01

Векторная модель Гейзенберга–Дирака–ван-Флека для одномерной антиферромагнитной цепочки локализованных $S = 1$ спинов

© Ф.Е. Орленко,[1] Г.Г. Зегря,[1] Е.В. Орленко[1]

[1] Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
195251 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: fadler@mail.ru
[2] Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 17 мая 2011 г.)

Исследованы магнитные свойства анизотропных кристаллов с локализованными спинами $S = 1$, для которых выводится гамильтониан в форме Гейзенберга–Дирака–ван-Флека, включающий в себя наряду с билинейными членами биквадратные вклады. Энергия основного состояния антиферромагнитной цепочки $S = 1$ спинов рассчитана в модели ближайших соседей, константа взаимодействия перенормируется по методу ренормгрупп при укрупнении системы. Получен температурный критерий возникновения дальнего порядка в системе. Возбуждения данной цепочки в линейном приближении имеют отличную от антиферромагнетиков с половинным спином дисперсионную зависимость и отделены энергетической щелью от основного состояния. Учет нелинейных вкладов приводит к образованию уединенной волны, имеющей форму dark-bright-солитона.

Введение

Интерес к одномерным цепочкам ионов со спинами $S = 1$ возник давно, начиная с известных работ Халдане [1,2], в которых было высказано предположение о том, что полный спин всей цепочки проявляет себя в основном состоянии как экспоненциально спадающая спин-спиновая корреляция и в отличие от цепочки 1/2-спинов цепочки спин-1 имеют спектр возбуждений, отделенный от основного состояния энергетической щелью, что вызывает принципиально иное их поведение в критической точке. Это так называемое „предположение Халдане“ сегодня получило надежные подтверждения в многочисленных работах, посвященных критическим явлениям в спин-1-цепочках [1–5]. Одноионная анизотропия с соответствующим проявлением магнитных свойств существует во многих соединениях, например в $CsNiCl_3$ (слабая аксиальная анизотропия), NENP $[Ni(C_2H_8N_2)_2\ NO_2ClO_4]$ (слабая аксиальная анизотропия), $CsFeBr_3$, NENC $[Ni(C_2H_8N_2)_2Ni(CN)_4]$ и DTN $[NiCl_2{-}4SC(NH_2)_2]$ (сильная планарная анизотропия [3]), которые могли бы стать объектами для экспериментальной проверки получаемых результатов теории критических явлений в системах с „большим“ спином.

В работах Халдане [1,2] исследовались одномерные цепочки ионов со спинами $S = 1$, где в континуальном приближении описывалась динамика системы так называемых „больших“ (т.е. отличных от 1/2) спинов в одномерном антиферромагнетике. В полуклассическом приближении было найдено солитонное решение для возбуждений, анализировались также промежуточные фазы путем излучения расширенной $S = 1$-модели резонирующих валентных связей с учетом биквадратного члена в обменном взаимодействии (квадрат от скалярного произведения операторов спина двух ионов). При этом использовался модельный гамильтониан с неопределенным коэффициентом

$$H_{\mathrm{AKLT}} = J\sum_i \left[(\hat{\mathbf{s}}_i \hat{\mathbf{s}}_{i+1}) + \beta(\hat{\mathbf{s}}_i \hat{\mathbf{s}}_{i+1})^2\right].$$

Авторы работы [4] показали, что гамильтониан допускает существование решений при значении коэффициента $\beta = 1/3$, в этом случае основное состояние представляет собой устойчивую простую валентную связь (VBS), которое отделено от возбуждений щелью. Так как основное состояние при $\beta = 0$ (как было показано в работе Халдане [2]) проявляет струнную корреляцию дальнего порядка и адиабатически связано с состоянием $\beta = 1/3$, то в работе Шолльвека [5] делается заключение о том, что фаза Халдане носит VBS-характер. Интерес к фазам Халдане, проявляющим линейную корреляцию дальнего порядка, проявился в работах [6–9], посвященным холодным атомным системам, в которых также исследуется линейный порядок.

Анализируя возбужденное состояние над основным неелевским для цепочек ионов, Нийс и Роммельз [10] интерпретировали спин-1-цепочку как газ псевдочастиц со спином 1/2, попарно занимающих состояния с $Siz = \pm 1$ путем комбинации проекций псевдоспинов $S^{\sim}iz = \pm 1/2$, а состояние с $Siz = 0$ полагалось как заселенное дыркой. Ситуация напоминает спин-зарядовое разделение в одномерной фермионной системе, где легирование дырками приводит к образованию „холонов“ и „спинонов“. При использовании этой модели в работе [10] численным путем были получены фазовые диаграммы переходов вблизи критической точки с разными возможными сценариями развития событий, напрямую зависящими от соотношения коэффициентов в исходном гамильтониане. Утверждается, что основное состояние одномерных магнитных спин-1-систем является дважды вырожденным с аксиальным неелевским упорядочением, топологические солитонные возбуждения являются подвижными доменными стенками, разделяющими две возможные конфигурации, соответствующие основному состоянию. Все разнообразие фаз, возникающих в спин-1-цепочке, напрямую связано со значениями коэффициентов при билинейном и биквадратном членах в гамильтониане обменного взаимодействия, записанном в спиновом представлении. Таким образом, знание точного вида гамильтониана, описывающего поведение спин-1-системы, является принципиальным моментом решения всей проблемы статистического описания систем с „большим" спином и анализа критических явлений, происходящих в таких системах. Например, в работе [9] получено, что свободный коэффициент β в гамильтониане, описывающем магнитное состояние спин-1-бозе-газа, может принимать только одно единственное значение $\beta = 1$.

