第 52 卷 第 9 期 2003 年 9 月
1000-3290/2003/52(09)/2290-03
物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA
Vol.52, No.9, September, 2003
©2003 Chin. Phys. Soc.

一维自旋-轨道模型中的畴状轨道液体态

张士勇

(长安大学基础部,西安 710064)

(2003 年 1 月 5 日收到;2003 年 3 月 31 日收到修改稿)

研究了一个一维可解自旋-轨道模型. 在大自旋极限下,自旋自由度可以近似用经典自旋来描述. 在没有外磁场情形,系统的基态是伊辛自旋反铁磁背景下的轨道液体态. 其低能元激发是类似于 spinon 的轨道量子. 而在有外磁场情形,系统会出现磁通点阵相. 同时,磁通将系统分割成不连通的轨道液体.

关键词:自旋轨道系统, 畴状轨道液体

PACC:7170E, 7560C, 7510J

1. 引 言

在许多过渡族氧化物中,电子不但具有自旋简并,而且具有轨道简并,并且导致了许多新奇的磁结构[1]. 轨道有序以及轨道密度波已在实验中被观测到[2]. 在这类系统中,电子自旋之间的耦合依赖于其轨道自由度. 在半满情形,这类系统又被称为自旋-轨道系统. 描述二度轨道简并自旋 1/2 系统最简单的模型就是自旋-轨道 $SU(4)$ 模型[3]. 但是,对于某些过渡金属化合物,例如锰氧化合物和镧钒化合物等,系统具有较高的自旋[4—10],因而对自旋自由度可以做经典处理[11]. 一般而言,忽略洪德耦合和轨道各向异性,自旋-轨道系统的哈密顿量可以写为

$$H = J\sum_{(ij)}(x + \boldsymbol{s}_i \cdot \boldsymbol{s}_j)(y + \boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j), \tag{1}$$

式中 x, y, J 是实参数, $\boldsymbol{s}_i$ 表示 i 格点上的自旋算符, $\boldsymbol{\tau}_i$(泡利矩阵)用以描述 i 格点上的轨道自由度. 在大自旋近似下, $\boldsymbol{s}_i \cdot \boldsymbol{s}_j \to \sigma_i^z \sigma_j^z$[11], 在本文中我们将在一维空间考虑以下模型:

$$H = -\frac{1}{4}\sum_{j=1}^{N}(1 - \boldsymbol{\tau}_j \cdot \boldsymbol{\tau}_{j+1})(1 - \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z) + \sum_{j=1}^{N} h\sigma_j^z, \tag{2}$$

式中 h 表示外磁场. 这一模型的自旋 − 1/2 情形曾在文献[12]得到研究.

2. Bethe ansatz 解

从模型哈密顿量(2)中可以看出当两个相邻自旋同向排列即 $\sigma_j^z \sigma_{j+1}^z = 1$ 时,相互作用能为零. 这表示该两自旋所在格点形成的键断开. 因此,系统被这些断键割成不相连的畴,在一个单畴中,所有相邻自旋都反向排列,即 $\sigma_j^z \sigma_{j+1}^z = -1$. 其相应的哈密顿量为

$$H_e = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{M}(\boldsymbol{\tau}_j \cdot \boldsymbol{\tau}_{j+1} - 1). \tag{3}$$

这正是长度为 M 的开边界海森堡自旋链的哈密顿量. 它是严格可解的[13]. 不过这里的自由度是轨道自由度. 模型(3)的本征值可以写为

$$E = -\sum_{n=1}^{\overline{M}} \frac{1}{\lambda_n^2 + \frac{1}{4}}, \tag{4}$$

式中 $\overline{M}$ 表示反转轨道的个数, λ_n 是谱参数并满足下列 Bethe ansatz 方程:

$$\left[\frac{\lambda_n - \frac{i}{2}}{\lambda_n + \frac{i}{2}}\right]^{2M} = \prod_{m \neq n}^{\overline{M}} \frac{\lambda_n - \lambda_m - i}{\lambda_n - \lambda_m + i} \times \frac{\lambda_n + \lambda_m - i}{\lambda_n + \lambda_m + i}. \tag{5}$$

对上式取对数可以得到

$$2M\theta_1(\lambda_n) = 2\pi I_n + \sum_{m \neq n}^{\overline{M}}[\theta_2(\lambda_n - \lambda_m) + \theta_2(\lambda_n + \lambda_m)], \tag{6}$$

式中 I_n 为整数, $\theta_n(\lambda) = \pi - 2\mathrm{arctg}\frac{1}{2\lambda}$. 系统的最低能态由对称排列的原点的 I_n 构成, 并且 $I_{n+1} - I_n = 1$. 在大 M 极限下,我们可以定义密度函数

$$\rho_M(\lambda_n) = \frac{1}{(\lambda_{n+1} - \lambda_n)M}. \tag{7}$$

并令 $a_n(\lambda) = \theta'_n(\lambda)$，则 $\rho_M(\lambda)$ 满足方程

$$\rho_M(\lambda) + \int_{-\infty}^{+\infty} a_2(\lambda - \mu)\rho_M(\mu)\mathrm{d}\mu$$
$$= a_1(\lambda) + \frac{1}{2M}[a_2(\lambda) + a_1(\lambda) + O(M^{-1})]. \quad (8)$$

