

Низкотемпературные свойства спиновой XY-цепочки с примесным фрагментом

Е.В. Езерская, А.А. Човпан

Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, пл. Свободы, 4, г. Харьков, 61077, Украина
E-mail: ezer@univer.kharkov.ua, annchovpan@yahoo.com

Статья поступила в редакцию 2 декабря 2005 г.

Для бесконечной XY-цепочки ($s = 1/2$) с примесным фрагментом, находящейся в продольном магнитном поле, найден точный энергетический спектр. Показано, что, кроме зоны сплошного спектра и дискретного набора уровней, в такой системе возможно существование от одного до четырех связанных состояний, локализованных на границах примесного фрагмента с основной цепочкой. Изучены критическое поведение локальных статических термодинамических характеристик и временные зависимости продольных динамических корреляторов при различных температурах. Показано, что на локальные термодинамические характеристики модели могут значительно влиять как дискретные уровни, так и связанные состояния.

Для нескінченного XY-ланцюжка ($s = 1/2$) з домішковим фрагментом, що знаходиться у повздовжньому магнітному полі, знайдено точний енергетичний спектр. Показано, що, окрім енергетичної зони суцільного спектра та дискретного набору рівнів, у такій системі можливо існування від одного до чотирьох зв'язаних станів, що локалізовані на границях домішкового фрагмента та основного ланцюжка. Вивчено критичну поведінку локальних статичних термодинамічних характеристик та часові залежності повздовжніх динамічних кореляторів при різних температурах. Показано, що на локальні термодинамічні характеристики моделі можуть суттєво впливати як дискретні рівні, так і зв'язані стани.

PACS: 75.10.Jm, 75.40.Cx

Ключевые слова: XY-цепочка; энергетический спектр, спиновые корреляционные функции, динамические корреляторы.

1. Введение

Уже несколько десятилетий одномерные спиновые системы являются объектом пристального интереса исследователей. Начиная с 1961 г., когда Либ, Шульц и Маттис [1] предложили антиферромагнитную линейную модель со спином $1/2$, в которой обменным взаимодействием связаны только ближайшие соседи, названную ими XY-моделью, исследование таких систем до сих пор не потеряло своей актуальности. Одной из причин такой длительной популярности является их простота и в то же время реальная возможность адекватно описывать целый ряд соединений, таких как PrCl_3 [2], $\text{Pr}(\text{C}_2\text{H}_5\text{SO}_4)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ [3], Cs_2CoCl_4 [4–6]. Теоретическое исследование подобных спиновых систем также представляет интерес ввиду возможности по-

лучить точные решения для энергетического спектра, различных термодинамических величин, статических и динамических корреляторов как в случае однородной [1,7–11], так и для димеризованной цепочки [12], а также для моделей с различными примесями [13–20].

В предыдущих работах [19,20] авторы изучали спектр и термодинамические свойства двух полубесконечных спиновых XY-цепочек с точечным контактом. В настоящей работе рассматривается бесконечная XY-цепочка, в которой есть «примесный» фрагмент конечной длины. Реальные соединения могут содержать различные примеси, в том числе кластеры из нескольких примесных атомов, что определяет целесообразность изучения данной модели. В разделе 2 исследован точный спектр стационарных состояний этой спиновой системы. Раздел 3

посвящен изучению локальных термодинамических характеристик в низкотемпературной области. В разделе 4 рассмотрены временные зависимости динамических продольных корреляторов и продольных автокорреляторов системы при различных температурах.

2. Стационарные состояния бесконечной спиновой XY-цепочки с примесным фрагментом

Рассмотрим бесконечную спиновую XY-цепочку, содержащую примесный фрагмент из конечного числа спинов,

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & -g_1 h \sum_{\substack{n \leq 0 \\ n \geq N+1}} S_n^z - g_2 h \sum_{n=1}^N S_n^z - \\ & - J_1 \sum_{\substack{n \leq -1 \\ n \geq N+1}} (S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y) - J_2 \sum_{n=1}^{N-1} (S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y) - \\ & - J_0 (S_0^x S_1^x + S_0^y S_1^y + S_N^x S_{N+1}^x + S_N^y S_{N+1}^y), \end{aligned} \quad (1)$$

где $\mathbf{S}_n = (S_n^x, S_n^y, S_n^z)$ — оператор спина в узлах решетки ($s = 1/2$), $J_1 > 0$ — константа XY-обменного взаимодействия вдоль основной цепочки, $J_2 > 0$ — константа XY-обменного взаимодействия спинов примесного фрагмента, $J_0 > 0$ — XY-обменное взаимодействие на контактах, g_1, g_2 — g -факторы для спинов основной цепочки и примесного фрагмента соответственно, $h = \mu_B H$ — постоянное магнитное поле, направленное вдоль оси z (μ_B — магнетон Бора), N — число спинов в примесном фрагменте. Можно показать, что энергетический спектр системы не зависит от знака J_1 , а при нечетном числе атомов в примесном фрагменте он не зависит и от знака остальных констант. Для определенности все обменные константы мы считаем положительными.

При $N = 1$ гамильтониан данной модели отвечает гамильтониану бесконечной XY-цепочки с примесью замещения, исследованной в работах [12–15]. При $N \rightarrow \infty$ — соответствует гамильтониану двух полубесконечных цепочек с точечным контактом [19].

