ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

УДК 537.611.44
17-85-299

ГОЧЕВ
Иван Гочев

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ СОСТОЯНИЙ В ФЕРРОМАГНЕТИКАХ

Специальность: 01.04.02 - теоретическая
и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой
степени доктора физико-математических наук

Дубна 1985

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор — А.М.КОСЕВИЧ

доктор физико-математических наук, профессор — Ю.А.ИЗЮМОВ

доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник — А.С.ШУМОВСКИЙ

Ведущая организация - Институт металлофизики АН УССР, Киев

Автореферат разослан "___"__________1985 г.

Защита диссертации состоится "___"__________1985 г. на заседании Специализированного совета Д047.01.01 Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований, г. Дубна, Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Объединенного института ядерных исследований.

Ученый секретарь Совета
кандидат физико-математических наук — В.И.ЖУРАВЛЕВ

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

В спектре гейзенберговских ферромагнетиков наряду с состояниями спин-волнового типа могут существовать локализованные состояния. Их появление вызвано сильным и сложным по своему характеру взаимодействием магнонов. Изучение локализованных состояний выходит за рамки линеаризованных схем[x)] и поэтому является частью исследования так называемых существенно нелинейных явлений в магнетиках. Исследование таких явлений представляет качественно новый этап изучения магнитоупорядоченных и других конденсированных сред. Оно характеризуется своеобразием применяемых методов и полученных результатов, что объясняет повышенное внимание физиков и математиков к нелинейной тематике.

При изучении спектров ферромагнетиков используется как последовательный микроскопический подход, так и феноменологическая теория, основанная на уравнениях Ландау-Лифшица. В квантовой (микроскопической) картине известно, что локализованными состояниями являются спиновые комплексы - связанные состояния магнонов. В феноменологической теории локализованные состояния принято называть солитонами (в обобщенном смысле).

При исследовании спиновых комплексов и солитонов к настоящему времени получено немало интересных результатов. Созданы и развиваются мощные методы изучения локализованных состояний в полностью интегрируемых системах. Показано, что связанные состояния магнонов играют важную роль в низкотемпературной термодинамике и кинетике квазиодномерных или сильноанизотропных ферромагнетиков. Опубликованы первые экспериментальные доказательства существования спиновых комплексов.

Подчеркнем, однако, следующее.

С физической точки зрения существующая теория солитонов является феноменологической. Только на основе микроскопической теории можно раскрыть до конца природу этих состояний и отсюда, например, последовательно искать способы их наблюдения. В рамках микроскопического подхода полностью выяснилась бы связь солитонов с другими локализо-

x) Т.е. схем, в которых взаимодействие спиновых волн учитывают по теории возмущений.

ванными состояниями – спиновыми комплексами[x]). Создание квантовой теории солитонов поэтому следует считать актуальным для физики нелинейных явлений в ферромагнетиках.

Нахождение эффективного способа возбуждения спиновых комплексов в тех или иных экспериментах также является нерешенной задачей, что значительно задерживает общее исследование этих состояний.

В ряде интересных моделей, когда полная интегрируемость нарушена, невозможно применение общих методов изучения солитонов и тяжелых комплексов. Поскольку в подобных системах могут существовать специфические локализованные состояния (связанные с наличием дефектов, возмущений и т.п.), необходимыми на данном этапе развития теории представляются отдельные примеры расчета спиновых комплексов или солитонов в них.

Целью работы является дальнейшее развитие теории спиновых комплексов, получение точных результатов для характеристик локализованных состояний ферромагнетиков в рамках микроскопического и феноменологического подхода и на этой основе – построение квантовых аналогов доменных стенок и бионов (солитонов с внутренней прецессией) в спиновой цепочке.

Научная новизна и практическая ценность

Новым вкладом является решение ряда задач о связанных состояниях двух или трех квазичастиц в ферромагнетиках или близких к ним в методическом отношении молекулярных системах.

Впервые получено точное решение стационарного уравнения Шредингера, описывающее локализованный вблизи конца цепочки спинов $s=\frac{1}{2}$ комплекс из n магнонов.

Новым достижением является последовательное квантовомеханическое вычисление энергий низколежащих состояний и корреляционных функций при нулевой температуре анизотропных ферромагнетиков в слабом поперечном поле. На основе полученных результатов предложен и обоснован способ прямого возбуждения спиновых комплексов в экспериментах по ферромагнитному резонансу и по неупругому рассеянию нейтронов.

Найдено точное решение феноменологических уравнений, описывающее плоскую доменную стенку в дискретной среде.

Впервые построены квантовые аналоги магнитных солитонов. Рассмотрена полуограниченная спиновая цепочка, $s=\frac{1}{2}$, и найдены волновые функции доменных стенок и бионов. Обнаружен новый тип локализованных состояний – нестационарные локализованные состояния (квантовые бионы). Раскрыта и исследована связь солитонов со спиновыми комплексами и со спиновыми когерентными состояниями.

x) На существование определенной связи между солитонами и спиновыми комплексами указывают результаты проведенных ранее исследований.

В большинстве рассмотренных случаев нами получены явные выражения для энергий и волновых функций локализованных состояний. Эти выражения могут быть использованы в дальнейшем при изучении термодинамических и кинетических характеристик соответствующих систем.

Для защиты выдвигаются следующие основные результаты, полученные в диссертации:

1. Полностью решена задача о магнон-экситонных связанных состояниях в одномерной системе. Показано, что могут существовать один или два комплекса как ниже, так и выше сплошного спектра. Найдены значения параметров, при которых происходит разрушение локализованных состояний.

