

X-Y-Z 模型——非各向同性反铁磁 Heisenberg 系统的自旋波解*

何 兵 应和平 季达人

(浙江近代物理中心, 浙江大学, 杭州 310027)

(1995 年 3 月 11 日收到)

给出了一个基于 Holstein-primakoff 变换的自旋波理论研究正方点阵 X-Y-Z 模型的基态和激发态性质的方案. 通过引入宇称变换算子和正则变换, 实现了 Hamiltonian 的对角化, 在线性近似下发现存在两支色散关系不同的自旋波. 同时, 求得了展开至 S^{-1} 的修正项.

PACC: 7430D; 7510J; 7550E

由于二维各向同性反铁磁 Heisenberg 模型 (AFHM) 在非零温度下不存在反铁磁长程序^[1], 近期许多理论研究中普遍采用非各向同性 AFHM 描述未掺杂 La_2CuO_4 材料 Cu-O 面的磁性^[2]. 非各向同性 AFHM 的最一般形式又称 X-Y-Z 模型, 它以如下的 Hamiltonian 表示:

$$H = J \sum_{\langle i, j \rangle} [X_1 S_i^x S_j^x + X_2 S_i^y S_j^y + X_3 S_i^z S_j^z], \quad (1)$$

其中 $J > 0$, $X_1 \neq X_2 \neq X_3$, $\langle i, j \rangle$ 表示最近邻求和. 系统定义在二维正方点阵 $\langle x, y \rangle$ 上, 该点阵总格点数为 N , 可分成 A, B 两个子点阵, $i \in A, j \in B$. 目前, 除了一维 X-Y-Z 链 (已获得基态和低激发态的严格解) 外^[3,4], 获得该模型的严格解是相当困难的. 所以, 有必要引入恰当的近似方法研究该自旋系统在高于二维空间中的基态和低激发态性质. 有关的研究表明在各种近似方法中, 以 Holstein-primakoff (H-P) 变换 (即 Ising 极限展开) 为基础的自旋波方法对研究自旋关联系统是其中比较有效的一种^[5]. 它可以获得与实验相符的一些结果, 对于非各向同性 AFHM 的一些特殊情形, 如 X-X-Z 模型和 X-Y 模型, 自旋波方法已被证明与数值计算方法的结果符合得很好^[6]. 同时, 对于有层间耦合的二维 AFHM 的非线性自旋波方法的计算表明, 该方法研究 Néel 相变温度等性质有其优越性^[7]. 因此, 如何发展自旋波方法应用于研究包括 (1) 式所示的 X-Y-Z 模型的 AFHM 自旋系统的基态和低激发态行为是人们一直关注的问题.

本文提出了一个基于 H-P 变换的关于反铁磁 X-Y-Z 模型的自旋波解. 通过引入宇称算符和两个正则变换, 我们在动量空间给出了该系统的线性 Boson 化方案及其对角化形

* 国家教育委员会留学归国人员基金和国家自然科学基金资助的课题.

式,求得了色散关系和基态能量.并且还进一步考虑了非线性修正效应.

为了下述计算方便,把(1)式改写为如下形式:

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} [X_1/4)(S_i^+ + S_i^-)(S_j^+ + S_j^-) - (X_2/4)(S_i^+ - S_i^-)(S_j^+ - S_j^-) + X_3 S_i^z S_j^z], \quad (2)$$

其中 $S_{i(j)}^\pm = (S_{i(j)}^x \pm i S_{i(j)}^y)$ 分别为 A(B) 点阵上的自旋升降算符 (S^z 的本征态). 通过引入标准的以经典 Néel 态为基态的 H-P 变换^[8]

$$S_i^+ = f_i(S) a_i, \quad S_i^- = a_i^\dagger f_i(S), \quad S_i^z = S - a_i^\dagger a_i, \\ S_j^+ = f_j(S) b_j, \quad S_j^- = b_j^\dagger f_j(S), \quad S_j^z = -S + b_j^\dagger b_j; \quad (3)$$

$$f_i(S) = \sqrt{2S - a_i^\dagger a_i}, \quad f_j(S) = \sqrt{2S - b_j^\dagger b_j}, \quad (4)$$

并作如下的 Fourier 变换:

$$c_k = \sqrt{1/N} \sum_i \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_i] a_i, \quad d_k = \sqrt{1/N} \sum_j \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_j] b_j. \quad (5)$$

从而,可以把(2)式所示的 Hamiltonian 表述为如下所述的动量空间 Boson 算符形式.