С помощью преобразования Иордана — Вигнера [21] гамильтониан (1) приводится к идеальному газу бесспиновых фермионов. Спектр стационарных состояний с одним «перевернутым спином» определяется уравнением Шредингера:

$$(\mathbf{H} - E_0)|1\rangle = \varepsilon|1\rangle, \quad |1\rangle = \sum_n A_n a_n^+ |0\rangle,$$

где $E_0 = -(g_1 N_0 + g_2 N)h/2$ — энергия упорядоченного «ферромагнитного состояния», для которого $a_n|0\rangle = 0$ для всех узлов решетки; N_0 — число атомов в основной цепочке ($N_0 \rightarrow \infty$), A_n — волновая функция в узельном представлении, которая при $N \geq 3$ определяется системой уравнений в конечных разностях

$$\begin{aligned} A_n (\varepsilon - 2\mu_i H) + \frac{J_i}{2} (A_{n+1} + A_{n-1}) &= 0, \\ n &\neq 0, 1, N, N+1; \\ g_i &= \begin{cases} g_1; & n \leq 0, n \geq N+1, \\ g_2; & 1 \leq n \leq N, \end{cases} \\ J_i &= \begin{cases} J_1; & n \leq -1, n \geq N+2, \\ J_2; & 2 \leq n \leq N-1 \end{cases} \end{aligned} \quad (2)$$

с «граничными» условиями:

$$\begin{aligned} A_0 (\varepsilon - g_1 h) + \frac{J_1}{2} A_{-1} + \frac{J_0}{2} A_1 &= 0, \\ A_1 (\varepsilon - g_2 h) + \frac{J_0}{2} A_0 + \frac{J_2}{2} A_2 &= 0, \end{aligned} \quad (3)$$

$$A_N (\varepsilon - g_2 h) + \frac{J_2}{2} A_{N-1} + \frac{J_0}{2} A_{N+1} = 0,$$

$$A_{N+1} (\varepsilon - g_1 h) + \frac{J_0}{2} A_N + \frac{J_1}{2} A_{N+2} = 0.$$

Общее решение системы (2), (3) ищем в виде

$$A_n = \begin{cases} C_1 x_1^n + D_1 x_1^{-n}, & n \leq 0; \\ C_2 x_2^n + D_2 x_2^{-n}, & 1 \leq n \leq N; \\ C_3 x_1^n + D_3 x_1^{-n}, & n \geq N+1. \end{cases} \quad (4)$$

Из (2) и (4) следует, что

$$\varepsilon = g_1 h - \frac{1}{2} J_1 \left(x_1 + \frac{1}{x_1} \right) = g_2 h - \frac{J_2}{2} \left(x_2 + \frac{1}{x_2} \right), \quad (5)$$

причем $x_{1,2}$ могут быть либо комплексными с единичным модулем, либо вещественными. Во втором случае без ограничения общности можно считать их по модулю меньшими единицы. Связь между коэффициентами C_i, D_i определяется из граничных условий (3) с учетом (5).

При $x_1 = e^{ik_1}$ каждому значению квазиимпульса k_1 отвечает двукратно вырожденный уровень с энергией

$$\varepsilon(k_1) = g_1 h - J_1 \cos k_1, \quad -\pi \leq k_1 < \pi, \quad (6)$$

что соответствует бесконечной XY-цепочке [1,11]. Примесный фрагмент проявляет здесь свойства потенциального барьера. При $|x_2| = 1$ соответствующим

щие волновые функции описывают «надбарьерное отражение» от границ примесного фрагмента, а при $|x_2| < 1$ — «туннелирование» через потенциальный барьер.

При $|x_1| < 1$ требование экспоненциального убывания волновой функции (4) будет выполнено, если положить в (4) $D_1 = C_3 = 0$. Вместе с граничными условиями (3) это приводит к дополнительному соотношению между x_1 и x_2

$$x_1 = \frac{J_1 J_2}{J_0^2} \frac{(1 \pm x_2^{N+1})}{x_2 (1 \pm x_2^{N-1})}. \quad (7)$$

Система уравнений (5), (7) определяет состояния дискретного спектра. Когда $|x_2| = 1$, примесный фрагмент проявляет свойства потенциальной ямы конечной глубины, а соответствующие энергии лежат в интервале

$$g_2 h - J_2 \leq \varepsilon \leq g_2 h + J_2, \quad (8)$$

но вне зоны сплошного спектра (6). При больших N такие состояния образуют зону квазинепрерывного спектра. При сильном обменном взаимодействии J_0 на контактах примесного фрагмента с основной цепочкой возможно появление от одного до четырех связанных состояний, локализованных на границах примесного фрагмента и XY-цепочки. В этом случае оба параметра $x_{1,2}$ вещественны и $x_{1,2} < 1$. Для таких состояний контакты фрагмента с основной цепочкой проявляют свойства двуянного потенциала. Из уравнения (7) следует, что вещественные решения $x_{1,2}$ всегда одного знака. Следовательно, энергии связанных состояний лежат либо выше, либо ниже как зоны непрерывного спектра (6), так и области квазинепрерывного спектра (8).

Ниже зоны (6) в области $g_1 h - J_1 \leq g_2 h - J_2$ один или два уровня существуют при выполнении неравенств

$$\frac{J_0^2}{J_1 J_2} \geq \frac{\text{sh} [N \text{ arch} (a - f)] \mp \sqrt{(a - f)^2 - 1}}{\text{sh} [(N - 1) \text{ arch} (a - f)]}, \quad a - f \geq 1, \quad (9)$$

где $f = \frac{(g_1 - g_2)h}{J_2}$, $a = \frac{J_1}{J_2}$.

