

有限海森堡反铁磁团簇的基态总自旋

郭平, 刘拥军, 史小延

(西北大学 物理学系, 陕西 西安 710069)

摘要:借助基于 Lanczos 技术的严格对角化方法, 计算含有 13 个格点和 25 个格点的具有特定位形的海森堡反铁磁团簇, 结果表明它们的基态分别是 6 重态和 8 重态(宏观反铁磁系统是单态)。由此可得, 对于有限双组分海森堡反铁磁(HAF)系统, GSTS 基态总自旋则与它的格点位形有关, 可能取比 LPTS 最低总自旋高很多的总自旋值, 从而导致高度简并的基态。另外, 把 Lieb 和 Mattis 的定理发展到有限系统, 并分析了基态的简并对自旋位形和物理性质的影响。

关键词:有限双组分海森堡反铁磁团簇; 基态总自旋; 最低可能总自旋; Lieb-Mattis 定理; 简并
中图分类号: O482.51 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-274 X (2003)04-0389-05

实验表明, 高温超导材料的母体化合物镧铜氧 (La_2CuO_4) 是反铁磁 Mott 绝缘体^[1], Anderson 认为高温超导可能与量子涨落诱发自旋状态无序有关^[2]。这一观点激发了近十多年来对二维(2D)HAF 模型持续不断的研究热情。由于量子涨落导致数学上严格求解量子反铁磁系统极其复杂和困难, 2D HAF 系统的严格基态迄今仍未得到。尽管如此, 关于 HAF 系统, 还是获得了一些严格结果^[3~8]。文献[9]研究了周期边界条件下偶数格点的自旋为 1/2 的 HAF 链, 严格证明其基态是自旋单态(singlet)。文献[10]指出平移不变性并不是必要的, 只要两个子系统(subsystems)具有反演对称性仍可得到上述结论。文献[11]最终去掉了平移不变性和反演对称性的条件, 研究了任意维双组分无限 HAF 系统能级排序。他们的结论被称为 Lieb-Mattis(LM)定理: 每个总自旋值 S^T 对应的最低能量本征值按单调递增的顺序自然排列, 即: $E_{\min}(S^T + 1) > E_{\min}(S^T)$, 这里 $E_{\min}(S^T)$ 表示总自旋为 S^T 的最低能量本征值。文献[11]同时指出无限双组分 HAF 系统的基态是自旋单态($S^T=0$)。显然, 这一结论对任意维超立方结构的(hypercubic)无阻挫的无限 HAF 系统都是适用的。最近, 文献[12]对有几何阻挫(geometric frustration)的烧绿石结构的 HAF 系统(其 2D 对应物是 checkerboard 晶格)进行了研究, 发现它的基

态也是单重态。这个结论可以用于具有反演对称的 HAF 系统^[13]。

到目前为止, 宏观 2D 双组分 HAF 系统的基态是否存在经典奈尔(Neél)序仍未能严格证明。尽管 Mermin-Wagner 定理^[14]表明任意小的热力学扰动足以破坏奈尔序。但是, 许多解析近似和数值模拟研究表明, 2D 系统的量子涨落并不破坏经典奈尔序。对于存在奈尔序的无限 2D HAF 系统, 自旋将倾向于沿极化方向取向, 但由于它的两个子系统的格点数目相等, 即 $N_A = N_B$, 导致 GSTS 为 0。但是, 对于有限 HAF 系统的有限性将引起维度的降低, 从而使量子涨落增强。这能否导致奈尔序的消失是一个有意义的问题。要研究维度变化诱发的量子涨落增强是否会导致量子相变, 常规(N 是偶数)系统并不是一个好的选择。因为, 这类系统总是具有自旋的向上-向下对称性, 这会使得系统无论是处于奈尔序相还是自旋无序相, GSTS 都是取系统的 LPTS 值为 0。

