第 53 卷 第 11 期 2004 年 11 月
1000-3290/2004/53(11)/3916-04

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.53, No.11, November, 2004

“禁忌”3-磁振子相互作用哈密顿项的有效性分析

史庆藩[1)]　李粮生[1)]　张　梅[2)]

[1)]（北京理工大学理学院，北京　100081）

[2)]（广东工业大学计算机学院，广州　510090）

（2004 年 2 月 25 日收到；2004 年 3 月 23 日收到修改稿）

考察磁有序晶体中局部存在的动量守恒而能量不守恒的 3-磁振子激励过程，通过幺正变换，把自旋波理论中不合理的 3-磁振子产生与湮没过程的哈密顿项构造为有效的 4-磁振子相互作用哈密顿项.

关键词：磁振子，哈密顿项，幺正变换

PACC：7530D，7540G

1. 引　　言

电磁波与物质相互作用的理论与应用研究历来是物理学领域的热点课题之一[1—3]．在理论方面，当研究放置于微波谐振腔中的磁有序晶体内磁振子激励理论时，会涉及描述交换相互作用和偶极子-偶极子相互作用的 3-磁振子激励过程[4]，其哈密顿量为

$$H^{(3)} = H_1^{(3)} + H_2^{(3)},$$

其中

$$H_1^{(3)} = \sum_{k_1,k_2,k_3}\left[\Psi_1(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3)b_{k_1}^{+}b_{k_2}^{+}b_{k_3}^{+} + \mathrm{H.c.}\right] \times \Delta(\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2+\boldsymbol{k}_3), \tag{1}$$

$$H_2^{(3)} = \sum_{k_1,k_2,k_3}\left[\Psi_2(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3)b_{k_1}^{+}b_{k_2}^{+}b_{k_3} + \mathrm{H.c.}\right] \times \Delta(\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_3), \tag{2}$$

式中 $\Delta(\boldsymbol{k})$是相应于动量守恒的 Kronecker 函数，即如果 $\boldsymbol{k}\neq 0$，则 $\Delta(\boldsymbol{k})=0$ 及 $\Delta(0)=1$．如果 Δ 因子不出现在(1)，(2)式中，则意味着自旋体系的准动量有可能不守恒，这出现在当晶体结构或表面有局部缺陷的情况[5]．在理想单晶内部，由于反射对称性，$H^{(3)}$ 可以被消去[6]．但是，当考虑非常接近表面，即距离表面只有几个晶格时，$H^{(3)}$ 在整个磁振子相互作用的分析中必须考虑．在理想单晶的条件下，设想内部的磁振子处处遵守准动量守恒和能量守恒，这时 $H^{(3)}$ 项已经得到了成功的处理[4]．然而，在有些条件下可能会出现局域的准动量守恒而能量不守恒的情况，例如当纯单晶受外界作用(如外力)而导致晶格本身发生畸变时，虽然在整个自旋波系统中能量守恒，但由于晶格的变动可能使得局部的 3-磁振子其准动量守恒而能量不守恒[7]，即对于正的能谱 $\varepsilon_k>0$，$H_1^{(3)}$ 表示其中一种可能的情况，即当 $\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2+\boldsymbol{k}_3=0$ 时，有可能 $\Delta\varepsilon(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3)\equiv\varepsilon_{k_1}+\varepsilon_{k_2}+\varepsilon_{k_3}\neq 0$；$H_2^{(3)}$ 表示另一种情况，即当 $\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_3=0$ 时，有可能 $\Delta\varepsilon(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3)\equiv\varepsilon_{k_1}+\varepsilon_{k_2}-\varepsilon_{k_3}\neq 0$．显然，这时的哈密顿项 $H^{(3)}=H_1^{(3)}+H_2^{(3)}$ 在自旋波动力学的理论研究方面呈现一个“禁忌”的形式．为了解决这一困难，本文通过幺正变换把以上的不合理 3-磁振子项 $H^{(3)}$ 消去，并构造相应的符合能量守恒和动量守恒定律的有效 4-磁振子相互作用项.