Верхний и нижний знаки в (9) отвечают верхнему и нижнему знакам в формуле (7). При $g_2 h - J_2 \leq g_1 h - J_1$ такие уровни существуют, если

$$\frac{J_0^2}{J_1 J_2} \geq \eta \left[\frac{1+f}{a} + \sqrt{\left(\frac{1+f}{a}\right)^2 - 1} \right], \quad \frac{1+f}{a} \geq 1. \quad (10)$$

Здесь

$$\eta = \begin{cases} 1, & \text{для знака «+»} \\ \frac{N+1}{N-1}, & \text{для знака «-»} \end{cases} \quad \text{в формуле (7).}$$

Выше зоны (6) в области $g_1 h + J_1 \geq g_2 h + J_2$ также могут существовать один или два уровня, когда выполнены неравенства

$$\frac{J_0^2}{J_1 J_2} \geq \frac{\text{sh} [N \text{ arch} (a + f)] \pm (-1)^N \sqrt{(a + f)^2 - 1}}{\text{sh} [(N - 1) \text{ arch} (a + f)]}, \quad (11)$$

$$a + f \geq 1.$$

Аналогичные уровни в области $g_1 h + J_1 \leq g_2 h + J_2$ есть при

$$\frac{J_0^2}{J_1 J_2} \geq \eta \left[\frac{1-f}{a} + \sqrt{\left(\frac{1-f}{a}\right)^2 - 1} \right], \quad \frac{1-f}{a} \geq 1. \quad (12)$$

Здесь

$$\eta = \begin{cases} 1, & \text{для знаков «∓»} \\ \frac{N+1}{N-1}, & \text{для знаков «±»} \end{cases}$$

в формуле (7) для четных и нечетных N соответственно.

Необходимым условием существования связанных состояний является сильное обменное взаимодействие на контактах: $J_0^2 \geq J_1 J_2$ — для одной пары уровней под и над зонами и

$$J_0^2 \geq J_1 J_2 \frac{(N+1)}{(N-1)}$$

— для другой. Если $g_1 \neq g_2$, то связанные состояния существуют в конечном интервале полей.

Интересно отметить, что при $\eta = 1$ в неравенства (10) и (12) не входит длина фрагмента N и они совпадают с условиями существования уровней для двух XY-цепочек с точечным контактом [19]. Энергии уровней при этом, естественно, различны. При $N \rightarrow \infty$ остается только по одному уровню ниже и выше зон, а все неравенства (9)–(12) совпадают с условиями, полученными в работе [19]. Нормированные волновые функции, соответствующие каждому из перечисленных случаев, приведены в приложении.

В частном случае $N = 2$ обменная константа J_2 и g -фактор g_2 примесного фрагмента входят только в граничные условия (3). Спектр состоит из полосы сплошного спектра (6) и локализованных уровней с энергиями

$$\varepsilon = g_1 h - \frac{(J_0^2 - 2J_1^2)[2(g_1 - g_2)h \pm J_2] \pm J_0^2 \{ [2(g_1 - g_2)h \pm J_2]^2 + 4(J_0^2 - J_1^2) \}^{1/2}}{4(J_0^2 - J_1^2)}. \quad (13)$$

В формуле (13) знак «плюс» перед слагаемыми в фигурных скобках отвечает двум уровням ниже зоны (6), которые возникают при $J_0 > J_1$ в полях

$$2(g_1 - g_2)h > \mp J_2 + 2J_1 - \frac{J_0^2}{J_1}, \quad (14)$$

а знак «минус» — двум уровням выше зоны (6), существующим при $J_0 > J_1$ в полях

$$2(g_1 - g_2)h < \mp J_2 - 2J_1 + \frac{J_0^2}{J_1} \quad (15)$$

соответственно. Как энергии (13), так и неравенства (14), (15) можно получить непосредственно из (5), (7) и (9)–(12).

3. Локальные термодинамические характеристики

Рассмотрим поведение z -проекции среднего локального магнитного момента в произвольном узле цепочки m_n^z

$$m_n^z = g_i \mu \langle S_n^z \rangle = g_i \mu_B \left(\frac{1}{2} - \langle a_n^+ a_n \rangle \right), \quad (16)$$

продольного парного коррелятора $\langle S_l^z S_{l+m}^z \rangle$

$$\langle S_l^z S_{l+m}^z \rangle = \langle S_l^z \rangle \langle S_{l+m}^z \rangle - |\langle a_l^+ a_{l+m} \rangle|^2, \quad m \neq 0, \quad (17)$$

поперечного парного коррелятора спинов контактов

$$\begin{aligned} \langle S_0^x S_1^x + S_0^y S_1^y \rangle &= \langle S_N^x S_{N+1}^x + S_N^y S_{N+1}^y \rangle = \\ &= \frac{1}{2} (\langle a_0^+ a_1 \rangle + \langle a_1^+ a_0 \rangle), \end{aligned} \quad (18)$$

а также парных поперечных корреляторов

$$\begin{aligned} \langle S_l^x S_{l+m}^x \rangle &= \langle S_l^y S_{l+m}^y \rangle = \\ &= 2^{m-2} \begin{vmatrix} \langle a_l^+ a_{l+1} \rangle & \langle a_l^+ a_{l+2} \rangle & \dots & \langle a_l^+ a_{l+m} \rangle \\ 0 & \langle a_{l+1}^+ a_{l+2} \rangle & \dots & \langle a_{l+1}^+ a_{l+m} \rangle \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \langle a_{l+m-1}^+ a_{l+1} \rangle & \dots & 0 & \langle a_{l+m-1}^+ a_{l+m} \rangle \end{vmatrix}, \end{aligned} \quad (19)$$

$m \neq 0$

(см., например, [1,8]) при низких температурах. Поперечные корреляторы изучались нами только для близких узлов ($m = 1, 2, 3$), чтобы избежать громоздких вычислений.

В формулах (16)–(19) величины $\langle a_l^+ a_{l+m} \rangle$ — это термодинамические средние

$$\langle a_l^+ a_{l+m} \rangle = \sum_{\lambda} A_l^*(\lambda) A_{l+m}(\lambda) n(\varepsilon_{\lambda}), \quad (20)$$

здесь $n(\varepsilon_{\lambda}) = (1 + \exp(\varepsilon_{\lambda}/T))^{-1}$ — распределение Ферми–Дирака, а \sum_{λ} означает суммирование по всем состояниям дискретного спектра, определяемым уравнениями (5), (7), и интегрирование по k_1 в областях непрерывного спектра (6).

