Физика низких температур, 1995, т. 21, № 9, с. 951–955 УДК 537.6

Стационарные состояния квазиодномерной магнитной системы со структурой «гребенки»

Е. В. Езерская

Харьковский государственный университет, Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы, 4

Статья поступила в редакцию 20 апреля 1995 г., после переработки 10 мая 1995 г.

Рассмотрены стационарные состояния квазиодномерной спиновой системы со структурой «гребенки» с XY-обменным взаимодействием вдоль цепочки и изинговским взаимодействием «отростков» ($J_0 > 0$). Показано существование связанных состояний произвольного числа (n) перевернутых спинов на отростках и одного на XY-цепочке, энергии которых при положительной константе изинговского обменного взаимодействия лежат ниже соответствующих состояний сплошного спектра. При $n \geq 2$ энергии этих состояний зависят от взаимного расположения перевернутых спинов на «отростках».

Розглянуто стаціонарні стани квазіодновимірної спінової системи з структурою «гребінця» з XY-обмінною взаємодією уздовж ланцюжка та ізінгівською взаємодією «паростків» ($J_0 > 0$). Показано існування зв'язаних станів довільного числа перевернутих спінів на паростках (n) та одного на XY-ланцюжку, енергії яких при позитивній константі ізінгівської обмінної взаємодії лежать нижче відповідних станів неперервного спектра. При $n \geq 2$ енергії цих станів залежать від взаємного розташування перевернутих спінів на «паростках».

1. Введение

Многочисленные экспериментальные исследования в области анизотропных магнетиков и органических металлов стимулировали в последнее время интерес к теоретическому изучению спиновых цепочек различной топологии. Несмотря на значительные усилия, предпринимаемые в этой области, многие вопросы до сих пор остаются невыясненными, а точно решаемые модели таких цепочек составляют незначительное меньшинство. Основные точные решения для одномерных систем с сильным взаимодействием получены с помощью методов, которые являются вариациями предложенного Бете (1931) способа нахождения n-частичной волновой функции стационарных состояний [1]. Например, таким образом были найдены основное состояние и спектр элементарных возбуждений антиферромагнитной цепочки с изотропным обменом и с одноосной xxz-анизотропией, а для ферромагнитной цепочки — энергии и волновые функции связанных состояний произвольного числа магнонов — «спиновые комплексы» [2]. Однако метод Бете нельзя использовать в случае ряда экспериментально обнаруженных квазиодномерных объектов, которые моделируются димеризованными гейзенберговскими цепочками и лестничными структурами [3]. В связи с этим представляют интерес теоретические исследования квазиодномерных моделей со сложной элементарной ячейкой, для которых можно найти точные решения. XY-цепочка, в которой обменным взаимодействием связаны только поперечные компоненты спинов, относится к числу точно решаемых, так как ее гамильтониан сводится к идеальному газу бесспиновых фермионов [4]. Это позволяет исследовать энергетический спектр, а также динамические, статические и кинетические свойства. Известен целый ряд соединений, которые достаточно хорошо описываются этой моделью [5,6]. Существенно, что гамильтониан одномерной XY-модели может быть диагонализован и в случае наличия двух подрешеток с чередующимися обменными взаимодействиями [7,8]. Учет взаимодействия между XY-цепочками приводит к рассеянию возбуждений и появлению связанных состояний. Подобные эффекты исследовались ранее для лестничных структур с XY-взаимодействием [9]. В настоящей работе рассматривается квазиодномерная система со структурой «гребенки», в которой каждый из спинов XY-цепочки дополнительно связан изинговским взаимодействием со спином на «отростке». Такой выбор типов взаимодействий позволяет проанализировать характер спектра стационарных состояний с любым числом перевернутых спинов.