通过几何边界的选择, 可以使有限 HAF 系统的两个子格具有不等的格点数, 即 $N_A \neq N_B$ 。在经典情形, 有限系统具有奈尔序, 且 GSTS 为 $|N_A - N_B|s$, 这里 s 表示格点自旋。对于有限的量子自旋系统, 当总格点数是偶数时, 系统的 LPTS 为 0(当总格点数是奇数时, LPTS 为 1/2), 如果 $N_A \neq N_B$, 量子系统

收稿日期: 2002-01-28

基金项目: 陕西省教育厅专项基金资助项目(FE94274); 西北大学科学研究基金资助项目(OONW54)

作者简介: 郭平(1974-), 女, 山西万荣人, 西北大学博士生, 从事强关联电子系统研究。

的 GSTS 取 LPTS 还是 $|N_A - N_B|s$ 将与基态是否存在奈尔序有密切关系。因为 GSTS 如果取 LPTS, 意味着系统的有限性诱发的量子涨落破坏了奈尔序, 系统将呈现自旋无序图像, 反之, 若 GSTS 不取 LPTS 而取 $|N_A - N_B|s$, 则表明量子涨落并不能破坏奈尔序。文献[15]研究了两子格格点数目不等的库仑排斥型量子费米(Fermi)系统, 得到在半满条件下 GSTS 为 $|N_A - N_B|/2$ 的严格结果。他们的证明要求系统具有偶数个格点。尽管在强库仑排斥极限下, 强关联费米系的半满 Hubbard 模型可以过渡到一个各向同性的自旋 1/2 的 HAF 模型^[16], 但它们毕竟不是全同的。系统 GSTS 取 $|N_A - N_B|s$ 的结论能否适用于有限量子自旋系统, 也就是量子涨落的增强是否导致系统基态自旋图像的改变, 正是我们想研究的问题。

只考虑最近邻相互作用 HAF 系统的哈密顿量表述为

$$H = J \sum_{nn} S_i \cdot S_j, \quad (1)$$

这里 $J > 0$ 。对于图 1(a) 所示的有限 HAF 团簇, 不具有自旋向上 - 向下对称性。其最简单的情形只有 5 个格点, 如图 1b, 它能被严格地解析求解。由于 S^T 和 $S_z^T = \sum_i S_z(i)$ ($S_z(i)$ 表示格点自旋的 z 分量) 是好量子数, 故可用 (E, S^T, S_z^T) 标记本征态。选择 $\{S_z(i)\}$ 表象 ($\{\}$ 表示系统所有格点的集合), 表 1 列

出了图 1(b) 的 32 个基矢。对角化 32×32 的 H 矩阵, 可以得到全部能量本征值及相应的本征函数。表 2 列出了所有的能量本征值和相应的 S^T, S_z^T 和简并度 g 。进一步的计算表明, 基态波函数 $\Psi(S^T, S_z^T)$ 是 4 度简并的, 其具体形式如下

$$\Psi_1\left(\frac{3}{2}, +\frac{3}{2}\right) = \frac{2}{\sqrt{5}} |11\rangle - \frac{1}{2\sqrt{5}} \sum_{k=12}^{15} |k\rangle; \quad (2)$$

$$\Psi_2\left(\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}\right) = \frac{2}{\sqrt{15}} \sum_{k=1}^6 |k\rangle - \frac{3}{2\sqrt{15}} \sum_{k=7}^{10} |k\rangle; \quad (3)$$

$$\Psi_3\left(\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{15}} \sum_{k=17}^{22} |k\rangle - \frac{3}{2\sqrt{15}} \sum_{k=23}^{26} |k\rangle; \quad (4)$$

$$\Psi_4\left(\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right) = \frac{2}{\sqrt{5}} |27\rangle - \frac{1}{2\sqrt{5}} \sum_{k=28}^{31} |k\rangle. \quad (5)$$

其中 $|k\rangle$ 在表 1 中被定义。计算结果表明, 系统 GSTS 并不取其 LPTS 1/2, 而是取一个较高的值 3/2, 基态不再是自旋单态而是四重态。

