Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

С. Н. Мартынов, Двухмагнетонные состояния одномерной изотропной модели Гейзенберга со свободными граничными условиями, *ТМФ*, 1997, том 113, номер 2, 338–345

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1083>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.89.197.203

26 апреля 2023 г., 11:17:49

С. Н. Мартынов*

ДВУХМАГНОННЫЕ СОСТОЯНИЯ ОДНОМЕРНОЙ ИЗОТРОПНОЙ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА СО СВОБОДНЫМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ

С помощью точного решения уравнения Шредингера найдены собственные функции и собственные значения энергии двухмагнонных состояний конечной одномерной изотропной модели Гейзенберга спина $1/2$ со свободными граничными условиями. В отличие от двухпараметрических решений модели с циклическими граничными условиями, полученные решения являются однопараметрическими. Амплитуды волновых функций связанных двухмагнонных состояний имеют экспоненциальную зависимость как от расстояния между перевернутыми спинами, так и от координаты центра комплекса, что ведет к локализации низкоэнергетических комплексов на концах ферромагнитной цепочки.

1. ВВЕДЕНИЕ

Одномерная изотропная модель Гейзенберга является одной из наиболее интенсивно изучаемых моделей магнетизма. Прежде всего это обусловлено огромным числом приложений и обобщений модели, применяемой для описания не только магнитных структур [1, 2]. Важно и то, что точные решения, существующие в рамках модели, являются критериями адекватности большого числа приближенных и численных расчетов для более сложных систем. Анализ модели Гейзенберга для спинов $S = 1/2$

$$H = J \sum_1^N \left(\mathbf{s}_n \mathbf{s}_{n+1} - \frac{1}{4} \right) \quad (1)$$

проводится, как правило, с наложением циклических граничных условий $\mathbf{S}_{N+1} = \mathbf{S}_1$ [1, 2], необходимых для применимости анзаца Бете [3]. При этом сопоставление полученных решений с экспериментальными данными становится возможным только в пределе бесконечного числа спинов $N \rightarrow \infty$ из-за отсутствия реальных замкнутых магнитных цепочек с конечным N . В то же время точные решения модели Гейзенберга для конечных N с циклическими граничными условиями [4] показали нетривиальную зависимость числа различных двухмагнонных состояний от N , не объясняемую в рамках струнной гипотезы [5]. Отсюда следует необходимость нахождения точных решений модели Гейзенберга для конечного числа спинов N при наложении реальных граничных условий. Прежде всего это относится к случаю свободных граничных условий, когда

* Институт физики СО РАН, Красноярск, Россия

у граничных спинов отсутствует одна внешняя обменная связь. Принципиальным отличием этого случая от замкнутой цепочки являются отсутствие трансляционной инвариантности в системе и как следствие неприменимость при решении анзаца Бете. Поиск собственных функций и собственных значений оператора (1) проведем в классах одномагнонных ($M = 1$) и двухмагнонных ($M = 2$) решений, для которых в явном виде получен полный набор соответствующих решений с циклическими граничными условиями [6].

2. ОДНОМАГНОННЫЕ РЕШЕНИЯ

В классе одномагнонных решений $M = 1$ для собственных функций модели (1)

$$\psi(k) = \sum_x a(x)\psi(x) \quad (2)$$

уравнение Шредингера сводится к системе конечно-разностных уравнений [1, 2] на амплитуды $a(x)$

$$\begin{aligned} 2(\varepsilon + 1)a(x) &= a(x+1) + a(x-1), & -(N-1)/2 < x < (N-1)/2, \\ 2(\varepsilon + 1/2)a(-(N-1)/2) &= a(-(N-3)/2), \\ 2(\varepsilon + 1/2)a((N-1)/2) &= a((N-3)/2), \end{aligned} \quad (3)$$

где x - координата перевернутого спина, отсчитываемая от середины магнитной цепочки из N спинов, а энергия $\varepsilon = E/J$ отсчитывается от ферромагнитного “вакуума” в единицах J . Неоднородная система (3) эквивалентна однородной системе, имеющей общие экспоненциальные решения, если дополнить набор из N физических амплитуд $a(x \in \{-(N-1)/2, (N-1)/2\})$ двумя нефизическими амплитудами, связанными с физическим набором двумя дополнительными условиями

$$\begin{aligned} a(-(N+1)/2) &= a(-(N-1)/2), \\ a((N+1)/2) &= a((N-1)/2). \end{aligned} \quad (4)$$