2. 自旋波理论中的幺正变换

在自旋波理论中，忽略 5 阶及更高阶的磁振子相互作用的一般哈密顿量表达式为

$$\begin{aligned} H = &\sum_k \varepsilon_k b_k^{+}b_k \\ &+ \sum_{k_1,k_2,k_3}\left[\Psi_1(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3)b_{k_1}^{+}b_{k_2}^{+}b_{k_3}^{+} + \mathrm{H.c.}\right] \\ &\times \Delta(\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2+\boldsymbol{k}_3) \\ &+ \sum_{k_1,k_2,k_3}\left[\Psi_2(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3)b_{k_1}^{+}b_{k_2}^{+}b_{k_3} + \mathrm{H.c.}\right] \\ &\times \Delta(\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_3) \\ &+ \frac{1}{2}\sum_{k_1,k_2,k_3,k_4}\Phi(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3,\boldsymbol{k}_4)b_{k_1}^{+}b_{k_2}^{+}b_{k_3}b_{k_4} \\ &\times \Delta(\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_3-\boldsymbol{k}_4), \end{aligned} \tag{3}$$

式中包含了(1),(2)两式所表达的禁忌 3-磁振子哈密顿项. 对此一般哈密顿量 H 进行幺正变换的一般形式可以写为[8]

$$\widetilde{H}(\theta) = e^{\theta R} H e^{-\theta R}, \tag{4}$$

式中 R 是反厄米算符($R^+ = -R$),θ 是形式参数. (4)式是方程

$$\frac{d}{d\theta}\widetilde{H}(\theta) = [R, \widetilde{H}(\theta)] \tag{5}$$

在初始条件 $\widetilde{H}(0) = H$ 下的解. 依据(4)式可以写出按照不同阶的算符组合进行展开的 $\widetilde{H}(\theta)$ 的最一般表达式,展开式中各项系数依赖于 θ,同时也可以写出反厄米算符 R 的最一般形式. 把 $\widetilde{H}(\theta)$ 和 R 代入(4)式,通过比较相似算符组合部分的系数就可以得到一系列线性偏微分方程,再结合初始条件,由这些方程可以得到变换后的哈密顿量 $\widetilde{H}(\theta)$. 为了消除 $\widetilde{H}(\theta)$ 中的不合理项,需要令三次项的系数(例如,对 $\theta = 1$)等于零. 同时这个条件确定了 R 的选择. 上述过程是在自旋哈密顿量对角化中被首先提出的[9,10],并成功用于磁激励物理学中[11].

3. 分析过程与结果

为了消除(1),(2)式所示的禁忌 3-磁振子哈密顿项,现在先写出依赖于参数 θ 的自旋波系统哈密顿量的一般形式如下:

$$\begin{aligned}\widetilde{H}(\theta) = & \sum_{k} \varepsilon_k b_k^+ b_k \\ & + \sum_{k_1,k_2,k_3} [\widetilde{\Psi}_1(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3;\theta) b_{k_1}^+ b_{k_2}^+ b_{k_3}^+ \\ & + \mathrm{H.c.}]\Delta(\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2+\boldsymbol{k}_3) \\ & + \sum_{k_1,k_2,k_3} [\widetilde{\Psi}_2(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3;\theta) b_{k_1}^+ b_{k_2}^+ b_{k_3} \\ & + \mathrm{H.c.}]\Delta(\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_3) \\ & + \frac{1}{2}\sum_{k_1,k_2,k_3,k_4}\Big(\widetilde{\Phi}_1(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3,\boldsymbol{k}_4;\theta) \\ & + \widetilde{\Phi}_2(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3,\boldsymbol{k}_4;\theta)\Big) \\ & \times b_{k_1}^+ b_{k_2}^+ b_{k_3} b_{k_4}\Delta(\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_3-\boldsymbol{k}_4).\end{aligned} \tag{6}$$

这里和以下我们忽略 5 阶及更高阶的磁振子算符组合. 因为我们考虑的是弱磁振子相互作用,所以相互作用的大小就必须随哈密顿量中磁振子算符的组合个数的增加而减小. 例如,对(6)式,$\varepsilon_k \gg \widetilde{\Psi}_1 \gg \widetilde{\Phi}/2$. 这种情况下,在相互作用项中产生与湮没算符的组合顺序并不那么重要. 如果改变算符的顺序,即 $b_{k_1}^+ b_{k_3} b_{k_2}^+ b_{k_4} = b_{k_1}^+ b_{k_2}^+ b_{k_3} b_{k_4} + b_{k_1}^+ b_{k_4}\Delta(\boldsymbol{k}_2 - \boldsymbol{k}_3)$,则附加项的作用相对于“裸”二次项小的可以忽略. 另外,容易证明下列磁振子算符组合之间的对易:

$$\Big[\underbrace{b^+\cdots b^+}_{n_1}\underbrace{b\ \cdots\ b}_{m_1},\quad \underbrace{b^+\cdots b^+}_{n_2}\underbrace{b\ \cdots\ b}_{m_2}\Big]$$