В настоящей работе покажем, что система частиц с произвольным (отличным от 1/2) спином может быть описана в спиновом представлении непосредственно, исходя из первых принципов [11]. Внесем существенные добавления в выражения для основного состояния антиферромагнитной $S = 1$-цепочки по сравнению с [12], связанные с последовательным использованием метода ренормгрупп [13], а также получим анилитические выражения для возбуждений, которые могут носить как линейный, так и нелинейный характер. Мы покажем возможность формирования dark-bright-магнитного солитона.

1. Гамильтониан обменного взаимодействия цепочки локализованных $S = 1$-спинов

В простейшем случае цепочки ионов с парным взаимодействием ближайших соседей гамильтониан может быть записан как

$$\widehat{H}_{\text{int}} = \sum_i (K_{i,i+1} + A_{i,i+1}\widehat{P}_{s_i,s_{i+1}}), \tag{1}$$

где $K_{i,i+1}$ — прямое кулоновское, $A_{i,i+1}$ — обменное взаимодействие соседних узлов i и $i+1$, а оператор четности перестановки $\widehat{P}_{s_i,s_{i+1}}$ при действии на вектор состояния в пространстве спинов имеет собственное значение ± 1 в соответствии с симметрией состояния указанной пары соседей (в [12] приведено последовательное изложение теории магнитного упорядочения в системах частиц со спином, отличным от 1/2). Поскольку симметрия спинового состояния пары частиц определяется симметрией коэффициентов Клебша–Гордана и оказывается связана с величиной полного спина пары, то явный вид оператора четности $\widehat{P}_{s_i,s_{i+1}}$ можно найти из условия

$$\widehat{P}_{s_1 s_2}|S, S_z; s_1, s_2\rangle = (-1)^S |S, S_z; s_1, s_2\rangle. \tag{2}$$

Здесь s_1, s_2 — спины 1-й и 2-й частиц, в нашем случае $s_1 = s_2 = 1$, а S, S_z — величины суммарного спина пары и его проекции на ось. Аналогично работам [11,12] будем искать явный вид оператора четности в виде полинома

$$\widehat{P}_{s_1,s_2} = c_{2s}(\widehat{\mathbf{s}}_1\widehat{\mathbf{s}}_2)^{2s} + c_{2s-1}(\widehat{\mathbf{s}}_1\widehat{\mathbf{s}}_2)^{2s-1} + \ldots c_1(\widehat{\mathbf{s}}_1\widehat{\mathbf{s}}_2) + c_0, \tag{3}$$

где число свободных коэффициентов не может превышать количество собственных значений оператора квадрата суммарного спина, в нашем случае суммарный спин принимает три значения $S = 2, 1, 0$. Тогда оператор четности имеет вид

$$\widehat{P}_{s_1,s_2} = (\widehat{\mathbf{s}}_1\widehat{\mathbf{s}}_2)^2 + (\widehat{\mathbf{s}}_1\widehat{\mathbf{s}}_2) - 1, \tag{4}$$

а гамильтониан всей цепочки спинов в отличие от гамильтониана Гейзенберга будет содержать наряду с билинейным еще и биквадратный член от скалярного произведения операторов спина и иметь противоположный знак перед константой обменного взаимодействия

$$\widehat{H}_{\text{int}} = \sum_i \Big[K_{i,i+1} + A_{i,i+1}\big\{(\widehat{\mathbf{s}}_i\widehat{\mathbf{s}}_{i+1})^2 + \widehat{\mathbf{s}}_i\widehat{\mathbf{s}}_{i+1} - 1\big\}\Big]. \tag{5}$$

Такой вид гамильтониана обусловливает появление нелинейных решений для возбужденных состояний.

2. Основное состояние антиферромагнитной цепочки

Гамильтониан (5) может быть переписан в форме, где операторы скалярных произведений спинов соседних ионов будут заменены операторами квадрата суммарного спина этой же пары. Обменный вклад в энергию от каждой пары $E^{\text{exc}}_{i,i+1}$ запишется в виде

$$E^{\text{exc}}_{i,i+1} = A_{i,i+1}\Bigg\{\bigg(\frac{1}{2}\big(S(S+1) - 2s(s+1)\big)\bigg)^2 + \frac{1}{2}\big(S(S+1) - 2s(s+1) - 1\big)\Bigg\}. \tag{6}$$

Будем считать величину суммарного спина пары плавно меняющейся переменной, тогда удобно перейти к новой, непрерывно меняющейся переменной x так, что

$$x = \frac{1}{2}\big(S(S+1) - 2s(s+1)\big), \tag{7}$$

где x находится в интервале $[-2, 1]$.

Тогда выражение для обменной энергии пары может быть записано как функция x

$$E^{\text{exc}}_{i,i+1}(x) = A_{i,i+1}(x^2 + x - 1). \tag{8}$$

Функция $E^{\text{exc}}_{i,i+1}(x)$ имеет минимум в точке $x = -0.5$, которая соответствовала бы спину пары $S = 1.3$, что лежит близко к физически реальному значению $S = 1$, которое соответствует антисимметричному состоянию для каждой пары спинов.

