

自旋为 1 的 Easy-plane Heisenberg 模型中的新方法

周 磊

(复旦大学李政道物理综合实验室, 复旦大学物理系, 上海 200433)

陶 瑞 宝

(复旦大学物理系, 上海 200433)

(1994 年 4 月 20 日收到)

引入一种新的变换方法(特征角自旋算子变换)探讨了自旋为 1 的 Easy-plane Heisenberg 铁磁体 $(H = -J \sum_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + D \sum_i (S_i^x)^2 - h \sum_i S_i^z)$ 的自旋波行为, 计算了体系的基态能量, 自发磁化强度和元激发谱, 并与其他方法和数值计算结果作了比较.

PACC: 7530G; 7530D

1 引 言

在自旋大于 1/2 的磁性体系中, 各向异性晶体场 (crystal-field anisotropy) 对其热力学性质有很重要的作用^[1-4]. 本文将考虑含有形为 $D \sum_i (S_i^x)^2 (D > 0)$ 的单离子各向异性相互作用 (single-ion anisotropy) 的自旋为 1 的铁磁体系 (easy-plane spin-one ferromagnet). 各向异性晶体场的非对角作用使得此种体系中的自旋波变得很不平凡, 它的基态与 Heisenberg 各向同性铁磁体的基态有很大的不同 (后者是使自旋沿轴平行排列). 因此对此种体系直接使用 Holsteine-Primakoff 变换 (H-P 变换) 是不合理的, 结果是 $k = 0$ 模式激发态能量将是虚数^[5]. 1974 年, Lindgard 等^[6]提出了 the matching of matrix elements (MME) 方法解决了这个问题. 从那以后, 人们用 MME 讨论了这种体系各种各样的性质^[5,7-9]. 1990 年, Sudha Gopalan 和 Cottam^[10]用格林函数方法讨论了表面自旋波在此种体系中的传播. 1991 年和 1993 年, Lo, Pan, Wang 等^[11,12]采用 coupled-cluster 方法数值计算了它的自发磁化强度在零温和常温下随各向异性晶体场的变化情况, 并讨论了它的相变问题.

回顾这些工作, 我们发现: MME 在处理元激发谱等问题上的确很成功, 但所得的自发磁化强度却与数值计算有较大出入. 出于上述考虑, 本文引入一套新的变换方法——特征角自旋算子变换 (CASOT) 来解决这个问题. 此方法是这样的: 考虑到 Heisenberg 交换项与 single-ion 各向异性项的竞争将引起基态自旋指向的某种意义上的“转动”, 期

望通过 CASOT 能描述这种“转动”。经过仔细计算,得到了与 MME 一样的元激发谱,比 MME 更加合理的基态能量,自发磁化强度。

哈密顿量取作

$$H = -J \sum_{(i,j)} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + D \sum_i (S_i^x)^2 - h \sum_i S_i^z, \quad (1)$$

其中 (i,j) 是指对最近邻格点对求和; i 的求和遍及整个晶体的 N 个格点; $S = 1$; $D > 0$ 是各项异性场参量; h 是辅助外磁场,唯一的作用是帮助我们确定自发磁化强度,在计算的最后将被置为零。

由角动量对易关系,上式可以改写为

$$H = -J \sum_{(i,j)} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) - h \sum_i S_i^z + (D/4) \sum_i (S_i^+ S_i^+ + S_i^- S_i^- + S_i^z S_i^z + S_i^z S_i^z). \quad (2)$$

2 特征角自旋算子变换 (CASOT)