将导致一个有 $n_1 + m_1 + n_2 + m_2 - 2$ 个磁振子算符的组合形式,其中 $n_1 + n_2 - 1$ 个是生成算符,而 $m_1 + m_2 - 1$ 个是湮没算符. 例如,对 $n_2 = m_2 = 1$,则交换后的算符组合有 n_1 个生成算符和 m_1 个湮没算符. 这意味着如果想要从初始哈密顿量中消去

$$\chi \underbrace{b^+\cdots b^+}_{n_1}\underbrace{b\ \cdots\ b}_{m_1} + \mathrm{H.c.}$$

形式的项,则应当选择

$$R_\chi \underbrace{b^+\cdots b^+}_{n_1}\underbrace{b\ \cdots\ b}_{m_1} - \mathrm{H.c.}$$

形式的反厄米算符. 所以为了消去(6)式中的“禁忌”3-磁振子哈密顿项 $\widetilde{H}_1^{(3)}$,可以利用反厄米算符

$$\begin{aligned}\bar{R}_1 = & \sum_{q_1,q_2,q_3}[R_1(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_3;\theta) b_{q_1}^+ b_{q_2}^+ b_{q_3}^+ - \mathrm{H.c.}] \\ & \times \Delta(\boldsymbol{q}_1+\boldsymbol{q}_2+\boldsymbol{q}_3)\end{aligned} \tag{7}$$

来进行幺正变换. 计算对易关系:

$$\begin{aligned}&[R_1(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_3;\theta) b_{q_1}^+ b_{q_2}^+ b_{q_3}^+ - \mathrm{H.c.}, \varepsilon_k b_k^+ b_k], \\ &[R_1(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_3;\theta) b_{q_1}^+ b_{q_2}^+ b_{q_3}^+ - \mathrm{H.c.}, \\ &\widetilde{\Psi}_1(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3;\theta) b_{k_1}^+ b_{k_2}^+ b_{k_3}^+ + \mathrm{H.c.}],\end{aligned}$$

由(5)式得到

$$\begin{aligned}&\frac{d}{d\theta}\widetilde{\Psi}_1(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3;\theta) \\ &= -(\varepsilon_{k_1}+\varepsilon_{k_2}+\varepsilon_{k_3}) R_1(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3), \\ &\frac{d}{d\theta}\widetilde{\Phi}_1(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3;\theta) \\ &= -2R_1(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,-\boldsymbol{k}_1,-\boldsymbol{k}_2) \\ &\quad\times \widetilde{\Psi}_1^*(\boldsymbol{k}_3,\boldsymbol{k}_4,-\boldsymbol{k}_3,-\boldsymbol{k}_4;\theta) \\ &\quad- 2R_1^*(\boldsymbol{k}_3,\boldsymbol{k}_4,-\boldsymbol{k}_3,-\boldsymbol{k}_4) \\ &\quad\times \widetilde{\Psi}_1(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,-\boldsymbol{k}_1,-\boldsymbol{k}_2;\theta).\end{aligned} \tag{8}$$

考虑初始条件 $\widetilde{\Psi}_1(\theta=0) = \Psi_1$,$\widetilde{\Phi}(\theta=0) = \Phi$,并且限定 $\widetilde{\Psi}_1(\theta=1) = 0$,解以上方程组,可得

$$R_1(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_3) = \frac{\Psi_1(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_3)}{(\varepsilon_{q_1}+\varepsilon_{q_2}+\varepsilon_{q_3})}, \tag{9}$$

以及

$$\begin{aligned}&\widetilde{\Phi}_1(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_4,\boldsymbol{k}_4;1) \\ &= -\Psi_1(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,-\boldsymbol{k}_1,-\boldsymbol{k}_2)\Psi_1^*(\boldsymbol{k}_3,\boldsymbol{k}_4,-\boldsymbol{k}_3,-\boldsymbol{k}_4)\end{aligned}$$

$$\times\left(\frac{1}{\varepsilon_{k_1}+\varepsilon_{k_2}+\varepsilon_{-k_1-k_2}}+\frac{1}{\varepsilon_{k_3}+\varepsilon_{k_4}+\varepsilon_{-k_3-k_4}}\right). \tag{10}$$