2. Установлено, что в электрон-ядерной спиновой системе возможно образование ряда двухчастичных связанных состояний. В пределе слабого взаимодействия между подсистемами они описывают комплексы из двух ядерных спиновых волн, комплексы смешанного типа – электронная + ядерная спиновая волна и известные комплексы гейзенберговского ферромагнетика.

3. Найдены нефизические трехчастичные состояния гамильтониана Дайсона-Малеева. При помощи этого результата доказано, что найденные раньше другими авторами четыре ветви трехбозонных состояний в двумерном случае являются физическими, т.е. описывают трехмагнонные комплексы изотропного ферромагнетика с квадратной решеткой ($s=\frac{1}{2}$). В сильноанизотропной плоской системе из найденных раньше 10 ветвей бозонных комплексов 4 являются нефизическими, а остальные 6 соответствуют трехмагнонным комплексам.

4. С учетом экситон-фононного и фонон-примесного взаимодействия решена задача о связанных примесных экситон-фононных состояниях в молекулярной цепи. При анализе применен модифицированный для этого случая метод изучения спиновых комплексов.

5. Найдена энергия и волновая функция комплекса из n магнонов, локализованного вблизи конца цепочки спинов $s=\frac{1}{2}$. Показано, что это состояние является основным в n-частичном секторе и что ветвь изученных комплексов определяет низкотемпературную теплоемкость сильноанизотропной системы.

6. Последовательно квантовомеханически найдены энергии низколежащих состояний и корреляционные функции при нулевой температуре анизотропных ферромагнетиков в слабом поперечном поле.

7. Предложен и обоснован способ наблюдения спиновых комплексов, связанный с включением постоянного поперечного поля в эксперименте по

неупругому рассеянию нейтронов и в эксперименте по ферромагнитному резонансу.

8. В рамках феноменологической теории решена задача о плоской доменной стенке произвольной толщины в кубических решетках и найдены бионы вблизи конца слабоанизотропной спиновой цепочки.

9. Найдена волновая функция доменной стенки в цепочке спинов, $s=\frac{1}{2}$. В этом состоянии средние значения компонент спинов и энергия совпадают с соответствующими характеристиками классической стенки. Построенное стационарное состояние является линейной комбинацией тяжелых комплексов, его можно записать и как прямое произведение спиновых когерентных состояний. Показана единственность состояния с перечисленными свойствами в рассмотренной квантовой системе.

10. Построена квантовая теория бионов, локализованных вблизи конца слабоанизотропной цепочки, $s=\frac{1}{2}$. Найдены локализованные состояния нового типа – нестационарные локализованные состояния, которые являются когерентными для указанной системы. Показано, что их можно представить как нерасплывающиеся пакеты спиновых комплексов и что усреднение операторных уравнений движения при помощи этих состояний приводит к феноменологическим уравнениям Ландау-Лифшица.

Апробация работы

Основные результаты диссертации докладывались на семинарах Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований. Ряд результатов был представлен и докладывался на 20-м Всесоюзном совещании по физике низких температур НТ-20 (Москва, 1979), XXI Международной конференции стран-членов СЭВ по физике и технике низких температур (Варна, НРБ, 1983), XX Школе по теоретической физике (Карпач, ПНР, 1984), Рабочем совещании "Уравнения Ландау-Лифшица" (Киев, 1984) и на III Международном симпозиуме по избранным проблемам статистической механики (Дубна, 1984).

Публикации

По материалам диссертации опубликовано 19 статей.

Объем работы

Диссертация состоит из введения, пяти глав основного содержания, включающих 20 параграфов, и заключения. Она содержит 235 страниц машинописного текста, 14 рисунков и библиографический список литературы из 167 названий.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении дано обоснование актуальности рассматриваемых в диссертации проблем, изложена цель работы и сформулированы основные ее результаты.

В первой главе изучены связанные состояния двух квазичастиц в составных системах с экситон-магнонным взаимодействием или с взаимодействием электронной и ядерной спиновых подсистем. В § 1 рассмотрена задача о магнон-экситонных связанных состояниях в одномерной системе. Метод прямого решения разностных уравнений для амплитуд позволил провести полный анализ указанных состояний и выявить характерные черты магнон-экситонного взаимодействия, существенного для ряда соединений. Показано, что могут существовать один или два комплекса как ниже, так и выше континуума. Появление комплексов выше сплошного спектра свидетельствует об определенном эффективном отталкивании экситона и магнона. В этой связи напомним, что в гейзенберговских ферромагнетиках двухчастичные связанные состояния лежат ниже континуума.

В § 2 установлено, что в электрон-ядерной системе существуют комплексы нескольких типов, которые в пределе слабой связи между подсистемами следует рассматривать как связанные состояния ядерных и электронных спиновых волн. Дисперсионные уравнения получены для одно- и трехмерной решетки в середине и на границе зоны Бриллюэна. Анализ уравнений подтвердил общие выводы, сделанные раньше в литературе при изучении двухмагнонных комплексов в системах с одним спином в элементарной ячейке: низкая размерность решетки и сильная анизотропия взаимодействия благоприятствуют образованию связанных состояний.

В § 3 изучено влияние взаимодействия вторых соседей на локализованные вблизи примеси одномагнонные состояния в спиновой цепочке. Показано, что лишь достаточно сильное взаимодействие вторых соседей меняет число примесных состояний. Как правило, такое взаимодействие между спинами матрицы приводит к разрушению, а взаимодействие примеси со вторыми соседями – к появлению дискретных уровней.