利用傅里叶变换解得

$$\rho_M(\lambda) = \rho_o(\lambda) + \frac{1}{M}\rho_b(\lambda) + O(M^{-2}),$$

$$\rho_o(\lambda) = \frac{1}{2\cosh(\pi\lambda)},$$

$$\rho_b(\lambda) = \frac{1}{2\cosh(\pi\lambda)} - \frac{1}{\pi}\int e^{-i\omega\lambda}\frac{e^{-\frac{|\omega|}{2}}}{2\cosh\frac{\omega}{2}}\mathrm{d}\omega,$$

其中 $\rho_o(\lambda)$ 是无限长链的密度分布，而 $\rho_b(\lambda)$ 是边界的贡献．由此可以解得基态能量

$$E_M = M e_o + e_b + O(M^{-1}),$$

$$e_o = -\int \frac{\rho_o(\lambda)}{\lambda^2 + \frac{1}{4}}\mathrm{d}\lambda = -2\ln 2,$$

$$e_b = -\int \frac{\rho_b(\lambda)}{\lambda^2 + \frac{1}{4}}\mathrm{d}\lambda + 4 = 8 - 2\pi - 2\ln 2,$$

其中 e_o 是热力学极限下每个键的基态能量，e_b 是边界能量．由于 $e_b > 0$，在没有外磁场情形，系统的基态没有断键，即所有的邻近自旋反向排列，而轨道自由度则形成连通液体态．

3．磁通点阵结构

我们继续考虑系统在外磁场中的相图．当外磁场反转一个自旋键即使得两个相邻自旋平行时，所导致的磁能为 $-2h$．同时该键又导致边界能 e_b．如果这样的态是稳定的，这两项能量之和必须为负，这给出了第一个临界磁场

$$h_{c1} = \frac{1}{2}e_b.$$

当 h 达到 h_{c1} 时，系统将出现第一个磁通或断键．随着外磁场的增加，越来越多的磁通或断键会出现．这些断键将系统分割成不连通的片段．假定第 m 个片断的长度为 $M_m = M + \delta_m$，在保持片断数或断键数不变的情况下，边界能的 M^{-1} 项修正将决定每个片段的长度．因为 $\sum_m \delta_m = 0$，我们很容易得出

$$\sum_m \frac{1}{M + \delta_m},$$

$\delta_m = 0$ 时取极小值．因此，每个片段在基态的长度是一样的．这时断键和磁通具有周期结构．随着磁场的增加，越来越多的自旋会被极化．当自旋达到二聚化时，每个自旋和它的两个邻近自旋分别平行和反平行．反平行键的能量为 -2．因此

$$h_{c2} = 1,$$

即当 $h > h_{c2}$ 时自旋将被完全极化．这一现象非常类似于第二类超导体．

4．结　　论

我们研究了一个一维自旋 - 轨道模型的基态相图．在大自旋极限下，自旋自由度可用伊辛自旋来近似．没有外磁场时，系统的基态是伊辛反铁磁背景下的轨道液体态．当 $h_{c1} > h > h_{c2}$ 时，系统处于混合态，即系统被磁通切割为不连通的，周期排列的畴状轨道液体．当 $h > h_{c2}$ 时，自旋被完全极化，这时的基态是高度轨道简并的．这一相图与第二类超导体的相图非常类似．在混合态中，系统存在三种元激发．第一种为单畴中的轨道量子，类似于自旋链中的 spinon．第二类为畴壁的呼吸或摆动，类似于晶格的声波．第三类则为单畴的劈裂，它在畴中产生另外的磁通或断键，因此有一个激发能隙．

[1] Tokura Y，Nagaosa N 2000 *Science* **288** 262

[2] Satioh E *et al* 2001 *Nature*.(London)**410** 180

[3] Kugel K I，Khomskii D I 1982 *Sov*. *Phys*. *Ups*. **25** 231

[4] Kugel K I，Khomskii D I 1980 *Fiz*. *Nizk*. *Temp*.**6** 207

[5] Ishihara S *et al* 1996 *Physica*. C **263** 130

[6] Feiner L F *et al* 1997 *Phys*. *Rev*. *Lett*.**78** 2799

[7] Shen S Q，Wang Z D 2000 *Phys*. *Rev*. B **61** 9532

[8] Khaliullin G *et al* 2001 *Phys*. *Rev*. *Lett* **86** 3879

[9] Gao Y，Zhang Y M，Chen H 2000 *Acta Phys*. *Sin*. **49** 1586(in Chinese)[高　阳、章豫梅、陈　鸿 2000 物理学报 **49** 1586]

[10] Shang Y M，Yao K L 1998 *Chin*. *Phys*. **7** 864

[11] Shen S Q，Cie X C，Zhang F C 2002 *Phys*. *Rev*. *Lett*. **88** 027201

[12] Santoro G *et al* 1997 *Phys*. *Rev*. B **55** 16168

[13] Wang Y 1999 *Int*. *J*. *Mod*. *Phys*. **13** 3323

The domain-state orbital liquids in a one-dimensional spin-orbital model

Zhang Shi-Yong
(*Department of Basic Courses*, *Chang'an University*, *Xi'an* 710064, *China*)
(Received 5 January 2003; revised manuscript received 31 March 2003)

Abstract

A one-dimensional integrable spin-orbital model is studied. In the large spin limit, the degrees of freedom of the spin part can be described by the classical Ising spins. Without the external magnetic field, the ground state of the system is a connected orbital liquid with the background of Ising antiferromagnetic order of spins. The elementary excitations are the usual spinon-like orbital quanta. In an external magnetic field, flux phase exists in the system. The fluxes (two parallel ising spins) cut the system into disconnected orbital liquids (domains).

Keywords: spin-orbital system, domain-state orbital liquid
PACC: 7170E, 7560C, 7510J