Тогда полный гамильтониан обменного взаимодействия (5) цепочки спинов можно представить в виде ряда

$$\widehat{H}_{\text{int}} \approx K\,\frac{N}{2} + \sum_{i=1,N/2} A_{i,i+1}\langle \bullet_i \bullet_{i+1}\rangle + \sum_{q=1,N/4} A^{(1)}_{q,q+1}\big\langle \langle \bullet\bullet\rangle_q \langle \bullet\bullet\rangle_{q+1}\big\rangle + \ldots, \qquad (9)$$

где символически обозначены операторы обменного взаимодействия $A_{i,i+1}\langle \bullet_i \bullet_{i+1}\rangle = A_{i,i+1}\big\{(\widehat{\mathbf{s}}_i\,\widehat{\mathbf{s}}_{i+1})^2 + \widehat{\mathbf{s}}_i\,\widehat{\mathbf{s}}_{i+1} - 1\big\}$ пары соседних ионов; двух пар — $A^{(1)}_{q,q+1}\big\langle \langle \bullet\bullet\rangle_q \langle \bullet\bullet\rangle_{q+1}\big\rangle = A^{(1)}_{q,q+1}\big\{(\widehat{\mathbf{s}}_q\,\widehat{\mathbf{s}}_{q+1})^2 + \widehat{\mathbf{s}}_q\,\widehat{\mathbf{s}}_{q+1} - 1\big\}$ с перенормированной константой $A^{(1)}_{q,q+1}$ обменного взаимодействия и суммарными спинами пары $\widehat{\mathbf{s}}_{q=\frac{i+1}{2}} = \widehat{\mathbf{s}}_i + \widehat{\mathbf{s}}_{i+1}$ и $\widehat{\mathbf{s}}_{q+1=\frac{i+3}{2}} = \widehat{\mathbf{s}}_{i+2} + \widehat{\mathbf{s}}_{i+3}$ и т.д. Энергия основного состояния находится с помощью метода последовательных приближений с учетом блочной структуры гамильтониана. При этом наиболее низким состоянием, соответствующим минимальной энергии в паре блоков, является антисимметричное состояние с суммарным спином пары $S = 1$. Таким образом, значение суммарного спина Σ всей цепочки, состоящей из N ионов, будет равен $\Sigma = 1$, что соответствует удельной намагниченности системы, приходящейся на одну частицу $M/N = \frac{g\Sigma}{N} \to 0$, и относится к антиферромагнитному. Полная энергия при этом будет иметь следующий вид:

$$E_{\text{int}} \approx K\,\frac{N}{2} + \frac{N}{2}\left(-\frac{1}{2}\right)\left(A^0 + \frac{A^{(1)}}{2} + \ldots + \frac{A^{(\nu)}}{2^\nu}\right). \qquad (10)$$

Полагая, что константа обменного взаимодействия $A^{(k)}$ при каждом последующем k-ом шаге перенормировки связана с константой $A^{(k-1)}$ предыдущего шага $k-1$ как

$$A^{(k)} \approx A^{(k-1)}\xi, \qquad (11)$$

где ξ — постоянная ренормализации. Тогда энергия, приходящаяся на один ион основного состояния антиферромагнитной цепочки бесконечной длины, будет стремиться к значению

$$\frac{E_{\text{int}}}{N} \approx \frac{K}{2} + \frac{1}{2}\left(-\frac{1}{2}\right)\sum_\nu \frac{A^{(\nu)}}{2^\nu} = \frac{1}{2}\left(K - A^{(0)}\sum_\nu \frac{\xi^\nu}{2^\nu}\right) = \left(\frac{1}{2}K - A^{(0)}\,\frac{1}{2-\xi}\right). \qquad (12)$$

Таким образом, обменное взаимодействие в цепочке обеспечивает эффект дальнего порядка при выполнении условия $\xi \to 2$ и приводит к установлению антиферромагнитного состояния.

Спиновой вектор основного состояния антиферромагнитной цепочки может быть получен в явном виде. Антисимметричные спиновые состояния для системы 2^ν-частиц могут быть записаны в виде

$$|A\rangle^{(\nu)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\det\begin{bmatrix} |A\rangle^{(\nu-1)} & |A\rangle^{(\nu-1)} \\ |B\rangle^{(\nu-1)} & |B\rangle^{(\nu-1)} \end{bmatrix},$$

$$|B\rangle^{(\nu)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\det\begin{bmatrix} |A\rangle^{(\nu-1)} & |A\rangle^{(\nu-1)} \\ |\Gamma\rangle^{(\nu-1)} & |\Gamma\rangle^{(\nu-1)} \end{bmatrix},$$

$$|\Gamma\rangle^{(\nu)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\det\begin{bmatrix} |\Gamma\rangle^{(\nu-1)} & |\Gamma\rangle^{(\nu-1)} \\ |B\rangle^{(\nu-1)} & |B\rangle^{(\nu-1)} \end{bmatrix}, \qquad (13)$$

где векторы $|A\rangle$, $|B\rangle$, $|\Gamma\rangle$ соответствуют состояниям системы 2^ν-частиц с полным спином $\Sigma = 1$ и соответствующими проекциями полного спина 1, 0, -1; верхний индекс ν над этими векторами означает номер итерации при укрупнении системы.

