УДК 538.9

О. В. ДЕРЖКО, Р. Р. ЛЕВИЦЬКИЙ, А. П. МОЇНА

НАБЛИЖЕННЯ КОМУТАЦІЙНИХ СПІВВІДНОШЕНЬ БОЗЕ І СПЕКТР ЕЛЕМЕНТАРНИХ ЗБУДЖЕНЬ У ТЕОРІЇ СПІНОВИХ СИСТЕМ

Розглянуто одновимірну $s = 1/2$ узагальнену XY модель у поперечному полі з періодичними граничними умовами, гамільтоніан якої $H = \Omega \sum_{j=1}^{N} s_j^z + \sum_{j=1}^{N} (J^{xx} s_j^x s_{j+1}^x + J^{xy} s_j^x s_{j+1}^y + J^{yx} s_j^y s_{j+1}^x + J^{yy} s_j^y s_{j+1}^y)$. За допомогою ферміонізації Йордана — Вігнера знайдено спектр елементарних збуджень $E_\varkappa = \varepsilon_\varkappa^{(-)} + \sqrt{\varepsilon_\varkappa^{(+)^2} + 4 | J^{++} |^2 \sin^2 \varkappa}$, $\varepsilon_\varkappa^{(+)} \equiv \Omega + \cos \varkappa (J^{xx} + J^{yy})/2$, $\varepsilon_\varkappa^{(-)} \equiv \sin \varkappa (J^{xy} - J^{yx})/2$, $| J^{++} |^2 \equiv [(J^{xx} - J^{yy})^2 + (J^{xy} + J^{yx})^2]/16$. Якщо ж прийняти для операторів s^+, s^- комутаційні співвідношення Бозе, то $\widetilde{E}_\varkappa = \varepsilon_\varkappa^{(-)} + \sqrt{\varepsilon_\varkappa^{(+)^2} - 4 | J^{++} |^2 \cos^2 \varkappa}$. Функціональна залежність енергії елементарних збуджень від квазіімпульсу не змінюється при наближенні комутаційних співвідношень Бозе, якщо $J^{xx} = J^{yy}$, $J^{xy} = - J^{yx}$.

У теорії квантових спінових систем (величина спіна $s = 1/2$) мають справу з спіновими операторами, компоненти яких $s^x = (s^+ + s^-)/2$, $s^y = (s^+ - s^-)/(2i)$, $s^z = s^+ s^- - \frac{1}{2}$ комутують на різних вузлах, а на одному вузлі задовольняють комутаційні співвідношення $[s^\alpha, s^\beta] = i s^\gamma$, де α, β, $\gamma = x$, y, z + циклічні перестановки, чи $[s^+, s^-] = 2s^z$, $[s^\pm, s^z] = \mp s^z$. При цьому часто для операторів s^+, s^- переходять до комутаційних співвідношень Бозе $[s^-, s^+] = 1 - 2s^+ s^- \simeq 1$ і вважають, що нехтувати доданком $2s^+s^-$ можна у випадку низькозбуджених станів [1—3]. Проаналізувати таке наближення, при якому враховують хіба що динамічну взаємодію спінів, а нехтують так званою кінематичною, можна у одновимірному випадку, для якого існує ряд точних результатів. При цьому виявляється, що для XXZ моделі Гейзенберга, гамільтоніан якої $H = h \sum_{j=1}^{N} s_j^z + \sum_{j=1}^{N} (J^{xx} s_j^x s_{j+1}^x + J^{xx} s_j^y s_{j+1}^y + J^{zz} s_j^z s_{j+1}^z)$, енергія одномагнонних станів, здобута за допомогою підстановки Бете [4], співпадає з енергією одночастинкових станів, знайденою після наближення комутаційних співвідношень Бозе для операторів s^+, s^- (енергія магнона у цьому випадку є $h + J^{xx} \cos \varkappa - J^{zz}$, $-\pi \leqslant \varkappa < \pi$). З другого боку, у праці [5] показано, що для моделі Ізінга в поперечному полі, гамільтоніан якої $H = \Omega \sum_{j=1}^{N} s_j^z + J \sum_{j=1}^{N} s_j^x s_{j+1}^x$, енергія одночастинкових станів, здобута шляхом ферміонізації Йордана — Вігнера, відрізняється від відповідного результату, знайденого у наближенні комутаційних співвідношень Бозе для операторів s^+, s^- (для енергії елементарних збуджень відповідно маємо $\sqrt{\Omega^2 + \Omega J \cos \varkappa + J^2/4}$, $-\pi \leqslant \varkappa < \pi$ і $\sqrt{\Omega^2 + \Omega J \cos \varkappa}$, $-\pi \leqslant \varkappa < \pi$). Таким чином, взагалі кажучи, наближення комутаційних співвідношень Бозе для спінових операторів s^+, s^- впливають на енергію навіть одночастинкових станів, хоча є випадки, коли енергія одночастинкових станів внаслідок такого наближення не змінюється. У даній статті на прикладі узагальненої XY моделі у поперечному полі буде вивчено питання про застосовність наближення комутаційних співвідношень Бозе при розрахунку спектра елементарних збуджень.

