами теории возмущений. Идея нашего рассмотрения состоит в том, чтобы переписать узельные спиновые операторы в представлении состояний димера. Таким образом,

$$S_{j-1}^i = \sum_{m, n} \alpha_{mn}^i X_j^{mn}, \quad S_{j-1}^i = \sum_{m, n} \beta_{m+1}^i X_{j+1}^{m+1, n}, \quad (2)$$

где $X_j^{mn} = |m\rangle\langle n|$ — операторы Хаббарда, описывающие переход димера из состояния $|n\rangle$ в состояние $|m\rangle$, $i = +, -, z$. Коэффициенты разложений в (2) являются матричными элементами операторов спина в базисе димерных состояний

$$\alpha_{mn}^i = \langle m | S_{2f-1}^i | n \rangle, \quad \beta_{mn}^i = \langle m | S_{2f}^i | n \rangle. \quad (3)$$

Систему уравнений для двухвременных функций Грина $\langle\langle X_j^{mn} | S_{j'}^i \rangle\rangle$ записываем в приближении типа Тябликова $\langle\langle X_j^{mn} X_{j'}^{i'k} | S_{j'}^i \rangle\rangle \rightarrow \langle X_{j'}^{i'k} \rangle \times \langle\langle X_j^{mn} | S_{j'}^i \rangle\rangle$, при котором все взаимодействия внутри димера учитываются точно. При $\xi \ll 1$ заселенность верхних уровней димера мала. Мы ищем решения дисперсионного уравнения с точностью до членов $\sim \xi^3$ включительно. В этом приближении вклад в спектр дают лишь три нижних мультиплета (синглет, триплет и квинтет). В результате находим следующий спектр возбуждений

$$\begin{aligned} \frac{\omega_{1,2}^2}{I^2} &= 1 - \xi \frac{4S(S+1)}{3} \cos k \langle X^{11} - X^{22} \rangle, & \frac{\omega_3^2}{I^2} &= 1 + \xi \frac{4S(S+1)}{3} \cos k \langle X^{11} - X^{33} \rangle, \\ \frac{\omega_{4,5}^2}{I^2} &= 4 - 4\xi(2S-1)(2S+3) \cos k \left\langle \frac{7X^{22}}{30} + \frac{X^{33}}{10} \right\rangle, \\ \frac{\omega_6^2}{I^2} &= 4 + 4\xi(2S-1)(2S+3) \cos k \left\langle \frac{X^{22}}{5} + \frac{4X^{33}}{15} \right\rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь $\langle X^{nn} \rangle$ — число заполнения состояния $|n\rangle$ димера

$$|1\rangle = |S=0, S^z=0\rangle, \quad |2\rangle = |S=1, S^z=1\rangle, \quad |3\rangle = |S=1, S^z=0\rangle, \quad |4\rangle = |S=1, S^z=-1\rangle, \quad (5)$$

$|1\rangle$ — синглетное основное состояние; $|2\rangle, |3\rangle, |4\rangle$ — состояния триплета. Состояния квинтета явно не входят в (4), они дают вклад в перенормировки чисел заполнения $\langle X^{nn} \rangle$.

Возбуждения $\omega_{1,2}$ соответствуют переходам $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ и $|1\rangle \rightarrow |4\rangle$, а ω_3 — $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$. Их энергия для изолированного кластера равна I . Эти возбуждения имеют место для любого S . Ветви спектра $\omega_{4,5,6}$ появляются лишь для $S \geq 1$ и для $\xi=0$ соответствуют переходам синглет—квинтет. В простейшем варианте несамосогласованного расчета считаем при $T=0$, $\langle X^{11} \rangle = 1$, остальные числа заполнения равны нулю. На самом деле наше расщепление позволяет учесть квантовые флуктуации при $T=0$. Для этого найдем числа заполнения, система уравнений для которых с точностью до ξ^2 имеет вид

$$\langle X^{22} \rangle = \langle X^{44} \rangle = \frac{1}{16} \left[\frac{4S(S+1)}{3} \xi \right]^2 \langle X^{11} \rangle^3, \quad \langle X^{33} \rangle = \langle X^{22} \rangle, \quad \sum_n \langle X^{nn} \rangle = 1. \quad (6)$$