(10)式即为(1)式所表述的'禁忌'3-磁振子的等效4-磁振子相互作用哈密顿项. 同样,为了消去(2)式表述的'禁忌'3-磁振子哈密顿项,利用反厄米算符

$$\bar{R}_2=\sum_{q_1,q_2,q_3}\left[R_2(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_3)b_{q_1}^{+}b_{q_2}^{+}b_{q_3}-\mathrm{H.c.}\right]\times\Delta(\boldsymbol{q}_1+\boldsymbol{q}_2-\boldsymbol{q}_3)$$

来进行幺正变换. 在进行了类似上面的计算后,得到

$$\bar{R}_2(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_3)=\frac{\Psi_2(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_3)}{\varepsilon_{q_1}+\varepsilon_{q_2}-\varepsilon_{q_3}},$$

相应的'禁忌'3-磁振子项的等效4-磁振子相互作用大小为

$$\begin{aligned}
&\tilde{\Phi}_2(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3,\boldsymbol{k}_4;1)\\
&=\Psi_2(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2)\Psi_2^{*}(\boldsymbol{k}_3,\boldsymbol{k}_4,\boldsymbol{k}_3+\boldsymbol{k}_4)\\
&\quad\times\left(\frac{1}{\varepsilon_{k_1}+\varepsilon_{k_2}-\varepsilon_{k_1+k_2}}+\frac{1}{\varepsilon_{k_3}+\varepsilon_{k_4}-\varepsilon_{k_3+k_4}}\right)\\
&\quad-\Psi_2(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_3-\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_4)\Psi_2^{*}(\boldsymbol{k}_3,\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_4,\boldsymbol{k}_2)\\
&\quad\times\left(\frac{1}{\varepsilon_{k_1}+\varepsilon_{k_3-k_1}-\varepsilon_{k_3}}+\frac{1}{\varepsilon_{k_4}+\varepsilon_{k_2-k_4}-\varepsilon_{k_2}}\right)\\
&\quad-\Psi_2(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_4-\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_4)\Psi_2^{*}(\boldsymbol{k}_3,\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_3,\boldsymbol{k}_2)\\
&\quad\times\left(\frac{1}{\varepsilon_{k_1}+\varepsilon_{k_4-k_1}-\varepsilon_{k_4}}+\frac{1}{\varepsilon_{k_3}+\varepsilon_{k_2-k_3}-\varepsilon_{k_2}}\right)\\
&\quad-\Psi_2(\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3-\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3)\Psi_2^{*}(\boldsymbol{k}_4,\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{k}_4,\boldsymbol{k}_1)\\
&\quad\times\left(\frac{1}{\varepsilon_{k_2}+\varepsilon_{k_3-k_2}-\varepsilon_{k_3}}+\frac{1}{\varepsilon_{k_4}+\varepsilon_{k_1-k_4}-\varepsilon_{k_1}}\right)\\
&\quad-\Psi_2(\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_4-\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_4)\Psi_2^{*}(\boldsymbol{k}_3,\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{k}_3,\boldsymbol{k}_1)\\
&\quad\times\left(\frac{1}{\varepsilon_{k_2}+\varepsilon_{k_4-k_2}-\varepsilon_{k_4}}+\frac{1}{\varepsilon_{k_3}+\varepsilon_{k_1-k_3}-\varepsilon_{k_1}}\right).
\end{aligned}\tag{11}$$

以上表达式满足 $\varepsilon_k\gg\Psi\Psi^{*}/\Delta\varepsilon$.