首先,考虑线性近似情形,即取 $f_{i(j)}(S) \approx \sqrt{2S}$ ^[9]. 此时,把上述(3)–(5)式代入(2)式可得到

$$H_{\text{LSW}} = (1/2)JSZ \sum_k \gamma_k [(X_1 + X_2)(c_k^\dagger d_k^\dagger + c_k d_k) + (X_1 - X_2)(c_k d_{-k}^\dagger + c_k^\dagger d_{-k})] \\ + JSZX_3 \sum_k [c_k^\dagger c_k + d_k^\dagger d_k] - JS^2 ZX_3 N, \quad (6)$$

其中 Z 为格点近邻数, $\gamma_k = (1/2)\exp[i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}]$, $\boldsymbol{\delta} = (\delta_x, \delta_y)$ 为二维点阵的单位矢量. 由于在 H_{LSW} 中既含有 $d_k, d_k^\dagger$ 又存在 $d_{-k}, d_{-k}^\dagger$, 使得直接实现(6)式的对角化有困难. 因此,引入如下的一个 Boson 场的宇称变换算子:

$$P = \exp[i\mathcal{H}], \quad \mathcal{H} = (-\pi/2) \sum_k (d_k^\dagger d_k - d_k^\dagger d_{-k}). \quad (7)$$

这样, $(d_{-k} d_{-k}^\dagger)$ 和 $(d_k d_k^\dagger)$ 存在变换关系

$$d_{-k} = P d_k P^{-1}, \quad d_{-k}^\dagger = P d_k^\dagger P^{-1}. \quad (8)$$

将上式代入(6)式中,则含有 d_{-k} 和 $d_{-k}^\dagger$ 部分的项可化为

$$H_{\text{part}} = (J/2)SZ(X_1 - X_2) \sum_k \gamma_k (c_k P d_k^\dagger P^{-1} + c_k^\dagger P d_k P^{-1}) \\ = (J/2)SZ(X_1 - X_2) \sum_k \gamma_k [c_k d_k^\dagger + c_k^\dagger d_k + c_k P [d_k^\dagger, P^{-1}] + c_k^\dagger P [d_k, P^{-1}]]. \quad (9)$$

上式中含有对易子的部分可分别展开. 由此, H_{part} 可表示成

$$H_{\text{part}} = (J/2)SZ(X_1 - X_2) \sum_k \gamma_k [c_k d_k^\dagger + c_k^\dagger d_k \\ + (\pi/2) \sum_{(n,m)} [(-i)^n / n!] P \mathcal{H}^m (c_k d_k^\dagger + c_k^\dagger d_{-k})$$

$$-c_k^+ d_k + c_k d_k^+ [d_k^+, d_{-k}]) \mathcal{H}^{n-m-1}\}, \quad (10)$$

式中 (n, m) 的求和范围为 $m \leq n-1$, $n = (0, \infty)$. 从而可以看出, 为了保持 H_{part} 的厄密性, 必须存在如下的对称关系:

$$d_k = d_{-k}, \quad d_k^+ = d_{-k}^+. \quad (11)$$

(如果 $d_k \neq d_{-k}$, 则 $[d_k^+, d_{-k}] = 0$). 同理, 可以推导出

$$c_k = c_{-k}, \quad c_k^+ = c_{-k}^+. \quad (12)$$

考虑到上述得到关于 Boson 算符 $(d_k, c_k; d_k^+, c_k^+)$ 的对称性, 从 (5) 式不难得到如下的结果:

$$\begin{aligned} H_{\text{LSW}} = & (J/2)SZ \sum_k \gamma_k [X_1 + X_2] (c_k^+ d_k^+ + c_k d_k) + (X_1 - X_2) (c_k d_k^+ + c_k^+ d_k) \\ & + JSZX_3 \sum_k (c_k^+ c_k + d_k^+ d_k) - JS^2 ZX_3 N. \end{aligned} \quad (13)$$

以下进一步采用两个正则变换实现上式的对角化. 第一步, 根据上式中系数的对称性, 采取的变换为

$$a_k = (1/\sqrt{2})(c_k + d_k), \quad b_k = (1/\sqrt{2})(c_k - d_k), \quad (14)$$

