объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р17-80-708

И.Г.Гочев

ДВУХЧАСТИЧНЫЕ СОСТОЯНИЯ РЕШЕТОЧНЫХ СИСТЕМ И ТЕРМОДИНАМИКА СФЕРИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ФЕРРОМАГНЕТИКА

Направлено в ТМФ

1980

Исследование слабовозбужденных состояний гейзенберговского ферромагнетика, начатое в работах Блоха [1] и продолженное в работах Бете [2] и Уортиса [3], привело, в частности, к полному решению задач об одномагнонных и двухмагнонных состояниях в этой системе. В работах [2-4] найдены связанные состояния двух магнонов и установлены условия их существования. Связанные состояния по энергии лежат ниже области непрерывного спектра, их волновые функции монотонно спадают с расстоянием, на больших расстояниях этот спад следует экспоненциальному закону. Несложный анализ указанных свойств решения двухмагнонной задачи указывает на некоторое сходство поведения волновых функций с поведением корреляционных функций в моделях статистической механики.

В настоящей работе мы установим и обсудим связь двухчастичной задачи в анизотропной модели Гейзенберга /или близкой ей по содержанию задачи о двухбозонных состояниях в решеточной системе/ с задачей о термодинамических функциях в сферической модели ферромагнетика. Сначала установим связь двухчастичной задачи с задачей о случайном блуждании частицы, а потом, используя известную связь последней задачи с термодинамикой сферической модели [5], свяжем исходную квантовомеханическую задачу с указанной задачей статистической физики. В результате будет показано, что внутренняя энергия и парная корреляционная функция сферической модели совпадают соответственно с энергией и волновой функцией двухчастичного состояния некоторого бозонного гамильтониана с взаимодействием, простым образом зависящим от температуры.

Отметим, что установленная нами здесь связь в принципе отличается от широко обсуждаемой в литературе связи статистической механики двухмерных решеток с динамикой одномерных спиновых цепочек /из последних обзоров, касающихся этой связи, укажем на [6] /. В настоящей работе мы не используем метод матрицы перехода, и установленная здесь связь имеет место при фиксированной размерности пространства d, т.е. d-мерная сферическая модель связывается с квантовомеханической задачей на той же самой d-мерной решетке.

1. Гамильтониан анизотропной модели Гейзенберга записывается в виде

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\sum_{\ell,\delta}[\sigma(S_\ell^x S_{\ell+\delta}^x + S_\ell^y S_{\ell+\delta}^y) + S_\ell^z S_{\ell+\delta}^z] - h\sum_\ell S_\ell^z. \qquad /1/$$

Здесь $\vec{\delta}$ - вектор, соединяющий ближайших соседей, h - магнитное поле, σ - константа обменной анизотропии, $0 \le \sigma \le 1$. При $\sigma=1$ система /1/ известна как изотропная модель Гейзенберга, а при $\sigma=0$ /1/ описывает модель Изинга. Так как $\mathcal{H}$ коммутирует с оператором S^z, состояния системы можно классифицировать по числу перевернутых спинов n. Состояние, в котором все спины направлены вверх, является основным состоянием, состояния с n=1 известны как спиновые волны Блоха, или одномагнонные состояния. Двухмагнонные состояния ферромагнетика /1/ рассмотрены в работах /2/ /одномерный случай/ и /3,4/ /двух- и трехмерная решетки/. Для дальнейшего полезно иметь решение двухмагнонной задачи системы /1/ при произвольной размерности пространства d и $S=\frac{1}{2}$. Для простоты будем рассматривать кубические решетки, обобщение на решетки другой симметрии делается без принципиальных затруднений. Записывая вектор двухмагнонного состояния системы /1/ в виде $|\Psi\rangle = \sum_{\ell_1 \neq \ell_1} B_{\ell_1 \ell_2} S^-_{\ell_1} S^-_{\ell_2}|0\rangle$ и вводя импульс центра инерции $\vec{k}$ /мы пользуемся периодическими граничными условиями/ $B_{\ell_1\ell_2} = F(\vec{\ell}_2 - \vec{\ell}_1)\exp[i\frac{\vec{k}}{2}(\vec{\ell}_1 + \vec{\ell}_2)]$, $F(\vec{r}) = F(-\vec{r})$, из уравнения Шредингера можно получить уравнения для амплитуд $F(\vec{r})$. В эти уравнения $\vec{k}$ входит как параметр. Мы рассмотрим случай $\vec{k}=0$ и запишем уравнения в виде /ср. с /4/ /:

$$2tF(\vec{r}) - \sum_{\delta} F(\vec{r}+\vec{\delta}) = \frac{1}{\sigma} F(\vec{\delta})\Delta(\vec{r}-\vec{\delta}), \quad \vec{r} \neq 0. \qquad /2/$$

Здесь $\Delta(\vec{r})$ - символ Кронекера, $F(0) \equiv 0$, $t = (2d - E + 2h)/2\sigma$, E- энергия двухмагнонного состояния /энергия основного состояния принята за начало отсчета/. Можно убедиться, что метод Фукуды-Уортиса /4/ применим для решения /2/ в случае произвольного d, и результат оказывается следующим: ниже области непрерывного спектра в зависимости от значения σ могут существовать не более чем два изолированных уровня, один - невырожденный /по энергии он лежит ниже всех двухчастичных состояний/ и один - (d-1) - кратно вырожденный. Только в пределе $\sigma=0$ они сливаются в один d-кратно вырожденный уровень. Волновая функция невырожденного уровня удовлетворяет условию $F(\vec{\delta}) = F_1$ для всех $\vec{\delta}$. Полное решение задачи об этом состоянии /в дальнейшем нас будет интересовать только это состояние/ можно записать в следующем виде:

$$E = 2h + 2d - 2\sigma t,$$
$$F(\vec{r}) = \frac{t - \sigma d}{\sigma} G_{\vec{r}}(t) F_1, \qquad /3/$$

$$(t-\sigma d)\, G_0(t) = 1.$$

Здесь

$$G_{\vec r}(t) = (2\pi)^{-d} \int_{-\pi}^{\pi} \dots \int dq_1 \dots dq_d \; \frac{e^{i\vec q \vec r}}{t-(\cos q_1 + \dots + \cos q_d)} \; -$$

решеточные функции Грина. При $d=1,2,3$ из /3/ можно получить все ранее известные результаты.

Нижняя граница непрерывного двухчастичного спектра определена равенством $E = \tilde E_{min} = 2h + 2d(1-\sigma)$. Критическое значение σ_0, при котором происходит отщепление /если мы уменьшаем σ, т.е. идем в сторону модели Изинга/, легко найти из /3/, подставляя $t = t_{min} = d$:

$$\sigma_0 = 1 - W_d^{-1}, \qquad /4/$$

где $W_d = G_0(d)\cdot d$ - т.н. интеграл Ватсона, $W_d = \infty$ при $d=1,2$; $W_3 =$ 1,51638 и $W_d \to 1$ при $d \to \infty$. Спиновый комплекс существует при всех $\sigma < \sigma_0$, при $d=1,2$ $\sigma_0 = 1$, при $d \geq 3$ $\sigma_0 < 1$, в пределе $d \to \infty$ $\sigma_0 \to 0$.

2. Для дальнейшего нам понадобится решение двухчастичной задачи в решеточной системе бозонов с δ-образным потенциалом притяжения. В литературе более широко известен и обсуждается непрерывный аналог этой системы /7/ /в одномерном случае с потенциалом отталкивания эта модель известна как модель Либа-Линигера /8/ /. Гамильтониан запишем в виде

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{4} \sum_{\ell,\delta} a_\ell^+ a_{\ell+\delta} - \frac{\alpha}{2} \sum_\ell n_\ell^2 + h_1 \sum_\ell n_\ell \; . \qquad /5/$$