2. Стационарные состояния XY-цепочки с «отростками»

В данной работе рассматривается спектр стационарных состояний XY-цепочки с «отростками» (рис. 1) в продольном магнитном поле H с гамильтонианом

© Е. В. Езерская, 1995

$$\hat{H} = -2\mu_1 H \sum S^z_{1m} - 2\mu_2 H \sum S^z_{2m} -$$

$$- J_0 \sum S^z_{1m} S^z_{2m} - J \sum (S^x_{1m} S^x_{1m+1} + S^y_{1m} S^y_{1m+1}) , \quad (1)$$

где S_{1m}, S_{2m} — операторы спинов на XY-цепочке и на отростках соответственно; $s_1 = s_2 = 1/2$, $J > 0$ — константа обменного взаимодействия вдоль XY-цепочки; $J_0 > 0$ — константа изинговского обменного взаимодействия «отростков»; H — постоянное магнитное поле, направленное вдоль оси z; μ_1 и μ_2 — соответствующие магнетоны. Предполагается, что число узлов N в цепочке стремится к бесконечности и краевыми эффектами можно пренебречь. Стационарные состояния здесь можно классифицировать по числу спинов, перевернутых на XY-цепочке и на «отростках», поскольку операторы $\sum S^z_{1m}$ и S^z_{2m} являются интегралами движения. Последнее означает, что перевернутые на «отростках» спины локализованы и номера соответствующих узлов являются квантовыми числами. Основное состояние будет «ферромагнитным» (все спины направлены «вверх»), а состояния с перевернутыми спинами — возбужденными в достаточно больших внешних полях H. Очевидно, достаточным будет условие $2\mu_1 H > J$, $J_0 > 0$, при котором как для XY-цепочки, так и для «отростков» такое состояние является основным. Стационарные состояния с n перевернутыми спинами описываются уравнением Шредингера

$$(\hat{H} - E_0)|n\rangle = \varepsilon|n\rangle , \quad (2)$$

$$|n\rangle = \sum A^{\alpha_1 \ldots \alpha_n}_{m_1 \ldots m_n} S^-_{\alpha_1 m_1} \ldots S^-_{\alpha_n m_n} |0\rangle ;$$

$$\alpha_i = 1, 2; \quad i = 1, 2, \ldots, n,$$

где $E_0 = -(\mu_1 + \mu_2)HN - J_0 N/4$ — энергия «ферромагнитного» состояния; ε — энергия состояния с n перевернутыми спинами, отсчитанная от энергии E_0; $S^{\pm}_{\alpha m} = S^x_{\alpha m} \pm iS^y_{\alpha m}$; $|0\rangle$ — вектор «ферромагнитного» состояния, определяемый равенством

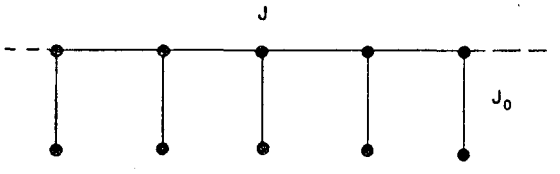

Рис. 1. Квазиодномерная спиновая система со структурой «гребенки». $J > 0$ — XY-обменное взаимодействие вдоль цепочки; $J_0 > 0$ — изинговское взаимодействие «отростков».

$S^+_{\alpha m}|0\rangle = 0$ для всех узлов; $A^{\alpha_1 \ldots \alpha_n}_{m_1 \ldots m_n}$ — волновая функция в узельном представлении.

В случае, когда спины перевернуты только на «отростках», задача об энергии возбужденных состояний решается тривиально. Это локализованные состояния с энергией

$$\varepsilon = (2\mu_2 H + J_0/2)n \quad (3)$$

и краткостью вырождения C^n_N.

Если спины перевернуты только на XY-цепочке, изинговское взаимодействие с «отростками» приводит лишь к перенормировке энергии одночастичных состояний одномерной XY-цепочки:

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_{k_i} , \quad \varepsilon_k = 2\mu_1 H + J_0/2 - J\cos k , \quad (4)$$

$$k_i \neq k_j , \quad i, j = 1, \ldots, n .$$

Подобные возбуждения не взаимодействуют, и для них выполняется принцип Паули.

Если спины перевернуты как на цепочке, так и на «отростках», то за счет изинговского взаимодействия с «отростками» происходит рассеяние возбуждений и образуются связанные состояния, энергия которых при $J_0 > 0$ ниже, чем у аналогичных состояний с рассеянием.