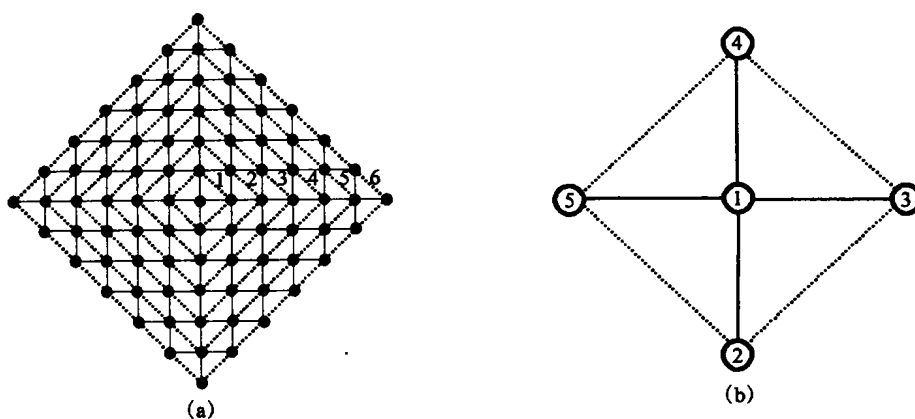


图 1 有限 HAF 团簇几何结构示意图

Fig. 1 The geometric shape of finite HAF cluster

在图 1 中实线表示最近邻反铁磁相互作用。图 1(a) 虚线标明这个团簇的层结构。5 个格点的团簇包括中心格点和第 1 层; 13 个格点的团簇包括中心点和第 1, 2 层; 25 个格点的团簇包括中心点和第 1, 2, 3 层, 等等; 图 1(b) 是 5 个格点的例子, 圆圈中的数字代表格点的编号。

使用基于 Lanczos 技术的严格对角化方法, 我们分别计算了包含 13 个和 25 个格点的有限 HAF 团簇。对于 13 个格点构成的 HAF 团簇, 基态能量为 $E_0 = -(0.444\ 544\ 27 \pm 10^{-8})J$, GSTS 取 5/2 而不是取它的 LPTS 值 1/2, 基态是 6 重简并的, 这些简并基态的磁量子数分别是 $S_z^T = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}$ 。这

一结果意味着在 $S^T < \frac{5}{2}$ 时,系统能级排序将不遵守 LM 定理。对于含有 25 个格点的有限 HAF 团簇,其基态 $E_G = -(0.510\ 594\ 23 \pm 10^{-8})J$, GSTS 取 $\frac{7}{2}$ 而不是 LPTS 值 $\frac{1}{2}$,基态是 8 重简并的,它们的磁量

子数分别为 $S_z^T = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}, \pm \frac{7}{2}$ 。由此可知,只有对 $S^T \geq \frac{7}{2}$ 的总自旋 S^T ,与之相应的最低能量才遵循 LM 定理的排序方式。

表 1 图 1(b)所示 HAF 团簇的所有可能的自旋图形

Tab. 1 All the possible spin configurations of the AF cluster defined by Fig. 1(b)

$ 1\rangle = \uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ 9\rangle = \downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ 17\rangle = \downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ 25\rangle = \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$
$ 2\rangle = \uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$	$ 10\rangle = \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ 18\rangle = \downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ 26\rangle = \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$
$ 3\rangle = \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ 11\rangle = \downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ 19\rangle = \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$	$ 27\rangle = \uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$
$ 4\rangle = \uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ 12\rangle = \uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ 20\rangle = \downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ 28\rangle = \downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$
$ 5\rangle = \uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$	$ 13\rangle = \uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ 21\rangle = \downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ 29\rangle = \downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$
$ 6\rangle = \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ 14\rangle = \uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ 22\rangle = \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$	$ 30\rangle = \downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$
$ 7\rangle = \downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$	$ 15\rangle = \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$	$ 23\rangle = \uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ 31\rangle = \downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$
$ 8\rangle = \downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ 16\rangle = \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ 24\rangle = \uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$	$ 32\rangle = \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$

注: $|i\rangle$ 表示 $\{S_z(i)\}$ 表象的第 i 个基矢。其中 Dirac 符号中的箭头表示了从第 1 到第 5 个格点上自旋 z 分量。