根据上面的讨论,引入特征角自旋算子变换 (CASOT)

$$S_i^+ = \cos \theta \cdot \tilde{S}_i^+ + \sin \theta \cdot \tilde{S}_i^- \exp(i\pi \tilde{S}_i^z), \quad (3)$$

$$S_i^- = \cos \theta \cdot \tilde{S}_i^- + \sin \theta \exp(-i\pi \tilde{S}_i^z) \cdot \tilde{S}_i^+, \quad (4)$$

$$S_i^z = (1/2)[S_i^+, S_i^-]_-, \quad (5)$$

其中特征角自旋算子 $(\tilde{S}^-, \tilde{S}^+, \tilde{S}^z)$ 满足通常的角动量对易关系; θ 是特征角,将在下面的计算中自洽确定。下面将证明 CASOT 不改变原算子 (S^-, S^+, S^z) 的角动量对易关系。考虑到 $S = 1$, 在 $\tilde{S}^z$ 对角化空间中,算子 S^+ 和 $\tilde{S}^+$ 的矩阵表示分别为

$$S^+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} \cos \theta & 0 \\ -\sqrt{2} \sin \theta & 0 & \sqrt{2} \cos \theta \\ 0 & \sqrt{2} \sin \theta & 0 \end{pmatrix}, \quad (6)$$

$$\tilde{S}^+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

其中矩阵元的定义为

$$S_{m,n}^+ = \langle m | S^+ | n \rangle, \quad (8)$$

$$\tilde{S}_{m,n}^+ = \langle m | \tilde{S}^+ | n \rangle, \quad (9)$$

而态矢量 $|m\rangle (m = 1, 2, 3)$ 是 $\tilde{S}^z$ 的本征完备集。本征值分别为 1, 0 和 -1。

不难证明,矩阵 S^+ 和 $\tilde{S}^+$ 有如下关系:

$$S^+ = \tau^+ \tilde{S}^+ \tau, \quad (10)$$

其中

$$\tau = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (11)$$

$$\tau^+ \tau - \tau \tau^+ = I. \quad (12)$$

上式表明由矩阵 S^+ 到 $\tilde{S}^+$ 的变换为么正变换。由于算子的对易关系与它们的矩阵表示的关系是一致的,而么正变换不影响矩阵的对易关系,所以由于算子 $(\tilde{S}^-, \tilde{S}^+, \tilde{S}^z)$ 满足角动量对易关系,算子 (S^-, S^+, S^z) 一定也满足角动量对易关系。由上面的讨论可知,这套变换是合理的。而且,对(1)式等号右端第二、三项实施变换,发现(省略下标)

$$\begin{aligned} & D(S^z)^2 - \hbar S^z \\ &= (D/4) \sin 2\theta [\tilde{S}^z \exp(i\pi \tilde{S}^z) + \text{H.c.}] \\ &+ [D/4 - (\hbar/2) \cos 2\theta] \tilde{S}^+ \tilde{S}^- + [D/4 + (\hbar/2) \cos 2\theta] \tilde{S}^- \tilde{S}^+ \\ &+ \{[(D/4)(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta \exp(-i2\pi \tilde{S}^z)) \\ &+ (\hbar/2) \sin 2\theta \exp(-i\pi \tilde{S}^z)] \tilde{S}^+ \tilde{S}^+ + \text{H.c.}\}. \end{aligned} \quad (13)$$

当

$$\tan \theta = \frac{D/2}{\hbar + \sqrt{(D/2)^2 + \hbar^2}} \quad (14)$$

时, (13)式等号右端大括弧中的项为零(这可以由写出上式的矩阵形式而得到证明)。因此 CASOT 可以严格对角哈密顿中的单粒子相互作用部分,而 Heisenberg 交换相互作用被期望与 $-\hbar \sum_i S_i^z$ 项有相似的作用趋势——都是使自旋沿定轴平行排列。正是这个事实启发我们对哈密顿使用 CASOT, 由使基态能量最小来决定 θ , 以此来讨论自旋为 1 的 easy-plane 铁磁体中的自旋波等问题。事实上,后面的计算表明, CASOT 可以消去大部分非对角项,在此基础上作 H-P 变换将能克服引言中提及的困难。