В нулевом магнитном поле энергетический спектр системы невзаимодействующих фермионов удовлетворяет «теореме парности» [22]. При $H = 0$ соответствующие волновые функции и энергии имеют следующую симметрию:

$$\begin{aligned} A_n(\lambda) &\equiv A_n(x_{\lambda}), \quad A_n(-x_{\lambda}) = (-1)^n A_n(x_{\lambda}), \\ \varepsilon(-x_{\lambda}) &= -\varepsilon(x_{\lambda}). \end{aligned} \quad (21)$$

Это приводит к тому, что термодинамические средние $\langle a_l^+ a_{l+m} \rangle$, определяемые формулой (20), равны нулю для любых ненулевых четных значений m , т.е. когда спины с номерами l и $l+m$ относятся к разным «подрешеткам». Очевидно, что этим же свойством при $H = 0$ обладают и продольные корреляторы, определяемые формулой (17). В нулевом магнитном поле $\langle S_l^z S_{l+m}^z \rangle = 0$ при любых ненулевых четных m . Это утверждение справедливо и для случайных взаимодействий ближайших соседей, а не только для однородной XY-цепочки. Из (17) следует также, что для нечетных m в нулевом магнитном поле $\langle S_l^z S_{l+m}^z \rangle < 0$.

Из-за симметрии гамильтониана (1) относительно перестановки поперечных компонент спина средние значения $\langle a_l^+ a_{l+m} \rangle$ всегда вещественные, поэтому $\langle a_l^+ a_{l+m} \rangle = \langle a_{l+m}^+ a_l \rangle$, а парные корреляторы для разных поперечных компонент спина $\langle S_l^x S_{l+m}^y \rangle$ в произвольном продольном магнитном поле равны нулю.

Известно, что при нулевой температуре в однородной XY-цепочке зависимость магнитной восприимчивости от постоянного внешнего магнитного поля, направленного вдоль оси z , имеет корневую особенность, обусловленную исчезновением щели в спектре одномагнанных состояний [7]. В XY-цепочке с примесью эта критическая точка для локальных магнитных восприимчивостей узлов решетки исчезает, кроме особого случая совпадения критического поля с полем, в котором появляется локальный

уровень. Кроме того, может возникнуть новая особенность — δ -сингулярность, которая обусловлена скачком локального магнитного момента, вызванным прохождением энергии связанного состояния через нулевое значение [16]. В данном случае, как и для XY-цепочки с примесью [16] и для двух XY-цепочек с точечным контактом, исследованных в работах [19,20], переход нижней границы энергетической зоны сплошного спектра (6) через нуль в поле $h_{1c} = J_1/g_1$ и связанное с этим исчезновение интегральных членов в (16)–(19) также не приводит к каким-либо особенностям в полевой зависимости среднего локального магнитного момента, а также продольных и поперечных корреляторов, кроме особого случая совпадения критического поля h_{1c} с полем, в котором появляется локальный уровень или уровень квазинепрерывного спектра. Только в этом особом случае существует та же корневая особенность локальной магнитной восприимчивости, что и в однородной XY-цепочке. В то же время наличие примесного фрагмента приводит к появлению новых критических полей, обусловленных существованием дискретных уровней. Каждый переход энергии уровня квазинепрерывного спектра или связанного состояния через нуль при нулевой температуре приводит к конечным скачкам в вышеуказанных зависимостях. Если $J_1/J_2 \geq g_1/g_2$ ($h_{1c} \geq h_{2c} = J_2/g_2$), то локальные термодинамические характеристики могут иметь один или два скачка в области полей $h > h_{1c}$ за счет связанных состояний. Если таких состояний нет, то все зависимости являются регулярными функциями поля. Если $J_1/J_2 \leq g_1/g_2$ ($h_{1c} \leq h_{2c}$), то в полях $h_{1c} < h < h_{2c}$ могут существовать скачки за счет уровней квазинепрерывного спектра, а в полях $h > h_{2c}$ — за счет локализованных состояний. При сильном обменном взаимодействии на контактах магнитный момент спинов контактов ($n = 0, 1, N, N + 1$) и близких к ним узлов может убывать с ростом поля и даже принимать отрицательные значения. Такое поведение характерно и для локального магнитного момента примесного спина в XY-цепочке [16], и для локального магнитного момента спинов контакта в двух полубесконечных XY-цепочках [19,20]. Амплитуда отдельных скачков уменьшается, а их число увеличивается с ростом N , поскольку увеличивается число уровней квазинепрерывного спектра. В пределе $N = \infty$ останется только один скачок, обусловленный локальным уровнем. Отметим, что в работе [19] ошибочно утверждалось, что отщепление или исчезновение локального уровня с отрицательной энергией сопровождается скачком локальной восприимчивости. При нулевой температуре в полях, больших максимального критического