表 2 图 1(b)所示的格点系统的能量本征值 E 、相应总自旋 S^T 及其 z 分量 S_z^T

Tab. 2 The eigenvalue E , the total spin S^T and its z -component S_z^T for each level of the cluster defined by Fig. 1(b)

E	S^T	$S_z^T(g)$
$-\frac{3}{2}J$	$\frac{3}{2}$	$+\frac{3}{2}(1), +\frac{1}{2}(1), -\frac{1}{2}(1), -\frac{3}{2}(1)$
$-J$	$\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}(3), -\frac{1}{2}(3)$
0	$\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}(2), -\frac{1}{2}(2)$
$\frac{1}{2}J$	$\frac{3}{2}$	$+\frac{3}{2}(3), +\frac{1}{2}(3), -\frac{1}{2}(3), -\frac{3}{2}(3)$
J	$\frac{5}{2}$	$+\frac{5}{2}(1), +\frac{3}{2}(1), +\frac{1}{2}(1), -\frac{1}{2}(1), -\frac{3}{2}(1), -\frac{5}{2}(1)$

上述计算结果表明,只有当总自旋大于某个值时,有限团簇的能级才按 LM 定理表述的方式排序。为了使计算结果成为一般性的结论,需要作更深入的解析分析。我们注意到,文献[11]所使用的研究方法并不需要平移对称性,即这一方法可以移植到有限双组分 HAF 系统。我们按通常的方式把有限 HAF 系统划分成 A 和 B 两个子系统,显然方程(1)中的 S_i 和 S_j 分别属于不同的子系统。经过把其中一个子系统的自旋绕 z 轴旋转 π 角的正则变换,应用变分法可以得出:在每一 S_z^T 空间,最低能量本征态的所有系数都是正的,因此,它们不可能是简并的。要进一步确定这些态的总自旋,需借助一个特殊哈密顿量: $H' = JS^A \cdot S^B$, 这里 $S^A = \sum_{i \in A} S_i, S^B = \sum_{j \in B} S_j$ 。它的能量本征值很容易求出,为 $E'(S^T) =$

$\frac{J}{2} \{S^T(S^T + 1) - S^A(S^A + 1) - S^B(S^B + 1)\}$ 。若对 H' 执行同样的正则变换,可以得出在 S_z^T 空间, H' 的最低能量本征态 Ψ' 也一定是非简并的。注意到 Ψ 和 Ψ' 属于同一 S_z^T 空间的 $(S^T)^2$ 的本征函数(这里 $S^T = \sum_{i \in A, B} S_i$), 它们系数为正,意味不可以互相正交,因此,它们具有相同的总自旋。于是,可以通过 Ψ' 的 S^T 去推断出 Ψ 的 S^T 。设 $S^A \geq S^B$, 则 S^T 在 $S^A - S^B \leq S^T \leq S^A + S^B$ 范围内取值。对于给定的 S^A 和 S^B , 当 $S^T = S^A - S^B$ 时, $E'(S^T)$ 达到它的最小值

$$E'_{\min} = -J(S^A + 1)S^B. \tag{6}$$

Lieb 和 Mattis 仅讨论了两个子系统具有相同格点数 ($N_A = N_B$) 的情形^[1], 得出 GSTS 取 0 (也就是 LPTS) 的结论。这个结果对于传统的无限双组分 HAF 系统是正确的。对 $N_A = N_B$ 的双组分有限