Точка K_0, в которой происходит отщепление связанного двухчастичного состояния от непрерывного спектра, обладает определенными особенностями. В этой точке основное двухчастичное состояние (двухчастичное состояние с минимальной энергией) меняет качественно свой вид. При $K>K_0$ оно связанное, волновая функция относительного движения квазичастиц $F(\vec{r})$ спадает на больших расстояниях как $exp(-r/r_0)$ и поэтому $\int d\vec{r}\,|F(\vec{r})|^2<\infty$. При $K<K_0$ этот интеграл расходится, поскольку соответствующее состояние описывает рассеяние квазичастиц. Подобного типа изменения испытывают и термодинамические и корреляционные функции различных систем в точке фазово-

го перехода. В § 4 установлена полная взаимосвязь между двухмагнонной задачей и задачей о фазовом переходе в сферической модели. Показано, что внутренняя энергия и парная корреляционная функция последней модели совпадают соответственно с энергией и волновой функцией основного двухчастичного состояния гейзенберговского ферромагнетика при замене температуры на константу анизотропии. Парамагнитная фаза сферической модели отвечает связанному состоянию, а ферромагнитная - состоянию на дне непрерывного спектра спинового гамильтониана.

Во второй главе изучены комплексы из трех и большего числа квазичастиц в ферромагнетиках и молекулярных системах.

После полного решения двухмагнонной задачи для гейзенберговских ферромагнетиков (это решение изложено в ряде монографий) естественными представляются попытки продвинуться в решении следующей по трудности задачи - трехмагнонной. При выводе уравнений Фаддеева в магнетизме оказалось, что алгебра спиновых операторов вносит существенные осложнения в схему, поэтому в ряде работ использовался бозонный гамильтониан Дайсона-Малеева. Для решения сложных интегральных уравнений удалось применить численные методы в одно- и двухмерном случае. Таким образом были найдены в плоской изотропной модели четыре ветви трехбозонных комплексов и до 10 ветвей (в зависимости от константы анизотропии) - в двумерной анизотропной модели. Особенности оператора Дайсона-Малеева $\mathcal{H}_D$ известны: среди его собственных значений содержатся все значения соответствующего спинового гамильтониана, но из-за бозонного и неэрмитовского характера $\mathcal{H}_D$ в его спектре имеются также бесконечно много дополнительных (нефизических) состояний как с вещественной, так и с комплексной энергией. Отсюда следует, в частности, что энергии трехмагнонных комплексов можно получить из решения трехбозонной задачи только после выделения нефизических уровней.

В § 5 получено решение задачи о нефизических связанных трехчастичных состояниях гамильтониана Дайсона-Малеева при произвольной размерности решетки. Это решение делает возможным использование более простого бозонного гамильтониана и вытекающих из него более простых уравнений Фаддеева для исследования трехмагнонных комплексов гейзенберговского ферромагнетика. При помощи полученного результата доказано, что все четыре ветви трехбозонных комплексов, найденные раньше в изотропной двумерной модели, являются физическими; в сильноанизотропной системе из 10 найденных другими авторами ветвей 4 являются нефизическими - остальные 6 описывают трехмагнонные комплексы ферромагнетика. При этом рассматривается самый благоприятный для образования комплексов случай $s=1/2$.

В настоящее время не существует общих методов теоретического исследования связанных состояний n частиц при $n>3$. Значительные

успехи в изучении таких состояний достигнуты только в случае полностью интегрируемых систем. К этому классу принадлежат и все спиновые системы, для которых известно на сегодняшний день решение n-частичной задачи. В этих случаях удалось применить анзац Бете или развитый в последнее время квантовый метод обратной задачи рассеяния. Заметим, что оба метода в той форме, которая известна сейчас, применимы для систем с периодическими граничными условиями. Разомкнутые цепочки (цепочки со свободными концами) с точки зрения обсуждаемых в диссертации состояний представляют особый интерес, поскольку в них могут существовать специфические комплексы - локализованные вблизи конца цепочки.

В § 6 такие комплексы изучены в системе с гамильтонианом

$$\mathcal{H}=-J\sum_{\ell=1}^{\infty}\left[\gamma\left(S_\ell^x S_{\ell+1}^x+S_\ell^y S_{\ell+1}^y\right)+S_\ell^z S_{\ell+1}^z\right], \qquad (I)$$

$$J>0,\ 0\le\gamma\le1,\ s=\frac{1}{2}.$$

Записывая волновую функцию n-частичного состояния в наиболее общей форме $|\psi_n\rangle=\sum B_{m_1m_2\ldots m_n}S_{m_1}^-S_{m_2}^-\ldots S_{m_n}^-|0\rangle,\ 1\le m_1<m_2<\ldots<m_n$, из уравнения Шредингера $\mathcal{H}|\psi_n\rangle=\mathcal{E}_n|\psi_n\rangle$ можно получить уравнения для $B_{m_1m_2\ldots m_n}$. Решение ищется в виде

$$B_{m_1m_2\ldots m_n}=A_n r^{m_1+m_2+\ldots m_n}\prod_{\nu=1}^{n-1} r_\nu^{m_{\nu+1}-m_\nu}. \qquad (2)$$

Для параметров r и r_ν найдены следующие выражения:

$$r=(\operatorname{ch} n\sigma)^{-\frac{1}{n}};\quad r_\nu=\operatorname{ch}\nu\sigma\cdot(\operatorname{ch} n\sigma)^{-\frac{\nu}{n}},\quad \nu=1,2,\ldots,n-1;$$
$$\sigma=\ln\left[\left(1+\sqrt{1-\gamma^2}\right)/\gamma\right]. \qquad (3)$$

При $\gamma<1$ имеем $r<1$, $r_\nu<1$. Амплитуды $B_{m_1m_2\ldots m_n}$ отличны от нуля, когда все перевернутые спины находятся вблизи границы цепочки. В изотропной системе $\gamma=1$, $r=r_\nu=1$ - в этом случае состояние (2) не существует.