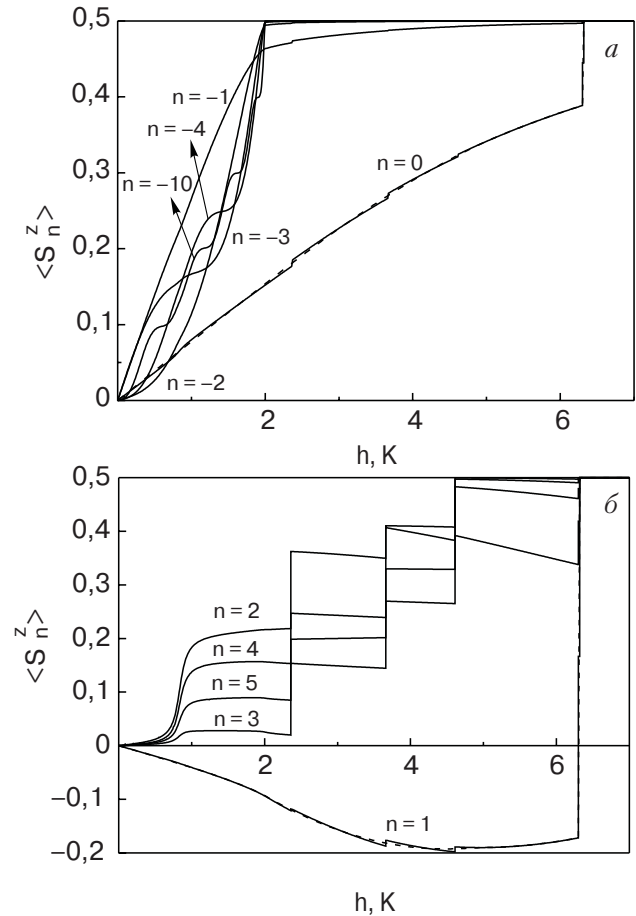


Рис. 1. Зависимость среднего значения проекции спина на ось z ($\langle S_n^z \rangle$) от внешнего магнитного поля h при нулевой температуре для XY-цепочки с примесным фрагментом из $N = 10$ спинов при $J_0 = 10$ К, $J_1 = 4$ К, $J_2 = 2$ К, $g_1 = 2$, $g_2 = 0,4$; для нескольких узлов основной цепочки вблизи контакта (а); для узлов примесного фрагмента (б). Очевидно, что из-за симметрии системы узлы n и $N + 1 - n$ эквивалентны.

поля, $\langle S_n^z \rangle$ и $\langle S_l^z S_{l+m}^z \rangle$ достигают максимальных значений $\langle S_n^z \rangle = 1/2$ и $\langle S_l^z S_{l+m}^z \rangle = 1/4$ соответственно, а поперечные корреляторы обращаются в нуль. Критическим полям, связанным с переходом энергии дискретных уровней через нуль, отвечают δ -сингулярности локальных восприимчивостей. В полевых зависимостях продольных и поперечных корреляторов также могут быть аналогичные скачки.

На рис. 1, а, б приведены зависимости $\langle S_n^z \rangle$ от внешнего магнитного поля при $T = 0$ для ряда узлов основной цепочки и примесного фрагмента. Пунктирной линией для сравнения приведены зависимости $\langle S_n^z \rangle$ от поля для узлов с номерами $n = 0, 1$ для двух полубесконечных XY-цепочек с точечным контактом ($N = \infty$), изученных в работе [19], при тех же значениях параметров. Для узлов слева и справа

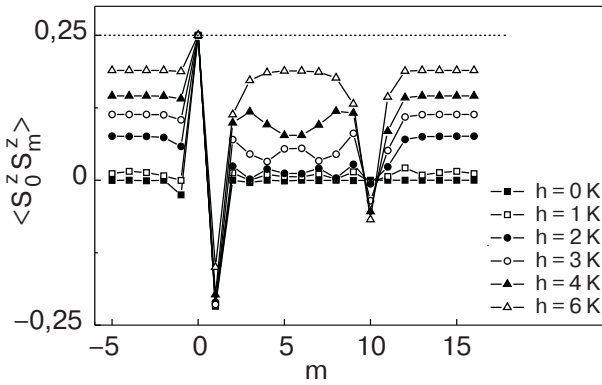


Рис. 2. Зависимость продольного коррелятора $\langle S_l^z S_{l+m}^z \rangle$ от «расстояния» между узлами m для $l = 0$ при нулевой температуре в магнитных полях, меньших максимального критического поля, для XY-цепочки с примесным фрагментом из $N = 10$ спинов при $J_0 = 10$ К, $J_1 = 4$ К, $J_2 = 2$ К, $g_1 = 2$, $g_2 = 0,4$.

от примесного фрагмента величины всех скачков экспоненциально убывают с ростом $|n|$ или $|n - N - 1|$ соответственно. Влияние контакта здесь проявляется в том, что кривая полевой зависимости $\langle S_n^z \rangle$ может иметь несколько перегибов. На рис. 2 показана зависимость продольного коррелятора $\langle S_l^z S_{l+m}^z \rangle$ в различных полях при нулевой температуре для $l = 0$ от «расстояния между узлами» m для тех же значений параметров, что и на рис. 1.

При $N = 2$ критические поля, в которых энергии уровней (13), расположенных ниже зоны, проходят через нуль, равны

$$h_{1,2}^{(0)} = \frac{\pm J_2(\gamma J_0^2 - 2J_1^2) + J_0^2[\gamma^2 J_2^2 + 4(\gamma J_0^2 - J_1^2)]^{1/2}}{4(g_1 J_0^2 - g_2 J_1^2)}, \quad \gamma = \frac{g_1}{g_2}. \quad (22)$$

Если

$$J_1(2J_1 \frac{g_2}{g_1} - J_2) < J_0^2 < J_1(2J_1 \frac{g_2}{g_1} + J_2),$$

то на кривой $\langle S_n^z \rangle$ от h наблюдается один скачок в поле $h_1^{(0)}$, а при

$$J_0^2 > J_1 \left(2J_1 \frac{g_2}{g_1} + J_2 \right)$$

— два скачка в полях $h_{1,2}^{(0)}$. Поле $h_2^{(0)}$ существует только при $g_1/g_2 > (J_1/J_0)^2$.

При $T > 0$ вклад в локальные термодинамические характеристики дают все состояния, поэтому особенности сглаживаются, но при температурах

$T \ll J_1, J_2, J_0$ вблизи критических значений поля остаются максимумы на кривой зависимости локальной восприимчивости от поля для спинов примесного фрагмента и близких к ним узлов.

