

spin-Peierls 系统低能量激发谱的理论研究*

徐 靖 陈 鸿 章 豫 梅 冯 伟 国

(同济大学波耳固体物理研究所, 上海 200092)

(2000 年 1 月 21 日收到)

用玻色化技术和量子自治方法研究了 spin-Peierls 系统的低能量激发谱, 计算了二聚化相的基态、单粒子激发态和双粒子束缚态的能量、阻挫对其低能量行为的影响及其各自的自旋-自旋关联函数. 结果表明, 随着阻挫的增大, spin-Peierls 系统中的基态能会逐渐减小, 单粒子激发态能隙和双粒子束缚态能隙却会增大. 双粒子束缚态和基态的关联函数具有类似的短程关联, 而单粒子激发态的关联函数具有长程关联. 因此导出, 单粒子激发态为自旋三重态, 双粒子束缚态与基态类似为自旋单态, 它存在于双粒子连续激发态的下边. 该结果与 Aïin 等在实验上观察到的现象是一致的, 说明存在束缚态是 spin-Peierls 系统的一个普遍特性.

关键词: spin-Peierls 系统, 束缚态, 关联函数

PACC: 7120, 0370, 0550

1 引 言

自从 Hase 等^[1]发现了无机 spin-Peierls 材料 CuGeO₃ 以来, 人们对 spin-Peierls 材料的研究越来越重视, 其重要原因在于该材料易于掺杂, 且存在一些奇异行为: 如在温度 T_{SP} 时, 该材料会发生 spin-Peierls 结构相变, 低于温度 T_{SP} 时, 该材料的磁化率急剧下降为零等^[1]. 在实验上, Hirota 等^[2]用 X 射线照相术观察到该材料的这些奇异行为, 并表明其基态是二聚化的单态, 最近的中子散射实验又观察到在该系统中存在束缚态^[3], 类似的实验也表明在 spin-Peierls 材料中存在束缚态^[4, 5]. 这些实验结果激发了人们在理论上研究 spin-Peierls 系统低能量行为的兴趣.

spin-Peierls 系统是准一维的量子自旋系统, 理论上用一维 $S = 1/2$ 的具有近邻和次近邻相互作用的反铁磁海森堡链(alternating Heisenberg chain, 简称 AHC 模型)来描述, 此哈密顿量为

$$H = J \sum_i \{ [1 + \delta(-1)^i] \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \alpha \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2} \}, \quad (1)$$

其中 J 为最近邻格点离子上电子间的交换积分, i 代表链上的第 i 个格点, \mathbf{S}_i 为 $S = 1/2$ 的自旋算符, δ 为二聚化参量, α 为次近邻格点离子间的阻挫参

量. AHC 模型引起人们极大兴趣的另一重要原因是它包含了两种自旋能隙形成的机制. 当 $\delta = 0, \alpha > \alpha_c$ 时, 它的基态是自发二聚化单态, 元激发谱存在能隙; $\alpha < \alpha_c$ 时, 基态是自旋液体, 元激发谱不存在能隙. 阻挫参量临界值 $\alpha_c = 0.2412$ 由数值计算给出^[6]. 然而, 当 $\delta \neq 0$ 时, 它的基态是二聚化单态, 元激发谱总存在能隙. 因此, AHC 模型的元激发谱已被用许多方法广泛研究, Bouzerar 等^[7]和 Barnes 等^[8]用严格对角化的方法, Sorensen 等^[9]用密度矩阵重整化群的方法, Uhrig 等^[10]用连续极限场论的方法以及 Dobry 等^[11]用半经典近似的方法. 但是所得到的理论结果与 Aïin 等^[3]的实验结果有些差异, 而且, 阻挫对系统低能量行为的影响也只是一些数值计算的结果, 相应的解析工作比较少.

基于实验现象和理论中存在的问题, 本文将用量子自治理论^[12]来研究 AHC 模型. 这个理论可以有效地克服低维强关联系统中红外发散的困难, 方便地给出相图, 元激发谱等信息. 通过该方法, 我们将计算阻挫对系统低能量行为的影响, 并用我们的理论结果定性地解释文献^[3]中的实验现象.