3. Коэффициент ренормализации

Следуя методу ренормгрупп [13], запишем статистическую сумму в виде

$$Z = \sum_{\sigma_{1,2}=0}^{2}\sum_{\sigma_{3,4}=0}^{2}\ldots\sum_{\sigma_{N-1,N}=0}^{2}\exp\left(-\frac{A}{T}\,P\big(\overline{\hat{\mathbf{s}}_1\hat{\mathbf{s}}_2}\big)\right) \times \exp\left(-\frac{A}{T}\,P\big(\overline{\hat{\mathbf{s}}_3\hat{\mathbf{s}}_4}\big)\right)\ldots\exp\left(-\frac{A}{T}\,P\big(\overline{\hat{\mathbf{s}}_{N-1}\hat{\mathbf{s}}_N}\big)\right)$$

$$= \sum_{\sigma_{1,2}+\sigma_{3,4}}\sum_{\sigma_{5,6}+\sigma_{7,8}}\ldots\sum f\left(\frac{A^{(1)}}{T}\right)\exp\left(-\frac{A^{(1)}}{T}\,P\big(\overline{\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{1,2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{3,4}}\big)\right) \times f\left(\frac{A^{(1)}}{T}\right)\exp\left(-\frac{A^{(1)}}{T}\,P\big(\overline{\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{3,6}\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{7,8}}\big)\right)\ldots$$

Здесь $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{1,2}$ и $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{3,4}$ — операторы суммарных спинов пары частиц 1, 2 и 3, 4 соответственно, функция $f\left(\frac{A^{(1)}}{T}\right)$ не должна зависеть от значений спинов $\sigma_{1,2}$ и $\sigma_{3,4}$. Условие

$$\exp\left(-\frac{A}{T}\left(\hat{P}(\hat{\mathbf{s}}_1\hat{\mathbf{s}}_2) + \hat{P}(\hat{\mathbf{s}}_3\hat{\mathbf{s}}_4)\right)\right) = f\left(\frac{A^{(1)}}{T}\right) \times \exp\left(-\frac{A^{(1)}}{T}\left(\hat{P}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{1,2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{3,4})\right)\right) \qquad (14)$$

должно выполняться при всех возможных значениях $\sigma_{3,4}$. Собственные значения операторов $\hat{P}(\hat{\mathbf{s}}_1\hat{\mathbf{s}}_2)$, как было показано выше, равны: $\hat{P}(\hat{\mathbf{s}}_1\hat{\mathbf{s}}_2)\big|_{\sigma_{1,2}=1} = -1$ и $\bar{\hat{P}}(\hat{\mathbf{s}}_1\hat{\mathbf{s}}_2)\big|_{\sigma_{1,2}=0} = \bar{\hat{P}}(\hat{\mathbf{s}}_1\hat{\mathbf{s}}_2)\big|_{\sigma_{1,2}=2} = 1$.

Тогда условие (14) можно переписать для различных спиновых конфигураций (см. таблицу).

Собственные значения оператора перестановки для различных значений суммарного спина

$\sigma_{1,2,3,4}$	$\overline{\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{1,2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{3,4}}$	$\overline{P(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{1,2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{3,4})}$
1	−3	5
2	−1	−1
3	2	5

1) Пусть $\sigma_{1,2} = \sigma_{3,4} = 1$, тогда

$$\left(e^{\frac{A}{T}(1+1)}\right) = f\left(\frac{A^{(1)}}{T}\right)\left(e^{\frac{A^{(1)}}{T}} + e^{\frac{-A^{(1)}}{T}}\right); \qquad (15)$$

2) Пусть $\sigma_{1,2} \neq \sigma_{3,4}$, тогда

a) $\sigma_{1,2} = 1, \quad \sigma_{3,4} = 0, \ \Rightarrow \ \sigma_{1,2,3,4} = 1, \quad \overline{\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{1,2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{3,4}} = 0$, $\overline{P(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{1,2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{3,4})} = -1$;

b) $\sigma_{1,2} = 1, \quad \sigma_{3,4} = 2 \Rightarrow \sigma_{1,2,3,4} = 1, 2, 3; \quad \overline{\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{1,2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{3,4}} = -3, -1, 2$; $\overline{P(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{1,2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{3,4})} = 5, -1, 5$.

Тогда соотношение (14) будет иметь вид

$$2 = f(A^{(1)}/T)\left(e^{\frac{-5A^{(1)}}{T}} + e^{\frac{A^{(1)}}{T}} + e^{\frac{-5A^{(1)}}{T}} + e^{\frac{A^{(1)}}{T}}\right)$$

$$= 4f(A^{(1)}/T)\,\mathrm{ch}\left(3\,\frac{A}{T}\right)e^{\frac{-2A^{(1)}}{T}}. \qquad (16)$$

Таким образом, имеем систему уравнений (15) и (16). Из уравнения (16) находим функцию $f(A^{(1)}/T) = \frac{e^{\frac{2A^{(1)}}{T}}}{2\,\mathrm{ch}\left(3\frac{A^{(1)}}{T}\right)}$ и получаем уравнение для нахождения коэффициента ренормализации

$$2\,\mathrm{ch}\left(\frac{2A}{T}\right) = \frac{2\,\mathrm{ch}\left(\frac{A^{(1)}}{T}\right)}{2\,\mathrm{ch}\left(3\frac{A^{(1)}}{T}\right)}\,e^{\frac{2A^{(1)}}{T}}. \qquad (17)$$

