Лекция 16
Спиновая цепочка Гайзенберга и анзатц Бете

Рассмотрим цепочку из N спинов $S=1/2$, то есть пространство

$$\mathcal{H}_N = \underbrace{\mathbb{C}^2\otimes\cdots\otimes\mathbb{C}^2}_{N}, \tag{1}$$

на котором действует гамильтониан

$$H_{XYZ} = -\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\left(J_x\sigma_n^x\sigma_{n+1}^x + J_y\sigma_n^y\sigma_{n+1}^y + J_z\sigma_n^z\sigma_{n+1}^z\right). \tag{2}$$

Здесь σ_n^i действует на n-ю компоненту в $\mathcal{H}_N$, причем $(N+1)$-я компонента отождествляется с первой. Такая модель называется *XYZ-моделью Гайзенберга* с циклическими граничными условиями. В случае $J_x=J_y$ модель называют *XXZ-моделью*, а в случае $J_x=J_y=\pm J_z$ — *XXX-моделью*. Мы будем считать N четным числом.

Базис в пространстве $\mathcal{H}_N$ мы будем записывать в виде

$$|\varepsilon_1\rangle\otimes|\varepsilon_2\rangle\otimes\cdots\otimes|\varepsilon_N\rangle \equiv |\varepsilon_1\varepsilon_2\dots\varepsilon_N\rangle, \qquad \sigma^z|\varepsilon\rangle=\varepsilon|\varepsilon\rangle, \qquad \varepsilon=\pm. \tag{3}$$

Поскольку физика не зависит от общего множителя в гамильтониане, обычно вводят обозначения

$$\Gamma = J_y/J_x, \qquad \Delta = J_z/J_x \tag{4}$$

При этом принимается, что

$$J_x>0, \qquad |\Gamma|\le 1, \qquad |\Delta|\le|\Gamma| \quad \text{или} \quad |\Delta|\ge 1.$$

Без ограничения общности мы положим $J_x=1$. Гамильтониан записывается в виде

$$H_{XYZ} = -\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\left((1+\Gamma)(\sigma_n^+\sigma_{n+1}^- + \sigma_n^-\sigma_{n+1}^+) + (1-\Gamma)(\sigma_n^+\sigma_{n+1}^+ + \sigma_n^-\sigma_{n+1}^-) + \Delta\sigma_n^z\sigma_{n+1}^z\right). \tag{5}$$

Здесь

$$\sigma^+ = \frac{\sigma^x+i\sigma^y}{2} = \begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}, \qquad \sigma^- = \frac{\sigma^x-i\sigma^y}{2} = \begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix} \tag{6}$$

— операторы повышения и понижения спина.

Мы ограничимся случаем *XXZ-цепочки Гайзенберга*, то есть модели с $\Gamma=1$:

$$H\equiv H_{XXZ} = -\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\left(\sigma_n^x\sigma_{n+1}^x + \sigma_n^y\sigma_{n+1}^y + \Delta\sigma_n^z\sigma_{n+1}^z\right) = -\sum_{n=1}^{N}\left(\sigma_n^+\sigma_{n+1}^- + \sigma_n^-\sigma_{n+1}^+ + \frac{\Delta}{2}\sigma_n^z\sigma_{n+1}^z\right). \tag{7}$$

В этом случае гамильтониан коммутирует с z-компонентой суммарного спина цепочки

$$[H_{XXZ}, S^z]=0, \qquad S^z = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\sigma_n^z. \tag{8}$$

Соответственно пространство состояний модели расщепляется на собственные пространства оператора S^z:

$$\mathcal{H}_N = \bigoplus_{s=-N/2,-N/2+1,\dots,N/2}\mathcal{W}_N(s).$$

Легко видеть, что пространства $\mathcal{W}_N(\pm N/2)$ одномерны. Это значит, что мы знаем два собственных вектора, которые мы будем называть *псевдовакуумами*:

$$|\Omega_\pm\rangle = |\pm\pm\cdots\pm\rangle, \qquad H|\Omega_\pm\rangle = -\frac{N\Delta}{2}|\Omega_\pm\rangle. \tag{9}$$

Являются ли эти собственные векторы основными состояниями? И можно ли получить другие собственные векторы?

