Физика низких температур, 1997, т. 23, № 7, с. 712–720

Классификация состояний и макроскопическое вырождение в незамкнутой XY-цепочке в поперечном поле

А. А. Логинов, Ю. В. Переверзев

Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины, Украина, 310164, г. Харьков, пр. Ленина, 47
E-mail:pereverzev@ilt.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 25 ноября 1996 г.

Для разомкнутой XY-цепочки строго установлена структура спектра и проведена классификация однофермионных состояний во всей области значений анизотропии и поперечного поля. Дается интерпретация квазивырождения и общей природы упорядочения в некотором классе систем с локально невырожденным основным состоянием.

Для розімкнутого XY-ланцюжка точно установлено структуру спектра і зроблено класифікацію однофеміонних станів в усій області значень анізотропії і поперечного поля. Наведено інтерпретацію квазівиродження і загальної природи упорядкування в деякому класі систем з локально невиродженим основним станом.

PACS:75.10.Jm

1. Введение

Интерес к XY-модели возник в связи с проблемой упорядочения в гейзенберговском антиферромагнетике [1]. В наиболее простых моделях, таких как изотропный ферромагнетик, уже для конечного числа узлов решетки основной уровень энергии вырожден и соответствующие состояния нарушают симметрию системы. При этом тенденция к упорядочению в макроскопической системе проявляется на самом элементарном уровне — в паре взаимодействующих узлов. Иначе обстоит дело в гейзенберговском антиферромагнетике, основное состояние которого не вырождено для любого конечного числа узлов и любой размерности системы [1], причем для пары узлов минимальная энергия возбуждения равна параметру обменного взаимодействия. В этом случае явление упорядочения принципиально связано с макроскопичностью системы. Эта же ситуация реализуется и в некоторых других квантовых системах.

Подобное явление можно изучить в модели XY-цепочки в поперечном магнитном поле H, которая позволяет получать строгие результаты. Эта модель исследовалась в работах [1,2], где рассматривалась замкнутая в кольцо цепочка N спинов ($S = 1/2$) с гамильтонианом

$$\hat{H} = -\sum_{n=1}^{N-1}\left(J_x S_n^x S_{n+1}^x + J_y S_n^y S_{n+1}^y\right) - H\sum_{n=1}^{N} S_n^z\ , \quad (1)$$

дополненным взаимодействием граничных узлов, где $J_x > J_y > 0$. В этом случае после перехода к ферми-операторам и отбрасывания некоторого «граничного» слагаемого гамильтониан сводится к невзаимодействующей системе фермионов с законом дисперсии

$$\varepsilon(k) = \left[(J_a \cos k - H)^2 + \Delta^2 \sin^2 k\right]^{1/2}\ ,$$
$$k = (2n/N)p,\ p = 0, \dots , N-1,$$
$$J_a = \frac{1}{2}\,(J_x + J_y)\ ,\ \Delta = \frac{1}{2}\,(J_x - J_y) \qquad (2)$$

и с вакуумным состоянием в качестве основного. Отсюда следует, что основное состояние при $\Delta \neq 0$ и $H \neq J_a$ не вырождено и его энергия для любых N отделена от остальной части спектра щелью δ:

$$\delta = \frac{1}{2}\,\Delta\,[1 - H^2/(J_x J_y)]^{1/2},\; H < J_x J_y/J_a\,;$$

$$\delta = |J_a - H|, \qquad H > J_x J_y/J_a\,. \quad (3)$$

Имея такую информацию, нельзя ничего сказать о наличии порядка при $N \to \infty$. В такой ситуации о существовании в системе дальнего порядка в термодинамическом пределе при температуре $T = 0$ и ненулевой анизотропии ($\Delta \neq 0$) свидетельствует найденное в [2] асимптотическое при $l \to \infty$ поведение корреляторов вида $\langle S_n^\alpha S_{n+1}^\alpha \rangle$ ($\alpha = x, y, z$).