Гамільтоніан моделі, що розглядатиметься, має вигляд

$$H = \Omega \sum_{j=1}^{N} s_j^z + \sum_{j=1}^{N} (J^{xx} s_j^x s_{j+1}^x + J^{xy} s_j^x s_{j+1}^y + J^{yx} s_j^y s_{j+1}^x + J^{yy} s_j^y s_{j+1}^y) =$$

$$= \Omega \sum_{j=1}^{N} \left(s_j^+ s_j^- - \frac{1}{2} \right) + \sum_{j=1}^{N} (J^{++} s_j^+ s_{j+1}^+ + J^{+-} s_j^+ s_{j+1}^- + J^{-+} s_j^- s_{j+1}^+ +$$

$$+ J^{--} s_j^- s_{j+1}^-), \qquad (1)$$

$$s_j^\alpha = s_{j+N}^\alpha, \quad J^{++} \equiv [J^{xx} - J^{yy} - i (J^{xy} + J^{yx})]/4 = \overline{J^{--}}, \quad J^{+-} \equiv [J^{xx} +$$

$$+ J^{yy} + i (J^{xy} - J^{yx})]/4 = \overline{J^{-+}}.$$

Здійснивши перетворення Йордана — Вігнера [6, 7]

$$c_1 = s_1^-, \; c_j = P_{j-1} s_j^- = s_j^- P_{j-1}, \quad j = 2, \ldots, N; \; c_1^+ = s_1^+, \; c_j^+ =$$

$$= P_{j-1} s_j^+ = s_j^+ P_{j-1}, \quad j = 2, \ldots, N; \quad P_j \equiv \prod_{n=1}^{j} (-2 s_n^z),$$

знайдемо

$$H = H^+ P^+ + H^- P^-;$$

$$H^\pm \equiv \Omega \sum_{j=1}^{N} \left(c_j^+ c_j - \frac{1}{2} \right) + \sum_{j=1}^{N} (J^{++} c_j^+ c_{j+1}^+ + J^{+-} c_j^+ c_{j+1} - J^{-+} c_j c_{j+1}^+ -$$

$$- J^{--} c_j c_{j+1}),$$

$$\{c_j, c_l^+\} = \delta_{jl}, \quad \{c_j^+, c_l^+\} = \{c_j, c_l\} = 0;$$

$$P^+ \equiv \frac{1 \pm P}{2}, \; P \equiv P_N, \; [H, P] = [H, P^\pm] = [H^\pm, P^\pm] = 0; \qquad (2)$$

тут $c_j^+ = c_{j+N}^+$, $c_j = c_{j+N}$ для H^- і $c_j^+ = -c_{j+N}^+$, $c_j = -c_{j+N}$ для H^+.