2 AHC 模型的玻色化

为了讨论 AHC 模型的低能量行为, 首先对于

* 国家自然科学基金(批准号: 19725416)资助的课题.

AHC 模型的哈密顿量(1)式进行 Jordan-Wigner 交换

$$S_i^+ = c_i^+ \exp\left[i\pi \sum_{i=1}^{n-1} c_i^+ c_i \right], \quad (2)$$

$$S_i^- = \exp\left[-i\pi \sum_{i=1}^{n-1} c_i^+ c_i \right] c_i^-, \quad (3)$$

$$H = J \sum_i \left[1 + \delta(\alpha - 1) \right] \left[\frac{1}{2} (c_i^+ c_{i+1} + c_{i+1}^+ c_i) + \left(n_i - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i+1} - \frac{1}{2} \right) \right] + \alpha \left[c_i^+ \left(n_{i+1} - \frac{1}{2} \right) c_{i+2} + \text{H. c.} \right] + \left(n_i - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i+2} - \frac{1}{2} \right) \quad (5)$$

在连续化极限条件下, $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} c_i$ (其中 ϵ 为晶格常量) 则哈密顿量(5)式可用连续化的费密场量 $\psi(x)$ 来描述, 并只考虑费密点附近的低能量激发, 可将其线性化为

$$\psi(x) = e^{ik_F x} \psi_+(x) + e^{-ik_F x} \psi_-(x), \quad (6)$$

其中 $\psi_+(x)$ 和 $\psi_-(x)$ 分别表示费密场的右左运动两支, k_F 为费密波矢. 引入算符

$$\Phi_{\pm}(x) = \frac{1}{2} \left[\psi(x) \mp \int_{-\infty}^x \Pi(x') dx' \right], \quad (7)$$

其中场算符 $\psi(x)$ 及其共轭的场动量算符 $\Pi(x)$ 满足标准的玻色对易关系

$$[\psi(x), \Pi(x')] = i\hbar \delta(x - x'). \quad (8)$$

费密场算符可表示为

$$\psi_{\pm}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon}} \exp\left[\pm i\sqrt{4\pi}\Phi_{\pm}(x) \right]. \quad (9)$$

模型的哈密顿量可写成相互作用的玻色场形式

$$H = \epsilon J \int dx \left\{ \frac{1}{2} [\pi^2(x) + (\nabla\phi(x))^2] - \frac{g_1}{\beta^2 \epsilon^2} \cos 2\beta\phi(x) - \frac{g_2}{\beta^2 \epsilon^2} \cos \beta\phi(x) \right\} \quad (10)$$

其中 $\beta = \sqrt{4\pi\kappa_s}$, $\kappa_s = \sqrt{\frac{1 - \frac{1}{\alpha} - \frac{\alpha}{\pi}}{1 + \frac{3}{\pi} + \frac{7\alpha}{\pi}}}$ 为关联指数, g_1

$= -\frac{\beta^2(3\alpha - 1)}{2\pi^2}$, $g_2 = \frac{\delta\beta^2\epsilon}{\pi}$ 经过玻色化后的哈密顿

量(10)式是一个双 sine-Gordon 方程. 由 κ_s 的表达式可得到, 当 $\alpha \leq \alpha_{c1} = 0.2204$ 时, $\kappa_s \geq \frac{1}{2}$ 及 $\beta^2 \geq 2\pi$,