В [1] была также рассмотрена незамкнутая XY-цепочка в отсутствие магнитного поля, допускающая строгое решение без указанного выше приближения. Оказалось, что при $\Delta \neq 0$ в данном случае имеется собственное состояние, энергия которого отстоит от основного уровня на величину ~ $(J_y/J_x)^{-N/2}$. Аналогичный результат получен в [3] для незамкнутой цепочки Изинга в поперечном магнитном поле. Авторы [1–3] считают, что именно с этим квазивырождением связано появление порядка при $N \to \infty$. Таким образом, приближение, которое приходится делать при рассмотрении замкнутой в кольцо цепочки, не влияя на термодинамические функции, затрудняет физическую интерпретацию результатов и, кроме того, может проявиться при анализе структуры упорядоченных состояний.

Учитывая вышесказанное, целесообразно исследовать точные решения конечной ($N > 4$) незамкнутой XY-цепочки в поперечном магнитном поле во всей области изменения параметров анизотропии и поля. В настоящей статье найдено распределение уровней энергии однофермионных состояний, приводится классификация этих состояний без явного исследования их структуры. При этом обнаруживаются два класса состояний «зонного» типа и два типа состояний, отвечающих квазивырождению. Установлено, что специфическое квазивырождение всегда связано с возникновением дальнего порядка. Обсуждаются критические размеры цепочек, в которых появляются особые решения, ответственные за квазивырождение; высказываются соображения, связанные с теорией возмущений, которые свидетельствуют о макроскопическом характере рассматриваемого квазивырождения и о его типичности для некоторого класса квантовых систем. Поскольку эти простые соображения подтверждаются строгими результатами в рассмотренном семействе XY-моделей, они могут быть использованы с некоторой уверенностью и в других аналогичных ситуациях.

2. Формулировка уравнений

Следуя методам [1], рассматривается гамильтониан (1), где, без ограничения общности, считается, что $J_x > 0$, $|J_y| < J_x$, $H \geq 0$, другие варианты сводятся к этому простыми унитарными преобразованиями. Точное решение модели (1) достигается преобразованием Иордана—Вигнера к ферми-операторам, в терминах которых гамильтониан принимает квадратичный вид. Его диагонализация достигается uv-преобразованием, которое определяется уравнениями

$$u = 1/\sqrt{2}\,(w + z),\; v = 1/\sqrt{2}(w - z),$$

$$AA^{+}w = \varepsilon^2 w\;,\;\; A^{+}w = \varepsilon z\;, \qquad (4)$$

где u, v, w, z — N-мерные столбцы, а матрица A равна

$$A_{n,m} = H\,\delta_{n,m} - \frac{1}{2}\,(J_a - \Delta)\delta_{n,m-1} - \frac{1}{2}\,(J_a + \Delta)\delta_{n,m+1}\,. \qquad (5)$$

При этом энергия фермиона ε выбирается неотрицательной, так что основное состояние является состоянием без фермионов.

Задача сводится к нахождению собственных значений и векторов (их должно быть в точности N) первого уравнения из (4):

$$AA^{+}w = \varepsilon^2 w\,. \qquad (6)$$

Все решения этого уравнения имеют вид ($n = 1, 2, \ldots, N$; $N > 4$)

$$w_n = c_1 e^{ik_1 n} + c_1' e^{-ik_1 n} + c_2 e^{ik_2 n} + c_2' e^{-ik_2 n} \qquad (7)$$

с комплексными k_1, k_2. Эти $k_{1,2}$ и $\varepsilon > 0$ из (6) связаны уравнениями

$$\varepsilon = \varepsilon(k_p),\; p = 1, 2, \qquad (8)$$

где функция $\varepsilon(k)$ определена в (2). (Мы не рассматриваем отдельно редкие случаи кратных корней и соответствующие виды решения, так как они при необходимости могут быть получены из (7) предельным переходом $k_1 - k_2 \to 0$, или $k_{1,2} \to 0, \pi$.)

Соотношения (8) обеспечивают решение при любых $c_{1,2}$, $c_{1,2}'$ всех уравнений (6) (записанных через компоненты векторов w_n и матричные элементы $(AA^{+})_{n,m}$), кроме двух первых ($n = 1; 2$) и двух последних ($n = N; N-1$). Эти граничные условия удовлетворяются выбором $c_{1,2}$, $c'_{1,2}$, что приводит к однородной системе четырех уравнений для них. Условие нетривиальной разрешимости этой системы дает еще одно уравнение для определения возможных значений ε, $k_{1,2}$:

$$(1 + \gamma^2 \mathrm{ctg}^2\, \kappa_1) \sin^2 [(N+1)\kappa_1] =$$

$$= (1 + \gamma^2 \mathrm{ctg}^2\, \kappa_2) \sin^2 [(N+1)\kappa_2] \ ,$$

$$\kappa_1 = \frac{1}{2}(k_1 - k_2) \ , \quad \kappa_2 = \frac{1}{2}(k_1 + k_2),$$

$$\gamma \equiv \Delta / J_a = (J_x - J_y)/(J_x + J_y) \ . \tag{9}$$

(Заметим, что условию $J_y > 0$ соответствует $0 < \gamma < 1$, а $J_y < 0$ — $\gamma > 1$.) Вместо одного из двух уравнений (8) можно взять

$$\cos k_1 + \cos k_2 = 2h_m \ \text{ или } \cos \kappa_1 \cos \kappa_2 = h_m \ ,$$

$$h_m = H/J_m \ , \quad J_m = J_x J_y / J_a \ , \tag{10}$$

которое выражает условие $\varepsilon(k_1) = \varepsilon(k_2)$, тогда второе из (8) будет определять собственные значения ε. Выражение (2) для $\varepsilon(k)$ одинаково для разомкнутой и замкнутой цепочек, но возможные значения k определяются в нашем случае системой уравнений (9), (10).

Уравнение (10) в отсутствие поля дает простую связь между двумя «импульсами» $k_1 \pm k_2 = \pi$, приводящую уравнение (9) к виду, изученному в [1]. Случай модели Изинга в поперечном поле также сводится к уравнению относительно одного импульса, так как в этой модели общее решение системы (6) имеет вид $ce^{ikm} + c'e^{-ikm}$ [3].

В рассматриваемом здесь общем случае два «импульса», участвующих в конструкции состояния, связаны соотношением (10), зависящим от параметров модели, что приводит к различным типам решений и делает их анализ более сложным.

3. Классификация решений

Уравнения (9), (10) допускают следующие типы решений в зависимости от положения чисел k_1, k_2 на комплексной плоскости. На k_1, k_2 мы накладываем некоторые ограничения с целью обеспечить взаимно однозначную параметризацию семейств функций (7).

1. k_1, k_2 вещественны,

$$0 < k_2 < k_1 < \pi \ ; \tag{11}$$

2. а) k_1 вещественно, $k_2 = ip$; б) k_1 вещественно, $k_2 = \pi + ip$;

$$0 < k_1 < \pi, \quad p > 0 \ . \tag{12}$$

3. $k_{1,2}$ — комплексные, $k_1 = k_2^*$, $k_1 = k + ip$, $k_2 = k - ip$,

$$0 < k < \pi, \quad p > 0 \ . \tag{13}$$

4. а) $k_{1,2} = ip_{1,2}$, $0 < p_2 < p_1$;
б) $k_1 = \pi + ip_1$,
$k_2 = ip_2$, $p_{1,2} > 0$; в) $k_{1,2} = ip_{1,2} + \pi$, $p_1 > p_2 > 0$. (14)

Все неравенства строгие, что обеспечивает линейную независимость векторов $\exp(ikm)$, входящих в (7) (см. замечание после (8)).

Решения типов 1 и 2 будем называть «зонными», так как значения $\varepsilon(k_1)$ для них с точностью до величин $\sim 1/N$ совпадают с соответствующими значениями $\varepsilon(k)$ для замкнутой в кольцо цепочки.

Решения первого типа реализуются при условии $H < |J_m|$ для значений $k_{1,2}$, лежащих в интервале $(0, k_0)$, $\cos k_0 = 2|h_m| - 1$, при $J_y > 0$ и в интервале $(\pi - k_0 , \pi)$ при $J_y < 0$. В этих интервалах при указанном условии функция $\varepsilon(k)$ немонотонна и дважды принимает каждое свое значение, причем она имеет минимум в точке $k_m = \arccos h_m$, если $J_y > 0$, и максимум, если $J_y < 0$. Таким образом, возможные значения величин $k_{1,2}$ для первого типа решений удовлетворяют условиям

$$\begin{gathered} 0 < k_2 < k_m < k_1 < k_0 \ , J_y > 0; \\ \pi - k_0 < k_2 < k_m < k_1 < \pi \ , \ J_y < 0 \ . \end{gathered} \tag{15}$$

Решениям типа 2 для магнитных полей $H < |J_m|$ соответствуют значения k_1, лежащие в интервале (k_0 , π) при $J_y > 0$, и в интервале $(0, \pi - k_0)$ при $J_y < 0$. При $H < |J_m|$ «зонные» решения могут быть только типа 2.

