Письма в ЖЭТФ, том 12, стр. 332 – 335 *20 сентября 1970 г.*

ОДНОМЕРНАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ $S = 1$ С МОДИФИЦИРОВАННЫМ АНТИФЕРРОМАГНИТНЫМ ГАМИЛЬТОНИАНОМ

Г.В.Уймин

В работе [1] была рассмотрена модель Хаббарда с большим кулоновским отталкиванием на одном атоме, причем учитывался орбитальный момент электрона. Эта модель во втором порядке теории возмущений приводит к гамильтониану вида

$$H = I \sum_{r,\,a} F_{r,\,r+a} \,. \qquad (1)$$

Действие оператора $F_{r,r'}$ таково: $F_{r,r'}\, \phi_r \psi_{r'} = \phi_{r'} \psi_r$ (здесь функции ϕ и ψ характеризуются определенными проекциями спина и орбитального момента). В частности, если $L = 0$, необходимо рассматривать только два типа состояний ($S_r^z = \pm \frac{1}{2}$) и тогда $F_{r,r'} = 2 S_r S_{r'} + \frac{1}{2}$. Очевиден антиферромагнитный характер основного состояния в этом случае. Однако, если $L \neq 0$, число конкурирующих состояний увеличивается до шести ($L = 1$), десяти ($L = 2$) и т. д.

Обычно считается, что орбитальные моменты в кристалле заморожены. Однако, если кристаллические поля, действующие на электрон, малы по сравнению с обменной энергией I, то момент электрона слабо связан с решеткой. Мы будем рассматривать как раз такую возможность.

Достаточно очевидно, что энергия основного состояния гамильтониана (1) понижается при увеличении числа конкурирующих состояний. Так, если число этих состояний совпадает с числом узлов, энергия основного состояния равна $-NI$.

В то же время известен точный результат для одномерной цепочки с $L = 0$ ([1, 2]). Энергия основного состояния равна $-NI(2\ln 2 - 1)$.

В настоящей работе будут получены уравнения для определения энергетического спектра одномерной системы с тремя конкурирующими состояниями. Энергия основного состояния такой системы меньше соответствующей энергии обычной антиферромагнитной цепочки на величину $\approx 0{,}3\,NI$. Это указывает на то, что наличие орбитального момента и малых кристаллических полей приводит к новому типу "антиферромагнитных" состояний.

Рассмотрим одномерную цепочку с гамильтонианом (1) и тремя возможными одноузельными состояниями. Очевидно, ее можно рассматривать как цепочку спинов $S = 1$ с гамильтонианом

$$H = \sum_i [(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1})^2 + (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1}) - 1] \tag{2}$$

(мы положили $I = 1$). В отличие от гайзенберговского антиферромагнетика в (2) содержатся слагаемые $(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1})^2$. За условный ферромагнитный вакуум примем состояние, в котором все проекции спинов равны единице. Спиновые отклонения можно записать с помощью операторов рождения и уничтожения

$$| S^z = -1 >_i = a_i^+ | \, bak >_i , \tag{3}$$

$$| S^z = 0 >_i = b_i^+ | \, bak >_i . \tag{4}$$

Все остальные матричные элементы операторов a и b, относящиеся к одному узлу, кроме сопряженных к (3) и (4), равны нулю. Операторы, относящиеся к разным узлам, коммутируют.

Собственные функции задачи ищем в виде

$$\Psi = \sum f(m_1, \ldots, m_{M_1} | m'_1, \ldots, m'_{M_2}) \, a^+_{m_1} \ldots a^+_{m_{M_1}} b^+_{m'_1} \ldots b^+_{m'_{M_2}} | \, bak . \tag{5}$$

Амплитуды f симметричны по каждой группе индексов, поэтому можно считать, что $m_1 < m_2 < \ldots < m_{M_1}$ и $m'_1 < m'_2 < \ldots < m'_{M_2}$. Кроме того положим $M_1 \leqslant M_2 \leqslant N - M_1 - M_2$, что не ограничивает общности задачи.