Решение уравнения (17) дает следующее соотношение „старой“ и „новой“ констант связи:

$$\left(\frac{A^{(1)}}{T}\right) = x' = \frac{1}{2}\ln\left\{\frac{1 \pm \sqrt{1 - 4(e^{2x} - 1)}}{2(e^{2x} - 1)}\right\};$$

$$x = \frac{A}{T}. \qquad (18)$$

В пределах области существования решений $x = \frac{A}{T} \in [0, \ln(5/4)/2]$ и соответствующей ей области значений $x' = \frac{A^{(1)}}{T} \in [0, \ln(2)/2]$ имеет два вида решений (рис. 1, 2):

$$1)\ \left(\frac{A^{(1)}}{T}\right)_1 = x'_1 = \frac{1}{2}\ln\left\{\frac{1 - \sqrt{1 - 4(e^{2x} - 1)}}{2(e^{2x} - 1)}\right\};$$

$$2)\ \left(\frac{A^{(1)}}{T}\right)_2 = x'_2 = \frac{1}{2}\ln\left\{\frac{1 + \sqrt{1 - 4(e^{2x} - 1)}}{2(e^{2x} - 1)}\right\}.$$

Второе решение должно быть отброшено, поскольку означало бы наличие бесконечно больших корреляций в пределе высоких температур $(x \to 0)$. Для предельно допустимых значений x и x' коэффициент ренормализации может достигать значения $\xi = A^{(1)}/A = x'/x = \ln(2)/\ln(5/4) \approx 3.1$. Из рис. 1 хорошо видно, что при определенной температуре ($T^* \approx \frac{A}{0.075k_B}$, где k_B — константа Больцмана) коэффициент ренормализации $\xi \to 2$, что в соответствии с (12) означает переход в антиферромагнитное состояние с возникновением дальнего порядка.

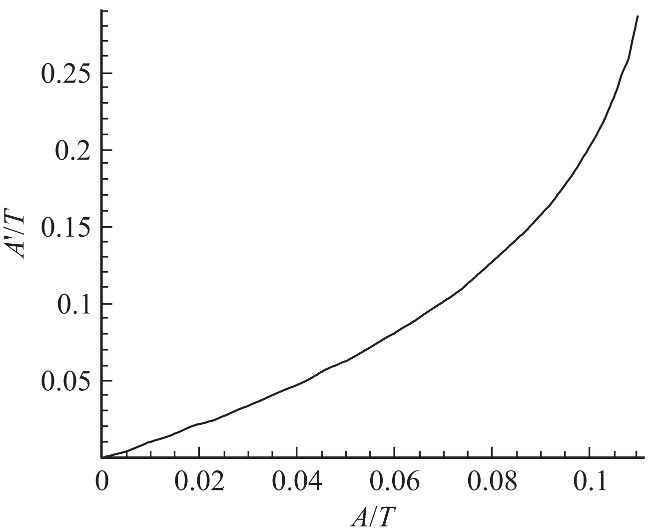

Рис. 1. Зависимость перенормированной константы обменного взаимодействия от исходной с учетом температуры. Коэффициент ренормализации будет определяться как тангенс угла наклона касательной к указанной кривой при заданной температуре.

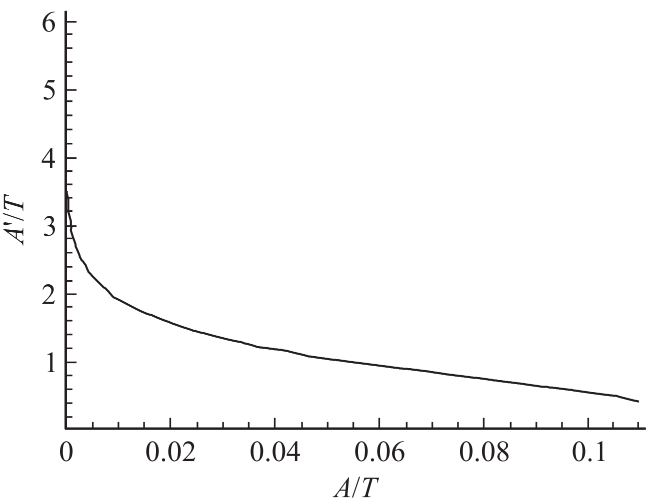

Рис. 2. Второе решение (17), которое должно быть отброшено.

4. Спиновые волны и спиновой dark-bright-солитон в цепочке $s = 1$ спинов

Основное состояние этой системы — антиферромагнитное, тогда в приближении взаимодействия с ближайшими соседями будем считать, что спин пары атомов $\underline{S = 1,}$ и собственное значение оператора $\widehat{s}_i\widehat{s}_{i+1}$ равно $\widehat{s}_i\widehat{s}_{i+1} = -1$.

Пусть один спин под номером k из цепочки атомов переброшен. Тогда оператор энергии возбуждения можно записать в виде

$$\widehat{V} = \widehat{H}_{\text{int}} - E_0 = A\Big\{\widehat{\mathbf{s}}_{k-1}\widehat{\mathbf{s}}_k + \widehat{\mathbf{s}}_k\widehat{\mathbf{s}}_{k+1} + (\widehat{\mathbf{s}}_{k-1}\widehat{\mathbf{s}}_k)^2 + (\widehat{\mathbf{s}}_k\widehat{\mathbf{s}}_{k+1})^2 - 2\big((-1)s_k^2 + (-1)^2 s_k^4\big)\Big\}, \tag{19}$$

где $E_0 = A\sum_i\big((-1)^2 s_i^4 + (-1)s_i^2 - 1\big)$ соответствует энергии основного состояния в нулевом (парном) приближении.