所以哈密顿量(10)式等号右端第一项相互作用项对模型激发谱能隙的贡献为零. 另一方面, 当 $\alpha = \alpha_{c2}$

$= \frac{1}{3}$ 时, (10)式等号右端第一项相互作用项消失, 则它对能隙的贡献消失. 而由数值计算结果给出^[6], 对 $\delta = 0$, $\alpha > \alpha_c$ 时, 激发谱能隙被打开. $\alpha_c \neq \alpha_{c1}$ ($i =$

$$S_i^Z = c_i^+ c_i - \frac{1}{2}, \quad (4)$$

我们可以将哈密顿量(1)式用无自旋的费密算符描述为

1, 2) 主要源于我们未考虑连续化及玻色化过程中对相关参量的重整化效应. 在以下的研究中, 我们将 α , α_{c1} 及 κ_s 视为唯象参量, 并取 $\alpha_{c1} = \alpha_{c2} = \alpha_c$ 及 $\kappa_s = \frac{1}{2} \left[\frac{1 - (\alpha - \alpha_c)}{1 + (\alpha - \alpha_c)} \right]^{1/2}$. 另外, 仅考虑 $\alpha > \alpha_c$ 的情况, 这时二聚化及阻挫均对激发谱能隙有贡献.

3 AHC 模型的基态及单粒子激发态

对于标准的 sine-Gordon 方程, 当 $\beta^2 = 2\pi$ 时存在严格解, 其低能量激发谱由孤子, 反孤子及呼吸子构成. 而对于双 sine-Gordon 方程, 还没有一种理论可严格求解, 因此我们在 sine-Gordon 模型的框架下, 用量子自洽方法^[12]来求解哈密顿量(10)式. 量子自洽方法的实质是将相互作用项在其某个极小点附近展开为二次型, 并通过自洽方法来考虑极小点附近的非简谐效应. 对于双 sine-Gordon 方程, 当 $g_2 > 4|g_1|$ 时, 其相互作用项的极小值为 $\phi(x) = 0$; 当 $g_2 < 4|g_1|$ 时, 其相互作用项的极小值由一个分为两个简并极小, 构成一个局域双阱势 (对此问题将另文讨论). 本文只讨论 $g_2 > 4|g_1|$ 的情况, 将场算符在动量空间展开

$$\psi(x) = \sum_k \left(\frac{1}{2|k|} \right)^{1/2} [b_k \exp(ikx) + b_k^+ \exp(-ikx)], \quad (11)$$

$$\Pi(x) = -i \sum_k \left(\frac{|k|}{2} \right)^{1/2} [b_k \exp(ikx) - b_k^+ \exp(-ikx)]. \quad (12)$$

选取变分基态为^[12]

$$|G_s\rangle = \exp\left[-\sum_k (\gamma_k/2) (b_k^+ b_{-k}^+ - b_k b_{-k}) \right] |0\rangle, \quad (13)$$

参量 γ_k 将通过变分给出, $|0\rangle$ 为真空态, 基态能量为

$$E_g = \langle G_s | H | G_s \rangle = \sum_k |k| \frac{\cosh 2\gamma_k}{2} - \frac{g_1}{\epsilon^2 \beta^2} K^4 - \frac{g_2}{\epsilon^2 \beta^2} K \quad (14)$$

其中

$$K = \exp\left[-\frac{\beta^2}{4} \sum_k \frac{e^{-2\gamma_k}}{|k|}\right]. \quad (15)$$

变分参量由条件 $\frac{\partial E_g}{\partial \gamma_k} = 0$ 定出

$$\gamma_k = \frac{1}{4} \ln \left[1 + \frac{4g_1 K^4}{\epsilon^2 |k|^2} + \frac{g_2 K}{\epsilon^2 |k|^2} \right]. \quad (16)$$

单粒子激发态的态函数为^[13]

$$|\psi_1(k)\rangle = b_k^+ |G_s\rangle. \quad (17)$$

能量期待值

$$E_1(k) = E_g + \omega(k). \quad (18)$$

基态到单粒子激发态的激发谱为

$$\omega(k) = E_1(k) - E_0 = \sqrt{k^2 + \mu^2}, \quad (19)$$

其中 μ 为重整化质量($k=0$ 时的激发能隙)

$$\mu = \frac{\sqrt{4g_1 K^4 + g_2 K}}{\epsilon}. \quad (20)$$

由(15)和(16)式计算得到关于 K 的自洽方程

$$K = \left[\frac{\sqrt{4g_1 K^4 + g_2 K}}{1 + \sqrt{1 + 4g_1 K^4 + g_2 K}} \right]^{\beta^2/4\pi}. \quad (21)$$