Остановимся сначала на простейшем случае двух перевернутых спинов (по одному на цепочке и «отростке»). Волновая функция этих состояний удовлетворяет уравнению в конечных разностях

$$A^{1\ 2}_{m_1 m_2}[\varepsilon - 2(\mu_1 + \mu_2)H - J_0] +$$

$$+ \frac{J}{2}(A^{1\ 2}_{m_1+1\ m_2} + A^{1\ 2}_{m_1-1\ m_2}) = 0 , \quad (5)$$

$$m_1 \neq m_2$$

с граничным условием

$$A^{1\ 2}_{m_2 m_2}[\varepsilon - 2(\mu_1 + \mu_2)H] +$$

$$+ \frac{J}{2}(A^{1\ 2}_{m_2+1\ m_2} + A^{1\ 2}_{m_2-1\ m_2}) = 0 , \quad (6)$$

$$m_1 = m_2 .$$

Общее решение (5), (6) ищем в виде

$$A^{1\ 2}_{m_1 m_2} = \begin{cases} A(m_2) r^{m_2 - m_1} + B(m_2) r^{m_1 - m_2}, & m_1 \leq m_2 , \\ C(m_2) r^{m_2 - m_1} + D(m_2) r^{m_1 - m_2}, & m_1 \geq m_2 . \end{cases} \quad (7)$$

Значение $|r| = 1$, $r = \exp(ik)$ соответствует непрерывному спектру:

$$\varepsilon = 2(\mu_1 + \mu_2)H + J_0 - J\cos k\,,$$

$$A^{\,1\;2}_{m_1 m_2} = a(m_2)\left[\alpha \sin k\, e^{ik(m_2-m_1)} + 2\theta(m_1 - m_2)\sin k(m_2 - m_1)\right] +$$

$$+ b(m_2)\left[\alpha \sin k\, e^{ik(m_1-m_2)} + 2\theta(m_1-m_2)\sin k(m_2-m_1)\right], \qquad (8)$$

$$a(m_2) = A(m_2)/(\alpha \sin k)\,,\quad b(m_2) = B(m_2)/\alpha \sin k)\,,$$

$$\alpha = J/J_0\,,\quad \theta(m) = \begin{cases} 1\,, & m > 0\,, \\ 0\,, & m < 0\,, \end{cases}$$

а $|r| < 1$ — связанному состоянию, волновая функция которого должна быть ограниченой при $|m_1 - m_2| \to \infty$. При этом $B(m_2) = C(m_2) = 0$, а r удовлетворяет характеристическому уравнению

$$r - \frac{1}{r} + \frac{2}{\alpha} = 0\,. \qquad (9)$$

Таким образом, связанное состояние двух магнонов существует при любом соотношении между обменными константами J и J_0, а его энергия

$$\varepsilon = 2(\mu_1 + \mu_2)H + J_0 - (J_0^2 + J^2)^{1/2} \qquad (10)$$

всегда ниже, чем у состояний с рассеянием двух магнонов. В полях $H < H_0$, где $2\mu_2 H_0 = (J_0^2 + J^2)^{1/2} - J - J_0/2$ ($H_0 > 0$ при $J_0 > 4J/3$), эта энергия также меньше нижней границы энергий одночастичных возбуждений на XY-цепочке (4).

Исследование состояний с двумя перевернутыми на XY-цепочке спинами и одним — на «отростке» вполне аналогично проведенному выше. Волновая функция таких состояний удовлетворяет уравнению в конечных разностях

$$A^{\,1\;1\;2}_{m_1 m_2 m_3}(\varepsilon - 4\mu_1 H - 2\mu_2 H - \frac{3}{2}J_0) + \frac{J}{2}\left(A^{\,1\;\;1\;\;2}_{m_1\pm1\;m_2 m_3} + A^{\,1\;\;1\;\;2}_{m_1 m_2\pm1\;m_3}\right) = 0\,,\quad m_1 \neq m_2 \neq m_3 \qquad (11)$$

с граничными условиями

$$A^{\,1\;1\;2}_{m_1 m_2 m_2}(\varepsilon - 4\mu_1 H - 2\mu_2 H - \frac{1}{2}J_0) + \frac{J}{2}\left(A^{\,1\;\;1\;\;2}_{m_1\pm1\;m_2 m_2} + A^{\,1\;\;1\;\;2}_{m_1 m_2\pm1\;m_2}\right) = 0\,,\quad m_1 \neq m_2\,;$$

$$A^{\,1\;1\;2}_{m_1 m_3 m_3}(\varepsilon - 4\mu_1 H - 2\mu_2 H - \frac{1}{2}J_0) + \frac{J}{2}\left(A^{\,1\;\;1\;\;2}_{m_1\pm1\;m_3 m_3} + A^{\,1\;\;1\;\;2}_{m_1 m_3\pm1\;m_3}\right) = 0\,,\quad m_2 \neq m_3\,;$$