Давайте возьмем состояние $|\Omega_+\rangle$ и перевернем один спин:

$$|n\rangle = \sigma_n^- |\Omega_+\rangle = |+\cdots+\overset{n}{-}+\cdots+\rangle. \tag{10}$$

Индекс над знаком «$-$» означает его позицию. Очевидно,

$$\mathcal{W}_N(N/2-1) = \operatorname{span}\{|n\rangle\}_{n=1}^N.$$

В силу однородности (сдвиговой симметрии) гамильтониана собственные состояния в этом подпространстве должны иметь вид рядов Фурье:

$$|p\rangle = \sum_{n=1}^N e^{\mathrm{i}pn}|n\rangle. \tag{11}$$

В силу циклической симметрии переменная p ограничена условием

$$e^{\mathrm{i}pN} = 1. \tag{12}$$

Найдем энергию состояния $|p\rangle$:

$$\begin{aligned} H|p\rangle &= -\sum_{n=1}^N e^{\mathrm{i}pn}\left(|n-1\rangle + |n+1\rangle + \frac{\Delta}{2}(N-4)|n\rangle\right) \\ &= -\sum_{n=1}^N e^{\mathrm{i}pn}\left(e^{\mathrm{i}p} + e^{-\mathrm{i}p} + \frac{(N-4)\Delta}{2}\right)|n\rangle. \end{aligned}$$

Отсюда находим

$$H|p\rangle = \left(-\frac{N\Delta}{2} + \epsilon(p)\right)|p\rangle, \qquad \epsilon(p) = 2(\Delta - \cos p). \tag{13}$$

Мы видим, что $\epsilon(p) > 0$ при любых p, только если $\Delta > 1$. Так что только в этом случае состояние Ω_+ может оказаться основным. Более того, если это так, то при $\Delta < -1$ это состояние будет состоянием наибольшей энергии. Кроме того, легко видеть, что при $\Delta \to +\infty$ ферромагнитные состояния $|\Omega_\pm\rangle$ действительно являются основными, в то время как при $\Delta \to -\infty$ и четном N основными состояниями являются *антиферромагнитные* состояния $|\pm\mp\pm\mp\cdots\pm\mp\rangle$.

Мы можем *предположить*, что пространство параметра Δ делится на три области:

1) $\Delta > 1$: область ферромагнитных основных состояний $|\Omega_\pm\rangle$;

2) $-1 < \Delta < 1$: область неупорядоченных основных состояний, лежащих в секторе $\mathcal{W}_N(0)$ или $\mathcal{W}_N(\pm 1/2)$;

3) $\Delta < -1$: область антиферромагнитных основных состояний, лежащих в секторе $\mathcal{W}_N(0)$ или $\mathcal{W}_N(\pm 1/2)$.

Эти предположения действительно подтверждаются точным решением в термодинамическом пределе $N \to \infty$. Заметим, что случаи 2) и 3) наиболее интересны, так как даже основное состояние в них нетривиально.

Для получения собственных значений в секторах $W_N(\pm N/2)$, $W_N(\pm(N/2-1))$ действительно не нужно было ничего, кроме сохранения спина S^z. Теперь мы попробуем получить собственные состояния с двумя перевернутыми спинами, т. е. в секторе $W_N(N/2-2)$. Для этого нам потребуется учесть некоторые специфические свойства гамильтониана (7). Прежде всего положим

$$|n_1 n_2\rangle = \sigma_{n_1}^- \sigma_{n_2}^- |\Omega_+\rangle = |+\cdots+\overset{n_1}{-}+\cdots+\overset{n_2}{-}+\cdots+\rangle, \qquad n_1 < n_2. \tag{14}$$

Возьмем состояние общего вида

$$|\psi\rangle = \sum_{1 \le n_1 < n_2 \le N} \psi(n_1, n_2)|n_1 n_2\rangle.$$

Посмотрим, как гамильтониан действует на это состояние:

$$
\begin{aligned}
H|\psi\rangle = &-\sum_{n_1+1<n_2<n_1+N-1} \psi(n_1,n_2)\Big(|n_1-1,n_2\rangle + |n_1+1,n_2\rangle + |n_1,n_2-1\rangle + |n_1,n_2+1\rangle \\
&\quad + \frac{(N-8)\Delta}{2}|n_1 n_2\rangle\Big) \\
&\quad - \sum_n \psi(n,n+1)\left(|n-1,n+1\rangle + |n,n+2\rangle + \frac{(N-4)\Delta}{2}|n,n+1\rangle\right) \\
= &-\sum_{n_1+1<n_2<n_1+N-1} \Big(\psi(n_1+1,n_2) + \psi(n_1-1,n_2) + \psi(n_1,n_2+1) + \psi(n_1,n_2-1) \\
&\quad + \frac{(N-8)\Delta}{2}\psi(n_1,n_2)\Big)|n_1 n_2\rangle \\
&\quad - \sum_n \left(\psi(n-1,n+1) + \psi(n,n+2) + \frac{(N-4)\Delta}{2}\psi(n,n+1)\right)|n,n+1\rangle.
\end{aligned}
$$