3 计 算

把(3)–(5)式代入(2)式中,可以得到以 $(\tilde{S}^-, \tilde{S}^+, \tilde{S}^z)$ 表示的哈密顿为

$$\begin{aligned} H &= -J \sum_{(i,j)} H_{ij}^1 + \sum_i H_i^2, \\ H_{ij}^1 &= [\cos \theta \cdot \tilde{S}_i^+ + \sin \theta \cdot \tilde{S}_i^- \exp(i\pi \tilde{S}_i^z)] \times [\cos \theta \tilde{S}_j^- \\ &+ \sin \theta \exp(-i\pi \tilde{S}_j^z) \cdot \tilde{S}_j^+] + [\cos 2\theta \cdot \tilde{S}_i^z \\ &- \sin \theta \cos \theta ((\tilde{S}_i^+)^2 \exp(-i\pi \tilde{S}_i^z) + \exp(i\pi \tilde{S}_i^z) \cdot (\tilde{S}_i^-)^2)] \\ &\times [\cos 2\theta \cdot \tilde{S}_j^z - \sin \theta \cos \theta ((\tilde{S}_j^-)^2 \exp(-i\pi \tilde{S}_j^z) \\ &+ \exp(i\pi \tilde{S}_j^z) \cdot (\tilde{S}_j^+)^2)], \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} H_i^2 &= (D/4)[(\cos \theta \cdot \tilde{S}_i^+ + \sin \theta \cdot \tilde{S}_i^- \exp(i\pi \tilde{S}_i^z))(\cos \theta \cdot \tilde{S}_i^- \\ &+ \sin \theta \exp(-i\pi \tilde{S}_i^z) \cdot \tilde{S}_i^+) + (\cos \theta \cdot \tilde{S}_i^+ + \sin \theta \cdot \tilde{S}_i^- \exp(i\pi \tilde{S}_i^z))^2 \\ &+ \text{H.c.}] - \hbar[\cos 2\theta \cdot \tilde{S}_i^z - \sin \theta \cos \theta ((\tilde{S}_i^+)^2 \exp(-i\pi \tilde{S}_i^z) \\ &+ \exp(i\pi \tilde{S}_i^z) \cdot (\tilde{S}_i^-)^2)]. \end{aligned} \quad (16)$$

“转动”以后,基态 $|0\rangle$ 应满足

$$\tilde{S}_i^z |0\rangle = |0\rangle, \tilde{S}_i^+ |0\rangle = 0. \quad (17)$$

引入 H-P 变换, 将自旋算子变换成玻色算子, 这在讨论低激发态时是有效的.

$$\tilde{S}_i^z \rightarrow 1 - a_i^\dagger a_i, \quad (18)$$

$$\tilde{S}_i^+ \rightarrow \sqrt{2} \sqrt{1 - (a_i^\dagger a_i/2)} a_i, \quad (19)$$

$$\tilde{S}_i^- \rightarrow \sqrt{2} a_i^\dagger \sqrt{1 - (a_i^\dagger a_i/2)}. \quad (20)$$

将上述变换代入(15),(16)式, 就能得到相应的哈密顿量. 写出代换的每一步是非常繁琐而无意义的, 因此下面只给出其中某些项的推导过程. 对照(13)与(16)式可知, H_i^z 中的一项正比于

$$\begin{aligned} & \tilde{S}_i^z \exp(i\pi \tilde{S}_i^z) + \exp(-i\pi \tilde{S}_i^z) \cdot \tilde{S}_i^z \\ &= -\exp(-i\pi a_i^\dagger a_i) + a_i^\dagger a_i \exp(-i\pi a_i^\dagger a_i) \\ &= \exp(i\pi a_i^\dagger a_i) + \exp(i\pi a_i^\dagger a_i) a_i^\dagger a_i \\ &= -2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\pi)^{2n}}{(2n)!} (a_i^\dagger a_i)^{2n} + 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\pi)^{2n}}{(2n)!} (a_i^\dagger a_i)^{2n+1}. \end{aligned} \quad (21)$$