Равенства (4) дополняют два неоднородных уравнения в системе (3) до общего однородного вида и являются граничными условиями зеркального типа для системы из N однородных уравнений. Общее число уравнений на $N+2$ неизвестные $a(x \in \{-(N+1)/2, (N+1)/2\})$ возрастает до $N+2$, что обеспечивает однозначное нахождение всех решений. Решения удобно разделить на симметричные и антисимметричные относительно точки $x = 0$, $a(x) = \pm a(\pm x)$. Для соответствующих решений

$$\begin{aligned} a^s(x) &= \sqrt{2/N} \cos kx, & k \neq 0, \\ a^a(x) &= \sqrt{2/N} \sin kx \end{aligned} \quad (5)$$

граничные условия (4) определяют в интервале $0 \leq k < \pi$ $N-1$ физически различные значения импульсов

$$\begin{aligned} k^s &= 2n\pi/N, & n = 0, 1, 2, \dots, \\ k^a &= (2n+1)\pi/N. \end{aligned} \quad (6)$$

Для четного N максимальное значение n для обоих типов решений одинаково и равно $N/2 - 1$. Для нечетного N симметричные состояния имеют максимальное n , равное

$(N-1)/2$, а антисимметричные $-(N-3)/2$. Для $k=0$ имеем однородное решение $a(x) = \sqrt{N}$.

Таким образом, свободные граничные условия приводят к набору из N ортонормированных волновых функций вида (5) с вещественными значениями импульсов k . Значения энергии имеют стандартный вид

$$\varepsilon = \cos k - 1. \quad (7)$$

3. ДВУХМАГНОННЫЕ РЕШЕНИЯ

В классе двухмагнонных решений $M=2$ для собственных функций модели (1)

$$\psi(k_1, k_2) = \sum_{n_1 < n_2} a(n_1, n_2) \psi(n_1, n_2) \quad (8)$$

уравнение Шредингера дает неоднородную систему уравнений на коэффициенты $a(n_1, n_2)$

$$\begin{aligned} 2(\varepsilon + 2)a(n_1, n_2) &= a(n_1 + 1, n_2) + a(n_1 - 1, n_2) + \\ &\quad + a(n_1, n_2 + 1) + a(n_1, n_2 - 1), \quad n_2 > x_1 + 1, \\ n_1 &\neq -(N-1)/2, (N-3)/2, \quad n_2 \neq -(N-3)/2, (N-1)/2; \\ 2(\varepsilon + 3/2)a(-(N-1)/2, n_2) &= a(-(N-3)/2, n_2) + \\ &\quad + a(-(N-1)/2, n_2 + 1) + a(-(N-1)/2, n_2 - 1), \\ n_2 &\neq -(N-3)/2, (N-1)/2; \\ 2(\varepsilon + 3/2)a(n_1, (N-1)/2) &= a(n_1 + 1, (N-1)/2) + \\ &\quad + a(n_1 - 1, (N-1)/2) + a(n_1, (N-3)/2), \\ n_1 &\neq (N-3)/2, -(N-1)/2; \\ 2(\varepsilon + 1)a(-(N-1)/2, (N-1)/2) &= a(-(N-3)/2, (N-1)/2) + \\ &\quad + a(-(N-1)/2, (N-3)/2); \\ 2(\varepsilon + 1/2)a(-(N-1)/2, -(N-3)/2) &= a(-(N-1)/2, -(N-5)/2); \\ 2(\varepsilon + 1/2)a((N-1)/2, (N-3)/2) &= a((N-1)/2, (N-5)/2); \\ 2(\varepsilon + 1)a(n_1, n_1 + 1) &= a(n_1 - 1, n_1 + 1) + a(n_1, n_1 + 2), \\ n_1 &\neq -(N-1)/2, (N-3)/2. \end{aligned} \quad (9)$$

