Письма в ЖЭТФ, том 49, вып. 2, стр. 108 – 110 *25 января 1989 г.*

О РАЗЛИЧИИ В СВОЙСТВАХ ОДНОМЕРНЫХ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКОВ С ЦЕЛЫМИ И ПОЛУЦЕЛЫМИ СПИНАМИ

А.В Чубуков

Явным образом показано, что несмотря на существование логарифмических расходимостей в теории возмущений, одномерный антиферромагнетик с $S = 1/2$ на больших масштабах эквивалентен системе свободных бозонов.

1. Одно из наиболее интересных явлений, изучаемых в последние годы в магнетизме – это предсказанная впервые Холдейном [1] принципиальная зависимость поведения одномерных гейзенберговских антиферромагнетиков (АФМ) от четности удвоенного спина. Согласно гипотезе Холдейна, АФМ с целыми S остаются в парамагнитном состоянии и при нулевой температуре, в то время как для АФМ с полуцелыми S $T = 0$ служит критической точкой и в ней реализуется квантовый аналог фазы Березинского–Костерлица–Таулесса. В настоящее время гипотеза Холдейна подтверждена как данными численных экспериментов [2], так и измерениями магнитных характеристик квазиодномерного соединения $Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2(ClO_4)$ $(S = 1)$ [3]. Что касается теоретических работ, то они, в основном, апеллировали к аналогии с теорией поля. Так, в рамках квазиклассики ($S \gg 1$) установлена [4,5] эквивалентность 1Д гейзенберговского АФМ и $O(3)$ σ-модели, содержащей дополнительный топологический θ-член с коэффициентом $\theta = 2\pi S$; при целых S $\theta = O(\mathrm{mod}\ 2\pi)$, топологический член не важен и, как известно из точного решения [6], в σ-модели квантовые флуктуации приводят к динамической генерации массы (то есть щели в спектре возбуждений), а при полуцелых S ($\theta = \pi(\mathrm{mod}\ 2\pi)$) в σ-модели предполагается наличие критической точки, то есть рост флуктуаций останавливается, и реализуется критическое поведение, характерное для фазы Березинского–Костерлица–Таулесса.

2. Цель настоящей работы – попытаться объяснить различие в свойствах одномерных АФМ с целыми и полуцелыми S не апеллируя к аналогии с θ-моделью. Конкретно речь пойдет об АФМ с $S = 1/2$. Идея подхода в том, чтобы в рамках одночастичного формализма явным образом учесть отличие параметра порядка в АФМ от единичного вектора, то есть включить в рассмотрение присущую АФМ дополнительную внутреннюю степень свободы изинговского типа, связанную с тем, что для $S = 1/2$ суммарный спин двух соседей (вектор ферромагнетизма) $M_{2l} = S_{2l} + S_{2l+1}$ может принимать два значения $M = 1$ и $M = 0$. Соответственно два значения – 0 и 3 принимает и квадрат вектора антиферромагнетизма, то есть оператора $L_{2l} = S_{2l} - S_{2l+1}$. Все четыре состояния M можно описать в рамках одночастичного формализма, если связать операторы M и L не с двумя, как в квазиклассике, а с тремя бозонными полями. Явный вид преобразования для перехода к бозонам таков:

$$\begin{aligned} &M_z = a^+a - b^+b, && M_+ = \sqrt{2}\,(a^+c - c^+b), && M_- = \sqrt{2}\,(c^+a - b^+c) \\ &L_z = -(c^+U + Uc), && L_+ = \sqrt{2}\,(a^+U + Ub), && L_- = \sqrt{2}\,(b^+U + Ua)\,. \end{aligned} \tag{1}$$

где $U = (1 - a^+a - b^+b - c^+c)^{1/2}$.