根据维克定理 (Wick's theorem),

$$(a_i^\dagger a_i)^n = N[(a_i^\dagger a_i)^{2n}] + (n-1)! N[(a_i^\dagger a_i)^{2n-2}] + \cdots + a_i^\dagger a_i, \quad (22)$$

其中 $N[AB \cdots C]$ 是算子 $A, B \cdots C$ 的正规乘积. 因此

$$\tilde{S}_i^z \exp(i\pi \tilde{S}_i^z) + \exp(-i\pi \tilde{S}_i^z) \tilde{S}_i^z = -2 + 2a_i^\dagger a_i + \cdots \quad (23)$$

还有如 $(\tilde{S}_i^+)^2$ 这样的项有些麻烦, 由(16)式, H_i^z 中的一项正比于

$$\begin{aligned} & (\tilde{S}_i^+)^2 \exp(-i\pi \tilde{S}_i^z) + \exp(i\pi \tilde{S}_i^z) \cdot (\tilde{S}_i^-)^2 \\ &= \exp(-i\pi \tilde{S}_i^z) \cdot (\tilde{S}_i^+)^2 + (\tilde{S}_i^-)^2 \exp(i\pi \tilde{S}_i^z) \\ &= \left(\sum_n C_n (a^+)^n a^n \right) \cdot \left(\sum_m D_m (a^+)^m a^{m+2} \right) + \text{H.c.}, \end{aligned} \quad (24)$$

其中 C_n, D_m 分别 $\exp(-i\pi \tilde{S}^z)$ 与 $(\tilde{S}^+)^2$ 的 N 乘积展开的系数 (为简便起见, 下面均省略下标 i). 由维克定理, $(a^+)^n a^n \cdot (\tilde{S}^+)^2$ 的最低级贡献为 $(a^+)^n a^n$ 与 $(\tilde{S}^+)^2$ 中的 $(a^+)^m \cdot a^{m+2} (m \geq n)$ 项的 N 乘积展开的最低级 $-(a^+)^n a^{n+2}$ 项, 所以若结果只保留到 a, a^+ 的二次项, (24) 式中的 $\exp(-i\pi \tilde{S}^z)$ 只需考虑常数项 (即 $n=0$), $(\tilde{S}^+)^2$ 只需考虑平方项 (即 $m=0$). 先计算 $(\tilde{S}^+)^2$

$$\begin{aligned} \tilde{S}^+ &= \sqrt{2} [a + (\sqrt{2}/2 - 1)a^+ a^2 \\ &\quad + (1/2 - \sqrt{2}/2)(a^+)^2 a^3 + \cdots], \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} (\tilde{S}^+)^2 &= 2 [a^2 + (\sqrt{2}/2 - 1)(a a^+ a^2 + a^+ a^3) \\ &\quad + (\sqrt{2}/2 - 1)^2 a^+ a^2 a^+ a^2 + \cdots]. \end{aligned} \quad (26)$$

(25) 式是(19)式的 N 乘积展开^[6]. 由维克定理容易得到, (26) 式中只有 a^2 和 $a a^+ a^2$ 项有 a, a^+ 的二次项的贡献,

$$\begin{aligned} (\tilde{S}^+)^2 &= 2[a^2 + (\sqrt{2}/2 - 1)a^2 + \cdots] \\ &= \sqrt{2} a^2 + \cdots \end{aligned} \quad (27)$$

将上式代入(24)式,可得

$$\begin{aligned} & \exp(-i\pi\tilde{S}_i^z) \cdot (\tilde{S}_i^+)^2 + (\tilde{S}_i^-)^2 \exp(i\pi\tilde{S}_i^z) \\ &= (-1 + \dots)(\sqrt{2} a^2 + \dots) + (\sqrt{2} (a^+)^2 + \dots)(-1 + \dots) \\ &= -\sqrt{2} ((a^+)^2 + a^2) + \dots \end{aligned} \quad (28)$$