В полуклассическом континуальном приближении собственные значения механических моментов ионов могут быть представлены в виде непрерывной функции расстояния от иона. Тогда вектор спина узла $k \pm 1$ может быть записан в виде

$$\mathbf{s}_{k\pm 1} = \mathbf{s}_k \pm b\,\frac{\partial \mathbf{s}_k}{\partial x} + \frac{b^2}{2}\,\frac{\partial^2 \mathbf{s}_k}{\partial x^2}. \tag{20}$$

В этом выражении b — по-прежнему постоянная решетки. После подстановки выражения (20) в (19) в полуклассическом приближении с учетом замены операторов спина на их векторные функции получим для энергии возбуждения V выражение

$$V = 2A\left\{s_k^2\left(2 + b^2\left(\frac{\partial \mathbf{s}_k}{\partial x}\right)^2 + \frac{b^4}{4}\left(\frac{\partial^2 \mathbf{s}_k}{\partial x^2}\right)^2\right) + \frac{b^2}{2}\,(1 + 2s_k^2)\mathbf{s}_k\,\frac{\partial^2 \mathbf{s}_k}{\partial x^2}\right\}. \tag{21}$$

С другой стороны, в приближении среднего эффективного поля H^*, образованного всей совокупностью магнитных моментов переброшенных спинов, энергия возбуждения будет записываться как энергия взаимодействия каждого собственного магнитного момента с этим полем:

$$V = -g\mathbf{s}_k\mathbf{H}^*, \tag{22}$$

где g — фактор Ланде, умноженный на магнетон Бора.

Тогда в соответствии с теоремой Блоха собственный магнитный момент каждого иона будет прецессировать в эффективном магнитном поле как

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = \gamma(\mathbf{H}^* \times \mathbf{m}), \qquad \gamma = \frac{e}{Mc}, \tag{23}$$

тогда как явное выражение для напряженности поля имеет следующий вид:

$$\mathbf{H}^* = \frac{-A}{g}\left\{s_k\left(2 + b^2\left(\frac{\partial \mathbf{s}_k}{\partial x}\right)^2 + \frac{b^4}{4}\left(\frac{\partial^2 \mathbf{s}_k}{\partial x^2}\right)^2\right) + \frac{b^2}{2}\,(1 + 2s_k^2)\,\frac{\partial^2 \mathbf{s}_k}{\partial x^2}\right\}. \tag{24}$$

Расписывая (23) для каждой компоненты вектора магнитного момента $\mathbf{m} = g\mathbf{s}$ и учитывая очевидное равенство $\mathbf{s} \times \mathbf{s} = 0$, можно переписать (17) в линейном приближении для циклических координат

$$\dot{m}^+ = \frac{\gamma As}{g}\,i\left\{-2m^+ + \frac{b^2}{2}\,\big(1 + 2s(s+1)\big)\,\frac{\partial^2 m^+}{\partial x^2}\right\}.$$

Тогда если искать решение для m^+ в виде монохроматической волны, то получим дисперсионное соотношение для спиновых волн в $S = 1$ антиферромагнетике, отличное от известного [14]:

$$\omega = \frac{\gamma As}{g}\left\{-2 + \frac{5}{2}\,b^2k^2\right\}. \tag{25}$$

Таким образом, при малых отклонениях от равновесного антиферромагнитного состояния по системе целых спинов $s = 1$ будут распространяться спиновые возбуждения в виде поперечных спиновых волн с дисперсионной зависимостью, напоминающей дисперсионное соотношение для спиновых волн в $s = 1/2$ ферромагнетике. Однако из соотношения (25) видно, что спектр линейных возбуждений отделен от основного состояния энергетической щелью $\Delta = \hbar\omega = 2\,\frac{\hbar\gamma As}{g}$, что можно связать с существованием минимального предельного значения для волнового вектора $k_{\min} = \sqrt{\frac{4}{5b^2}}$ и соответствующим ограничением на максимальную длину волны.

Если же в выражении (25) сохранить первые неисчезающие нелинейные поправки, то получим систему уравнений для поперечных компонент собственных магнитных моментов:

$$\dot{m}_+ = -i\,\frac{Ab^2}{\hbar}\left[\frac{\partial^2 m_+}{\partial x^2} + \left(\frac{(m_+)^2}{b^2g^2} - \frac{4(m_-)^2}{b^2g^2}\right)m_+\right],$$

$$\dot{m}_- = -\frac{Ab^2}{\hbar}\,i\left[\frac{\partial^2 m_-}{\partial x^2} + \left(\frac{m_-^2}{b^2g^2} - \frac{4m_+^2}{b^2g^2} - \Xi\right)m_-\right], \tag{26}$$

$$m_\pm = m_x \pm im_y.$$

Здесь

$$\Xi = \frac{A}{g^2}\,b.$$

Это уравнение аналогично уравнению для dark-bright-солитона [15–17]. Решение можно записать в виде

$$m_+ = \sqrt{Aa^3}\,\big(i\sin\alpha + \cos\alpha\tanh\{k[x - q(t)]\}\big),$$

$$m_- = \sqrt{\frac{m_0^2ka}{2}}\,e^{i\Omega t}e^{ikx\,\mathrm{tg}\,\alpha}\,\mathrm{sech}\{k(x - q(t))\}. \tag{27}$$