Після перетворення Фур'є $c_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\varkappa \exp(-i\varkappa j) c_\varkappa$, де $\varkappa = \varkappa^- \equiv 2\pi n/N$ для H^- і $\varkappa = \varkappa^+ \equiv 2\pi (n + 1/2)/N$ для H^+, $n = -N/2, -N/2 + 1, \ldots, N/2 - 1$ (якщо N парне) і $n = -(N-1)/2, -(N-1)/2 + 1, \ldots, (N-1)/2$ (якщо N непарне), для квадратичних за фермі-операторами форм $H^\pm$ матимемо

$$H^\pm = \sum_\varkappa \left[-\frac{\Omega}{2} + \varepsilon_\varkappa c_\varkappa^+ c_\varkappa - i \sin\varkappa (J^{++} c_\varkappa^+ c_{-\varkappa}^+ + J^{--} c_\varkappa c_{-\varkappa}) \right],$$

$$\varepsilon_\varkappa \equiv \varepsilon_\varkappa^{(+)} + \varepsilon_\varkappa^{(-)}, \; \varepsilon_\varkappa^{(+)} \equiv \Omega + \frac{J^{xx} + J^{yy}}{2} \cos\varkappa, \; \varepsilon_\varkappa^{(-)} \equiv \frac{J^{xy} - J^{yx}}{2} \sin\varkappa. \qquad (3)$$

Завершує діагоналізацію (3) перетворення Боголюбова

$$\beta_\varkappa = x_\varkappa c_\varkappa + y_\varkappa c_{-\varkappa}^+, \; x_\varkappa = 2i\, | J^{++} | \sin\varkappa \exp(-i \arg J^{++}) / \sqrt{2E_\varkappa (E_\varkappa - \varepsilon_\varkappa^{(+)})},$$

$$y_\varkappa = \sqrt{(E_\varkappa - \varepsilon_\varkappa^{(+)})/(2E_\varkappa)}, \; E_\varkappa \equiv \sqrt{\varepsilon_\varkappa^{(+)2} + 4 |J^{++}|^2 \sin^2\varkappa};$$

внаслідок отримуємо

$$H^\pm = \sum_\varkappa E_\varkappa \left(\beta_\varkappa^+ \beta_\varkappa - \frac{1}{2} \right), \quad E_\varkappa = \varepsilon_\varkappa^{(-)} + E_\varkappa,$$

$$\{\beta_{\varkappa'}, \beta_{\varkappa''}^+\} = \delta_{\varkappa'\varkappa''}, \; \{\beta_{\varkappa'}^+, \beta_{\varkappa''}^+\} = \{\beta_{\varkappa'}, \beta_{\varkappa''}\} = 0. \qquad (4)$$

Для побудови власних значень гамільтоніана (2), (4) припустимо, що існує невироджений основний стан $|0_\beta\rangle$, який визначається співвідношенями $\beta_\varkappa \mid 0_\beta\rangle = 0$ для всіх $\varkappa$. Тоді з того, що P і H комутують, випливає: 1) або $P^+ \mid 0_\beta\rangle = \mid 0_\beta\rangle$, $P^- \mid 0_\beta\rangle = 0$, 2) або $P^- \mid 0_\beta\rangle = \mid 0_\beta\rangle$, $P^+ \mid 0_\beta\rangle = 0$. Враховуючи співвідношення $\beta_\varkappa^+ P^\pm = P^\mp \beta_\varkappa^+$, знаходимо, що у першому випадку власні функції гамільтоніана (1) є $\mid 0_\beta\rangle$; $\beta_{\varkappa_1^-}^+ \mid 0_\beta\rangle$; $\beta_{\varkappa_1^+}^+ \beta_{\varkappa_2^+}^+ \mid 0_\beta\rangle$, $\varkappa_1^+ \neq \varkappa_2^+$; ..., а відповідні їм власні значення — $\mathscr{E}_0 = \mathscr{E}_0^+ \equiv$ $\equiv -\frac{1}{2}\sum_{\varkappa^+} E_{\varkappa^+}$; $\mathscr{E}_1(\varkappa_1^-) = \mathscr{E}_0^- + E_{\varkappa_1^-}$,

$$\mathscr{E}_0^- \equiv -\frac{1}{2}\sum_{\varkappa^-} E_{\varkappa^-};\ \mathscr{E}_2(\varkappa_1^+, \varkappa_2^+) = \mathscr{E}_0^+ + E_{\varkappa_1^+} + E_{\varkappa_2^+};\ \ldots,$$