其他项依此不难推得。这样,保留到 a^+, a 的平方项(按 N 乘积展开),相应的哈密顿量为

$$H = H_0 + H_2 + \dots, \quad (29)$$

$$H_0 = (-JZ \cos^2 2\theta - (D/2) \sin 2\theta + D/2 - h \cos 2\theta)N, \quad (30)$$

$$\begin{aligned} H_2 = & -J \sum_{(i,j)} [2a_i^+ a_j - \cos^2 2\theta (a_i^+ a_j + a_i a_j^+) \\ & - \sin 2\theta (a_i a_j + a_i^+ a_j^+) + (\sqrt{2}/4) \sin 4\theta (a_i^2 + a_j^2 + \text{H.c.})] \\ & + \sum_i [(D/2 + (D/2) \sin 2\theta + h \cos 2\theta) a_i^+ a_i \\ & \times ((\sqrt{2}/4) D \cos 2\theta - (\sqrt{2}/2) h \sin 2\theta) (a_i^2 + \text{H.c.})], \end{aligned} \quad (31)$$

其中 H_0 是平均场理论 (MF) 给出的结果。对算子 a^+, a 作通常的傅里叶展开

$$a_i = (1/\sqrt{N}) \sum_k \exp(ik \cdot r_i) a_k, \quad (32)$$

$$a_i^+ = (1/\sqrt{N}) \sum_k a_k^+ \exp(-ik \cdot r_i), \quad (33)$$

对 k 的求和遍及整个倒格子空间的第一布里渊区, r_i 为 i 点的格矢。可得

$$H = H_0 + \sum_k A_k a_k^+ a_k + \sum_k B_k (a_k^+ a_{-k}^+ + a_k a_{-k}), \quad (34)$$

系数分别为

$$A_k = 2JZ(\cos^2 2\theta - \gamma_k) + (D/2) \sin 2\theta + D/2 + h \cos 2\theta, \quad (35)$$

$$B_k = (\sqrt{2}/2)[-JZ \sin 4\theta + (D/2) \cos 2\theta - h \sin 2\theta] + JZ \sin 2\theta \gamma_k, \quad (36)$$

其中

$$\gamma_k = (1/Z) \sum_{\delta} \exp(ik \cdot r_{\delta}). \quad (37)$$

(31)式中的 Z 是最近邻格点数。而对 δ 的求和遍及 Z 个最近邻格点。上式可以由 Bogolyubov 变换

$$a_k^+ = U_k \alpha_k^+ - V_k \alpha_{-k}, \quad (38)$$

$$a_k = U_k \alpha_k - V_k \alpha_{-k}^+, \quad (39)$$

对角化。系数 U_k, V_k 由使 H 中的非对角项为零确定。于是

$$H = E_0 + \sum_k \epsilon_k \alpha_k^+ \alpha_k, \quad (40)$$

$$E_0 = H_0 + \sum_k [-A_k(\theta)/2 + (1/2)\sqrt{A_k^2 - 4B_k^2}], \quad (41)$$

$$\epsilon_k = \sqrt{A_k^2 - 4B_k^2}. \quad (42)$$

由作用量原理, θ 角应由使能量 E 最小而确定。因此, 在参数 $d = D/4JZ$ 取值不同的情况下, 分别计算了能量 E_0 随 $\sin 2\theta$ 的变化情况, 从中选出使 E_0 最小的 θ 值作为特征角的取值。经过上述计算, 发现特征角 θ_0 总满足方程