Энергия спинового комплекса (2) имеет вид:

$$\mathcal{E}_n=\frac{J}{2}\operatorname{th}\sigma\cdot\operatorname{th} n\sigma. \qquad (4)$$

Показано, что это состояние является основным состоянием (состоянием с минимальной энергией) в n-частичном секторе. При $\gamma<3/5$ изученные комплексы определяют полностью низкотемпературную теплоемкость цепочки: $C\sim\exp\left(-\frac{J}{T}\operatorname{th}\sigma\right)$. При $1>\gamma>3/5$ магноны оказываются ниже по энергии, чем комплексы, и поэтому $C\sim\exp(-\mathcal{E}_M/T)$.

Модель (I) хорошо известна в теории магнетизма. Она учитывает обменную анизотропию и является одной из двух простейших моделей одноосного ферромагнетика (вторая модель, с одноионной анизотропией, применима только при $S>1/2$). Имеется и ряд соединений, магнитные свойства которых описываются этой XXZ моделью. Одномерная система (I) с периодическими граничными условиями является полностью интегрируемой, для нее ранее проведено полное исследование спектра, известны энергии и волновые функции n -магнонных комплексов. Такие спиновые комплексы с $n\leq 14$ наблюдались в $CoCl_2.2H_2O\ (\gamma\simeq 0.15)$. Мы полагаем, что в этом соединении могут наблюдаться и изученные здесь состояния.

В § 7 известные результаты (включительно результаты § 6) для характеристик спиновых комплексов перенесены на случай связанных состояний экситонов Френкеля в молекулярной цепи с взаимодействием ближайших соседей.

В задачах о комплексах из квазичастиц разного сорта возможны случаи, когда трехчастичные состояния можно исследовать более простыми методами, чем методом Фаддеева. В частности, возможно прямое решение уравнений для амплитуд в координатном пространстве. Такой способ исследования связанных двухчастичных состояний применялся нами в первой главе диссертации. В § 8 подобная схема, соответствующим образом модифицированная, использована для решения задачи о примесном экситон-фононном комплексе в молекулярной цепи. При учете экситон-фононного и фонон-примесного взаимодействия анализ проведен практически до конца и показано, что в зависимости от знака взаимодействия с примесью комплексы существуют над или под областью сплошного спектра.

<u>В третьей главе</u> построена квантовомеханическая теория слабовозбужденных состояний и найдены корреляционные функции при нулевой температуре анизотропных ферромагнетиков в слабом поперечном поле. На основе полученных результатов предложен способ прямого наблюдения спиновых комплексов.

В § 9 найдены поправки к энергиям состояний с одним или двумя перевернутыми спинами в модели Изинга, вызванные включением слабого поперечного поля. Показано, что состояния с двумя спинами при наличии поля заполняют область (по энергии), структура которой во многом похожа на структуру области двухмагнонных состояний гейзенберговского ферромагнетика (имеются сплошной спектр и изолированные уровни). Квантовомеханический результат для энергии спиновых волн совпадает с результатом полуклассической теории только в пределе $S\to\infty$. Вычислены корреляционные функции при $T=0$ и $\vec{q}=0$ и показано, что они отличаются от корреляторов коллинеарной системы наличием дополнительной особенности (в определенном приближении по возмущающему полю).

Так например, для мнимой части запаздывающей функции Грина $G^{(r)}_{xx}(\vec{q},\omega)$ при $\vec{q}=0$ имеем:

$$\operatorname{Im} G^{(r)}_{xx}(0,\omega)=\frac{\pi S}{2}\left(1+2ah^2\right)\delta(\omega-\omega_1')+bh^2\delta(\omega-\omega_2'), \tag{5}$$

где h - поперечное поле; ω_1', ω_2' - энергии спиновой волны и двухмагнонного комплекса (при наличии возмущения). Из (5) следует, что в эксперименте по ферромагнитному резонансу будет поглощение и на частоте ω_2' - т.е. будут возбуждаться и слегка деформированные кластеры. Для сравнения подчеркнем, что в коллинеарной системе $(h=0)$ возбуждаются только спиновые волны. Последнее является главным препятствием экспериментального изучения спиновых комплексов во многих соединениях.

В § 10 подобное поведение спиновых корреляционных функций обнаружено и в модели с одноионной анизотропией. Найден способ вычисления коэффициентов a и b в (5) и показано, что при $h\sim 10$ кэ для типичных ферромагнетиков $bh^2\sim 0.1$ - другими словами, при таких h линия поглощения на частоте ω_2' обладает достаточной интенсивностью для того, чтобы ее можно было наблюдать в эксперименте по ферромагнитному резонансу. Таким образом предлагается и обосновывается способ прямого возбуждения двухчастичных комплексов, связанный с включением слабого поперечного поля. Раньше спиновые комплексы удалось наблюдать в $CoCl_2.2H_2O$, где существует слабая анизотропия в xy взаимодействии $(J_x\neq J_y)$, приводящая к перемешиванию состояний невозмущенной системы с разными n и отсюда - к возможности наблюдения комплексов оптическими методами. Так как такая анизотропия во многих соединениях отсутствует, предложенный здесь способ (с включением внешнего поля) представляется универсальным.