Здесь $1/k$ — длина солитона, $m_z = m_0$, $k = \frac{1}{b}\left\{\sqrt{\frac{4m_0^2}{g^2}\cos^2\alpha + \left(\frac{m_0^2}{4g^2}\right)^2} - \frac{m_0^2}{4g^2}\right\}$. Частота прецессии с учетом сдвига: $\Omega = \frac{A}{\hbar}\left(1 - \frac{\mathrm{tg}^2\,\alpha}{2}\right)(kb)^2 - \Xi$. Координата солитона: $q(t) = q(0) + kt\,\frac{Aa^2}{\hbar}\,\mathrm{tg}\,\alpha$.

Подобные интегрируемые системы известны как уравнения Манакова. Эти системы сохраняют свободную энергию. Но поскольку свободная энергия убывает с ростом скорости солитона, то солитон формально нестабилен (он ускоряет) [18]. Если добавить неоднородный потенциал, то система становится неинтегрируемой и солитон может взаимодействовать нетривиальным образом с окружением. Тем не менее если потенциал взаимодействия изменяется медленно в масштабе длины k^{-1} солитона, то это приводит к согласованному движению (изменению) солитона и потенциала, а свободная энергия является в этом случае адиабатическим инвариантом.

Заключение и выводы

На основании вышеизложенного можно прийти к выводу о том, что:

1) антиферромагнитное состояние цепочки ионов с $s = 1$ формируется на основании того, что при парном взаимодействии наиболее выгодным состоянием является антисимметричное состояние с суммарным спином ближайших соседей $S = 1$. При взаимодействии ближайших блоков, составленных из двух частиц каждый, наиболее выгодным будет также антисимметричное состояние с суммарным спином, равным единице. Таким образом, на ν-й итерации укрупнения при взаимодействии двух кластеров, состоящих из $2^{\nu-1}$ каждый, формируется кластер, содержащий 2^{ν}-частиц, для которого антисимметричное состояние с суммарным спином $\Sigma = 1$ кластера является основным. Таким образом, намагниченность системы, помещенной в магнитное поле, будет определяться проекцией на направление поля именно этого суммарного спина $\Sigma = 1$, так что удельная намагниченность системы, приходящаяся на один ион, будет стремиться к нулю как

$$\frac{M}{N} = \frac{g\Sigma}{N} \to 0.$$

где g — гиромагнитный фактора иона;

2) с помощью метода ренормгрупп установлено, что в системе устанавливается антиферромагнитный дальний порядок при температуре, приблизительно равной $T^* \approx \frac{A}{0.075k_B}$, связанный с появлением особенности в выражении (12) для энергии основного состояния;

3) линейные возбуждения системы $s = 1$ в форме спиновых волн имеют иную, чем у антиферромагнетиков со спином 1/2, дисперсионную зависимость частоты от волнового вектора, которая больше напоминает зависимость типа k^2, имеющую место у ферромагнетиков с половинными спинами. Однако в отличие от последних спектр возбуждений антиферромагнитной спин-1 цепочки отделен энергетической щелью, предсказываемой еще в работах Халдане;

4) в рассматриваемой цепочке могут распространяться и нелинейные волны, имеющие форму dark-bright-солитона. Это происходит потому, что спиновый гамильтониан содержит биквадратные члены от скалярного произведения спиновых операторов частиц. Солитон формально нестабилен (он ускоряется), но влияние других возбуждений (обычных спиновых волн), как показано в [18], не является причиной диссипации.

Работа выполнена при финансовой поддержке Комитета по науке и высшей школе правительства Санкт-Петербурга (гранты 2010, 2011 гг. для молодых ученых вузов и академических институтов, расположенных на территории Санкт-Петербурга).

Приложение. Вектор основного состояния цепочки спинов

Антисимметричные спиновые состояния для пары частиц известны и могут быть записаны в виде

$$|S=1, S_z=1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\alpha\rangle_1\,|\beta\rangle_2 - |\beta\rangle_1\,|\alpha\rangle_2\right) = |A\rangle^{(1)},$$

$$|S=1, S_z=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\alpha\rangle_1\,|\gamma\rangle_2 - |\gamma\rangle_1\,|\alpha\rangle_2\right) = |B\rangle^{(1)},$$

$$|S=1, S_z=-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\gamma\rangle_1\,|\beta\rangle_2 - |\beta\rangle_1\,|\gamma\rangle_2\right) = |\Gamma\rangle^{(1)},$$

$$|\alpha\rangle_1 = |s_1 = 1,\ s_{1z} = 1\rangle_1,$$
$$|\beta\rangle_1 = |s_1 = 1,\ s_{1z} = 0\rangle_1,$$
$$|\gamma\rangle_1 = |s_1 = 1,\ s_{1z} = -1\rangle_1. \qquad (\text{П}1)$$