$$\sin 2\theta_0 = d = D/4JZ. \quad (43)$$

作为例子, $d = 0.1$ 和 $d = 0.6$ 的条件下, 能量随 $\sin 2\theta$ 的变化分别画在图 1 和图 2 中。

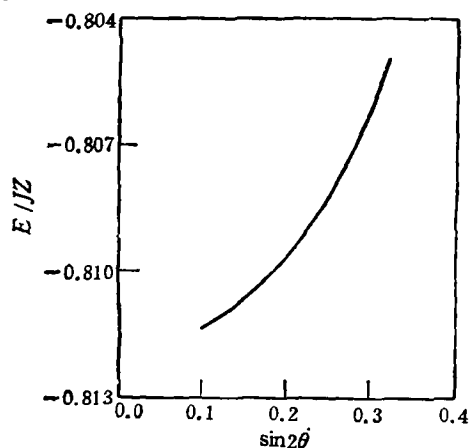


图 1 基态能量作为 $\sin 2\theta$ 的函数 $d = 0.1$

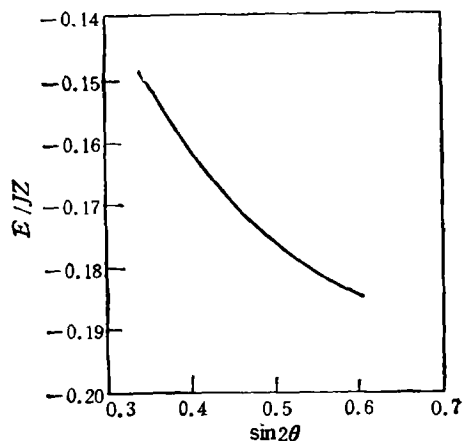


图 2 基态能量作为 $\sin 2\theta$ 的函数 $d = 0.6$

容易发现使得能量最小的 $\sin 2\theta_0$ 的值分别为 0.1 和 0.6。

事实上, 这并非一个巧合。下面给出一个大致的说明。定义

$$\begin{aligned} \Delta(\theta) &= (1/2JZ)^2 [A_1^2(\theta) - 4B_1^2(\theta)]|_{\lambda=0} \\ &= (d + \sin 2\theta(d - \sin 2\theta))^2 - (\sin 2\theta + \sqrt{2} \cos 2\theta \\ &\quad \cdot (d - \sin 2\theta))^2. \end{aligned} \quad (44)$$

由方程(42),(43)可知

$$\Delta(\theta_0) = 0, \quad (45)$$

$$e_0 = 2JZ\sqrt{\Delta(\theta)}. \quad (46)$$

显然

$$\Delta(\theta) \geq 0 \quad (47)$$

是对本计算的一个限制。

为了考察 $E_0(\theta)$ 在 θ_0 点附近的性质, 对 $\Delta(\theta)$, $(1/2JZ)E_0(\theta)$ 分别计算在 $\theta_0 = (1/2)\sin^{-1}d$ 点的微分, 得到两个 d 的函数

$$\begin{aligned} D(d) &= \frac{d}{d\theta} \Delta(\theta)|_{\theta_0} \\ &= -2d(d+1)\sqrt{1-d^2} + 2\sqrt{2}d(1-d^2), \\ F(d) &= (1/2JZ) \frac{d}{d\theta} E_0(\theta)|_{\theta_0} \end{aligned} \quad (48)$$

$$= (1/2N) \sum_k \left[2d\sqrt{1-d^2} + \frac{-2d\sqrt{1-d^2}(1-\gamma_k+d-\sqrt{2(1-d^2)}\gamma_k+\gamma_k^2)}{\sqrt{(1-\gamma_k+d)^2-(d\gamma_k)^2}} \right]. \quad (49)$$

图 3 是 $D(d)$ 与 $F(d)$ 的比较图.