Следуя Бете, доопределим нефизические амплитуды

$$f(\ldots m, m \ldots | \ldots) + f(\ldots m+1, m+1 \ldots | \ldots) = 2f(\ldots m, m+1 \ldots | \ldots), \tag{6}$$

$$f(\ldots | \ldots m, m \ldots) + f(\ldots | \ldots m+1, m+1 \ldots) = 2f(\ldots | \ldots m, m+1 \ldots), \tag{6'}$$

$$f(\ldots m \ldots | \ldots m \ldots) + f(\ldots m+1 \ldots | \ldots m+1 \ldots) = f(\ldots m \ldots | \ldots m+1 \ldots) + f(\ldots m+1 \ldots | \ldots m \ldots). \tag{7}$$

При этом уравнения для определения собственных значений становятся простыми

$$[E - (N - 2M_1 - 2M_2)] f(m_1, \ldots, m_{M_1} | m'_1, \ldots, m'_{M_2}) = \sum_{i,\, \alpha = \pm 1} f(\ldots m_i + \alpha \ldots), \tag{8}$$

но в них появляются нефизические амплитуды, поэтому часть собственных значений E отвечает нефизическим состояниям, которые ,однако, можно легко учесть.

Решения уравнений (8) ищем в виде разложения по плоским волнам

$$f(m_1, \dots, m_{M_1} \mid m'_1, \dots, m'_{M_2}) = \sum_{\{P\}} \zeta^{Q_1 \dots Q_{M_1+M_2}}_{P_1 \dots P_{M_1+M_2}} \exp\{ i \sum_j k_{P_j} m_{Q_j} \} . \qquad (9)$$

Оказывается, что задача сходна с той, которая рассмотрена в [4] и [5]. Опуская промежуточные выкладки, приведем окончательный результат в пределе $N \to \infty,\ M_1 \to \infty,\ M_2 \to \infty$.

$$\frac{1}{1+\xi^2} = 2\pi\phi(\xi) + 4\int_{-A}^{A} \frac{\phi(\xi')\,d\xi'}{4+(\xi-\xi')^2} - 2\int_{-B}^{B} \frac{\psi(\eta)\,d\eta}{1+(\xi-\eta)^2}, \qquad (10)$$

$$0 = 2\pi\psi(\eta) + 4\int_{-B}^{B} \frac{\psi(\eta')\,d\eta'}{4+(\eta-\eta')^2} - 2\int_{-A}^{A} \frac{\phi(\xi)\,d\xi}{1+(\xi-\eta)^2}, \qquad (11)$$

$$\frac{M_1+M_2}{N} = 2\int_{-A}^{A} \phi(\xi)\,d\xi, \qquad (12)$$

$$\frac{M_1}{N} = 2\int_{-B}^{B} \psi(\eta)\,d\eta, \qquad (13)$$

$$E = N\left(1 - 2\frac{M_1}{N} - 2\frac{M_2}{N}\right) + 4\int_{-A}^{A} \phi(\xi)\left(1 - \frac{2}{1+\xi^2}\right)d\xi. \qquad (14)$$

Из этих уравнений можно получить энергию основного состояния. Она достигается при $M_1/N = 1/3$ и $M_2/N = 1/3$ и равна $-N(\ln 3 + \frac{\pi}{3\sqrt{3}} - 1)$.

Автор благодарен Б.Л.Покровскому за полезное обсуждение.

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
4 августа 1970г.

Литература

[1] Б.Л.Покровский, Г.В.Уймин. Письма в ЖЭТФ, 11, 206, 1970.

[2] H.Bethe. Zs. Phys., 71, 205, 1931.

[3] L.Hulten. Arkiv Met. Astron. Fysik, 26A, №11, 1938.
[4] M.Gaudin. Phys. Lett., 24A, 55, 1967.
[5] C.N.Yang. Phys. Rev. Lett., 19, 1312, 1967.