Здесь a - бозонные операторы, $n_\ell = a_\ell^+ a_\ell$, $\alpha \geq 0$, $h_1 \geq 0$. Так как $\mathcal{H}$ коммутирует с оператором числа бозонов, можно корректно сформулировать n-частичную задачу. Здесь мы рассмотрим состояния с $n=2$, т.е. $|\Psi\rangle = \sum_{\ell_1,\ell_2} \Phi(\vec\ell_2 - \vec\ell_1) \exp[i\frac{\vec k}{2}(\vec\ell_1 + \vec\ell_2)] \cdot a_{\ell_1}^+ a_{\ell_2}^+ |0\rangle$. Уравнения для амплитуд $\Phi(\vec r)$ при $\vec k = 0$ имеют вид:

$$2t_1 \Phi(\vec r) - \sum_\delta \Phi(\vec r + \vec\delta) = 2\alpha\, \Phi(0) \cdot \Delta(\vec r), \qquad /6/$$

где $t_1 = 2h_1 - \alpha - E$; E - энергия, отсчитываемая от энергии состояния с $n=0$ /здесь мы не будем обсуждать вопроса об основном состоянии системы /5//. Систему /6/ можно решить тем же методом Уортиса-Фукуды и показать, что имеется не больше чем одно связанное состояние двух бозонов, его волновая функция и энергия даются выражениями:

$$E = 2h_1 - \alpha - t_1,$$

$$\Phi(\vec{r}) = \alpha\, G_{\vec{r}}(t_1)\Phi(0), \qquad /7/$$

$$\alpha G_0(t_1) = 1.$$

Критическое значение α_0 получается из последнего равенства в /7/, если положить $t_1 = d$ /т.е. $E = \tilde{E}_{min} = 2h_1 - \alpha - d$):

$$\alpha_0 = W_d^{-1} d. \qquad /8/$$

Связанное состояние существует при сколь угодно слабом притяжении в одно- и двухмерной системах, при $d \geq 3$ оно существует только в области достаточно сильного притяжения.

Заканчивая рассмотрение двухчастичных задач, отметим следующее. Волновые функции определены в /3/ и /7/ с точностью до произвольной постоянной F_1 или $\Phi(0)$, которые можно найти из условия нормировки. Если исключить $\Phi(0)$ из уравнений /7/ и получить систему уравнений для $\Phi(\vec{r})$, $\vec{r} \neq 0$, простое сравнение с системой /2/ показывает, что решения обоих задач совпадают после замены $t = t_1$, $\sigma = (t_1 - \alpha)/d$.

3. Критическое значение σ_0, полученное при всех d в форме /4/, совпадает с хорошо известной величиной в теории случайного блуждания, а именно, с вероятностью возврата блуждающей по решетке случайным образом частицы /иногда ее называют вероятностью Пойа/ [9]. Покажем, что это совпадение является следствием более общей связи этих двух задач.

В теории случайного блуждания /см.[9]/ рассматривается величина $P_N(\vec{r})$ - вероятность того, что частица после N шагов попадает в точку $\vec{r}$ /мы будем интересоваться только простейшей задачей о случайном блуждании с одинаковой вероятностью прыжка в соседний узел $(2d)^{-1}$ по кубическим решеткам/. Для этих величин легко получается рекуррентное соотношение $P_{N+1}(\vec{r}) = (2d)^{-1} \sum_{\delta} P_N(\vec{r}+\vec{\delta})$, $P_0(\vec{r}) = \Delta(\vec{r})$. Так же хорошо известна и величина $U(z,\vec{r})$ - производящая функция для траекторий, кончающихся в точке $\vec{r}$: $U(z,\vec{r}) = \sum_{N=0}^{\infty} P_N(\vec{r})\, z^N$. Для этой функции получается следующее уравнение[9]:

$$U(z,\vec{r}) - \frac{z}{2d}\sum_{\delta} U(z,\vec{r}+\vec{\delta}) = \Delta(\vec{r}). \qquad /9/$$