由(21)式可以得到 AHC 模型的低温相图. 对于 $\beta^2 < 8\pi$, K 总是有非零解, 而 $\beta^2 > 8\pi$, 存在一个临界曲线 $g_2^c(\beta^2)$ ^[12], 当 $g_2 < g_2^c$ 时, K 只有零解, 当 $g_2 > g_2^c$ 时, K 还有一个非零解. 因此, 可在 g_2 与 β^2 参量空间将 AHC 模型的行为分为两相: 一个相为 $K \neq 0$, 即元激发谱存在能隙; 另一个相元激发谱不存在能隙, 对应 $K=0$. 在 spin-Peierls 系统中, 有能隙的相为二聚化相, 均匀反铁磁准长程序相为不存在能隙的相. 我们主要研究 spin-Peierls 系统在二聚化相的元激发谱. 给定二聚化参量 δ 的值, 由(14)(16)和(21)三式联立, 画出 $E_g - \alpha$ 的关系图, 从图 1 中可以看出, 随着阻挫 α 的增大, 基态能量逐渐降低. 由(20)(21)二式, 在图 2 中画出重整化质量 μ 与阻挫 α 的关系, 该图告诉我们能隙随着阻挫 α 的增大而增大.

4 AHC 模型中的束缚态

$$E_{\alpha}(k) = \frac{\langle \psi_{\alpha}(k) | H | \psi_{\alpha}(k) \rangle}{\langle \psi_{\alpha}(k) | \psi_{\alpha}(k) \rangle} = E_g + \frac{\int [\sqrt{(k+p)^2 + \mu^2} + \sqrt{(k-p)^2 + \mu^2} \mathbf{I}(\alpha(p))] \mathcal{F} dp}{\int d\mathcal{P}[\alpha(p)] \mathcal{F}}$$

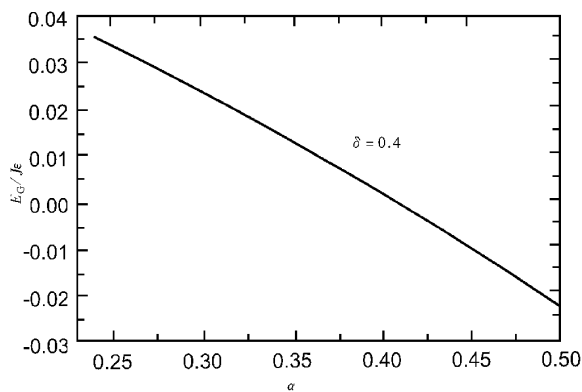


图 1 基态能量 E_g 与阻挫 α 的关系 J_e 为无量纲量

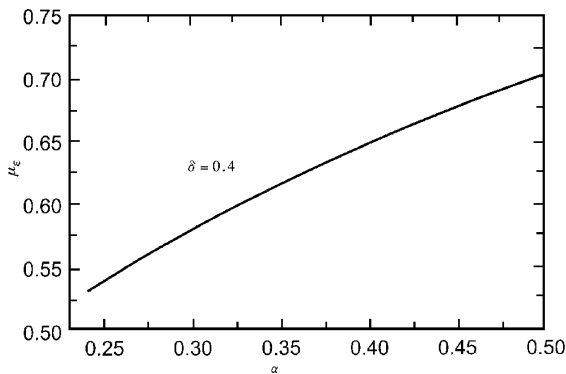


图 2 单粒子激发能隙 μ_e 与阻挫 α 的关系 J_e 为无量纲量

在文献 [3] 中, Ain 等在 CuGeO_3 的中子散射实验中观察到: 在二聚化相中, 基态与连续激发谱之间除了单粒子激发谱线以外, 还有一支离散的激发谱. 在文献 [4, 5] 中, Garrett 等在 $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ 材料中也观察到类似的现象, 这种谱线被称为束缚态. 这些实验现象激发了人们在理论上研究束缚态的兴趣, 因此, 我们将在玻色图象中进行研究. 类似于单粒子激发态波函数的构造, 取束缚态的态函数为^[13]

$$\psi_{\alpha}(k) = \int dp \alpha(p) b_{k+p}^+ b_{k-p}^+ |G_s\rangle, \quad (22)$$

