О СВЯЗИ АНТИСИММЕТРИЧНОГО ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С ИЗМЕНЕНИЕМ МУЛЬТИПЛЕТНОСТИ

С.В.Вонсовский, М.С.Свирский

В теории слабого ферромагнетизма [1,2] важную роль играет обменное взаимодействие вида:

$$H_1 = \mathbf{D}[\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2], \tag{1}$$

антисимметричное относительно спинов $\mathbf{S}_1$ и $\mathbf{S}_2$. С другой стороны, в теории обменного взаимодействия, связанного с изменением мультиплетности [3], также существенны антисимметричные спиновые операторы. Естественно возникает вопрос о связи взаимодействия (1) с изменением мультиплетности.

Для установления этой связи введем симметричный и антисимметричный спиновые операторы:

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2, \quad \mathbf{A} = \mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_2, \tag{2}$$

где

S_1 и S_2 удовлетворяют перестановочным соотношениям:

$$[S_1 S_1] = iS_1, \quad [S_2 S_2] = iS_2. \tag{3}$$

Из (2) и (3) вытекают следующие перестановочные соотношения для S и A:

$$[SS] = [AA] = i\,S \tag{4}$$

$$S_i A_k - A_k S_i = i e_{ikl} A_l, \tag{5}$$

где e_{ikl} – антисимметричный единичный тензор третьего ранга. Соотношение (5) приводит [4] к равенству:

$$S^4 A_x - 2S^2 A_x S^2 + A_x S^4 = 2(S^2 A_x + A_x S^2) - 4S_x(SA), \tag{6}$$

из которого следует, что оператор A может перевести состояние системы со спином S только в состояние со спином S', удовлетворяющем условию:

$$S' - S = 0, \pm 1 \ . \tag{7}$$

Равенство $S' - S = 0$ (сохранение мультиплетности) может иметь место только в том случае, если последнее слагаемое из (6) не равно нулю. В рассматриваемом случае из (2) следует:

$$(SA) = S_1^2 - S_2^2 = S_1(S_1 + 1) - S_2(S_2 + 1). \tag{8}$$

Следовательно, если ограничиться случаем двух одинаковых спинов ($S_1 = S_2$), то $(SA) = 0$ и оператор A приводит к изменению мультиплетности системы.

Согласно (2) можно выразить S_1 и S_2 через S и A в виде:

$$S_1 = \frac{1}{2}(S + A), \quad S_2 = \frac{1}{2}(S - A). \tag{9}$$

Подставляя (9) в (1), получаем с учетом (4) следующее выражение для антисимметричного обменного взаимодействия:

$$H_1 = \frac{1}{4} D \{[AS] - [SA]\}. \tag{10}$$

Другая удобная форма может быть получена, если учесть соотношение (5). Дважды применяя (5), получаем:

$$H_1 = \frac{i}{4} S\,(AS^2 - S^2 A). \tag{11}$$

Выражение (10) или (11) устанавливает связь между антисимметричным обменным взаимодействием и антисимметричным спиновым опера-

тором работы [3]. В случае $S_1 = S_2$ выражение (10) или (11) позволяет утверждать, что в системе из двух спинов одинаковой величины антисимметричное обменное взаимодействие (1) обуславливает изменение мультиплетности системы.

В случае когда основное невозмущенное состояние является синглетом ($S = 0$), взаимодействие (1) включает согласно (10) или (11) состояния с $S \neq 0$. Однако средний спин остается равным нулю. Действительно, пусть обменное взаимодействие имеет вид:

$$H = H_0 + H_1, \tag{12}$$

где $H_0 = I(\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2)$ – изотропный обмен, а $I > 0$. Направим ось Z вдоль вектора $\mathbf{D}$. Согласно (5) S_Z коммутирует с $(A_Z S^2 - S^2 A_Z)$ и соответственно с (12). Следовательно, S_Z является хорошим квантовым числом и, поскольку операторы S_x и S_y не коммутируют с оператором S_Z, имеем $\bar{S}_x = \bar{S}_y = 0$. Остается возможность появления $\bar{S}_Z$ вдоль $\mathbf{D}$. Но для синглетного состояния $S_Z = 0$, а для того чтобы S_Z оставалось хорошим квантовым числом, H_1 может добавить к этому состоянию только состояния с $S_Z = 0$. Следовательно, в основном состоянии, возникающем из синглетного состояния, по-прежнему $S_Z = 0$. Этим объясняется результат, полученный недавно непосредственным расчетом в [5] для частного случая $S_1 = S_2 = 1/2$.