Физическим состояниям на узле в "удвоенной решетке" отвечают вакуум и три состояния с одним возбуждением какого-либо сорта. На физическом подпространстве коммутационные соотношения $[M_iM_j] = i\epsilon_{ijk}M_k$, $[L_iL_j] = i\epsilon_{ijk}M_k$, $[M_iL_j] = i\epsilon_{ijk}L_k$ вместе с условием фиксации длины векторной части параметра порядка $M^2 + L^2 = 3$ выполняются, и, кроме того M действительно принимает значения 0 и 1: $M^2 = 2(a^+a + b^+b + c^+c)$. Матричные элементы переходов между физическими и нефизическими состояниями равны нулю, и поэтому при $T = 0$ преобразование (1) можно рассматривать как точное. Его использование позволяет выразить исходные спины S_{2l} и S_{2l+1} через бозоны и тем самым представить АФМ как систему трех взаимодействующих бозе-полей. Выбор четырех физических состояний для M_{2l} означает, что каждый из спинов S_{2l} и S_{2l+1} описывается одним из двух спиноров φ или $\tilde{\varphi}$, где $(1 \equiv 2l,\ 2 \equiv 2l+1)$

$$\varphi_1 = \begin{pmatrix} |a_1\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_1\rangle + |c_1\rangle) \end{pmatrix} \quad \tilde{\varphi}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_1\rangle - |c_1\rangle) \\ |b_1\rangle \end{pmatrix},$$
$$\varphi_2 = \begin{pmatrix} -|a_2\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_2\rangle - |c_2\rangle) \end{pmatrix} \quad \tilde{\varphi}_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_2\rangle + |c_2\rangle) \\ -|b_2\rangle \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Здесь $|0\rangle, |a\rangle, |b\rangle, |c\rangle$ обозначают вакуум и состояния с одним возбужденным бозоном определенного типа. Нелокальность в бозе-гамильтониан вносят члены $S_{2l}S_{2l-1} = 1/2(S_{2l} + S_{2l-1})^2 - 3/4$, в которых взаимодействующие спины принадлежат соседним узлам в укрупненной вдвое решетке. Избыточность описания состояний суммарного спина $M = S_{2l} + S_{2l-1}$ позволяет своеобразным способом учесть взаимодействие векторной и скалярной (действительный скаляр) частей параметра порядка, составив из компонент спиноров четыре волновые функции ψ, которые полностью опишут состояния $\tilde{M}$, и исключив из бозонного гамильтониана члены, дающие ноль при действии на любую из ψ. Эти волновые функции мы выберем следующими:

$$\psi_1^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_1^{(1)}\tilde{\varphi}_2^{(1)} + \tilde{\varphi}_1^{(1)}\varphi_2^{(2)}\right)$$
$$\psi_1^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left(\varphi_1^{(1)}\tilde{\varphi}_2^{(2)} + \varphi_1^{(2)}\tilde{\varphi}_2^{(1)}\right) + \left(\tilde{\varphi}_1^{(1)}\varphi_2^{(2)} + \tilde{\varphi}_1^{(2)}\varphi_2^{(1)}\right)\right]$$
$$\psi_1^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_1^{(2)}\tilde{\varphi}_2^{(2)} + \tilde{\varphi}_1^{(2)}\varphi_2^{(2)}\right) \tag{3}$$
$$\psi_0 = \frac{1}{2}\left[\left(\varphi_1^{(1)}\tilde{\varphi}_2^{(2)} - \varphi_1^{(2)}\tilde{\varphi}_2^{(1)}\right) - \left(\tilde{\varphi}_1^{(1)}\varphi_2^{(2)} - \tilde{\varphi}_1^{(2)}\varphi_2^{(1)}\right)\right],$$

где $\varphi_1 \equiv \varphi_{2l}$, $\varphi_2 \equiv \varphi_{2l-1}$, а индексы в скобках обозначают верхние и нижние компоненты спиноров.

Модифицированный бозевский аналог спинового гамильтониана $H = \sum_l S_l S_{l+1}$ записывается в виде суммы $H = H_{ab} + H_c + H_{ab}^c$, в которой первое слагаемое представляет собой бозонный вариант гамильтониана системы с векторным параметром порядка и после диагонализации квадратичной формы $(a, b \to p, q)$ и перехода к длинноволновому пределу выглядит так:

$$H_{ab} = \sum_k |k|\sqrt{2}\,(q_k^+ q_k + p_k^+ p_k) + \frac{2}{N}\sum_{k_i} \phi\,[q_1^+ q_2^+ q_3 q_4 + p_3^+ p_4^+ p_1 p_2 + q_1^+ q_2^+ p_3^+ p_4^+ + \tag{5}$$
$$+ q_3 q_4 p_1 p_2 + 2(q_1^+ q_2^+ p_3^+ q_4 + p_1 p_2 q_3 p_4^+ - q_1^+ p_2 q_3 q_4 - p_3^+ p_4^+ q_2^+ p_1) - 4 q_1^+ p_2 q_3 p_4^+],$$