Дополнение системы (9) до однородной обеспечивается введением нефизических состояний [7], связанных с амплитудами (8) граничными условиями

$$\begin{aligned} a(-(N-1)/2, n_2) &= a(-(N+1)/2, n_2), \quad n_2 \neq -(N-3)/2, (N-1)/2; \\ a(n_1, (N-1)/2) &= a(n_1, (N+1)/2), \quad n_1 \neq (N-3)/2, -(N-1)/2; \\ 2a(-(N-1)/2, (N-1)/2) &= a(-(N+1)/2, (N-1)/2) + \\ &\quad + a(-(N-1)/2, (N+1)/2); \\ 3a(-(N-1)/2, -(N-3)/2) &= a(-(N+1)/2, -(N-3)/2) + \\ &\quad + a(-(N-3)/2, -(N-3)/2) + a(-(N-1)/2, -(N-1)/2); \\ 3a((N-1)/2, (N-3)/2) &= a((N-3)/2, (N+1)/2) + \\ &\quad + a((N-3)/2, (N-3)/2) + a((N-1)/2, (N-1)/2); \\ 2a(n_1, n_1 + 1) &= a(n_1, n_1) + a(n_1 + 1, n_1 + 1), \\ n_1 &\neq -(N-1)/2, (N-3)/2. \end{aligned} \quad (10)$$

Система (10) может быть сведена к трем уравнениям расширенных граничных условий, снимающих ограничения на n_1 и n_2 в (10),

$$\begin{aligned} a(-(N-1)/2, n_2) &= a(-(N+1)/2, n_2); \\ a(n_1, (N-1)/2) &= a(n_1, (N+1)/2); \\ 2a(n_1, n_1+1) &= a(n_1, n_1) + a(n_1+1, n_1+1). \end{aligned} \quad (11)$$

Эта процедура требует дополнительного сравнения полного числа переменных $a(n_1, n_2)$ с учетом введенных нефизических состояний с общим числом уравнений, связывающих все состояния. Число физических амплитуд (8) и число уравнений (9) равны $N(N-1)/2$. Условия (10) добавляют $3N-2$ нефизических состояния, связанных с этими амплитудами $3N-6$ уравнениями. Расширение граничных условий (10) осуществляется четырьмя дополнительными соотношениями

$$\begin{aligned} a(-(N-1)/2, -(N-3)/2) &= a(-(N+1)/2, -(N+3)/2); \\ a(-(N-1)/2, (N-1)/2) &= a(-(N+1)/2, (N-1)/2); \\ a((N-3)/2, (N-1)/2) &= a((N-3)/2, (N+1)/2); \\ a(-(N-1)/2, (N-1)/2) &= a(-(N-1)/2, (N+1)/2), \end{aligned}$$

снимающими ограничения в первых двух равенствах (10) и автоматически расширяющих последнее равенство (10) до всей области определения $a(n_1, n_2)$. Это устраняет недоопределение нефизических состояний, вызванное меньшим числом условий (10), доводя его до числа этих состояний, т.е. до $3N-2$. Таким образом, полное число неизвестных $a(n_1, n_2)$ и число уравнений однородной системы плюс условия (11) становятся одинаковыми и равными $N(N-1)/2 + 3N-2$, что обеспечивает однозначность решения.

Общее решение однородной системы конечно-разностных уравнений

$$\begin{aligned} 2(\varepsilon+2)a(n_1, n_2) &= a(n_1+1, n_2) + a(n_1-1, n_2) + \\ &+ a(n_1, n_2+1) + a(n_1, n_2-1) \end{aligned} \quad (12)$$

представляет собой сумму экспонент с произвольными коэффициентами

$$a(n_1, n_2) = \sum_{k_1, k_2} \left(A \exp(i(\pm k_1 n_1 \pm k_2 n_2)) + B \exp(i(\pm k_2 n_1 \pm k_1 n_2)) \right).$$