а у другому випадку власні функції гамільтоніана (1) є $\mid 0_\beta\rangle$; $\beta_{\varkappa_1^+}^+ \mid 0_\beta\rangle$; $\beta_{\varkappa_1^-}^+ \beta_{\varkappa_2^-}^+ \mid 0_\beta\rangle$, $\varkappa_1^- \neq \varkappa_2^-$; ...., а відповідні їм власні значення — $\mathscr{E}_0 = \mathscr{E}_0^-$; $\mathscr{E}_1(\varkappa_1^+) = \mathscr{E}_0^+ + E_{\varkappa_1^+}$; $\mathscr{E}_2(\varkappa_1^-, \varkappa_2^-) = \mathscr{E}_0^- + E_{\varkappa_1^-} + E_{\varkappa_2^-}$; ... Знадені таким чином власні значення, наприклад, співпадають з відповідними результатами, що отримуються при діагоналізації матриці гамільтоніана для $N = 2$ (тоді $H = \Omega(s_1^z + s_2^z) + 2J^{xx} s_1^x s_2^x + (J^{xy} + J^{yx}) s_1^x s_2^y + (J^{yx} + J^{xy}) \times$ $\times s_1^y s_2^x + 2J^{yy} s_1^y s_2^y$). Для системи, що розглядається з $N \to \infty$ для енергії збудження одночастинкових збуджень, знаходимо

$$\mathscr{E}_1(\varkappa) - \mathscr{E}_0 = E_\varkappa = \frac{J^{xy} - J^{yx}}{2}\sin\varkappa + \left\{\left(\Omega + \frac{J^{xx} + J^{yy}}{2}\cos\varkappa\right)^2 + \right.$$
$$\left. + \left[\left(\frac{J^{xx} - J^{yy}}{2}\right)^2 + \left(\frac{J^{xy} + J^{yx}}{2}\right)^2\right]\sin^2\varkappa\right\}^{1/2}, \quad -\pi \leqslant \varkappa < \pi. \tag{5}$$

Подивимося, який результат замість (5) отримується, якщо прийняти для операторів s^+, s^- комутаційні співвідношення Бозе; позначатимемо тоді їх відповідно B^+ і B. У такому разі після перетворення Фур'є $B_j =$ $= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_\varkappa \exp(-i\varkappa j) B_\varkappa$, де $\varkappa = 2\pi n/N$, гамільтоніан моделі (1) матиме вигляд

$$\tilde{H} = \sum_\varkappa \left[-\frac{\Omega}{2} + \varepsilon_\varkappa B_\varkappa^+ B_\varkappa + \cos\varkappa\,(J^{++} B_\varkappa^+ B_{-\varkappa}^+ + J^{--} B_\varkappa B_{-\varkappa})\right],$$
$$[B_{\varkappa'}, B_{\varkappa''}^+] = \delta_{\varkappa'\varkappa''},\ [B_{\varkappa'}^+, B_{\varkappa''}^+] = [B_{\varkappa'}, B_{\varkappa''}] = 0, \tag{6}$$

а після перетворення Боголюбова $\alpha_\varkappa = u_\varkappa B_\varkappa + v_\varkappa B_{-\varkappa}^+$, $u_\varkappa = 2\mid J^{++}\mid \times$ $\times \cos\varkappa \exp(-i\arg J^{++})/\sqrt{2\tilde{E}_\varkappa(\varepsilon_\varkappa^{(+)} - \tilde{E}_\varkappa)}$, $v_\varkappa = \sqrt{(\varepsilon_\varkappa^{(+)} - \tilde{E}_\varkappa)/(2\tilde{E}_\varkappa)}$, $\tilde{E}_\varkappa \equiv$ $\equiv \sqrt{\varepsilon_\varkappa^{(+)2} - 4\mid J^{++}\mid^2\cos^2\varkappa}$ у (6) —

$$\tilde{H} = -N\Omega + \sum_\varkappa \tilde{E}_\varkappa\left(\alpha_\varkappa^+\alpha_\varkappa + \frac{1}{2}\right),\ \tilde{E}_\varkappa = \varepsilon_\varkappa^{(-)} + \tilde{E}_\varkappa,$$
$$[\alpha_{\varkappa'}, \alpha_{\varkappa''}^+] = \delta_{\varkappa'\varkappa''},\ [\alpha_{\varkappa'}^+, \alpha_{\varkappa''}^+] = [\alpha_{\varkappa'}, \alpha_{\varkappa''}] = 0. \tag{7}$$