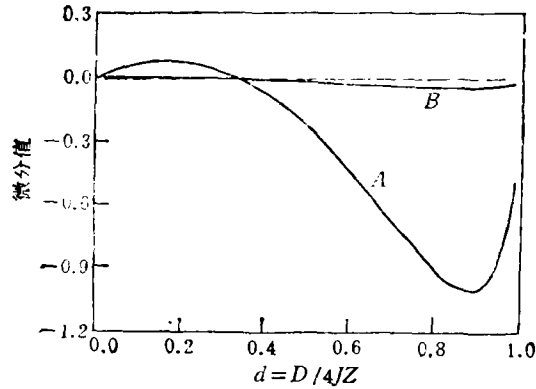


图 3 函数 $D(d)$ 与 $F(d)$ 在 $0 \leq d \leq 1$ 的范围内的比较图 A 为 $D(d)$; B 为 $F(d)$

从图 3 中不难发现上述两项微分总有相同的符号, 即 $\Delta(\theta)$ 与 $E_0(\theta)$ 的变化趋势在 θ_0 点总相同. 分为两种情况讨论: 1) 当 $D(d)$ $F(d)$ 均为正时, $\Delta(\theta)$ 随 θ 的增加而增加. 由方程(45)注意到 $\Delta(\theta_0) = 0$, 限制条件(47)式要求 $\theta \geq \theta_0$, 不然, 当 $\theta < \theta_0$ 时, $\Delta(\theta)$ 将为负. 既然 $E_0(\theta)$ 在 θ_0 点也是 θ 的单调递增函数, 在 $\theta - \theta_0$ 的区域中, 由限制条件 $\theta \geq \theta_0$ 容易得到 $E_0(\theta_0)$ 必然是 $E_0(\theta)$ 的最小值. 2) 当 $F(d)$ 和 $D(d)$ 均为负时, 可以得到相同的结果. 当然, 这只是一个大致的说明而不是严格的证明, 但至少可以使我们理解结果(43)式的正确性.

将(43)式代入(40), (42)式, 注意到 $\hbar$ 在计算的最后应定为零, 于是得到相应的基态能量 E_0 , 自发磁化强度 M 和元激发谱 ϵ_k 分别为

$$E_0 = JZ \sum_k [-2 + d - d^2 + \gamma_k + \sqrt{(1 + d - \gamma_k)^2 - (d\gamma_k)^2}], \quad (50)$$

$$M = -\frac{1}{N} \frac{d}{dh} E_0(h)|_{h=0} = M^{\text{MF}} + \Delta M, \quad (51)$$

$$\epsilon_k = 2JZ \sqrt{(1 + d - \gamma_k)^2 - (d\gamma_k)^2}, \quad (52)$$

其中 M^{MF} 是平均场理论给出的结果, 并且

$$M^{\text{MF}} = \sqrt{1 - d^2}, \quad (53)$$

$$\Delta M = \frac{1}{2\sqrt{1-d^2}} - (1/2N) \sum_k \frac{d + 1 - \gamma_k + (d\gamma_k)^2}{\sqrt{(1-d^2)((1+d-\gamma_k)^2 - (d\gamma_k)^2)}}. \quad (54)$$

4 比较与结论

(50)和(54)式是 CASOT 方法所得的结果。而另一方面, MME 方法得到^[5]

$$E_0 = JZ \sum_k [-2 + d + r_k + \sqrt{(1 + d - r_k)^2 - (dr_k)^2}], \quad (55)$$

$$M = \frac{3}{2} - (1/2N) \sum_k \frac{d + 1 + (\sqrt{2d^2 - 1})r_k}{(1 + d - r_k)^2 - (dr_k)^2}, \quad (56)$$