Решения, удовлетворяющие зеркальным граничным условиям (11), могут быть симметричными или антисимметричными относительно операции отражения координат n_1 и n_2 :

$$a(n_1, n_2) = \pm a(-n_2, -n_1).$$

Это позволяет разделить все решения на симметричные и антисимметричные относительно центра цепочки. Граничные условия (11) определяют коэффициенты A и B общего решения. В результате получаем для симметричных и антисимметричных решений соответственно

$$\begin{aligned} a^{s,a}(n_1, n_2) &= C(k_1, k_2) \left(\cos(k_1(n_1 + N/2)) \cos(k_2(n_2 - N/2)) \pm \right. \\ &\quad \left. \pm \cos(k_2(n_1 + N/2)) \cos(k_1(n_2 - N/2)) \right). \end{aligned} \quad (13)$$

Импульсы k_1 и k_2 решений (13) определяются третьим граничным условием (11), которое представляет собой условие баланса потока вероятности на границе физических и нефизических состояний. Для симметричных решений имеем

$$\begin{aligned}\cos(k_1 + k_2)/2 &= \frac{\cos(N-1)(k_1 - k_2)/2}{\cos N(k_1 - k_2)/2}, \\ \cos(k_1 - k_2)/2 &= \frac{\cos(N-1)(k_1 + k_2)/2}{\cos N(k_1 + k_2)/2},\end{aligned}\quad (14)$$

для антисимметричных –

$$\begin{aligned}\cos(k_1 + k_2)/2 &= \frac{\sin(N-1)(k_1 - k_2)/2}{\sin N(k_1 - k_2)/2}, \\ \cos(k_1 - k_2)/2 &= \frac{\sin(N-1)(k_1 + k_2)/2}{\sin N(k_1 + k_2)/2}.\end{aligned}\quad (15)$$

Системы (14) и (15) имеют решения как в области реальных значений k_1 и k_2 , так и в области комплексно-сопряженных значений $k_1 = k_2^*$. В последнем случае получаем системы уравнений на импульсы связанных двухмагнанных состояний в цепочке со свободными граничными условиями. Для симметричных решений получаем

$$\begin{aligned}\cos(k_1 + k_2)/2 &= \frac{\operatorname{ch}(N-1)(k_1 - k_2)/2}{\operatorname{ch} N(k_1 - k_2)/2}, \\ \operatorname{ch}(k_1 - k_2)/2 &= \frac{\cos(N-1)(k_1 + k_2)/2}{\cos N(k_1 + k_2)/2},\end{aligned}\quad (16)$$

для антисимметричных –

$$\begin{aligned}\cos(k_1 + k_2)/2 &= \frac{\operatorname{sh}(N-1)(k_1 - k_2)/2}{\operatorname{sh} N(k_1 - k_2)/2}, \\ \operatorname{ch}(k_1 - k_2)/2 &= \frac{\sin(N-1)(k_1 + k_2)/2}{\sin N(k_1 + k_2)/2}.\end{aligned}\quad (17)$$

Четность волновых функций относительно смены знака у каждого импульса (13) приводит к симметрии уравнений (14)–(17) относительно перестановки $k_1 + k_2 \leftrightarrow k_1 - k_2$, что допускает также решения $k_1 = -k_2^*$, физически неотличимые от решений $k_1 = k_2^*$.

Нормировочные множители волновых функций (13) могут быть получены двойным суммированием тригонометрических рядов по узлам $n_1 < n_2$ с учетом того, что, например, для симметричных решений

$$\begin{aligned}4a^2(k_1, k_2) &= a(0, 0) + a(2k_1, 2k_2) + a(2k_1, 0) + a(0, 2k_2) + \\ &\quad + a(k_1 + k_2, k_1 + k_2) + a(k_1 - k_2, k_1 - k_2) + 2a(k_1 + k_2, k_1 - k_2), \\ S(k_1, k_2) &= \sum_{n_1 < n_2} a(n_1, n_2) = \\ &= \frac{\sin \frac{(N-1)(k_1 - k_2)}{2} \sin \frac{N(k_1 + k_2)}{2} + \sin \frac{N(k_1 - k_2)}{2} \sin \frac{(N-1)(k_1 + k_2)}{2}}{2 \sin \frac{k_1 + k_2}{2} \sin \frac{k_1 - k_2}{2}}, \\ 4C^{-2}(k_1, k_2) &= N(N-1) + S(2k_1, 2k_2) + S(2k_1, 0) + S(0, 2k_2) + \\ &\quad + S(k_1 + k_2, k_1 + k_2) + S(k_1 - k_2, k_1 - k_2) + 2S(k_1 + k_2, k_1 - k_2).\end{aligned}$$