新引进的 Boson 算符可验证满足 Boson 对易关系

$$\begin{aligned} [a_k, a_k^+] &= \delta_{k,k'}, \quad [b_k, b_k^+] = \delta_{k,k'}; \\ [a_k, b_k] &= [a_k, b_k^+] = [a_k^+, b_k] = [a_k^+, b_k^+] = 0. \end{aligned} \quad (15)$$

从而, H_{LSW} 变换为如下两种 Boson 算符分离的形式:

$$\begin{aligned} H_{\text{LSW}} = & JSZ \sum_k [X_3 + (1/2)(X_1 - X_2)\gamma_k] a_k^+ a_k + JSZ \sum_k [X_3 - (1/2)(X_1 - X_2)\gamma_k] b_k^+ b_k \\ & + (1/4)JSZ \sum_k (X_1 + X_2)\gamma_k (a_k^+ a_k^+ + b_k^+ b_k^+ + \text{H.c.}). \end{aligned} \quad (16)$$

第二步, 采用标准的 Bogoliubov 变换, 分别对 a_k 和 b_k 算符操作. 即

$$\begin{aligned} \alpha_k &= \mu_{1k} a_k + \nu_{1k} a_k^+, \quad \alpha_k^+ = \mu_{1k}^* a_k^+ + \nu_{1k}^* a_k, \\ \mu_{1k}^z - \nu_{1k}^z &= 1; \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \beta_k &= \mu_{2k} b_k + \nu_{2k} b_k^+, \quad \beta_k^+ = \mu_{2k}^* b_k^+ + \nu_{2k}^* b_k, \\ \mu_{2k}^z - \nu_{2k}^z &= 1. \end{aligned} \quad (18)$$

从而, 得到 (15) 式的对角化形式

$$H_{\text{LSW}} = \sum_k (\omega_{1k} \alpha_k^+ \alpha_k + \omega_{2k} \beta_k^+ \beta_k - \omega_{1k} \nu_{1k} k_1^z - \omega_{2k} \nu_{2k} k_2^z) - JS^2 ZX_3 N, \quad (19)$$

其中 ω_k 和 (μ_k, ν_k) 分别满足

$$\begin{aligned} \omega_{1k} &= JSZ \sqrt{[X_3 + (1/2)\gamma_k(X_1 - X_2)]^2 - (1/4)\gamma_k^2(X_1 + X_2)^2}, \\ \omega_{2k} &= JSZ \sqrt{[X_3 - (1/2)\gamma_k(X_1 - X_2)]^2 - (1/4)\gamma_k^2(X_1 + X_2)^2}; \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned}\mu_{1k}^z &= (1/2)(A_k^+/\omega_{1k} + 1), \quad \nu_{1k}^z = (1/2)(A_k^+/\omega_{1k} - 1); \\ \mu_{2k}^z &= (1/2)(A_k^-/\omega_{2k} + 1), \quad \nu_{2k}^z = (1/2)(A_k^-/\omega_{2k} - 1),\end{aligned}\quad (21)$$

式中 $A_k^\pm = JSZ[X_3 \pm (1/2)\gamma_k(X_1 - X_2)]$. 同时, 给出该自旋系统的基态能量,

$$\begin{aligned}E_0 &= (1/2)JSZ \sum_k \{ \sqrt{[X_3 + (1/2)(X_1 - X_2)\gamma_k]^2 - (1/4)(X_1 + X_2)^2\gamma_k^2} \\ &\quad + \sqrt{[X_3 - (1/2)(X_1 - X_2)\gamma_k]^2 - (1/4)(X_1 + X_2)^2\gamma_k^2} - 2X_3 \} \\ &\quad - JS^2ZX_3N.\end{aligned}\quad (22)$$

由以上得到结果可看到, X-Y-Z 模型所描述的自旋系统存在两支色散关系不同的自旋波, 这一结果是由于各向同性的破坏 ($X_1 \neq X_2$) 而产生的. 如果减弱系统的非各向同性程度, 例如回归到 X-X-Z 模型, 即 (1) 式中 $(X_1, X_2, X_3) = (X, X, 1)$, 这两支色散关系不同的自旋波就简并合成一支,

$$\omega_{1k} = \omega_{2k} = JSZ \sqrt{1 - X^2\gamma_k^2}.\quad (23)$$

该结果与已知的各向同性反铁磁 Heisenberg 模型的自旋波解相同^[2].