Решением /9/ являются хорошо известные выражения для $U(z,\vec{r})$. Зная производящую функцию, вероятность возврата P можно найти по формуле [9] $P=1-[U(1,0)]^{-1}$. Определим функцию

$$P(z)=1-[U(z,0)]^{-1}. \qquad /10/$$

С ее помощью неоднородную систему разностных уравнений /9/ можно преобразовать к виду

$$\frac{2d}{z}U(z,\vec{r}) - \sum_{\delta} U(z,\vec{r}+\vec{\delta}) = \frac{2d}{z}[1-P(z)]U(z,0)\Delta(\vec{r}). \qquad /11/$$

Таким образом, смотря на $P(z)$ как на независимый параметр задачи /при фиксированном z /, мы получили для величин $U(z,\vec{r})$ систему линейных однородных разностных уравнений /11/ /в отличие от обычно обсуждаемой в литературе неоднородной системы /9//, полностью совпадающую с системой уравнений для двухбозонной задачи /6/. Связь между решениями этих задач осуществляется соотношениями $t=d/z$, $\alpha=\frac{d}{z}[1-P(z)]$ /замена $\frac{P(z)}{z}=\sigma$, $\frac{d}{z}=t$ приводит нас к решению двухмагнонной задачи/. Очевидно, аналогом волновой функции в задаче о случайном блуждании является производящая функция $U(z,\vec{r})$, рассматриваемая на отрезке $0\le z\le 1$. Из выписанных выше равенств следует, в частности, что $\tilde{z}_{min}=1$ и $P(\tilde{z}_{min})=P(1)=P=\sigma_0$, т.е. критическое значение анизотропии в модели Гейзенберга равно вероятности возврата случайно блуждающей частицы по той же самой решетке. Критическое значение α_0 в двухбозонной задаче пропорционально вероятности невозврата. Заметим, что причиной появления элемента случайного блуждания в задаче о собственных значениях оператора /1/ является член, описывающий XY -взаимодействие.

4. Сферическая модель ферромагнетика, рассмотренная в работе Каца и Берлина [10], привлекает и в настоящее время внимание физиков. Энергию системы записывают в виде $E=-\frac{1}{2}\sum_{\ell,\delta}\epsilon_\ell\epsilon_{\ell+\delta}$, где ϵ_ℓ подчинены единственному условию $\sum_\ell \epsilon_\ell^2=N$ / N- число узлов решетки/. При $T>T_c$ / T_c - температура перехода/ для внутренней энергии /на одну частицу/ u и парной корреляционной функции $C(\vec{r})=\langle\epsilon_0\epsilon_{\vec{r}}\rangle$ получены следующие выражения [10]:

$$u = (4K)^{-1} - z_s,$$

$$C(\vec{r}) = (4K)^{-1} G_{\vec{r}}(z_s), \qquad /12/$$

$$4K = G_0(z_s), \quad K = (2T)^{-1}.$$

Здесь z_s - т.н. седловая точка, а уравнение, связывающее z_s с T, известно как уравнение для седловой точки.

Известна связь решения /12/ с решением задачи о случайном блуждании /5/: интеграл $G_0(z_s)$, который входит в уравнение /12/ для седловой точки, прямым образом определяет и функцию $U(z,0)$ в теории случайного блуждания. $U(z,\vec{r})$ и $C(\vec{r})$ также определяются одним и тем же интегралом $G_{\vec{r}}(t)$. На основе этого легко можно получить соотношение $P = 1 - \frac{T_c}{2d}$, т.е. $\frac{T_c}{2d}$ в сферической модели есть просто вероятность невозврата в задаче о случайном блуждании.

Нетрудно, однако, сообразить, что из этой связи между решениями обоих задач следует и существование некоторой системы уравнений для корреляторов $C(\vec{r})$ в сферической модели, аналогичной системе для производящих функций /11/. Выписать такую систему особенно просто, если сравнить решение /12/ с решением /7/ двухбозонной задачи. Очевидное совпадение при $a = (4K)^{-1} = \frac{T}{2}$ позволяет сразу написать систему /6/ для корреляторов $C(\vec{r})$ в сферической модели:

$$2t_3 C(\vec{r}) - \sum_{\delta} C(\vec{r}+\vec{\delta}) = \frac{1}{2K} C(0) \cdot \Delta(\vec{r}),$$

$$t_3 = (4K)^{-1} - u. \qquad /13/$$

Решением этой системы при условии, что $C(\vec{r}) = 0$ и $\sum C(\vec{r}) < \infty$ /т.е. $T > T_c$ /, являются уже выписанные выражения /12/ /условие нормировки здесь заменено условием $C(0) = 1$/.