4. ЭНЕРГИЯ ДВУХМАГНОННЫХ СОСТОЯНИЙ

Значения энергии двухмагнонных состояний, отсчитываемые от ферромагнитного вакуума

$$\varepsilon = \cos k_1 + \cos k_2 - 2,$$

с учетом (14)–(17) могут быть записаны как функции либо только полного импульса $K = k_1 + k_2$, либо только относительного импульса $Q = k_1 - k_2$. Для симметричных и антисимметричных состояний соответственно имеем

$$\varepsilon = \frac{\cos(N-2)K/2}{\cos NK/2} - 1 = \frac{\cos(N-2)Q/2}{\cos NQ/2} - 1, \quad (18)$$

$$\varepsilon = \frac{\sin(N-2)K/2}{\sin NK/2} - 1 = \frac{\sin(N-2)Q/2}{\sin NQ/2} - 1. \quad (19)$$

Полный спектр $N(N-1)/2$ значений энергии двухмагнонных состояний показан на рисунке.

Он состоит из зоны волновых двухмагнонных решений, внутри которой проходит ветвь одномагнонных энергий (7), и двух ветвей связанных симметричных и антисимметричных двухмагнонных состояний, совпадающих в пределе $N \rightarrow \infty$. Значения для симметричных (темные точки) и антисимметричных (светлые точки) состояний образуют чередующиеся по K области и заполняют волновую зону, ограниченную кривыми $\varepsilon_w = 2 \pm 2 \cos(K/2)$, ниже которой находятся энергии связанных двухмагнонных комплексов. Одномагнонный спектр показан штриховой линией. Отметим, что двухмагнонный спектр состоит из чередующихся по K областей с решениями различной четности.

5. ОБСУЖДЕНИЕ

Для сравнения волновых функций двухмагнетонных состояний (13) с соответствующими функциями, полученными для циклических граничных условий [6], представим их в переменных $R = (n_1 + n_2)/2$, $r = n_1 - n_2$:

$$\begin{aligned} a^s(R, r) &= C^s(K, Q) \left(\cos(2KR) \cos(Q(r + N)) + \cos(K(r + N)) \cos(2QR) \right), \\ a^a(R, r) &= C^a(K, Q) \left(\sin(2KR) \sin(Q(r + N)) + \sin(K(r + N)) \sin(2QR) \right). \end{aligned}$$

В отличие от трансляционно-инвариантного по R случая циклических граничных условий [6] $a(R) \sim \exp(iKR)$ амплитуды волновых функций становятся либо гармонической функцией R , либо суперпозицией гармонических и экспоненциальных функций. В последнем случае связанные состояния $k_1 = k_2^*$:

$$\begin{aligned} a^s(R, r) &= C^s(K, Q) \left(\cos(2KR) \operatorname{ch}(|Q|(r + N)) + \cos(K(r + N)) \operatorname{ch}(2|Q|R) \right), \\ a^a(R, r) &= C^a(K, Q) \left(\sin(2KR) \operatorname{sh}(|Q|(r + N)) + \sin(K(r + N)) \operatorname{sh}(2|Q|R) \right), \end{aligned}$$

представляющие собой связанные комплексы Бете для ферромагнетика со свободными границами, имеют максимальные амплитуды волновых функций при $r \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \pm N/2$. Таким образом, для связанных состояний появляется экспоненциальная зависимость не только по r , но и по R .