同时, 由 (11) 和 (12) 式两个关系, 不难得到

$$\langle \alpha_k^+ \alpha_k \rangle = \langle \alpha_{-k}^+ \alpha_{-k} \rangle, \quad \langle \beta_k^+ \beta_k \rangle = \langle \beta_{-k}^+ \beta_{-k} \rangle.\quad (24)$$

这说明 $+k$ 和 $-k$ 方向上传播的磁子数目相等, 反映出正方点阵上自旋波的传播对称性.

进一步考虑至 $1/S$ 阶非线性修正效应. 即取至 $f_i(S)$ 的二阶近似^[10,11],

$$f_i(S) \approx \sqrt{2S} - (1/2\sqrt{2S})a_i^+a_i; \quad f_j(S) \approx \sqrt{2S} - (1/2\sqrt{2S})b_j^+b_j.\quad (25)$$

再经过与上述线性近似下所作的一系列相同的变换及相似的化简计算, 可以得到如下的 AFHM 的非线性近似下的自旋波的色散关系和基态能量的结果:

$$\begin{aligned}\omega'_{1k} &= \omega_{1k} - (J/4)Z(X_1 - X_2)N^{-1} \sum_{k'} [\gamma_k \mu_{1k} \nu_{1k} c_{1k'} + \gamma_{k'} \mu_{1k} \nu_{1k} c_{2k'} \\ &\quad + \gamma_k (\mu_{1k}^z + \nu_{1k}^z) c_{3k'} + (1/2)\gamma_{k'} (\mu_{1k}^z + \nu_{1k}^z) (c_{4k'} + c_{5k'})] \\ &\quad + (J/4)Z(X_1 + X_2)N^{-1} \sum_{k'} [\gamma_k \mu_{1k} \nu_{1k} c_{4k'} \\ &\quad + (1/2)\gamma_k (\mu_{1k}^z + \nu_{1k}^z) c_{1k'} + \gamma_{k'} (\mu_{1k}^z + \nu_{1k}^z) c_{2k'} + 2\gamma_{kk'} \mu_{1k} \nu_{1k} c_{3k'}] \\ &\quad - JZX_3N^{-1} \sum_{k'} [(1/2)(\mu_{1k}^z + \nu_{1k}^z) c_{3k'} \\ &\quad + \gamma_{kk'} \mu_{1k} \nu_{1k} c_{2k'} + (1/4)\gamma_{kk'} (\mu_{1k}^z + \nu_{1k}^z) (c_{4k'} + c_{5k'})]; \\ \omega'_{2k} &= \omega_{2k} + (J/4)Z(X_1 - X_2)N^{-1} \sum_{k'} [\gamma_k \mu_{1k} \nu_{1k} c_{1k'} - \gamma_{k'} \mu_{2k} \nu_{2k} c_{2k'} \\ &\quad + \gamma_k (\mu_{2k}^z + \nu_{2k}^z) c_{3k'} - (1/2)\gamma_{k'} (\mu_{2k}^z + \nu_{2k}^z) (c_{4k'} + c_{5k'})]\end{aligned}\quad (26)$$

$$\begin{aligned}
& + (J/4)Z(X_1 + X_2)N^{-1} \sum_{k'} [\gamma_k \mu_{2k} \nu_{2k} c_{4k'} \\
& + (1/2) \gamma_k (\mu_{1k}^z + \nu_{2k}^z) c_{1k'} + \gamma_k (\mu_{2k}^z + \nu_{2k}^z) c_{2k'} + 2 \gamma_k \mu_{2k} \nu_{2k} c_{3k'}] \\
& - JZ X_3 N^{-1} \sum_{k'} [(1/2) (\mu_{2k}^z + \nu_{2k}^z) c_{3k'} \\
& + \gamma_{k-k'} \mu_{2k} \nu_{2k} c_{2k'} + (1/4) \gamma_{k-k'} (\mu_{2k}^z + \nu_{2k}^z) (c_{4k'} + c_{5k'})];
\end{aligned} \quad (27)$$

$$E'_0 = E_0$$

$$\begin{aligned}
& - (J/4)Z(X_1 - X_2)N^{-1} \sum_{k,k'} [(1/2) \gamma_k \gamma_{k'}^{-1} c_{2k} c_{1k'} + \gamma_k \gamma_{k'}^{-1} c_{3k} (c_{4k'} + c_{5k'})] \\
& + (J/4)Z(X_1 + X_2)N^{-1} \sum_{k,k'} [(1/2) \gamma_k \gamma_{k'}^{-1} c_{4k} c_{1k'} + \gamma_k \gamma_{k'}^{-1} c_{2k} c_{3k'}] \\
& - (J/4)Z X_3 N^{-1} \sum_{k,k'} [c_{3k} c_{3k'} + \gamma_{k-k'} c_{2k} c_{2k'} + \gamma_{k-k'} c_{5k} c_{4k'}],
\end{aligned} \quad (28)$$