В § 11 развитая теория применена для исследования спектра квазидвумерного ферромагнетика $FeCl_2$ в слабом поперечном поле h . Вычислена поправка к энергии спиновой волны и показано, что при наличии поля h по положению главной линии ферромагнитного резонанса можно определить $\varkappa$ - отношение константы анизотропии к обменному интегралу. Это интересно, поскольку в литературе опубликованы несогласующиеся друг с другом результаты для $\varkappa$. Вычислены корреляционные функции и показано, что в полях $h\simeq 44$ кэ при $\varkappa\gtrsim 3{,}7$ комплексы в $FeCl_2$ могут быть возбуждены оптическим путем.

В § 12 найдены поправки к энергии спиновой волны и связанного двухмагнонного состояния анизотропной цепочки, $S=1/2$, в слабом поперечном поле. При вычислении поправки к энергии спинового комплекса учтен вклад трехчастичных состояний невозмущенной системы. Показано, что в определенной области значений параметров гамильтониана и продольного поля эти две поправки полностью определяют закон дисперсии двух основных ветвей возбуждений системы. Корреляционная функция здесь найдена при любом q, что позволило доказать возможность возбуждения комплексов и в эксперименте по неупругому рассеянию нейтронов. Расчеты проведены для значений параметров известных квазиодномерных магнетиков. Показано, что поперечные поля порядка 10 кэ обеспечивают достаточную для наблюдения интенсивность линии спиновых комплексов. Такие поля являются обычными в сегодняшнем эксперименте – это свидетельствует об эффективности обсуждаемого способа возбуждения связанных состояний.

<u>В четвертой главе</u> изучены локализованные состояния ферромагнетиков в рамках феноменологической теории. По-видимому, рассматриваемые нами здесь модели не являются полностью интегрируемыми.

В § 13 найдено однопараметрическое решение уравнений Ландау-Лифшица, описывающее локализованный вблизи конца цепочки бион (солитон с внутренней прецессией). Граничное условие к нелинейным дифференциальным уравнениям выведено из граничного условия в дискретной модели. Последнее выбрано в простейшем виде: первый спин отличается от остальных лишь тем, что не имеет соседа слева. Показано, что найденный солитон качественно похож на неподвижный солитон в бесконечной цепочке - имеется неоднородное распределение z-ой компоненты спина, которое не меняется во времени и повернутые таким образом стрелки прецессируют с одинаковой частотой ω. Зависимость энергии W от частоты ω получена в явном виде.

В § 14 найдена доменная стенка в дискретной цепочке. Энергия системы получается из гамильтониана (1) путем замены операторов $\hat{S}_m$ на классические векторы длины s (суммирование по m в (1) распространено от $-\infty$ до $+\infty$). Уравнение для угла θ_m ($S^z_m = s\cos\theta_m$) имеет вид:

$$\sin\theta_m(\cos\theta_{m+1}+\cos\theta_{m-1}) = \gamma\cos\theta_m(\sin\theta_{m+1}+\sin\theta_{m-1}). \qquad (6)$$

Найдено точное решение этого уравнения: $\cos\theta_m = th(m-m_0)\sigma$, σ определено в (3), m_0 - произвольная константа. Для компонент спина и энергии стенки имеем выражения:

$$S^x_m = \frac{s}{ch(m-m_0)\sigma};\quad S^y_m = 0;\quad S^z_m = s\,th(m-m_0)\sigma;\quad W_{DC} = 2s^2 J\,th\,\sigma. \qquad (7)$$

Доменная стенка (7) статическая, что является следствием сохранения $S^z = \sum S^z_m$ в модели (1). Обратим внимание и на то, что W_{DC} не зависит от координаты m_0 центра стенки. Решение (7) описывает доменную границу произвольной толщины в отличие от известного решения

континуальной теории, где ширина границы должна превышать во много раз межатомное расстояние. Последнее возможно лишь в слабоанизотропной системе $(\sigma \ll 1)$; в этом пределе из (7) следует результат континуальной теории: $W_{DC} = 2s^2 J\sigma$. В пределе $\sigma \to \infty$ имеем $W_{DC} = 2s^2 J < \infty$, что свидетельствует о невозможности экстраполировать в эту область результат макроскопического рассмотрения.

В § 15 показано, что в кубической решетке задача о плоской доменной стенке с нормалью вдоль диагонали куба сводится к решенной в § 14 одномерной задаче. Получены выражения для плотности энергии и распределения спинов в такой плоской границе при произвольном значении параметра σ. Рассмотрена также стенка с нормалью вдоль ребра куба. Энергия и спиновая плотность этой стенки найдены в двух предельных случаях слабой и сильной анизотропии. Из сравнения результатов для двух типов доменных границ следует, что энергия плоской стенки в рассматриваемой системе зависит от положения стенки относительно кристаллической решетки. В модели Изинга дано простое объяснение этого результата.

В <u>пятой главе</u> построены квантовые аналоги изученных в четвертой главе феноменологическим путем солитонов в спиновой цепочке с обменной анизотропией и $s = 1/2$.