其中系数 $\alpha(p)$ 将通过变分求出. 束缚态能量期待值为

$$= \frac{(\beta^2 \mu'^2 / 16\pi) \left[\int \alpha(p) dp \mathcal{A}((k+p)^2 + \mu^2)^{1/4} \mathcal{B}((k-p)^2 + \mu^2)^{1/4} \right]}{\int dp \mathcal{A}(p)^2} \quad (23)$$

束缚态能隙为 $m_{\mathcal{L}}(k) = E_{\mathcal{L}}(k) - E_g$ 式中 $\mu'^2 = \frac{16g_1}{\alpha^2} K^4 + \frac{g_2}{\alpha^2} K$, 系数 $\alpha(p)$ 由条件 $\frac{\partial E_{\mathcal{L}}(k)}{\partial \alpha(p)}$ 给出

$$\alpha(p) \propto \frac{[(k+p)^2 + \mu^2]^{1/4} [(k-p)^2 + \mu^2]^{1/4}}{\sqrt{(k+p)^2 + \mu^2} + \sqrt{(k-p)^2 + \mu^2} - m_{\mathcal{L}}(k)} \quad (24)$$

由(23)和(24)二式得到一个关于 $m_{\mathcal{L}}(k)$ 的方程

$$1 = \frac{\beta^2 \mu'^2}{16\pi} \int \frac{[\sqrt{(k+p)^2 + \mu^2} \sqrt{(k-p)^2 + \mu^2}]^{1/4} dp}{\sqrt{(k+p)^2 + \mu^2} + \sqrt{(k-p)^2 + \mu^2} - m_{\mathcal{L}}(k)} \quad (25)$$

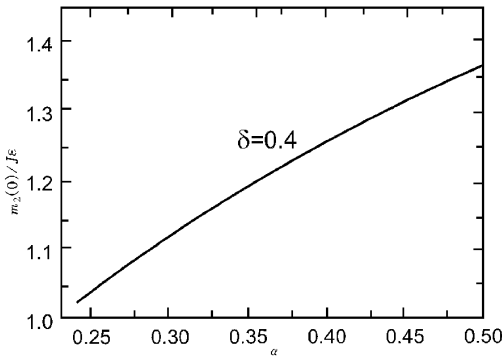


图3 束缚态能隙 $m_{\mathcal{L}}(0)$ 与阻挫 α 的关系 J_e 为无量纲量

我们考虑质心静止的情况($k=0$), 令 $\nu = \frac{m_{\mathcal{L}}(0)}{2\mu}$ 则

(25) 式变形为

$$\frac{8\pi}{\beta^2} = \frac{\mu'^2}{\mu^2} \frac{1}{2\nu} \frac{1}{\sqrt{1-\nu^2}} \left[\arcsin \nu + \frac{\pi}{2} \right] - \frac{\pi}{2} \quad (26)$$

其束缚能为

$$E_b = 2\mu - m_{\mathcal{L}}(0) \quad (27)$$

由(26)式, 我们画出束缚态能隙 $m_{\mathcal{L}}(0) - \alpha$ 的关系图(图3), 束缚态能隙会随着阻挫的增大而增大, 这一结论与文献[7]中的结论一致. 束缚能与阻挫的关系也在图4中给出, 此结论与文献[8]中由微扰理论所得结果相符.