Определяя оператор $\hat{H}$, действующий на волновую функцию $\psi(n_1,n_2)$, условием

$$
H|\psi\rangle = \sum_{n_1<n_2} (\hat{H}\psi)(n_1,n_2)|n_1 n_2\rangle,
$$

имеем

$$
\begin{aligned}
(\hat{H}\psi)(n_1,n_2) = &-\frac{(N-8)\Delta}{2}\psi(n_1,n_2) \\
&- \psi(n_1+1,n_2) - \psi(n_1-1,n_2) - \psi(n_1,n_2+1) - \psi(n_1,n_2-1), \qquad n_1+1<n_2, \quad (15)
\end{aligned}
$$

$$
(\hat{H}\psi)(n_1,n_2) = -\frac{(N-4)\Delta}{2}\psi(n_1,n_2) - \psi(n_1-1,n_2) - \psi(n_1,n_2+1), \qquad n_1+1=n_2. \tag{16}
$$

Первое соотношение имеет очевидный вид $\hat{H}\psi = (-N\Delta/2 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2)\psi$, где каждый из гамильтонианов $\hat{H}_i$, $i=1,2$ действует на i-ю переменную. Поэтому если мы забудем о втором соотношении (16), то из одного только первого соотношения (15) мы получим, что решения уравнения $\hat{H}\psi = E\psi$ должны быть комбинациями плоских волн

$$
\psi(n_1,n_2) = e^{\mathrm{i}p_1 n_1 + \mathrm{i}p_2 n_2},
$$

с энергиями

$$
E = -\frac{N\Delta}{2} + \epsilon(p_1) + \epsilon(p_2).
$$

Из этого выражения для энергии заключаем, что допустимы комбинации 16 членов

$$
e^{\pm\mathrm{i}p_1 n_1 \pm \mathrm{i}p_2 n_2}, \quad e^{\pm\mathrm{i}p_1 n_2 \pm \mathrm{i}p_2 n_1},
$$

(знаки «$\pm$» здесь независимы). Замечательно, что условие, которое следует из (16), допускает при любых p_1, p_2 решение в виде линейной комбинации всего двух слагаемых

$$
\psi_{p_1 p_2}(n_1,n_2) = A_{12}(p_1,p_2)e^{\mathrm{i}p_1 n_1 + \mathrm{i}p_2 n_2} + A_{21}(p_1,p_2)e^{\mathrm{i}p_2 n_1 + \mathrm{i}p_1 n_2}. \tag{17}
$$

То есть взаимодействие «псевдочастиц» в этой задаче *безотражательное*.

Соотношение (16) накладывает связи на коэффициенты A_{12}, A_{21}. Взяв любое n_1, $1 \le n_1 \le N-1$ получаем

$$
\frac{A_{12}(p_1,p_2)}{A_{21}(p_1,p_2)} = S(p_1,p_2) \equiv -\frac{1 + e^{\mathrm{i}p_1+\mathrm{i}p_2} - 2\Delta e^{\mathrm{i}p_1}}{1 + e^{\mathrm{i}p_1+\mathrm{i}p_2} - 2\Delta e^{\mathrm{i}p_2}} \tag{18}
$$

Осталось применить (16) в точке $n_1 = N$, $n_2 = 1$. Чтобы не повторять всех вычислений, можно воспользоваться циклической симметрией. Действительно, это условие сведется к (18), если потребовать

$$
\psi(n_1,n_2) = \psi(n_2, n_1+N). \tag{19}
$$

Отсюда получаем

$$\frac{A_{12}(p_1,p_2)}{A_{21}(p_1,p_2)} = e^{\mathrm{i}p_1N} = e^{-\mathrm{i}p_2N}. \tag{20}$$

Вместе с условием (18), получаем систему уравнений на p_1, p_2

$$e^{\mathrm{i}p_1N} = S(p_1,p_2), \qquad e^{\mathrm{i}p_2N} = S(p_2,p_1). \tag{21}$$

Эта система представляет собой обобщение уравнения (12) на случай двух псевдочастиц и является первым нетривиальным примером системы уравнений Бете в этой модели. Матрица $S(p_1,p_2)$ играет роль S-матрицы двух псевдочастиц (но при $\Delta<1$ не настоящих возбуждений!).