$$A^{\,1\;1\;2}_{m_1 m_1 m_3} = 0\,. \qquad (12)$$

Ее можно искать в виде (анзатц Бете)

$$A^{\,1\;1\;2}_{m_1 m_2 m_3} = A(m_3) r_1^{m_3 - m_1} r_2^{m_3 - m_2} + B(m_3) r_1^{m_1 - m_3} r_2^{m_3 - m_2} + C(m_3) r_1^{m_3 - m_1} r_2^{m_2 - m_3} + D(m_3) r_1^{m_1 - m_3} r_2^{m_2 - m_3} + \ldots$$

$$(r_1 \rightleftarrows r_2)\,. \qquad (13)$$

Здесь опущены слагаемые, в которых r_1 и r_2 меняются местами. Коэффициенты $A(m_3)$, $B(m_3)$, ... различны в трех областях: $m_1 \leq m_2 \leq m_3$; $m_1 \leq m_3 \leq m_2$; $m_3 \leq m_1 \leq m_2$, а волновая функция (13) непрерывна на границах этих областей. Вновь изинговское взаимодействие приводит к рассеянию возбуждений. Энергии таких состояний характеризуются двумя вещественными квазиимпульсами ($r_1 = \exp(ik_1)$, $r_2 = \exp(ik_2)$) и являются суммой (3) с $n = 1$ и (4) с $n = 2$. Происходит также частичное связывание возбуждений (случай $|r_1| \leq 1$, $r_2 = \exp(ik)$). Энергии подобных состояний определяются как сумма (4) с $n = 1$ и (10), а волновая функция имеет вид

$$1.\quad A^{1\ 1\ 2}_{m_1 m_2 m_3} = a(m_2)\left[\alpha \sin k\left(r^{m_3-m_1} e^{ik(m_3-m_2)} - r^{m_3-m_2} e^{ik(m_3-m_1)}\right)\right] +$$
$$+ b(m_3)[\ldots k \to -k \ldots], \quad m_1 \le m_2 \le m_3;$$

$$2.\quad A^{1\ 1\ 2}_{m_1 m_2 m_3} = a(m_3)\left[2r^{m_3-m_1} \sin k(m_3 - m_2) + \alpha \sin k\left(r^{m_3-m_1} e^{ik(m_3-m_2)} - r^{m_2-m_3} e^{ik(m_3-m_1)}\right)\right] +$$
$$+ b(m_3)[\ldots k \to -k \ldots], \quad m_1 \le m_3 \le m_2;$$

$$3.\quad A^{1\ 1\ 2}_{m_1 m_2 m_3} = a(m_3)\left[2r^{m_1-m_3} \sin k(m_3 - m_2) + 2r^{m_2-m_3} \sin k(m_1 - m_3) + \alpha \sin k\, r^{m_1-m_3} e^{ik(m_3-m_1)}\right] +$$
$$+ b(m_3)[\ldots k \to -k \ldots], \quad m_3 \le m_1 \le m_2. \qquad (14)$$

При большем числе перевернутых на XY-цепочке спинов значительно увеличивается количество определяемых коэффициентов волновой функции, однако структура граничных уравнений такова, что вывод остается прежним: когда на «отростке» перевернут только один спин, изинговское взаимодействие, кроме рассеяния, приводит к частичному связыванию магнонов, а энергии соответствующих состояний являются суммой (3) и (4) или (4) и (10).

Изинговское взаимодействие дает более интересные эффекты, когда на «отростках» перевернуто несколько спинов. Рассмотрим связанные состояния с произвольным числом n перевернутых спинов на «отростках» и одним на XY-цепочке. Волновая функция $A^{1\ 2\ldots\ 2}_{m_1 m_2 \ldots m_{n+1}}$ удовлетворяет уравнению

$$A^{1\ 2\ldots\ 2}_{m_1 m_2 \ldots m_{n+1}}\left[\varepsilon - 2\mu_1 H - 2n\mu_2 H - \frac{J_0}{2}(n+1)\right] +$$
$$+ A^{1\ 2\ldots\ 2}_{m_1 \pm 1\ m_2 \ldots m_{n+1}} =$$
$$= -J_0 A^{1\ 2\ldots\ 2}_{m_1 m_2 \ldots m_{n+1}} (\delta_{m_1,m_2} + \ldots + \delta_{m_1,m_{n+1}}), \qquad (15)$$