Для выяснения квантовомеханической природы солитонов удобно начинать с квазиклассического квантования локализованных решений уравнений Ландау-Лифшица. Такое квантование было проведено раньше в некоторых моделях и сравнение с точными квантовомеханическими результатами показало полное совпадение квазиклассических энергий солитонов с энергиями спиновых комплексов. Опубликовано доказательство совпадения и другой характеристики комплекса - среднего значения S^z_m - с плотностью продольной компоненты малоамплитудного солитона в цепочке с одноионной анизотропией. Совпадение энергий обнаружено и в немагнитных моделях. В значительной степени под влиянием перечисленных совпадений возникла точка зрения на солитон как связанное состояние квазичастиц. В §§ 16,17 такая интерпретация солитонов проверена для случая цепочки спинов с обменной анизотропией.

В § 16 получены квазиклассические энергии солитонов и проведено сравнение этих энергий с энергиями спиновых комплексов. Показано, что в первом порядке по малому параметру (константе анизотропии σ) имеется полное совпадение указанных энергий как в случае бесконечной цепочки спинов $s = 1/2$, так и в случае полуограниченной цепочки. Для бесконечной системы найдены и другие общие черты спинового комплекса и солитона: групповая скорость тяжелого комплекса равна нулю, что можно сопоставить статическому характеру доменных стенок[x)] в этой модели; пересечение ветвей спиновых комплексов с разными n в квантовом случае можно связать с наличием движущихся без прецессии солитонов в феноменологической теории. Таким образом, полученные здесь результаты согласуются с указанной раньше интерпретацией солитонов.

В § 17 проведено исследование совпадения другой характеристики солитона и комплекса – распределения продольной компоненты спина S_m^z. Для этой цели вычислено среднее значение S_m^z в предельно тяжелом спиновом комплексе. При помощи (2) и (3) получено следующее выражение для среднего значения S_m^z $(n \to \infty)$:

$$\langle \psi_n | \hat{S}_m^z | \psi_n \rangle = \frac{1}{2} - \sum_{p=0}^{\infty} (-1)^p \exp[p\sigma(2m-2n-p-1)]. \tag{8}$$

Этот результат совпадает с классическим результатом (7) только в случае $\sigma \ll 1$. При $\sigma \gtrsim 1$, когда существенна дискретность решетки, можно говорить лишь о качественном сходстве распределений (7) и (8). В то же время энергия доменной стенки (7) совпадает с энергией тяжелого комплекса (4) при любом значении σ. Эти результаты указывают на необходимость более последовательного анализа точки зрения на солитон как связанное состояние магнонов.

В § 18 обращено внимание на то, что энергия и S_m^z не являются полным набором характеристик магнитных солитонов – имеются и две другие характеристики, S_m^x и S_m^y, которые также нужно сравнивать с соответствующими характеристиками квантового аналога. В спиновом комплексе, как в любом состоянии с фиксированным числом магнонов, средние значения S_m^x и S_m^y тождественно равны нулю – в доменной стенке $S_m^y = 0$, но $S_m^x = s[ch(m-m_0)\sigma]^{-1}$ (см. (7)). При этом подчеркнем, что отличие в x-ых компонентах стенки и спинового комплекса существенно и в пределе слабой анизотропии, т.е. это отличие не обусловлено дискретностью решетки. Таким образом, становится ясно, что, ограничиваясь рассмотрением состояний с фиксированным n, невозможно добиться полного соответствия между квантовомеханическими и классическими результатами. Поэтому при поиске квантового аналога магнитных солитонов следует рассматривать состояния общего вида.

Доказано, что в анизотропной цепочке спинов $s = 1/2$ при любом σ существует одно и только одно состояние, средние значения S_m^α, $\alpha = x, y, z$ и энергия в котором совпадают с соответствующими характеристиками (7) доменной стенки. Это состояние найдено, оно оказалось гауссовской комбинацией тяжелых комплексов:

x) Согласно упомянутой выше трактовке солитонов доменная стенка соответствует предельно тяжелому спиновому комплексу (комплексу с $n \to \infty$, n – число связанных магнонов).

$$|\phi_{m_0}\rangle = A \sum_{k=-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{\sigma}{2}\left(k+\frac{1}{2}-\alpha\right)^2\right] \cdot |\psi_{N_0+k}\rangle, \tag{9}$$

$$m_0 = N_0 + \alpha, \ |\alpha| \le \frac{1}{2}, \ N_0 \to \infty.$$

Состояние $|\phi_{m_0}\rangle$ стационарно, средние S_m^α, в нем не зависят от времени и это отражает статический характер доменной стенки в анизотропной цепочке. При расчетах обнаружена и использована аналогия изучаемой доменной стенки с ферми-ступенькой идеального газа с эквидистантным спектром.

Ранее другими авторами было показано, что если θ_m удовлетворяет уравнениям, равносильным уравнению (6) для углов классической доменной стенки, в бесконечной цепочке (I) существует стационарное состояние следующей своеобразной формы:

$$|\tilde{\phi}_{m_0}\rangle = \left(\prod_m e^{-i\theta_m \hat{S}_m^y}\right)|0\rangle. \tag{10}$$

С помощью точного решения уравнения (6), полученного нами в § 14, можно найти явный вид $|\tilde{\phi}_{m_0}\rangle$, подставляя в (10) $\cos\theta_m = th(m-m_0)\sigma$. В § 19 показано, что состояния $|\phi_{m_0}\rangle$ из (9) и $|\tilde{\phi}_{m_0}\rangle$ из (10) совпадают, т.е. (9) и (10) являются разными формами одного и того же состояния цепочки. Из соотношения (10) следует ряд свойств квантовой доменной стенки: состояние $|\phi_{m_0}\rangle$ представлено как прямое произведение известных спиновых когерентных состояний – следовательно, оно минимизирует произведения неопределенностей. Корреляционные функции $\langle \phi_{m_0} | \hat{S}_{m_1}^{\alpha_1} \hat{S}_{m_2}^{\alpha_2} | \phi_{m_0} \rangle$ при $m_1 \neq m_2$ факторизуются – это также свойство, которое можно было ожидать из факта, что $|\phi_{m_0}\rangle$ осуществляет полное соответствие между квантово-механическим и классическим описанием доменных стенок.