考虑到(3)式中初始的'裸'4-磁振子相互作用大小为$\Phi/2$,则总的4-磁振子相互作用振幅大小为

$$\Phi(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3,\boldsymbol{k}_4)/2+\tilde{\Phi}_1(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3,\boldsymbol{k}_4;1)+\tilde{\Phi}_2(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3,\boldsymbol{k}_4;1). \tag{12}$$

4. 结 论

本文通过幺正变换证明了在实际的磁有序晶体中局部存在的动量守恒而能量不守恒的'禁忌'3-磁振子相互作用哈密顿项的有效性,得到了其等效4-磁振子相互作用振幅大小的表达形式. 以 $H_1^{(3)}$ 为例,可以用图1的物理图像来表示这种处理过程. 图1(a)表示在晶体内部可能出现的局域准动量守恒而能量不守恒的情况,即当 $\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2+\boldsymbol{k}_3=0$ 时,有可能 $\Delta\varepsilon(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3)\equiv\varepsilon_{k_1}+\varepsilon_{k_2}+\varepsilon_{k_3}\neq0$. 对于这种在自旋波动力学的理论中'禁忌'的形式,本文通过幺正变换把其不合理的3-磁振子哈密顿项 $H_1^{(3)}$ 消去,并构造出相应的符合能量守恒和动量守恒定律的有效4-磁振子相互作用哈密顿项,如图1(b)所示.

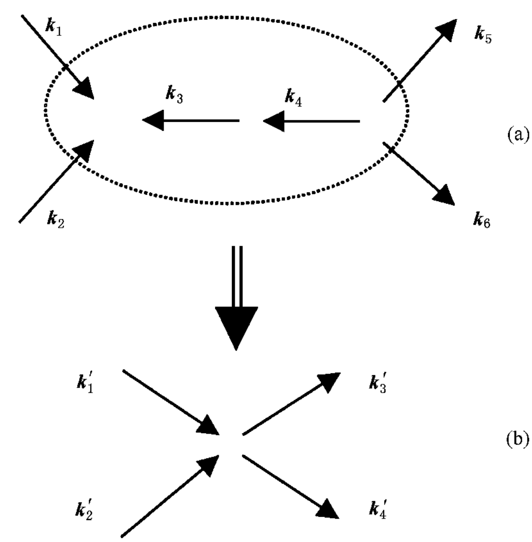

图1 构造有效4-磁振子相互作用哈密顿项的物理过程

[1] Xu Y, Xue D S, Zuo W and Li F S 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2896 (in Chinese) [徐 岩、薛得胜、左 维、李发伸 2003 物理学报 **52** 2896]

[2] Liu G Q *et al* 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 997 (in Chinese) [刘公强等 1998 物理学报 **47** 997]

[3] Wu Z, Wang Q, Zhou J M, Li C F and Shi J L 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1612 (in Chinese) [吴 中、王 奇、周炯昴、李春芳、施解龙 2002 物理学报 **51** 1612]

[4] Rado G T and Suhl H 1963 *Magnetism*, V.1: *Magnetic Ions in Insulators Their Interactions Resonances, and Optical Properties* (New

York: Academic) p168

[5] Sparks M, Loudon R and Kittel C 1961 *Phys. Rev.* **122** 791

[6] Majlis N 2000 *The Quantum Theory of Magnetism* (Singapore: World Scientific)

[7] Ye H Q 1991 *Structure and Characteristic of Material Interface* (Beijing: Science Press) chap 5 (in Chinese) [叶恒强 1991 材料界面结构与特性(北京:科学出版社) 第五章]

[8] Wagner M 1986 *Unitary Transformations in Solid State Physics, in: Modern Problems in Condensed Matter Sciences* vol 15 eds V M Agranovich and A A Maradudin (Amsterdam: North-Holland)

[9] Safonov V L 1983 *Phys. Lett.* A **97** 164

[10] Safonov V L and Farzetdinova R M 1991 *J. Magn. Magn. Mater.* **98** L235

[11] Safonov V L 1992 *Phys. State Solidi* (b) **174** 223

Effectivity of Hamiltonian terms of "forbidden" 3-magnon interaction

Shi Qing-Fan[1)]   Li Liang-Sheng[1)]   Zhang Mei[2)]

[1)] (*School of Science, Beijing Institute of Technology, Beijing* 100081, *China*)

[2)] (*School of Computers, Guangdong Institute of Technology, Guangzhou* 510090, *China*)

(Received 25 February 2004; revised manuscript received 23 March 2004)

Abstract

Analyzing the effectivity of "forbidden" 3-magnon processes locally excitated in magneto-ordered crystals, we successfully constructed the corresponding effective 4-magnon interaction terms by the unitary transformations.

Keywords: magnon, Hamiltonian term, unitary transformation

PACC: 7530D, 7540G