которое удобно рассматривать как уравнение с правой частью и решать с помощью преобразования Фурье по m_1. В результате получим следующее выражение для энергии:

$$\varepsilon = 2(\mu_1 + n\mu_2)H + \frac{J_0}{2}(n+1) - \frac{J}{2}\left(r + \frac{1}{r}\right), \qquad (16)$$

где r удовлетворяет характеристическому уравнению

$$\det(\delta_{i,j} + g(m_i - m_j)) = 0, \qquad (17)$$

$$i, j = 2, \ldots, n+1; \quad g(m) = \frac{2r^{-|m|}}{\alpha(r - r^{-1})}.$$

Как мы видим, при $n \ge 2$ энергия связанных состояний зависит от взаимного расположения перевернутых спинов на «отростках» (разностей квантовых чисел $|m_i - m_j|$). В предельном случае $|m_i - m_j| \to \infty$ для всех i, j существует один nC_N^n-кратно вырожденный уровень, для которого r определяется формулой (9). При сближении узлов с перевернутыми спинами он расщепляется на несколько уровней. При данном n в зависимости от соотношения между параметрами α и $|m_i - m_j|$ может существовать от 1 до n уровней, причем уровень с наименьшей энергией существует при любых значениях параметров. Условием появления каждого уровня является наличие для уравнения (17) решения $|r| = 1$ при определенном α. Так, для $n = 2$ при $\alpha \ge l$ и $0 \le \alpha < l$ имеется один или два уровня соответственно, а для $n = 3$ в интервалах $0 \le \alpha < \alpha_1$, $\alpha_1 \le \alpha < \alpha_2$ и $\alpha \ge \alpha_2$ — соответственно три, два и один уровень, где $\alpha_{2,1} = 2/3[l + m \pm (l^2 + m^2)^{1/2}]$, $l = m_3 - m_2 > 0$, $m = m_4 - m_3 > 0$. На рис. 2 и 3 приведены графики зависимости энергии локальных уровней от расстояния между узлами для $n = 2$ при $\alpha = 2$ и от $\alpha = J/J_0$ для $n = 3$. Наблюдается эффект «расталкивания» уровней при уменьшении расстояния между узлами с переворотами спинов на «отростках», известный в теории сильной связи как эффект взаимодействия примесей [10].

Анализ уравнений, описывающих состояния с произвольным числом перевернутых спинов на

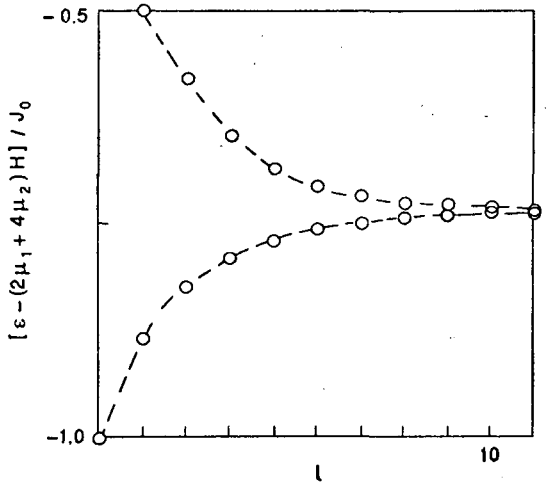

Рис. 2. Зависимость энергии связанных состояний (12) с двумя перевернутыми на «отростках» спинами от расстояния между этими узлами l. Один уровень существует при любых значениях параметров, другой отщепляется от нижней границы сплошного спектра при $\alpha = l$. С ростом l уровни сближаются, при $l \to \infty$ их энергии стремятся к общему значению $\varepsilon \to (2\mu_1 H + 4\mu_2 H) + 3/2\, J_0 - (J_0^2 + J^2)^{1/2}$.