Простая проверка показывает, что решения в рамках сферической модели и при $T < T_c$ /см. /10/ /:

$$u = (4K)^{-1} - d; \quad C(\vec{r}) = 1 - \frac{K_c}{K} + (4K)^{-1} G_{\vec{r}}(d); \quad 4K_c = G_0(d), \qquad /14/$$

удовлетворяют уравнениям /13/, т.е. система /13/ правильна при всех T.

5. Сравнение /2/, /6/, /11/ и /13/ показывает, что основные величины четырех рассмотренных задач связаны одной и той же системой уравнений /с точностью до очевидной замены переменных/. Критические значения параметров при этом подчинены следующим равенствам:

$$\sigma_0 = P = 1 - \frac{\alpha_0}{d} = 1 - \frac{T_c}{2d} = 1 - \frac{1}{W_d}. \qquad /15/$$

Произвольная постоянная, которая фигурирует в решении любой из указанных систем, находится: из условия нормировки - в квантовомеханической задаче, из условия /10/ - в задаче о случайном блуждании и из условия $C(0)=1$ - в сферической модели.

Остановимся более подробно на связи двухбозонной задачи с термодинамической задачей в сферической модели. Прежде всего, установленная нами выше связь позволяет заключить, что система /6/ при $\alpha<\alpha_0$ /т.е. когда отсутствует связанное состояние/ обладает решением

$$t_1 = d\,; \quad E = \tilde{E}_{min}\,; \quad \Phi(\vec{r}) = 1 - \frac{\alpha}{\alpha_0} + \alpha G_{\vec{r}}(d), \qquad /16/$$

которое является аналогом известного решения /14/ сферической модели при $T<T_c$. После этого приходим к выводу, что энергия и волновая функция двухчастичного состояния гамильтониана /5/ с наименьшей энергией /при $\alpha>\alpha_0$ это есть связанное состояние, при $\alpha<\alpha_0$ - состояние на дне области непрерывного спектра/ зависят от константы взаимодействия α так, как зависят от температуры внутренняя энергия и парная корреляционная функция в сферической модели. Аналогом параметра порядка в двухчастичной задаче является величина

$$m = \lim_{r\to\infty} \Phi(\vec{r}) = \begin{cases} 0, & \alpha>\alpha_0, \\ 1-\dfrac{\alpha}{\alpha_0}, & \alpha<\alpha_0. \end{cases} \qquad /17/$$

Тот факт, что $m=1$ при $\alpha=0$, можно доказать и непосредственно. Действительно, легко проверить равенство $\mathcal{H}\,\sum a^+_{\ell_1} a^+_{\ell_2}|0\rangle = -d\sum a^+_{\ell_1} a^+_{\ell_2}|0\rangle$, и так как $\tilde{E}_{min} = -d$, то $\sum a^+_{\ell_1} a^+_{\ell_2}|0\rangle$ есть двухчастичное состояние с наименьшей энергией. Очевидно, что для этого состояния $\Phi(\vec{r}) \equiv 1$ и оно соответствует состоянию с номинальной намагниченностью в сферической модели.