Для побудови власних значень гамільтоніана (7) припустимо, що існує невироджений основний стан $\mid 0_\alpha\rangle$, який визначається співвідношеннями $\alpha_\varkappa \mid 0_\alpha\rangle = 0$ для всіх $\varkappa$. Тоді власні функції гамільтоніана (7) є $\mid 0_\alpha\rangle$; $\alpha_{\varkappa_1}^+ \mid 0_\alpha\rangle$; $\alpha_{\varkappa_1}^+\alpha_{\varkappa_2}^+ \mid 0_\alpha\rangle$; ..., а відповідні їм власні значення $\tilde{\mathscr{E}}_0 \equiv$ $\equiv -N\Omega + \frac{1}{2}\sum_\varkappa \tilde{E}_\varkappa$; $\tilde{\mathscr{E}}_1(\varkappa_1) = \tilde{\mathscr{E}}_0 + \tilde{E}_{\varkappa_1}$; $\tilde{\mathscr{E}}_2(\varkappa_1, \varkappa_2) = \tilde{\mathscr{E}}_0 + \tilde{E}_{\varkappa_1} + \tilde{E}_{\varkappa_2}$; ... Для розглядуваного випадку з $N \to \infty$ для енергії збудження одночастинкових збуджень знаходимо

$$\tilde{\mathscr{E}}_1(\varkappa) - \tilde{\mathscr{E}}_0 = \tilde{E}_\varkappa = \frac{J^{xy} - J^{yx}}{2}\sin\varkappa + \left\{\left(\Omega + \frac{J^{xx} + J^{yy}}{2}\cos\varkappa\right)^2 - \right.$$
$$\left. - \left[\left(\frac{J^{xx} - J^{yy}}{2}\right)^2 + \left(\frac{J^{xy} + J^{yx}}{2}\right)^2\right]\cos^2\varkappa\right\}^{1/2}, \quad -\pi \leqslant \varkappa < \pi. \tag{8}$$

Порівнюючи (5) і (8), зауважуємо, що функціональна залежність від квазіімпульсу спектра елементарних збуджень не змінюється після наближення комутаційних співвідношень Бозе у випадку розглядуваної моделі (1), якщо гамільтоніан має симетрію $J^{xx} = J^{yy}$, $J^{xy} = -J^{yx}$ чи $J^{++} = J^{--} = 0$. Це узгоджується з наведеними раніше результатами для моделі Гейзенберга і моделі Ізінга у поперечному полі.

Один з авторів (О. В. Держко) дякує Büro für Austauschprogramme für Mittel- und Osteuropa des Österreichischen Akademischen Austauschdienstes за стипендію для перебування в Інституті теоретичної фізики Віденського університету, де була виконана частина цієї роботи, професору Вальтеру Тіррінгу за гостинність, плідні обговорення і цінні зауваження і професору Гаральду Гроссе за корисні обговорення.

1. *Тябликов С. В.* Методы квантовой теории магнетизма.— М. : Наука, 1975.— 528 с.
2. *Давыдов А. С.* Теория твердого тела.— М. : Наука, 1976.— 640 с.
3. *Барьяхтар В. Г., Криворучко В. Н., Яблонский Д. А.* Функции Грина в теории магнетизма. - Киев : Наук. думка, 1984.— 336 с.
4. *Годен М.* Волновая функция Бете.— М. : Мир, 1987.— 352 с.
5. *Derzhko O. V., Levitskii R. R., Moina A. Ph.* The spectrum of the 1D Ising model in transverse field Hamiltonian and its applications to some problems of condensed matter physics.— L'viv, 1992.— 32 p.— (Prepr./ Acad. Sci. Ukraine. Inst. Cond. Matt. Phys.; ICMP-91-1E).
6. *Lieb E., Schultz T., Mattis D.* Two soluble models of antiferromagnetic chain // Ann. Phys.— 1961.— **16**, N 3.— P. 407—466.
7. *Конторович В. М., Цукерник В. М.* Спиральная структура в одномерной цепочке спинов // ЖЭТФ.— 1967.— **52**, вып. 5.— С. 1446—1453.

Інститут фізики конденсованих систем
АН України, Львів

Одержано 9.07.92