4. Динамические продольные корреляторы и автокорреляционные функции

Динамические продольные корреляторы определяются формулой (см., например, [10,11,18])

$$\begin{aligned} \langle S_l^z(t) S_{l+m}^z \rangle &= \langle S_l^z \rangle \langle S_{l+m}^z \rangle + \\ &+ \sum_{\lambda} e^{i\varepsilon_{\lambda} t / \hbar} A_l^*(\lambda) A_{l+m}(\lambda) n(\varepsilon_{\lambda}) \times \\ &\times \sum_{\lambda} A_l(\lambda) A_{l+m}^*(\lambda) e^{-i\varepsilon_{\lambda} t / \hbar} (1 - n(\varepsilon_{\lambda})). \quad (23) \end{aligned}$$

При $m = 0$ (23) определяет автокорреляционную функцию $\langle S_l^z(t) S_l^z \rangle$. Поведение корреляторов $\langle S_l^z(t) S_{l+m}^z \rangle$ и $\langle S_l^z(t) S_l^z \rangle$ при больших t существенно зависит от наличия уровней дискретного спектра и локализованных на границах примесного фрагмента и XY-цепочки состояний. Согласно известной теореме Римана—Лебега (см., например, [23]), интегральные слагаемые, входящие в формулу (23), стремятся к нулю с ростом t . Таким образом, если отсутствуют область квазинепрерывного спектра и локализованные состояния, то величины $\langle S_l^z(t) S_{l+m}^z \rangle$ и $\langle S_l^z(t) S_l^z \rangle$ стремятся к нулю с увеличением t . Уровни квазинепрерывного спектра при конечных N дают неисчезающий вклад в (23) только для спинов примесного фрагмента и близких к ним узлов. Локализованные состояния дают существенный вклад при больших N только для спинов вблизи контактов и на контактах ($n = 0, 1, N, N + 1$). Для остальных узлов цепочки эти вклады малы, поскольку соответствующие волновые функции экспоненциально убывают с ростом $|n|$ или $|n - N - 1|$. В нулевом магнитном поле все волновые функции и энергии модели (1) удовлетворяют соотношениям (21). Таким образом, если при нулевой температуре в отсутствие магнитного поля будут выполнены условия существования только одной пары локализованных состояний (9)–(12) или одной пары дискретных уровней, то при $t \rightarrow \infty$ действительная и мнимая части $\langle S_l^z(t) S_{l+m}^z \rangle$ и $\langle S_l^z(t) S_l^z \rangle$ будут меняться по простому гармоническому закону:

$$\begin{aligned} \text{Re} \langle S_l^z(t) S_{l+m}^z \rangle &= (-1)^m A_l^2(1) A_{l+m}^2(1) \cos \frac{2\varepsilon_1 t}{\hbar}; \\ \text{Im} \langle S_l^z(t) S_{l+m}^z \rangle &= (-1)^{m+1} A_l^2(1) A_{l+m}^2(1) \sin \frac{2\varepsilon_1 t}{\hbar}, \quad (24) \end{aligned}$$

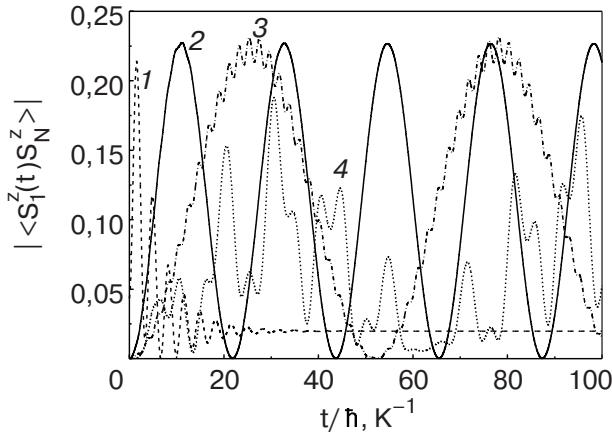


Рис. 3. Зависимость модуля динамического коррелятора $|\langle S_l^z(t)S_{l+m}^z \rangle|$ при $h = 0$, $T = 0$ от времени для XY-цепочки с примесным фрагментом для узлов с номерами $l = 1$, $l + m = N$: $N = 4$, $J_0 = 1$ К, $J_1 = 2$ К, $J_2 = 4$ К, $g_1 = 1,6$, $g_2 = 2$ (1); $N = 4$, $J_0 = 10$ К, $J_1 = 2$ К, $J_2 = 4$ К, $g_1 = 1,6$, $g_2 = 2$ (2); $N = 5$, $J_0 = 1$ К, $J_1 = 2$ К, $J_2 = 4$ К, $g_1 = 1,6$, $g_2 = 2$ (3); $N = 10$, $J_0 = 6$ К, $J_1 = 2$ К, $J_2 = 4$ К, $g_1 = 1,6$, $g_2 = 2$ (4).

а модуль оставаться постоянным. Если будут существовать две пары уровней, то модуль коррелятора будет меняться при $t \rightarrow \infty$ по закону

$$\begin{aligned} & |\langle S_l^z(t)S_{l+m}^z \rangle| = \\ & = A_l^2(1)A_{l+m}^2(1) + A_l^2(2)A_{l+m}^2(2) + \\ & + 2A_l(1)A_{l+m}(1)A_l(2)A_{l+m}(2) \cos \frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)t}{\hbar}. \end{aligned} \quad (25)$$

В (24) и (25) $A_l(1)$, $A_l(2)$ — вещественные волновые функции любых состояний с энергиями ε_1 , ε_2 , определяемыми из (5), (7). Энергии локализованных на границах примесного фрагмента с XY-цепочкой состояний близки между собой даже для сравнительно небольших N . Поведение действительной и мнимой частей $\langle S_l^z(t)S_{l+m}^z \rangle$ и $\langle S_l^z(t)S_l^z \rangle$ в этом случае можно рассматривать как биения с периодом $\tau = 2\pi\hbar/|\varepsilon_1 - \varepsilon_2|$. Формулы (24) и (25) применимы для коротких примесных фрагментов, когда число дискретных уровней может ограничиваться одной или двумя парами, а также при

$J_1 > J_2$ и достаточно сильном взаимодействии на контактах, когда в нулевом поле нет области квазинепрерывного спектра, но выполнены условия существования одной или двух пар локализованных состояний.