Выпишем аналоги некоторых термодинамических величин в двухчастичной задаче. Очевидно, роль теплоемкости будет играть величина $\frac{dE}{d\alpha}$, а роль восприимчивости - величина $\sum_{r} \Phi(\vec{r})$. Интересная связь между восприимчивостью и внутренней энергией в сферической модели при $T > T_c$ $\chi^{-1} = 1 - \frac{2(1+u)}{T}$, отмеченная Джойсом /5/, в терминах квантовомеханической задачи, имеет вид $\Delta E . \sum \Phi(\vec{r}) = 1$, где ΔE - энергия связи. Такое соотношение известно в двухчастичных задачах, оно отражает тот факт, что по мере приближения по энергии дна непрерывного спектра эффективный размер связанного состояния растет. Эффективный размер вероятностного облака в квантовомеханической задаче играет роль корреляционной длины в статистической задаче. Роль энергии связи в сферической модели выполняет величина $\tilde{u}(T) - u(T)$, где $\tilde{u}(T) = (4K)^{-1} - d$ /при $T < T_c$ $\tilde{u}(T)$ есть внутренняя энергия/.

Таким образом, равновесному состоянию сферической модели можно сопоставить стационарное двухчастичное состояние бозонного гамильтониана /5/ с наименьшей энергией. Если выбрать параметры /5/ в виде $h_1 = \alpha = \frac{T}{2}$, то энергия и волновая функция указанного стационарного состояния совпадают с внутренней энергией и парной корреляционной функцией сферической модели при температуре T. Парамагнитная фаза сферической модели соответствует связанному состоянию, а ферромагнитная фаза - состоянию на дне непрерывного спектра гамильтониана /5/.

Любопытно сравнить некоторые результаты нашей работы с результатами, полученные в рамках модели Изинга. В скейлинговом пределе в модели Изинга ранее было показано /11/, что корреляционные функции плоской решетки можно выразить через решение уравнения синус-Гордона. Недавно в работе /12/ было показано, что корреляционные функции можно выразить через решение некоторой замкнутой системы разностных уравнений при всех T. Нами здесь показано, в частности, что в сферической модели существует замкнутая система уравнений /13/ для самих корреляторов при всех T. В этом случае на эту систему можно смотреть как на систему уравнений, следующую из уравнения Шредингера для гамильтониана /5/.

В заключение отметим, что установленную нами здесь связь легко можно распространить на случаи, когда рассматриваются взаимодействия и более далеких соседей, а также решетки более сложной геометрии. При этом из справедливости /15/ следует, что критическое значение σ_0 равно найденной в настоящий момент практически во всех случаях вероятности возврата P. Дальнодействия, которые в сферической модели приводят к фазовому переходу даже в одномерных системах /5/, в двухчастичной задаче привели бы к разрушению спинового комплекса.

Пользуюсь случаем выразить благодарность В.Цукернику, В.Приезжеву, Н.Ангелеску, В.Загребнову и В.Федянину за обсуждение настоящей работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Bloch F. Zs.Phys., 1930, 61, p. 206.
2. Bethe H. Zs.Phys., 1931, 71, p. 205.
3. Wortis M. Phys.Rev., 1963, 132, p. 85.
4. Fukuda N., Wortis M. Journ.Phys.Chem.Sol., 1963, 24, p. 1675.
5. Joyce G.S. In: Physe Transitions and Critical Phenomena, ed. C.Domb and M.S.Green, vol. 2, p. 375, Academic Press, London, New York, 1972.
6. Kogut J. Rev.Mod.Phys., 1979, 51, p.659.
7. Березин Ф., Похил Г., Финкельберг В. Вестник МГУ, 1964, сер. 1, № 1, с. 21; Mc Guire J. Journ.Math.Phys., 1964, 5, p. 622.
8. Lieb E., Liniger W. Phys.Rev., 1963, 130, p. 1605.
9. Монтролл Э. В кн.: Прикладная комбинаторная математика, под ред. Э.Бекенбаха, "Мир", М., 1968, с. 9.
10. Berilin T., Kac M. Phys.Rev., 1952, 86, p. 821.
11. Mc Coy B.M., Tracu C.A., Wu T.T. Journ.Math.Phys., 1977, 18, p. 1058.
12. Mc Coy B.M., Wu T.T., ITP-SB-80-26, Inst.Theor.Phys., New York, 1980.

Рукопись поступила в издательский отдел
3 ноября 1980 года.