Ситуация изменяется, однако, если кроме H_1 в системе действует фактор, стабилизирующий антипараллельную ориентацию спинов. Таким свойством стабилизации "антиферромагнитного" (в классическом смысле) упорядочения обладает согласно [3] оператор A_Z. Соответственно рассмотрим гамильтониан:

$$H = I(\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2) + \frac{i}{4}\mathbf{D}(\mathbf{A}S^2 - S^2\mathbf{A}) + pA_Z, \tag{13}$$

где p – "молекулярное поле". При $D = D_z$ оператор S_Z коммутирует с H и по-прежнему в основном состоянии $\bar{S}_x = \bar{S}_y = \bar{S}_Z = 0$. Если же $D_\perp \neq 0$, возникает возможность отличного от нуля среднего спина в основном состоянии, так как S^Z не коммутирует, согласно (5), с $(A_\perp S^2 - S^2 A_\perp)$. В этом можно убедиться также непосредственно, рассматривая волновую функцию основного состояния системы из двух спинов $S_1 = S_2 = 1/2$, которая в случае (13) имеет следующий вид

$$\Psi = F^{-1/2}\Big[\Big(\sqrt{\frac{1}{4}(I^2 + D^2) + p^2} + \frac{I}{2}\Big)\Psi^s + \Big(\frac{iD_Z}{2} - p\Big)\Psi^T - \frac{i\bar{D}}{2\sqrt{2}}\Psi_+ + \frac{i\bar{D}^+}{2\sqrt{2}}\Psi_+\Big], \tag{14}$$

где $F = (1/2)(I^2 + D^2) + 2p^2 + I\sqrt{(1/4)(I^2 + D^2) + p^2}$, Ψ^s – синглетное состояние, а Ψ_+, Ψ^T, Ψ_+ – триплетные состояния с $S_Z = 1, 0, -1$.

В состоянии (14) проекции спина имеют следующие средние значения

$$\bar{S}_x = \frac{pD_y}{F}, \quad \bar{S}_y = -\frac{pD_x}{F}, \quad \bar{S}_z = 0. \tag{15}$$

Таким образом при совместном действии pA_z и $D[S_1S_2]$ среднее значение спина оказывается отличным от нуля, в то время, когда каждый из них в отдельности не приводит к появлению среднего спина.

В заключение приводим выражение для энергии состояния (14):

$$E_1 = -\frac{I}{4} - \sqrt{\frac{1}{4}(I^2 + D^2) + p^2}, \tag{16}$$

а также для вышележащих (при $I > 0$) уровней:

$$E_2 = E_3 = \frac{I}{4}, \quad E_4 = -\frac{I}{4} + \sqrt{\frac{1}{4}(I^2 + D^2) + p^2}. \tag{17}$$

Нетрудно написать также выражения для соответствующих волновых функций.

Институт
физики металлов
Академии наук СССР

Поступило в редакцию
13 марта 1967 г.
После переработки
20 апреля 1967 г.

Литература

[1] И.Е.Дзялошинский. ЖЭТФ, 32, 1547, 1957.
[1] T.Moriya. Phys. Rev., 120, 91, 1960.
[3] С.В.Вонсовский, М.С.Свирский. ЖЭТФ, 47, 1354, 1964.
[4] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Квантовая механика, 1948.
[5] P.Erdős. Phys. Chem. Solids, 27, 1705, 1966.