$$e_k = 2JZ \sqrt{(1 + d - r_k)^2 - (dr_k)^2}. \quad (57)$$

将简立方晶体的自发磁化强度 M 的数值计算结果, MF 结果, CASOT 结果和 MME 结果一道画在图 4 中。

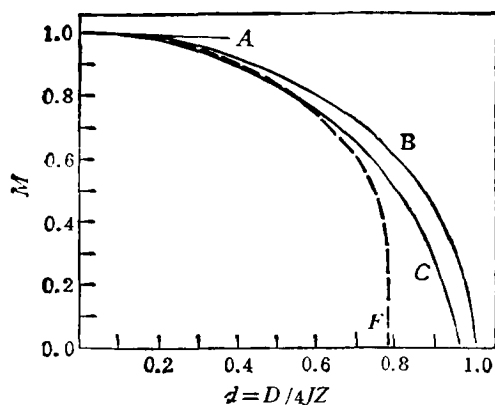


图 4 几种方法算得的简单立方晶体的自发磁化强度 M 作为 d 的函数的比较图
A 为 MME; B 为 MF; C 为 CASOT; F 为数值计算结果

CASOT 方法与 MME 方法,数值计算的比较显示

- 1) 基态能量, E_0^{CASOT} 比 E_0^{MME} 低;
- 2) 自发磁化强度, M^{CASOT} 比 M^{MME} 好得多(见图 4)。除非接近相变点, M^{CASOT} 与数值计算非常接近,而 M^{MME} 却相差甚远;
- 3) 元激发谱, e_k^{CASOT} 与 e_k^{MME} 一致。

综上所述,对此种各向异性铁磁体 (easy-plane spin-one ferromagnet) 成功地引入了 CASOT 变换,并用来计算了它的基态能量 E_0 , 自发磁化强度 M 和元激发谱 e_k 。最后,给出了 CASOT 方法与其他方法和数值计算的比较结果。

- [1] Crystalline Electric Field and Structure Effect in f-Electron Systems, eds. by J. E. Crow, R. P. Gruertin, and T. W. Mihalisin (Plenum, New York, 1980).
- [2] R. Harris, M. Plischke and M. J. Zuckermann, *Phys. Rev. Lett.*, **31** (1973), 160.
- [3] R. W. Cochran, R. Harris and M. J. Zuckermann, *Phys. Rev.*, **48** (1978), 1.
- [4] Crystalline Electric Field Effect in f-Electron Magnetism, eds. by Robert Gruertin, Wojciech Suski and Zigmunt Zolnieriek (Plenum, New York, 1982).
- [5] P-A Lindgård and A. Kowalska, *J. Phys. C*, **9** (1976), 2081.

- [6] P-A Lindgård and O. Danielsen, *J. Phys. C*, **7** (1974), 1523.
- [7] J. F. Cooke and P-A Lindgård, *Phys. Rev.*, **B16** (1977): 408; *J. Appl. Phys.*, **49** (1978), 2136.
- [8] U. Balucani, M. G. Pini, A. Rettori and V. Tognetti *J. Phys. C*, **13** (1980), 3895.
- [9] E. Rastelli and P-A Lindgård, *J. Phys. C*, **12** (1979), 1899.
- [10] Sudha Gopalan and M. G. Cottam, *Phys. Rev.*, **B42** (1990), 624.
- [11] C. F. Lo, K. K. Pan and Y. L. Wang, *J. Appl. Phys.*, **70** (1991), 6080.
- [12] K. K. Pan and Y. L. Wang, *J. Appl. Phys.*, **73** (1993), 6099.

A NEW METHOD FOR EASY-PLANE SPIN-ONE HEISENBERG MODEL

ZHOU LEI

(T. D. Lec Physics Laboratory and Department of Physics, Fudan University, Shanghai 200433)

TAO RUI-BAO

(Department of Physics, Fudan University, Shanghai 200433)

(Received 20 April 1994)

ABSTRACT

We introduce a new method (the characteristic angle spin operator transformation method) to discuss the spin-waves in easy-plane spin-one Heisenberg ferromagnet $\left(H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + D \sum_i (S_i^z)^2 - h \sum_i S_i^z\right)$. The ground state energy E_0 , the magnetization M and the magnon dispersion relation ϵ_k are calculated analytically, and the contrast with other methods and numerical results have been given.

PACC: 7530G; 7530D