На рис. 3 приведены временные зависимости модуля динамического коррелятора при нулевой температуре в нулевом поле для узлов с номерами $l = 1$, $l + m = N$ для примесных фрагментов различной длины при нескольких значениях параметров взаимодействия. Повышение температуры, наличие нескольких уровней дискретного спектра или включение магнитного поля усложняет характер колебаний, но они по-прежнему остаются незатухающими при $t \rightarrow \infty$.

5. Заключение

В работе исследован точный энергетический спектр бесконечной спиновой XY-цепочки со спином $1/2$ с примесным фрагментом, отличающимся от основной цепочки обменными константами и g -факторами спинов. Спектр стационарных состояний с одним перевернутым спином представляет собой энергетическую зону сплошного спектра и дискретный набор уровней двух типов. С ростом числа спинов в примесном фрагменте один из наборов уровней превращается в зону квазинепрерывного спектра, а при достаточно сильном обменном взаимодействии основной цепочки и примесного фрагмента возникают связанные состояния, локализованные на границах фрагмента с основной цепочкой. При нулевой температуре наличие дискретных уровней с отрицательной энергией приводит к появлению скачков в полевых зависимостях среднего локального магнитного момента, а также продольных и поперечных корреляторов, если соответствующие энергии проходят через нуль. Исследованы временные зависимости продольных автокорреляторов и продольных динамических корреляторов системы при различных температурах. Показано, что здесь также существенную роль играют состояния дискретного спектра и связанные состояния, определяя характер релаксации при больших t .

Приложение

1. Нормированные волновые функции, отвечающие области непрерывного спектра (6) и удовлетворяющие условию ортогональности, при $g_2\hbar - J_2 \leq \varepsilon(k_1) \leq g_2\hbar + J_2$ имеют вид

$$A_n^{(1)}(k_1) = \begin{cases} A\alpha_1\alpha_2 \sin k_1 \sin k_2 e^{i k_1 n}, & n \leq 0; \\ A\alpha_1 \sin k_1 R(n), & 1 \leq n \leq N; \\ A[\alpha_1\alpha_2 R(N+1) \sin k_1(n-N) + R(N) \sin k_1(n-N-1)], & n \geq N+1; \end{cases} \quad (\text{П.1})$$

$$A_n^{(2)}(k_1) = \begin{cases} A[-\alpha_1\alpha_2 R(N+1) \sin k_1(n-1) + R(N) \sin k_1 n], & n \leq 0; \\ A\alpha_1 \sin k_1 R(N+1-n), & 1 \leq n \leq N; \\ A\alpha_1\alpha_2 \sin k_1 \sin k_2 e^{-ik_1(n-N-1)}, & n \geq N+1, \end{cases}$$

где

$$A = (2/\pi)^{1/2} \{2\alpha_1^2\alpha_2^2 \sin^2 k_1 \sin^2 k_2 + \alpha_1^2\alpha_2^2 |R(N+1)|^2 + |R(N)|^2 - \alpha_1\alpha_2 \cos k_1 [R^*(N+1)R(N) + R(N+1)R^*(N)]\}^{-1/2};$$

$$R(n) = \alpha_1\alpha_2 e^{ik_1} \sin k_2 n - \sin k_2(n-1); \quad k_2 = \arccos \frac{g_2 h - \varepsilon(k_1)}{J_2}; \quad \alpha_{1,2} = \frac{J_{1,2}}{J_0}.$$

2. Нормированные волновые функции, отвечающие области непрерывного спектра (6) и удовлетворяющие условию ортогональности, при $\varepsilon(k_1) \leq g_2 h - J_2$ и $\varepsilon(k_1) \geq g_2 h + J_2$ имеют вид

$$A_n^{(3)}(k_1) = \begin{cases} B\alpha_1\alpha_2 \sin k_1(x_2 - x_2^{-1}) e^{ik_1 n}, & n \leq 0; \\ B\alpha_1 \sin k_1 Q(n), & 1 \leq n \leq N; \\ B[\alpha_1\alpha_2 Q(N+1) \sin k_1(n-N) - Q(N) \sin k_1(n-N-1)], & n \geq N+1; \end{cases} \quad (\text{П.2})$$

$$A_n^{(4)}(k_1) = \begin{cases} B[-\alpha_1\alpha_2 Q(N+1) \sin k_1(n-1) + Q(N) \sin(n-N-1)], & n \leq 0; \\ B\alpha_1 \sin k_1 Q(N+1-n), & 1 \leq n \leq N; \\ -B\alpha_1\alpha_2 \sin k_1(x_2 - x_2^{-1}) e^{-ik_1(n-N-1)}, & n \geq N+1, \end{cases}$$