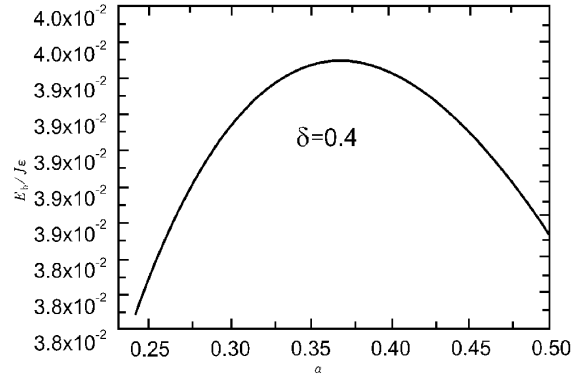


图4 束缚能 E_b 与阻挫 α 的关系 J_e 为无量纲量

5 关联函数

为了进一步讨论基态、单粒子激发态、双粒子束缚态的物理性质, 我们将考虑各个态的自旋-自旋关联函数. 关联函数的渐近行为在各个态是不相同的, 因此我们将分别讨论. 先通过玻色化和连续化, 得到 S^z 在玻色图象中的表达式

$$S^z = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{\partial \sqrt{\kappa_s} \phi(x)}{\partial x} + (-1)^{x/a} \frac{\sin \sqrt{4\pi\kappa_s} \phi(x)}{\pi} \quad (28)$$

基态的纵向关联函数

$$C_{\mathcal{L}}(x-y) = G_s |S^z(x)S^z(y)| G_s = \frac{a^2 \kappa_s}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\xi^2} \left[\frac{\xi}{x-y} \right]^{1/2} e^{-(x-y)\gamma\xi} - (-1)^{x-y/a} I \left[\frac{\xi}{x-y} \right]^{1/2} e^{-(x-y)\gamma\xi} \quad (29)$$

式中 I 是关于 μ 和 κ_s 的常量, 关联长度 $\xi = 1/\mu$. 从(29)式中, 我们可以看出自旋-自旋关联函数有二项, 一项是单调衰减项, 另一项是交替项, 当 $x-y \gg \xi$ 时, 关联函数中的两项都是以指数形式衰减的, 它描述了二聚化自旋单态基态的反铁磁短程关联.

单粒子激发态的纵向关联函数

$$C_1(k; ix-y) = \phi_1(k) |S^z(x)S^z(y)| \phi_1(k)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{a^2 \kappa_s}{\pi} \left\{ \left[\frac{\pi}{2} \right]^{1/2} \frac{1}{\xi^2} \left[\frac{\xi}{x-y} \right]^{1/2} e^{-(x-y)\mathcal{Y}\xi} + \frac{k^2 e^{-ik(x-y)}}{\sqrt{k^2 + \mu^2}} \right\} \\
&- (-1)^{x-y} \mathcal{Y} a \frac{1}{\pi^2} \left\{ I_0 \left[\frac{\xi}{x-y} \right]^{1/2} e^{-(x-y)\mathcal{Y}\xi} + I_1 (e^w - e^{-w}) \right. \\
&\left. - I_1 \cos k(x-y) \cdot (e^w + e^{-w}) \right\}, \quad (30)
\end{aligned}$$

式中 I_0 是关于 μ 和 κ_s 的常量, I_1 和 w 是关于 μ 和波矢 k 的常量. 从此式可以看出, 单粒子激发态的自旋-自旋纵向关联函数由单调衰减项、交替振荡项和平面波动项三部分构成, 当 $x-y \gg \xi$ 时, 对于给定波矢的平面波在空间传播不衰减, 描述了单粒子激发态的反铁磁长程序.

双粒子束缚态的纵向关联函数 $C_{\mathcal{Z}}(k; x-y) = \psi_{\mathcal{Z}}(k) | S^{\mathcal{Z}}(x) S^{\mathcal{Z}}(y) | \psi_{\mathcal{Z}}(k)$. 以下我们仅给出 $k \rightarrow 0$ 的结果:

$$C_{\mathcal{Z}}(k=0; x-y) = A(x-y) + (-1)^{x+y} \mathcal{Y} a \frac{1}{\pi^2} B(x-y), \quad (31)$$