HAF 团簇的情形也如此。现在需要讨论的是有限系统在 $N_A \neq N_B$ 的情形。

以 S_{\max}^A 和 S_{\max}^B 分别表示两个子系统中自旋值 S^A 和 S^B 的最大可能取值, $S_{\max}^A = N_A s$, $S_{\max}^B = N_B s$ 。定义 $\Delta \equiv |S_{\max}^A - S_{\max}^B| = |N_A - N_B|s$ 。如果 $|S_z^T| \geq \Delta$, 则在 S_z^T 空间, 当 $S^T = |S_z^T|$ 时, 能量 E' 取最低值, 同时 S^A 和 S^B 取它们的最大值。 Ψ' 的总自旋是 $|S_z^T|$ 。 H 的自旋空间旋转不变性使每个能级都是 $2S^T + 1$ 重简并的, 除了 $S^T < |S_z^T|$ 对应的能级外, 每个能量本征值在 S_z^T 空间都有一个对应的本征态。当 $S^T \geq \Delta$ 时, $E_{\min}(S^T + 1) > E_{\min}(S^T)$, 以 $E_{\min}(|S_z^T|)$ 代表 S_z^T 空间的最低能量本征值。当 $|S_z^T| > \Delta$ 时, $E_{\min}(S_z^T + 1) > E_{\min}(|S_z^T|)$ 。若 $|S_z^T| < \Delta$, 方程(6)表明, 在 S_z^T 空间, 当 $S^A = S_{\max}^A$ 和 $S^B = S_{\max}^B$ 时, E' 达到它的最低值, Ψ 对应的总自旋是 Δ , 因此 HAF 的基态是 $2\Delta + 1$ 重简并。由此, 对于具有任意几何外形的双组分 HAF 有限团簇, 可以得出下面的结论: ① 它的 GSTS 总是 $\Delta = |N_A - N_B|s$, 基态是 $2\Delta + 1$ 重简并; ② 如果 $S^T \geq \Delta$, 能级仍然按以下方式 $E_{\min}(S^T + 1) > E_{\min}(S^T)$ 排序; ③ 当 $|S_z^T| \geq \Delta$ 时, 能级对于 S_z^T 以类似方式排序, 即

$$E_{\min}(|S_z^T| + 1) > E_{\min}(|S_z^T|). \quad (7)$$

对于 $N_A = N_B$ 的双组分 HAF 系统, 基态是自旋单态 ($S^T = 0$), 而对自旋为 $1/2$ 且满足 $|N_A - N_B| = 1$ 的有限 HAF (如: $3 \times 3, 5 \times 5, 7 \times 7$ 等) 团簇, GSTS 是 $1/2$, 且基态是二重简并的。这些都是 GSTS 取 LPTS 的例子。但是, 如果有限双组分 HAF 团簇满足 $|N_A - N_B| > 1$, GSTS 总是高于 LPTS。其实, 图 1(a) 所示的 HAF 团簇, 它的两个子系统的格点数 N_A 和 N_B 有相当大的差别。对一个含有 m 层格点的系统, 格点的总数为

$$N = 1 + \sum_i^m 4i = 2m^2 + 2m + 1, \quad (8)$$

并且有 $|N_A - N_B| = 2m + 1$ 。当格点自旋 $s = \frac{1}{2}$ 且 $m = 2$ 时, $\Delta = |N_A - N_B|s = \frac{5}{2}$; $m = 3$ 时, $\Delta = |N_A - N_B|s = \frac{7}{2}$ 。这些结果与严格对角化方法的数值计算结果是一致的。层数越多的系统, 它的基态就有越高的总自旋, 同时简并度也越高。可以认为反铁磁相互作用导致的奈尔序是 GSTS 高于 LPTS 的根本原因。在经典奈尔序的物理图像下, 若图 1(a) 中心格点自旋向上, 那么第 1 层格点的自旋向下, 第 2 层格点的自旋向上, 第 3 层格点的自旋向下等, 以此类

推。这样的排列方式自然导致总自旋取 $|N_A - N_B|s$ 。量子 HAF 有限团簇的基态自旋仍然取 $|N_A - N_B|s$ 而不是 LPTS, 说明维度的变化尽管引起量子涨落的增强, 但并没有破坏奈尔序。