где

$$B = (2/\pi)^{1/2} \{2\alpha_1^2\alpha_2^2 \sin^2 k_1(x_2 - x_2^{-1})^2 + \alpha_1^2\alpha_2^2 |Q(N+1)|^2 + |Q(N)|^2 + \alpha_1\alpha_2 \cos k_1 [Q^*(N+1)Q(N) + Q(N+1)Q^*(N)]\}^{-1/2};$$

$$Q(n) = \alpha_1\alpha_2 e^{ik_1} (x_2^n - x_2^{-n}) - (x_2^{n-1} - x_2^{-n+1}); \quad x_2 = \frac{g_2 h - \varepsilon(k_1)}{J_2} - \text{sign} \left(\frac{g_2 h - \varepsilon(k_1)}{J_2} \right) \left[\left(\frac{g_2 h - \varepsilon(k_1)}{J_2} \right)^2 - 1 \right]^{1/2}.$$

3. Нормированные волновые функции, отвечающие дискретному набору уровней энергии в области квазинепрерывного спектра (8), для которой $|x_1| < 1$, $x_2 = e^{ik_2}$, имеют вид

$$A_n(k_2) = \begin{cases} Cx_1^{|n|}, & n \leq 0; \\ C \left[\frac{e^{ik_2 n} \pm e^{ik_2(N+1-n)}}{\alpha_2(1 \pm e^{ik_2(N+1)})} \right], & 1 \leq n \leq N; \\ \pm Cx_1^{n-N-1}, & n \geq N+1, \end{cases} \quad (\text{П.3})$$

где

$$C = \alpha_2 \left\{ \frac{(1 - x_1^2) \sin k_2 [1 \pm \cos k_2(N+1)]}{2\alpha_2^2 \sin k_2 [1 \pm \cos k_2(N+1)] + (1 - x_1^2)(N \sin k_2 \pm \sin k_2 N)} \right\}^{1/2}$$

(x_1, x_2 определяются из системы уравнений (5), (7)).

4. Нормированные волновые функции для локализованных на контактах состояний, для которых $|x_1| < 1$, $|x_2| < 1$ и определяются из (5), (7), имеют вид

$$A_n = \begin{cases} Dx_1^{|n|}, & n \leq 0; \\ D \left[\frac{(x_2^n \pm x_2^{N+1-n})}{\alpha_2(1 \pm x_2^{N+1})} \right], & 1 \leq n \leq N; \\ \pm Dx_1^{n-N-1}, & n \geq N+1, \end{cases} \quad (\text{П.4})$$

где

$$D = \frac{\alpha_2(1 \pm x_2^{N+1})}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{(1-x_1^2)(1-x_2^2)}{\alpha_2^2(1-x_2^2)(1 \pm x_2^{N+1})^2 + (1-x_1^2)x_2^2[1-x_2^{2N} \pm N(x_2^{N-1} - x_2^{N+1})]} \right\}^{1/2}.$$

1. E. Lieb, T. Schulz, and D. Mattis, *Ann. Phys.* **3**, 407 (1961).
2. J.P. Harrison, J.P. Hessler, and D.R. Taylor, *Phys. Rev.* **B14**, 2979 (1976).
3. L.L. Gonsalves and R.J. Elliot, *J. Phys.* **C12**, 1703 (1979).
4. P.M. Duxbury, J. Oitmaa, M.N. Barber, A. van der Bilt, K.O. Joung, and R.L. Carlin, *Phys. Rev.* **B24**, 5149 (1981).
5. M. Kenzelmann, R. Coldea, D.A. Tennant, D. Visser, M. Hofmann, P. Smeibidl, Z. Tylczynski, *Phys. Rev.* **B65**, 144432 (2002).
6. I. Chatterjee, *J. Magn. Magn. Matter* **265**, 363 (2003).
7. С.А. Пикин, В.М. Цукерник, *ЖЭТФ* **50**, 1377 (1966).
8. В.М. Конторович, В.М. Цукерник, *ЖЭТФ* **52**, 1466 (1967).
9. Th. Niemeijer, *Physica* **36**, 377 (1967).
10. Th. Niemeijer, *Physica* **39**, 313 (1968).
11. S. Katsura and M. Horiguchi, *Physica* **46**, 67 (1970).
12. В.М. Конторович, В.М. Цукерник, *ЖЭТФ* **53**, 1167 (1967).
13. J.A. Tjon, *Phys. Rev.* **B2**, 2411 (1970).
14. И.А. Винниковецкий, А.М. Фришман, В.М. Цукерник, *УФЖ* **19**, 1966 (1974).
15. В.З. Клейнер, В.М. Цукерник, *ФММ* **39**, 947 (1975).
16. В.З. Клейнер, В.М. Цукерник, *ФНТ* **6**, 322 (1980).
17. А.А. Звягин, Я.Ю. Сегал, *ФНТ* **21**, 1068 (1995).
18. J. Stolze and M. Vogel, *Phys. Rev.* **B61**, 4026 (2000).
19. Е.В. Езерская, *ФНТ* **24**, 474 (1998).
20. Е.В. Езерская, А.А. Кравченко, *Вісник ХНУ, сер. «Фізика»* **516**, вип. 5, 30 (2001).
21. P. Jordan and E. Wigner, *Z. Phys.* **47**, 631 (1928).
22. С.А. Coulson and G.S. Rushbrooke, *Proc. Camb. Philos. Soc.* **36**, 193 (1940).
23. Г. Корн, Т. Корн, *Справочник по математике*, Наука, Москва (1984).

Low temperature properties of XY spin-1/2 chain with impurity fragment

E.V. Ezerskaya and A.A. Chovpan

The exact energy spectrum has been found for infinite spin-1/2 XY-chain with impurity fragment in the longitudinal magnetic field. The spectrum consists of the energy band, a set of discrete levels, and may contain from one to four bound states localized at the boundaries between the impurity fragment and the main chain. The critical behavior of the local static thermodynamic characteristics and the time dependences of the dynamic longitudinal correlation functions at different temperatures are investigated. It is shown that the local thermodynamic characteristics are considerably influenced by both discrete and localized levels.

Keywords: XY-chain, energy spectrum, spin-correlation functions, dynamic correlations.