Поскольку гамильтониан (7) содержит только члены, отвечающие взаимодействию только соседних спинов, для трех и более перевернутых спинов не возникает никаких новых контактных членов. Поэтому обобщение на общий случай k перевернутых спинов (пространства $\mathcal{W}_N(N/2-k)$) сделать очень легко. Определим состояние

$$|n_1\dots n_k\rangle = \sigma^-_{n_1}\dots\sigma^-_{n_k}|\Omega_+\rangle. \tag{22}$$

Далее, ищем собственные векторы гамильтониана в виде «координатного» анзатца Бете

$$|p_1\dots p_k\rangle = \sum_{1\le n_1<\dots<n_k\le N}\ \sum_{\sigma\in S_k} A_\sigma(p_1,\dots,p_k)e^{\mathrm{i}\sum_{i=1}^k p_{\sigma_i}n_i}|n_1\dots n_k\rangle. \tag{23}$$

Условия на коэффициенты в волновой функции имеют вид

$$\frac{A_{\dots ij\dots}(p_1,\dots,p_k)}{A_{\dots ji\dots}(p_1,\dots,p_k)} = S(p_i,p_j). \tag{24}$$

Вместе с циклическим условием

$$\frac{A_{\sigma_1\sigma_2\dots\sigma_k}}{A_{\sigma_2\dots\sigma_k\sigma_1}} = e^{\mathrm{i}p_{\sigma_1}N} \tag{25}$$

получаем уравнения Бете

$$e^{\mathrm{i}p_iN} = \prod_{j=1(j\ne i)}^{k} S(p_i,p_j), \qquad i=1,\dots,k. \tag{26}$$

В отличие от случая $k=1$ в общем случае уравнения Бете допускают решения, для которых p_i не вещественны. Можно, однако, показать, что для каждого комплексного p_i имеется комплексно сопряженное ему p_j. Кроме того решения уравнений Бете не могут содержать двух одинаковых корней. Нетрудно показать, что если $p_i=p_j$, $i\ne j$, то собственный вектор равен нулю.

Энергия и квазиимпульс состояния (23) равны

$$E_{p_1\dots p_k} = -\frac{N\Delta}{2} + \sum_{i=1}^k \epsilon(p_i), \qquad P_{p_1\dots p_k} = \sum_{i=1}^k p_i. \tag{27}$$

Как и следовало ожидать, энергии и квазиимпульсы состояний вещественны.

Еще одним замечательным свойством системы (26) является существование специальной параметризации $p_i=p(v_i)$, в которой функция $S(p_i,p_j)$ зависит только от разности v_i-v_j. Именно, если положить

$$\Delta=-\cos\lambda, \qquad p(v)=\frac{\sin(\frac{\lambda}{2}+\mathrm{i}v)}{\sin(\frac{\lambda}{2}-\mathrm{i}v)}, \qquad S(v)=-\frac{\sin(\lambda+\mathrm{i}v)}{\sin(\lambda-\mathrm{i}v)} \tag{28}$$

при $-1\le\Delta\le1$ и

$$\Delta=-\operatorname{ch}\lambda, \qquad p(v)=\frac{\operatorname{sh}(\frac{\lambda}{2}+\mathrm{i}v)}{\operatorname{sh}(\frac{\lambda}{2}-\mathrm{i}v)}, \qquad S(v)=-\frac{\operatorname{sh}(\lambda+\mathrm{i}v)}{\operatorname{sh}(\lambda-\mathrm{i}v)} \tag{29}$$

при $\Delta < -1$, уравнения Бете примут вид

$$e^{\mathrm{i}p(v_i)N} = \prod_{j=1 (j\neq i)}^{k} S(v_i - v_j), \qquad i = 1, \ldots, k. \tag{30}$$

Такая параметризация кажется чудом, как чудом кажется и вообще возможность построения собственных векторов в виде бетевских состояний (23). В следующий раз мы получим собственные векторы и уравнения Бете в несколько более общем виде другим способом и обсудим их связь с интегрируемостью XXZ-цепочки.

Задачи

1. Выведите соотношения (18), (20).

2. Решите уравнения Бете при $\Delta = 0$. Выпишете явно все собственные состояния и уровни энергии системы.

3. Найдите все собственные состояния и уровни энергии для спиновых цепочек с $N = 2, 3$.

4. Проверьте формулы (28)—(30) для параметризации импульсов через переменные v_i.