其中的系数为

$$\begin{aligned}
c_{1k} &= \mu_{1k} \nu_{1k} + \mu_{2k} \nu_{2k}, \quad c_{2k} = \mu_{1k} \nu_{1k} - \mu_{2k} \nu_{2k}, \\
c_{3k} &= \nu_{1k}^z + \nu_{2k}^z, \quad c_{4k} = \mu_{1k}^z - \mu_{2k}^z, \quad c_{5k} = \nu_{1k}^z - \nu_{2k}^z.
\end{aligned} \quad (29)$$

至此,得到了关于 X-Y-Z 模型近似至 $1/S$ 阶的两支自旋波的色散关系和基态能量.

本文给出了关于正方点阵 X-Y-Z 模型的自旋波解的一种方案,得到了非各向同性耦合引起的两支色散关系不同的自旋波解和基态能量.初步的计算结果表明,回归到 X-X-Z 情形时,我们的结果至 $1/S$ 阶非线性修正项仍然与已有工作的结果一致;该方法还可应用于非各向同性 Heisenberg 反铁磁模型的基态性质和低激发态行为的研究.目前,我们已发展了簇团 Monte Carlo 模拟方法^[12]关于非各向同性反铁磁 X-Y-Z 模型的计算方案,以配合自旋波方法研究该自旋系统的基态能量与非各向同性耦合参数的关系.如何推广到研究处理含外场的 X-Y-Z 自旋系统,以及将它应用于研究二维及其层状系统的反铁磁长程序和能隙与外场和非各向同性耦合参数的关系等问题是我们工作的方向.

- [1] N. D. Mermin and H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.*, **22**(1966), 1133.
- [2] E. Manonakis, *Rev. Mod. Phys.*, **63**(1991), 1.
- [3] R. J. Baxter, *Ann. Phys. (N. Y.)*, **70**(1972), 323.
- [4] J. D. Johnson, S. Krinsky and B. M. McCoy, *Phys. Rev.*, **A8**(1973), 2526.
- [5] T. Barnes, *Int. J. Mod. Phys.*, **2**(1991), 659.
- [6] W. Zheng, J. Oitmaa and C. J. Hamer, *Phys. Rev.*, **B44**(1991), 11864; W. Zheng, C. J. Hamer and J. Oitmaa, *ibid.*, **B45**(1991), 831.
- [7] Y. K. Wu and Y. Song, *Phys. Rev.*, **B49**(1994), 9634.
- [8] T. Holstein and H. Primakoff, *Phys. Rev.*, **58**(1990), 10784.

- [9] P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **86**(1952), 694.
- [10] R. Kubo, *Phys. Rev.*, **87**(1952), 568; T. Oguchi, *ibid.*, **117**(1960), 117.
- [11] C. J. Hamer, J. Oitmaa and W. Zheng, *Phys. Rev.*, **B43**(1991), 1789.
- [12] H. - P. Ying, D. - R. Ji, *Commun. Theor. Phys.*, **21**(1994), 421; 应和平、季达人, 物理学报, **42**(1993), 1845.

SPIN WAVE APPROACH FOR X-Y-Z MODEL ——A STUDY OF THE ANISOTROPIC HEISENBERG ANTIFERROMAGNET

HE BING YING HE-PING JI DA-REN

(Zhejiang Institute of Modern Physics, Zhejiang University, Hangzhou 310027)

(Received 11 March 1995)

ABSTRACT

A spin wave approach to study the anisotropic Heisenberg antiferromagnet is presented. By means of introducing a parity operator and canonical transformations, the Hamiltonian is diagonalized, based on the Holstein-Primakoff transformation, to obtain dispersion relations of the spin waves. The terms of non-linear approximation effects for the ground state energy and the dispersion relations are also shown.

PACC: 7430D; 7510J; 7550E