В отличие от статических доменных границ бион, изученный в § 13, обладает внутренней прецессией. Полный квантовый аналог биона не может быть стационарным состоянием системы, так как в стационарном состоянии средние значения S_m^α, $\alpha = x, y, z$, не зависят от времени. В § 20 построено нестационарное состояние слабоанизотропной полуограниченной цепочки спинов, $s = 1/2$, следующего вида:

$$|\phi_N(t)\rangle = e^{-i\varepsilon_N t} \sum_{k=-\infty}^{\infty} C_k e^{-ik\omega t} |\psi_{N+k}\rangle, \tag{11}$$

N – среднее число магнонов, $\omega = \sigma^2/2ck^2\sigma N$, $\sigma \ll 1$ и $\sigma N \gtrsim 1$. Коэффициенты C_k не зависят от времени[x)], они описываются гауссовским распределением с шириной, слабо зависящей от параметра σN.

x) C_k определялись из условия совпадения (11) и (12) (см. дальше) при $t = 0$.

По порядку величин ширина $\Delta K \sim \sigma^{-1/2}$. $|\psi_n\rangle$ в (II) – спиновый комплекс, изученный в § 6.

В состоянии (II) выполнено

$$\langle \Phi(t)|\hat{S}_m^\alpha|\Phi(t)\rangle = S^\alpha_{m,\text{бион}}; \quad \langle\Phi|\mathcal{H}|\Phi\rangle = W_{\text{бион}},$$

где $S^\alpha_{m,\text{бион}}$ и $W_{\text{бион}}$ совпадают с найденными в § I3 выражениями:

$$S_m^x = \frac{1}{2}\sin\theta_m\cos\omega t; \quad S_m^y = -\frac{1}{2}\sin\theta_m\sin\omega t; \quad S_m^z = \frac{1}{2}\cos\theta_m;$$

$$\operatorname{tg}\frac{\theta_m}{2} = \frac{\operatorname{sh}\sigma N}{\operatorname{ch}(m\sigma\operatorname{th}\sigma N)}; \quad W = \frac{J}{2}\sigma\operatorname{th}\sigma N.$$

Состояние (II) можно записать и в другой форме:

$$|\Phi(t)\rangle \sim \left(\prod_{m=0}^{\infty} e^{-i\theta_m(\sin\omega t.\hat{S}_m^x + \cos\omega t.\hat{S}_m^y)}\right)|0\rangle. \qquad (I2)$$

$|\Phi(t)\rangle$ – нестационарное состояние цепочки, сохраняющее свой функциональный вид (I2) во времени. Оно локализовано при всех t и это первый пример построения нестационарного локализованного состояния квантовой системы. Отметим также, что с одной стороны $|\Phi(t)\rangle$ является нерасплывающимся пакетом (II) спиновых комплексов, а с другой – прямым произведением (I2) спиновых когерентных состояний. Эти два свойства являются основными свойствами изученных в диссертации квантовых солитонов. Мы полагаем, что такими они окажутся и для движущегося или сталкивающихся солитонов в неограниченной системе.

В квантовой картине постоянство частоты прецессии ω спинов в бионе вытекает из эквидистантности уровней спиновых комплексов (4) при $\Delta n \lesssim \sigma^{-1/2}$ и $\sigma \ll 1$. С ростом среднего числа магнонов в пакете частота ω падает – этот результат феноменологической теории в квантовом случае связан с существованием точки сгущения спектра состояний (4) $\mathcal{E}_\infty$ $\left(\mathcal{E}_\infty = \lim_{n\to\infty}\mathcal{E}_n = \frac{1}{2}J\operatorname{th}\sigma\right)$.

Из (I2) следует также, что $|\Phi(t)\rangle$ при всех временах минимизирует соотношения неопределенностей – другими словами, $|\Phi(t)\rangle$ есть максимально классическое состояние. В состоянии $|\Phi(t)\rangle$ парные корреляционные функции при $m_1 \neq m_2$ факторизуются. Из этого свойства следует, что усреднение операторных уравнений движения

$$\dot{\hat{S}}_m^\alpha = i[\mathcal{H}, \hat{S}_m^\alpha], \quad \alpha = x, y, z,$$

с помощью $|\Phi\rangle$ приводит к феноменологическим уравнениям Ландау-Лифшица $(m \to \xi)$

$$\frac{\partial\vec{S}}{\partial t} = \left[\frac{\delta W}{\delta\vec{S}} \times \vec{S}\right], \quad |\vec{S}(\xi,t)| = \frac{1}{2},$$

где функционал $W\{S^\alpha\}$ получен в континуальном пределе из гамильтониана $\mathcal{H}$ путем замены операторов $\hat{\vec{S}}_m$ на классические векторы[x)] длины I/2.

Поскольку спектр (4) эквидистантен (при $\sigma \ll 1$ и $\Delta n \lesssim \sigma^{-1/2}$) и распределение C_K в (II) четное, средняя энергия $\bar{E}(\bar{N})$ пакета $|\Phi\rangle$ ($\bar{N}$ – среднее число магнонов) совпадает при целочисленном $\bar{N}$ с энергией комплекса $\mathcal{E}_N$. Это позволяет согласовать полученные здесь результаты с многочисленными результатами (в том числе – полученными нами в § I6) о совпадении квазиклассических энергий солитонов с энергиями спиновых комплексов.