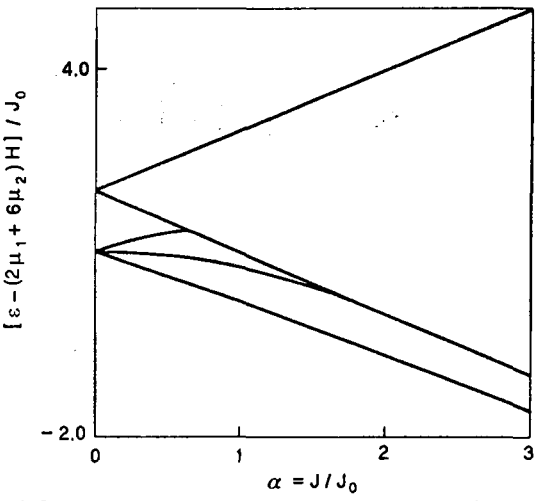

Рис. 3. Зависимость энергии связанных состояний (12) с тремя перевернутыми на «отростках» спинами от $\alpha = J/J_0$ при $l = m = 1$. Нижний уровень существует при любых $\alpha > 0$, средний — при $0 < \alpha < 2/3\ [l + m + (l^2 + m^2)^{1/2}]$, верхний — при $0 < \alpha < 2/3\ [l + m - (l^2 + m^2)^{1/2}]$. Границы области сплошного спектра: $2 - \alpha \le (\varepsilon - 2\mu_1 H - 6\mu_2 H)/J_0 \le 2 + \alpha$

XY-цепочке (n_1) и на« отростках» (n_2), показывает, что существуют состояния с рассеянием магнонов, энергии которых являются суммой энергий (3) и (4), а также «частично связанные» и полностью связанные состояния при $n_1 > n_2$ и $n_1 \le n_2$ соответственно.

3. Заключение

Проведен анализ спектра стационарных состояний квазиодномерной спиновой системы со структурой типа «гребенки» с XY-обменным взаимодействием вдоль цепочки и изинговским взаимодействием «отростков». Показано, что в такой системе при положительном знаке константы изинговского обменного взаимодействия оказывается энергетически выгодным образование связанных состояний — «спиновых комплексов» — из произвольного числа перевернутых спинов, локализованных на «отростках» (n), и одного на XY-цепочке. Энергии этих состояний зависят от взаимного расположения перевернутых на «отростках» спинов, а номера соответствующих узлов (m_j) являются квантовыми числами. При данном n таких состояний может быть от 1 до n в зависимости от соотношения между обменными константами и разностями квантовых чисел $m_i - m_j$, $i \ne j = 1, ..., n$. Для $n = 2, 3$ эти условия найдены в явном виде. При произвольном числе перевернутых спинов на XY-цепочке и на «отростках» существуют «частично связанные» и связанные состояния магнонов. Связанные состояния будут определять низкотемпературные свойства данной системы в особенности в слабых внешних полях, когда основное состояние не будет ферромагнитным. Существование спиновых комплексов можно обнаружить также при измерениях высокочастотных характеристик, когда наиболее полно проявляются характерные особенности всего спектра.

1. H. Bethe, *Z. Phys.* **61**, 205 (1931).
2. Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Скрябин, *Статистическая механика магнитоупорядоченных систем*, Наука, Москва (1987).
3. H. Watanabe, *Phys. Rev.* **B50**, 13442 (1994).
4. E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, *Ann. Phys.* **3**, 407 (1961).
5. L. Gonsalves and E. Elliott, *J. Phys.* **C12**, 1703 (1979).
6. H. Yoshizawa, G.Shirane, H. Shiba, and K. Hirakawa, *Phys. Rev.* **B28**, 3904 (1983).
7. В. М. Конторович, В. М. Цукерник, *ЖЭТФ* **53**, 1167 (1967).
8. В. З. Клейнер, В. М. Цукерник, *ФММ* **37**, 321 (1974); там же 1133 (1974).
9. Е. В. Езерская, В. М. Цукерник, *ФНТ* **9**, 1083 (1983).
10. Г. Ф. Квенцель, *ТЭХ* **5**, 26 (1969).

Stationary states of quasi-one-dimensional magnetic system with «comb» structure

E. V. Eserskaya

The stationaty states of a quasi-one-dimensional spin system, which have a «comb» structure with XY-exchange interaction along the chain and the Ising-type interaction of «appendices» are studied. It has been shown that there exist the bound states of the arbitrary number (n) of flipped spins located on the appendices and one on the XY-chain. The energies of such states lie lower than the energies of the corresponding continuous spectrum states if the constant of the Ising interaction is positive. The energies of these states depend on the mutual distribution of flipped spins located on the appendices when $n \ge 2$.