其中

$$\begin{aligned}
A(x-y) &= \frac{a^2 \kappa_s^2 I_2}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\xi^2} \left[\frac{\xi}{x-y} \right]^{1/2} e^{-(x-y)\mathcal{Y}\xi} - \frac{3\pi}{2} \frac{\xi^2}{\nu^3} e^{-(x-y)\mathcal{Y}\xi} - \frac{\pi(x-y)\xi}{2\nu(1-\nu^2)\mathcal{Y}^{1/2}} e^{-(x-y)\mathcal{Y}\xi_1} \\
&+ \frac{\pi\xi^2(1-2\nu^2)}{\nu^3(1-\nu^2)} e^{-(x-y)\mathcal{Y}\xi_1} + \frac{(x-y)\xi^3}{2\nu^2} \left[\frac{\pi}{2} \right]^{1/2} \left[\frac{\xi}{x-y} \right]^{1/2} e^{-(x-y)\mathcal{Y}\xi} \\
&+ \frac{1}{\mu^4} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \nu^{2n-1} \Gamma\left(-n - \frac{1}{2}\right) -(x-y)\mathcal{Y}\xi_1 \mathbb{P}^{n+1} K_{n+1}[(x-y)\mathcal{Y}\xi_1], \quad (32)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B(x-y) &= I_3 \left[\frac{\xi}{x-y} \right]^{1/2} e^{-(x-y)\mathcal{Y}\xi} - I_4 \left\{ \frac{3\pi\xi^4}{2\nu^3} e^{-(x-y)\mathcal{Y}\xi} + \frac{(x-y)\xi^3}{2\nu(1-\nu^2)\mathcal{Y}^{1/2}} e^{-(x-y)\mathcal{Y}\xi_1} \right. \\
&- \frac{\pi(1-2\nu^2)\xi^4}{\nu^3(1-\nu^2)} e^{-(x-y)\mathcal{Y}\xi_1} - \frac{(x-y)\xi^3}{\nu^2} \left[\frac{\pi}{2} \right]^{1/2} \left[\frac{\xi}{x-y} \right]^{1/2} e^{-(x-y)\mathcal{Y}\xi} \\
&\left. + \frac{1}{\mu^4} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \nu^{2n-1} \Gamma\left(-n - \frac{1}{2}\right) -(x-y)\mathcal{Y}\xi_1 \mathbb{P}^{n+1} K_{n+1}[(x-y)\mathcal{Y}\xi_1] \right\}, \quad (33)
\end{aligned}$$

式中 I_2 是与 μ, ν 有关的常量; I_3 是与 μ, ν, κ_s 有关的常量; I_4 是关于 μ, κ_s 常量. 由于束缚态的存在, 引入另一关联长度 $\xi_1 = \frac{1}{\mu\sqrt{1-\nu^2}}$, 当 $x-y \gg \xi$ 和 ξ_1 时, 关联函数先以 ξ 衰减, 然后再以 ξ_1 衰减, 描述了短程关联效应. 该关联函数的渐近行为与基态关联函数的渐近行为类似, 基态是自旋单态, 由此我们认为该束缚态是自旋单态. 另外, 单粒子激发态关联函数的渐近行为不同于基态, 因此可认为该激发态为自旋三重态. 至此, 通过我们的计算, 在理论上得出 AHC 模型的激发谱行为, 该模型的基态, 单粒子态激发谱能隙受到阻挫的影响, 随着阻挫的增大, 其基态能量会减小, 相应的激发能隙会增大. 在单粒子激发态与双粒子连续激发态之间存在束缚态, 束缚态能隙的大小与阻挫参量 α 的数值有关, α 增大, 束缚态能隙也增大. Ain 等^[3]在实验上观察到 CuGeO_3 的双能隙激发谱定性地从我们的理论得到解释, 实

验上观察到的第一能隙是自旋单态基态到自旋三重态单粒子激发态的能隙, 第二能隙是自旋三重态单粒子激发态到自旋单态的双粒子束缚态之间的能隙. 从理论上证实束缚态的存在是 spin-Peierls 系统的一个特性.