当系统 GSTS 为 $|N_A - N_B|s$ 时, 对于 $|S_z^T| > 0$ 的每个简并态, 向上和向下自旋数目是不同的。源于自旋反转的量子涨落, 对于基态简并现象的出现起了重要作用。显然, 在 $S_z^T > 1$ 的情形, 由于 $|\Delta, S_z^T\rangle$ 态比 $|\Delta, S_z^T - 1\rangle$ 态可以更好地保持反铁磁关联, Ising 反铁磁关联能 $\langle \Delta, S_z^T | J \sum_{(i,j)} S_i^z S_j^z | \Delta, S_z^T \rangle$ 比 $\langle \Delta, S_z^T - 1 | J \sum_{(i,j)} S_i^z S_j^z | \Delta, S_z^T - 1 \rangle$ 低, 但由于在 $|\Delta, S_z^T - 1\rangle$ 态中自旋向上与向下数目之差比 $|\Delta, S_z^T\rangle$ 态中的小, 所以态 $|\Delta, S_z^T - 1\rangle$ 中源于自旋反转的量子涨落 $\langle \Delta, S_z^T - 1 | J/2 \sum_{(i,j)} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) | \Delta, S_z^T - 1 \rangle$ 产生的能量损失将大于态 $|\Delta, S_z^T\rangle$ 中的 $\langle \Delta, S_z^T | J/2 \sum_{(i,j)} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) | \Delta, S_z^T \rangle$ 。这两种因素导致的能量变化由于 H 的自旋空间旋转不变性而恰好可以完全抵消。另外, 一般, $2\Delta + 1$ 重简并态有相同能量, 并不意味着不同简并态的键能 (bond energy) $\langle \Psi_m | J S_i \cdot S_j | \Psi_m \rangle$ 与 $\langle \Psi_n | J S_i \cdot S_j | \Psi_n \rangle$ 相等, 而仅要求如下等式 $\sum_{(i,j)} \langle \Psi_m | J S_i \cdot S_j | \Psi_m \rangle = \sum_{(i,j)} \langle \Psi_n | J S_i \cdot S_j | \Psi_n \rangle$ 成立。我们采用严格对角化方法分别计算了含有 13 个格点和 25 个格点有限系统中所有键能的期望值, 发现系统基态的简并是细致的, 即对于任意的一对 S_i 和 S_j , 当 $m, n = \pm \Delta, \pm (\Delta - 1)$ 时, 总有 $\langle \Psi_m | J S_i \cdot S_j | \Psi_m \rangle = \langle \Psi_n | J S_i \cdot S_j | \Psi_n \rangle$ 。这一结论可以直接从 $S_i \cdot S_j$ 的旋转不变性得到解释。并且这种结论提供了一种从 Ising 反铁磁关联计算自旋反转量子涨落的有效方法。

增加新层扩展系统的尺寸 (参见图 1(a)), 可以使之更接近真实的宏观物理系统。尽管层数 m 趋于无穷大时, 系统的基态将是高度简并的 ($2m + 2$ 重), 但这并不意味着这样的宏观热力学磁性系统存在非零的零温熵^[17]。因为在热力学极限下, 将出现自旋对称性的自发破缺, 从而基态的简并得以解除。

GSTS 可以取高于系统 LPTS 的事实, 可能导致低能激发态会产生新的性质。比如, 13 个格点系统的第一激发态的总自旋并不是 $1/2$ 而是 $3/2$, 可以认为第一激发态是在基态背景上激发一个等效的自旋三重态。第一激发态也不取 LPTS 的事实, 可能会影响到系统的低温性质。另外, 基态的简并可能会导致 2D 和 3D 有限 HAF 系统磁性出现一些有意义的

变化。这和其他具有简并基态的自旋系统一样,在零温时,其磁化率在零场极限下将是无限的。换句话说,这种反铁磁系统在零温下将显示出顺磁行为。

上述结论很容易推广到具有铁磁次近邻相互作用的非均匀 HAF 系统,这个系统的哈密顿量可以表示为

$$H = \sum_{nn} J_{ij} S_i \cdot S_j + \sum_{nnn} J'_{ik} S'_i \cdot S_k,$$

其中 $J'_{ik} \leq 0$ 。尽管我们的数值计算仅限于图 1(a) 形状的系统。但是,解析分析适用于任意几何外形的有限双组分 HAF 系统,即由式(7)所表述的结论具有普遍意义。