Среди двухмагнетонных решений (14), (15) выделяется группа состояний, у которых один из импульсов $k_{1,2}$ равен нулю,

$$a(n_1, n_2) = \sqrt{\frac{2}{N(N-1)}} \left(\cos k(n_1 + N/2) \pm \cos k(n_2 - N/2) \right), \quad k \neq 0.$$

При этом ненулевой импульс k принимает те же значения, что и одномагнетонный импульс (6), и в отсутствие внешнего постоянного магнитного поля энергия этих состояний совпадает с одномагнетонной ветвью. При ферромагнитном обмене $J < 0$ нижнее по энергии состояние с $K = 0$ многократно вырождено, т.к. энергии всех однородных многомагнетонных состояний совпадают с ферромагнитной, что отражает отсутствие дальнего порядка для изотропного гейзенберговского магнетика со свободными граничными условиями. Анизотропия обмена $|J_z| > |J_x| = |J_y|$ снимает вырождение: все магнетонные состояния имеют энергии большие, чем ферромагнитная. Для одномагнетонного состояния вместо (7) имеем

$$\varepsilon = \Delta \cos k - 1, \quad \Delta = J_x/J_z.$$

Изменяются также допустимые значения импульса k , в частности отсутствуют однородные магнетонные состояния с $k = 0$, приводившие к вырождению по энергии в изотропном случае, поскольку граничные условия (4) (а также (11)) модифицируются:

$$\Delta a(\pm(N+1)/2) = a(\pm(N-1)/2).$$

Это приводит к гармоническим решениям, у которых длина волны в общем случае несоизмерима с периодом решетки уже и в одномагнетонном случае.

Проанализируем распределение намагниченности по конечной цепочке с изотропным обменом в одно- и двухмагнонном состояниях с одинаковыми энергиями. Для одномагнонного состояния с импульсом k вероятность обнаружить перевернутый спин с координатой x равна

$$W(x) = a^2(x) = (1 \pm \cos 2kx)/N.$$

Аналогично для двухмагнонного состояния имеем

$$W(x) = \sum_{n_2} a^2(x, n_2) + \sum_{n_1} a^2(n_1, x) = 2 \left(1 \pm \frac{N-4}{2(N-2)} \cos 2kx \right) / N.$$

Верхние знаки соответствуют симметричным состояниям с $k = 2n\pi/N$, нижние – антисимметричным с $k = (2n+1)\pi/N$. Видно, что при малых значениях импульсов в обоих случаях максимумы вероятности обнаружить перевернутый спин локализуются на концах цепочки.

Принципиальным различием между двухмагнонными решениями с циклическими и свободными граничными условиями является однопараметрический характер последних. Если в случае циклических условий для каждого полного импульса $K = 2\pi n/N$ существует набор решений с различными Q [6], то для свободных границ каждому K соответствует только один относительный импульс Q . Таким образом, все двухмагнонные состояния однозначно параметризуются одним квантовым числом (K или Q), удовлетворяющим одной из систем уравнений (14)–(17).

Список литературы

- [1] Ю. А. Изюмов, Ю. И. Скрыбин. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. М.: Наука, 1987.
- [2] М. Годен. Волновая функция Бете. М.: Мир, 1987.
- [3] H. A. Bethe. Z. Phys. 1931. В. 73. S. 205.
- [4] K. Isler, M. B. Paranjape. Phys. Lett. B. 1993. V. 319. P. 209.
- [5] L. D. Faddeev, L. A. Takhtajan. Phys. Lett. A. 1981. V. 85. P. 375.
- [6] S. N. Martynov. Phys. Lett. A. 1996. V. 219. P. 329.
- [7] Д. Маттис. Теория магнетизма. М.: Мир, 1967.

Поступила в редакцию 10.VI.1997 г.

S. N. Martynov

TWO-MAGNON STATES OF THE ONE-DIMENSIONAL ISOTROPIC HEISENBERG MODEL WITH FREE BOUNDARY CONDITIONS

By solving the Schrödinger equation the eigenfunctions and eigenvalues of the energy of two-magnon states in the one-dimensional isotropic Heisenberg model $S = 1/2$ with free boundary conditions were found. The obtained solutions are single-parametrical unlike the two-parametrical solutions of the model with cyclic boundary condition. The amplitudes of the wave functions of the coupled two-magnon states have exponential dependence on both the distance between reversed spins, and the coordinate of the center of the complex. This leads to the localization of the low energy complexes at the ends of the ferromagnetic chain.