6 结 论

本文我们用玻色化技术和量子自治方法研究了 AHC 模型, 通过自治方程的分析, 可知 spin-Peierls 系统分为两相, 即有能隙的二聚化相和无能隙的反铁磁准长程序相. 计算了 spin-Peierls 系统在二聚化相的基态、单粒子激发态、双粒子束缚态, 以及在各个态的自旋-自旋关联函数, 发现阻挫对 AHC 模型的基态能量, 基态到第一激发态的能隙有较大影响. 通过分析关联函数的渐近行为, 我们认为双粒子束缚态是自旋单态, 它存在于单粒子激发态与双粒子

连续激发谱之间,束缚态能隙和束缚能的大小也与
阻挫参量的数值有关.这一理论结果与 Ain 等^[3]的

实验现象相符.在理论上证明存在束缚态是 spin-
Peierls 材料的特征之一.

- [1] M. Hase ,I. Terasaki ,K. Uchinokura , *Phys. Rev. Lett.* , **70** (1993) ,3651.
- [2] K. Hirota *et al.* , *Phys. Rev. Lett.* , **73**(1994) ,736.
- [3] M. Ain , J. E. Lorenzo , L. P. Regnault , G. Dhalenne , A. Revcolevschi ,B. Hennion ,Th. Jolicoeur , *Phys. Rev. Lett.* , **78** (1997) ,1560.
- [4] A. W. Garrett ,S. E. Nagler ,D. A. Tennant ,B. C. Sales ,T. Barnes , *Phys. Rev. Lett.* , **79**(1997) ,745.
- [5] A. W. Garrett ,S. E. Nagler ,T. Barnes ,B. C. Sales , *Phys. Rev.* , **B55**(1997) ,3631.
- [6] K. Okamoto ,K. Nomura , *Phys. Lett.* , **A169**(1993) ,A33.
- [7] G. Bouzerar , A. P. Kampf ,G. I. Japaridze , *Phys. Rev.* , **B58** (1998) ,3117.
- [8] T. Barnes ,J. Riera ,D. A. Tennant , *Phys. Rev.* , **B59**(1999) , 11384.
- [9] E. Sorensen ,I. Affleck ,D. Augier ,D. Poilblanc , *Phys. Rev.* , **B58**(1998) ,14701.
- [10] G. S. Uhrig ,H. J. Schulz , *Phys. Rev.* , **B54**(1996) ,R9624.
- [11] A. Dobry ,D. Ibaceta , *Phys. Rev.* , **B59**(1999) ,8660.
- [12] G. M. Zhang ,H. Chen ,X. Wu , *Phys. Rev.* , **B43**(1991) ,13566.
- [13] Y. M. Zhang ,B. W. Xu ,W. F. Lu , *Phys. Rev.* , **B49**(1994) , 854.

THEORETICAL STUDY OF LOW-ENERGY ELEMENTARY EXCITATIONS IN SPIN-PEIERLS SYSTEM*

XU JING CHEN HONG ZHANG YU-MEI FENG WEI-GUO

(*Pohl Institute of Solid State Physics , Tongji University , Shanghai 200092 , China*)

(Received 21 January 2000)

ABSTRACT

By using bosonization technique and quantum self-consistent theory , we study the low-energy excitations of a spin-Peierls system. The ground state , one-particle excited state , two-particle bound state are calculated , and it is shown , as the frustration increases , the energy of the ground state decreases while the energy gap of the one- and two-particle states increases. By analysing the asymptotic behavior of the longitudinal spin correlation function , we obtain that the two-particle bound state has similar spin structures as those of the singlet ground state. Thus , we regard the bound state as a singlet state , which exists between the ground state and the two-particle continuous excited state. Our results are qualitatively in agreement with the experimental phenomena observed by Ain *et al.* It is shown that the existence of bound state is one of the spin-Peierls system 's characteristic features.

Keywords : spin-Peierls system , bound state , correlation function

PACC : 7120 , 0370 , 0550