Здесь нижними индексами *1* и *2* обозначены номера частиц со спинами $s = 1$ и соответствующими проекциями. Векторы $|A\rangle$, $|B\rangle$, $|\Gamma\rangle$ соответствуют состояниям пары частиц с полным спином $S = 1$ и соответствующими проекциями полного спина, верхний индекс ν над этими векторами означает номер итерации и связан с $2^{\nu=1}$ числом частиц, составляющих полный спин. Составим антисимметричные спиновые состояния для цепочки из четырех ($2^{\nu=2}$) частиц, т. е. во второй ($\nu = 2$) итерации

$$|A\rangle^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|A\rangle^{(1)}_{1,2}\,|B\rangle^{(1)}_{3,4} - |B\rangle^{(1)}_{1,2}\,|A\rangle^{(1)}_{3,4}\right)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\det\begin{bmatrix} |A\rangle^{(1)}_{1,2} & |A\rangle^{(1)}_{3,4} \\ |B\rangle^{(1)}_{1,2} & |B\rangle^{(1)}_{3,4} \end{bmatrix},$$

$$|B\rangle^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|A\rangle^{(1)}_{1,2}\,|\Gamma\rangle^{(1)}_{3,4} - |\Gamma\rangle^{(1)}_{1,2}\,|A\rangle^{(1)}_{3,4}\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\det\begin{bmatrix} |A\rangle^{(1)}_{1,2} & |A\rangle^{(1)}_{3,4} \\ |\Gamma\rangle^{(1)}_{1,2} & |\Gamma\rangle^{(1)}_{3,4} \end{bmatrix},$$

$$|\Gamma\rangle^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\Gamma\rangle^{(1)}_{1,2}\,|B\rangle^{(1)}_{3,4} - |B\rangle^{(1)}_{1,2}\,|\Gamma\rangle^{(1)}_{3,4}\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\det\begin{bmatrix} |\Gamma\rangle^{(1)}_{1,2} & |\Gamma\rangle^{(1)}_{3,4} \\ |B\rangle^{(1)}_{1,2} & |B\rangle^{(1)}_{3,4} \end{bmatrix}. \qquad (\text{П}2)$$

Продолжая, таким образом, укрупнять систему, на ν-й итерации, в которой учитывается состояние цепочки из 2^{ν}-частиц, имеем для векторов спинового состояния выражения

$$|A\rangle^{(\nu)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\det\begin{bmatrix} |A\rangle^{(\nu-1)} & |A\rangle^{(\nu-1)} \\ |B\rangle^{(\nu-1)} & |B\rangle^{(\nu-1)} \end{bmatrix},$$

$$|B\rangle^{(\nu)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\det\begin{bmatrix} |A\rangle^{(\nu-1)} & |A\rangle^{(\nu-1)} \\ |\Gamma\rangle^{(\nu-1)} & |\Gamma\rangle^{(\nu-1)} \end{bmatrix},$$

$$|\Gamma\rangle^{(\nu)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\det\begin{bmatrix} |\Gamma\rangle^{(\nu-1)} & |\Gamma\rangle^{(\nu-1)} \\ |B\rangle^{(\nu-1)} & |B\rangle^{(\nu-1)} \end{bmatrix}. \qquad (\text{П}3)$$

Список литературы

[1] *Haldane F.D.M.* // Phys. Rev. Lett. 1983. Vol. 50. N 15. P. 1153–1156.
[2] *Haldane F.D.M.* // Phys. Lett. A. 1983. Vol. 93. P. 464.
[3] *Albuquerque A.F., Hamer C.J., Oitmaa J.* // Phys. Rev. B. 2009. Vol. 79. N 5. P. 054 412 (1–6).
[4] *Affleck I., Kennedy T., Lieb E.H., Tasaki H.* // Phys. Rev. Lett. 1987. Vol. 59. N 7. P. 799–802.
[5] *Schollowöck U., Jolicoeur T., Garel T.* // Phys. Rev. B. 1996. Vol. 53. N 6. P. 3304–3311.
[6] *Ho Tin-Lun, Yip Lan* // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 84. N 11. P. 4031–4034.
[7] *Ho T.-L.* // Phys. Rev. Lett. 1998. Vol. 81. P. 742–745.
[8] *Ho T.-L., Sung Kit Yip* // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 84. N 18. P. 4027–4030.
[9] *Орленко Е.В., Мазец И.Е., Матисов Б.Г.* // ЖТФ. 2003. Т. 73. Вып. 1. С. 30–37.
[10] *Den Nijs M., Rommelse K.* // Phys. Rev. B. 1989. Vol. 40. N 7. P. 4709–4733.
[11] *Orlenko E.* // Int. J. Quant. Chem. 2007. Vol. 107. P. 2838–2843.
[12] *Orlenko E.V., Orlenko F.E., Zegrya G.G.* // Nat. Sci. 2010. Vol. 2. N 11. P. 1287–1291.
[13] *Maris H.J., Kadanoff L.P.* // Am. J. Phys. 1978. Vol. 46. P. 652–658.
[14] *Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Статистическая физика. Ч. 2. М.: Наука, 1978. 447 с.
[15] *Busch Th., Anglin J.R.* // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 87. N 1. P.01 040 (1–4).
[16] *Trillo S., Wabnitz S., Wright E.M., Stegeman G.I.* // Opt. Lett. 1988. Vol. 13, N 10. P. 871–873.
[17] *Christodoulides D.N.* // Phys. Lett. A. 1988. Vol. 132. N 8. P. 451–452.
[18] *Манаков С.В.* // ЖЭТФ. 1974. Т. 67. № 8. С. 543–555.