В результате для щелей в спектре окончательно получаем

$$\begin{aligned} \frac{\omega_{1,2}(0)}{I} &= \pm \left[1 - \frac{4S(S+1)}{3} \xi + 2 \left(\frac{2S(S+1)}{3} \right)^3 \xi^3 \right]^{1/2}, \\ \frac{\omega_3(0)}{I} &= \pm \left[1 + \frac{4S(S+1)}{3} \xi - 2 \left(\frac{2S(S+1)}{3} \right)^3 \xi^3 \right]^{1/2}, \\ \frac{\omega_{4,5}(0)}{I} &= \pm 2 \left[1 - (2S-1)(2S+3) S^2 \frac{(S+1)^2}{27} \xi^3 \right]^{1/2}, \\ \frac{\omega_6(0)}{I} &= \pm 2 \left[1 + (2S-1)(2S+3) S^2 \frac{7(S+1)^2}{135} \xi^3 \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (7)$$

Нас интересует поведение наименьшей щели в спектре возбуждений $\omega_{1,2}(0)$.

На рисунке показана зависимость $\omega_{1,2}(0)$ от ξ , на котором сплошной линией показан результат (7), штрихпунктирной линией изображен результат несамосогласованного расчета. Загиб вверх при больших ξ указывает на неприменимость формул (7) и необходимость учета всех

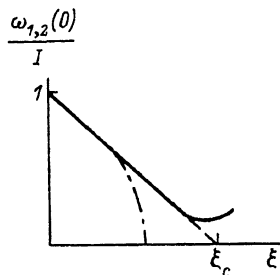
членов по ξ , поэтому в области больших ξ мы воспользуемся экстраполяцией (см. рисунок, пунктирная линия). Согласно этой экстраполяции, для $S=1$ $\xi_c=0.68$. Это значение близко к критической точке $\xi_c=0.6 \pm 0.04$, полученной в [5] и отделяющей димерную фазу при $g < \xi_c$ от фазы Холдейна при $\xi > \xi_c$.

Для значений $S > 1$ поведение щели качественно сохраняется, хотя величина ξ_c уменьшается монотонно.

S	1	$\frac{3}{2}$	2	$\frac{5}{2}$	3	$\frac{7}{2}$	4	$\frac{9}{2}$
ξ_c	0.68	0.31	0.23	0.16	0.11	0.08	0.06	0.05

Никакого качественного отличия между целыми и полуцелыми значениями спина мы не обнаружили. Единственное отличие возникает для $S=1/2$, для которого экстраполяция дает $\xi_c > 1$.

Таким образом, случай $S=1/2$ и $S=1$, как и в [1], отличаются, но в противоположность гипотезе Холдейна для $S > 1$ качественного отличия целых и полуцелых спинов в области $\xi \ll 1$ мы не получили. Из нашего рассмотрения мы не видим оснований возникновения этого отличия при $\xi \sim 1$.



Зависимость щели в спектре возбуждений от ξ .

Список литературы

- [1] Haldane F. M. // Phys. Lett. A. 1983. V. 93. N9. P. 464—468.
- [2] Хвещенко Д. В., Чубуков А. В. // ЖЭТФ. 1987. Т. 66. № 5. С. 1088—1094.
- [3] Nightingale M. P., Blöte H. W. J. // Phys. Rev. B. 1986. V. 33. N1. P. 659—661.
- [4] Renard J. P., Verdaguier M., Regnault L. P. // J. Appl. Phys. 1988. V. 63. N8. Pt2A. P. 3538—3542.
- [5] Singh Rajiv R. P., Gelfand Martin P. // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61. N 18. P. 2133—2136.

Институт физики им. Л. В. Киренского
СО АН СССР
Красноярск

Поступило в Редакцию
29 ноября 1989 г.