参考文献:

- [1] SHIRANE G, ENHOH Y, BIRGENAU R J, *et al.* Two-dimensional antiferromagnetic quantum spin-fluid state in La_2CuO_4 [J]. *Phys Rev Lett*, 1987, 59: 1 613-1 617.
- [2] ANDERSON P W. The resonating valence bond state in La_2CuO_4 and superconductivity [J]. *Science*, 1987, 235, 1 196-1 120.
- [3] DYSON F J, LIEB E, SIMON B. Phase transitions in quantum spin systems with isotropic and nonisotropic interactions [J]. *J Stat Phys*, 1978, 18, 335-340.
- [4] TIAN G S. Ferrimagnetism in a one-dimensional Heisenberg model [J]. *Phys Rev B*, 1997, 56: 5 355-5 361.
- [5] NEVES E J, PEREZ J F. Long range order in the ground state of two-dimensional antiferromagnets [J]. *Phys Lett A*, 1986, 114, 331-334.
- [6] AFFECK I, KENNEDY T, LIEB E, *et al.* Valence bond ground states in isotropic quantum antiferromagnets [J]. *Commun Math Phys*, 1988, 115, 477-480.
- [7] KENNEDY T, LIEB E, SHASTRY B S. Equivalence of certain convex and nonconvex models of spatially modulated structures [J]. *J Stat Phys*, 1988, 53: 1 031-1 035.
- [8] KUBO K, TATSUYA T. Existence of long-range order in the XXZ model [J]. *Phys Rev Lett*, 1988, 61: 2 585-2 590.
- [9] MARSHALL W. Antiferromagnetism [J]. *Proc Roy Soc (London) A*, 1955, 232: 48-51.
- [10] LIEB E, SCHULTZ T, MATTIS D. Two soluble models of an antiferromagnetic chain [J]. *Ann Phys*, 1961, 16: 407-412.
- [11] LIEB E, MATTIS D. Ordering energy levels of interacting spin systems [J]. *J Math Phys*, 1962, 3: 749-753.
- [12] LIEB E, SCHUPP P. Ground state properties of a fully frustrated quantum spin system [OL]. [cn. arxiv. org/abs/math-ph/9908019](http://cn.arxiv.org/abs/math-ph/9908019).
- [13] LIEB E, SCHUPP P. Singlets and reflection symmetric spin systems [OL]. [cn. arxiv. org/abs/math-ph/9910037](http://cn.arxiv.org/abs/math-ph/9910037).
- [14] MERMIN M D, WAGNER H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one-or two-dimensional isotropic Heisenberg models [J]. *Phys Rev Lett*, 1966, 17: 1 133-1 136.
- [15] LIEB E. Two theorems on the Hubbard model [J]. *Phys Rev Lett*, 1989, 62: 1 201-1 205.
- [16] ANDERSON P W. New approach to the theory of superexchange interactions [J]. *Phys Rev*, 1959, 115: 2-10.
- [17] RAMIREZ A P, HAYASHI A, CAVA R J, *et al.* Zero-point entropy in 'spinice' [J]. *Nature*, 1999, 399: 333-337. (编辑 曹大刚)

The total spin of the finite Heisenberg antiferromagnet cluster

GUO Ping, LIU Yong-jun, SHI Xiao-yan

(Department of Physics, Northwest University, Xi'an 710069, China)

Abstract: For clusters of 13 and 25 sites with the special shape, the numerical results by using the exact diagonalization based on Lanczos technique show that their GS are respectively 6-fold and 8-fold degeneracy (the GS of macroscopic antiferromagnet is singlet). So for finite bipartite HAF, the GSTS is related to its shape. It is possible that the GS takes much higher value of TS than the lowest one, thus the GS is higher degenerate. Moreover, Lieb and Mattis's approaches are extended to finite systems. The effect of the ground-state degeneracy on the spin status and physical properties are investigated.

Key words: finite bipartite HAF cluster; ground-state total spin; the lowest possible total spin; Lieb and Mattis's theorem; degeneracy