Таким образом, найдены волновые функции $|\Phi\rangle$ доменных стенок и бионов в цепочке спинов $s = 1/2$. Состояния $|\Phi\rangle$, в отличие от спиновых комплексов, не являются собственными состояниями оператора $\hat{S}^z$ (или, что то же самое, оператора числа магнонов $\hat{N}$). В этой связи напомним, что полное соответствие между квантовой и классической механикой линейных систем осуществляют состояния $|\alpha\rangle$ с таким же свойством: $\hat{N}|\alpha\rangle \neq N|\alpha\rangle$. Имеется, однако, важное отличие: состояния $|\alpha\rangle$, которые соответствуют классической спиновой волне, являются когерентной суперпозицией магнонов – пакеты $|\Phi\rangle$ построены из спиновых комплексов.

Зная волновые функции солитонов, можно в дальнейшем последовательным образом ставить и решать, например, вопрос о прямом возбуждении этих состояний в эксперименте. Следует ожидать, что в подходящих условиях (вероятно – при включении неоднородного переменного поля) одномерная спиновая система (I) перейдет из основного в изученные здесь когерентные состояния – в пользу такого предположения свидетельствуют полученные раньше результаты относительно возбуждения когерентных состояний линейных систем.

<u>В заключении</u> перечисляются основные результаты диссертации.

<u>Результаты, вошедшие в диссертацию</u>, опубликованы в работах:

1. Гочев И.Г. Связанные магнон-экситонные состояния.– ТМФ, 1975, т. 22, № 3, с. 412–417.
2. Georgiev G., Gochev I., Grozdev K. Two-magnon Bound States in a System of Coupled Electronic and Nuclear Spins.– Czech. J. Physics B, 1980, v. 30, N 11, p. 1247–1256.

x) В рассматриваемом случае эта операция эквивалентна усреднению $\mathcal{H}$ по состояниям, в которых парные корреляторы с $m_1 \neq m_2$ факторизуются.

3. Georgiev G., Gochev I. Localized Magnons around an Impurity in a Spin Chain with Next-Nearest Neighbour Interaction.- Phys. Stat. Sol. (b), 1978, v. 85, N 2, p. 657-662.
4. Гочев И.Г. Двухчастичные состояния решеточных систем и термодинамика сферической модели ферромагнетика.- Дубна, ОИЯИ, I980.- 9 с. (Препринт/Объед. ин-т ядер. исслед.: PI7-708).
5. Gochev I.G. Non-Physical Three Magnon Bound States of Dyson's Hamiltonian.- Phys. Lett. A, 1975, v. 53, N 3, p. 195-196.
6. Gochev I.G. Dyson-Maleev Transformation and Three-Magnon Problem for an s=1/2 Ferromagnet.- Phys. Stat. Sol. (b), 1976, v. 74, N 1, p. 311-316.
7. Гочев И.Г. Спиновые комплексы в ограниченной цепочке.- Письма в ЖЭТФ, I977, т. 26, вып. 3, с. I36-I38.
8. Gochev I.G. Bound States of Frenkel Excitons.- Phys. Stat. Sol. (b), 1974, v. 63, N 1, p. K59-K60.
9. Gochev I., Lalov I., Compound Vibronic Spectra of Molecular Crystals.- Bulg. J. Phys., 1979, v. 6, N 4, p. 442-450.
I0. Гочев И.Г., Филатова Л.Д., Цукерник В.М. Слабовозбужденные состояния изинговского ферромагнетика при наличии поперечного магнитного поля.- ФТТ, I974, т. I6, вып. 3, с. 745-75I.
II. Гочев И.Г. Об одной возможности оптического возбуждения спиновых комплексов.- ФТТ, I976, т. I8, вып. 7, с. I806-I8II.
I2. Гочев И.Г. О магнитных возбуждениях в $FeCl_2$ при наличии поперечного поля.- ФТТ, I977, т. I9, вып. 5, с. I4I0-I4I3.
I3. Гочев И.Г. О спектре одномерного ферромагнетика в поперечном поле.- ФТТ, I983, т. 25, вып. 2, с. 436-440.
I4. Гочев И.Г. Нелинейные возбуждения в ограниченной спиновой цепочке.- ФНТ, I984, т. I0, № 6, с. 6I5-6I9.
I5. Гочев И.Г. К теории плоских доменных стенок в ферромагнетике.- ЖЭТФ, I983, т. 85, вып. I(7), с. I99-206.
I6. Gochev I.G. Solitons and spin complexes in the Anisotropic Heisenberg chain.- Phys. Lett. A, 1982, v. 89, N 1, p. 31-32.
I7. Гочев И.Г. Доменная стенка в квантовой спиновой цепочке.- Дубна, ОИЯИ, I982 - 4 с. (Препринт/Объед. ин-т ядер. исслед.: PI7-748).
I8. Gochev I.G. Quantum domain wall and Coherent states for the Heisenberg-Ising spin 1/2 chain.- Phys. Lett. A, 1984, v. 104, N 1, p. 36-37.
I9. Гочев И.Г. Бионы и когерентные состояния для гейзенберговской цепочки спинов s=1/2 .- Дубна, ОИЯИ, I984.- II с. (Препринт/Объед. ин-т ядер. исслед.: PI7-663).

Рукопись поступила в издательский отдел
25 апреля I985 года.