где $\phi = \frac{\sqrt{2}}{16} g_0 \frac{|k_1||k_2| - k_1 k_2}{(|k_1 k_2 k_3 k_4|)^{1/2}}$, $g_0 = \frac{1}{2\sqrt{2}}$.

Взаимодействие возбуждений p- и q-типов растет с ростом масштаба: в однопетлевом приближении $g = g_0 / 1 - \frac{g_0}{2\pi} \, |\ln\ k|$. Естественно ожидать, что этот рост приведет, как и в σ-модели, к динамической генерации массы. Второе слагаемое – H_c изначально соответствовало модели Изинга с $S = 1/2$ в поперечном поле. В модифицированном варианте квадратичная форма в H_c выглядит так:

$$H_c^{(2)} = \frac{1}{2} \{ \sum_k c_k^+ c_k - \frac{\cos 2k}{2} (c_k^+ c_{-k}^+ + c_k c_{-k})\} , \qquad (6)$$

то есть затравочный спектр возбуждений c-типа содержит две голдстоуновские моды на $k = 0$ и на границе зоны Бриллюэна в удвоенной решетке $k = \pi/2$. Выделив низкоэнергетические области и диагонализовав квадратичную часть гамильтониана, получим выражение в точности такого же типа, что и (4), но с противоположным знаком у ϕ, поэтому в данном случае константа связи будет демонстрировать *нульзарядовое поведение* и затравочная жесткость спиновых волн не разрушится флуктуациями.

Последнее слагаемое описывает взаимодействие подсистем с векторной и скалярной частями параметра порядка. Расчет показывает, что соответствущая константа связи *не испытывает логарифмической ренормировки*, то есть на больших масштабах щелевые возбуждения a- и b-типов отделяются от бесщелевых c-типа и мы приходим к критической теории, задаваемой H_c. Значение центрального заряда C равно удвоенному (два голдстоуновских бозона) значению в модели Изинга, то есть $C = 1$, как для свободных бозонов, что согласуется с результатом [7].

3. Основываясь на рассмотрении АФМ с $S = 1/2$ можно предположить, что различие гейзенберговских АФМ с целыми и полуцелыми S обусловлено различием в четности числа состояний вектора ферромагнетизма $M = S_1 + S_2$. Для целых S полное описание состояний M на языке одночастичных возбуждений требует введения $(2S + 1)^2 - 1$, то есть четного числа бозонов, которые, как мы предполагаем, будут либо щелевыми, либо попарно связаны лагарифмически растущим взаимодействием, так что в результате все возбуждения окажутся щелевыми. Напротив, при полуцелых S требуемое число бозонов нечетно и после попарного объединения останется "лишний" бозон, который и будет определять низкоэнергетические свойства АФМ. Вопрос о том, что происходит в интегрируемых точках для обобщенных моделей требует отдельного рассмотрения.

Автору приятно поблагодарить М.И.Каганова и Д.В.Хвещенко за обсуждение результатов работы.

Литература

1. *Haldane F.D.M.* Phys. Lett. A, 1983, 93, 464.
2. *Bonner J.C., Parkinson J.B.* J. Appl. Phys., 1988, 63, 3543.
3. *Renard J.P. et al.* Europhys. Lett., 1987, 3, 945.
4. *Affleck I.* Nucl. Phys. B, 1985, 265, 409.
5. *Хвещенко Д.В., Чубуков А.В.* ЖЭТФ, 1987, 93, 1904.
6. *Вигман П.Б.* Письма в ЖЭТФ, 1985, 41, 79.
7. *Luther A., Peschel I.* Phys. Rev. B, 1975, 12, 3908.

Институт физических проблем
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
15 декабря 1988 г.