Решения типов 3 и 4 реализуются в полях $H < J_a$ и соответствуют квазивырождению в системе. Как и в [1,4], мы связываем это с появлением дальнего порядка при $N \to \infty$, в пользу чего будут приведены дополнительные соображения.

4. Решения «зонного» типа

Для решения типа 1, реализующегося только в полях $|h_m| < 1$, уравнение (9) удобно представить в виде

$$\frac{1+\gamma^2 \operatorname{ctg}^2 \kappa_1}{1+\gamma^2 \operatorname{ctg}^2 \kappa_2} = \frac{\sin^2 (N+1)\kappa_2}{\sin^2 (N+1)\kappa_1}\ , \qquad (16)$$
$$0 < \kappa_1 < \pi/2,\ \ \kappa_1 < \kappa_2\ ,\ \ \kappa_1 + \kappa_2 < \pi\ .$$

Уравнение (10) определяет монотонно убывающую функцию

$$\kappa_2\ (\kappa_1) = \arccos\ (h_m/\cos\ \kappa_1) \qquad (17)$$

в интервале $[0,\ \kappa_0]$, где $\kappa_0 \equiv k_0/2$.
Подставив (17) в уравнение (16), получим

$$f(\kappa_1) = F_N(\kappa_1)\ , \qquad 0 < \kappa_1 < \kappa_0\ , \qquad (18)$$

где f, F_N — функции в левой и правой частях уравнения (16) после такой подстановки. Функция $f(\kappa_1)$ монотонно убывает в интервале $[0,\ \kappa_0]$ от ∞ до 1. Функция $F_N(\kappa_1)$ в некоторой окрестности каждой точки $\pi l/(N+1)$, $l = 0,1,2,\ldots,m$ является монотонно растущей от 1 до ∞ слева от этой точки и монотонно убывающей справа от нее. Здесь m определяется условием

$$\frac{\pi m}{N+1} < \kappa_o \le \frac{\pi(m+1)}{N+1}\ . \qquad (19)$$

В остальных точках интервала $(o,\ \kappa_0)$ функция $F_N(\kappa_1) < 1$, а $F_N(\kappa_0) = 1$. Таким образом, уравнение (18) имеет два решения в каждом интервале

$$P_l \equiv \left(\frac{\pi l}{N+1}, \frac{\pi(l+1)}{N+1}\right) \qquad (20)$$

с $l = 1,\ 2,\ \ldots,\ m-1$. В интервале P_0 всегда имеется один корень уравнения (18), отсутствие же второго корня (вблизи $\kappa_1 = 0$) эквивалентно условию

$$\frac{1}{\gamma^2} < \frac{(N+1)^2}{\sin^2 (N+1)k_m} - \frac{1}{\sin^2 k_m} + 1\ , \qquad (21)$$
$$k_m = \arccos\ h_m\ .$$

Достаточным условием выполнения (21) и, тем самым, отсутствия второго корня в интервале P_0 является более простое соотношение

$$\frac{1}{\gamma^2} < \frac{1}{3}\ (N+1)^2 + \frac{2}{3}\ . \qquad (22)$$

Из (22) видно, что при анизотропии $0 < \gamma < 1$ отсутствие второго корня в P_0 обеспечивается в достаточно длинной цепочке, причем выбор этой длины не зависит от близости поля H к J_m. При $\gamma > 1$ ($J_y < 0$) второй корень в интервале P_0 отсутствует при всех $N > 4$.

Выше предполагалось,что в правой части уравнения (16) числитель не обращается в нуль вместе со знаменателем. В противном случае необходимо исходить из очевидно выполняющегося уравнения (9). При этом, обращаясь непосредственно к системе уравнений для $c_{1,2}$, $c'_{1,2}$, можно заметить, что ее ранг равен двум, а следовательно, и в этом случае имеются два независимых решения.

Энергия фермиона, соответствующая параметру κ_1 , может быть получена как $\varepsilon(\kappa_1 + \kappa_2(\kappa_1))$, где с точностью $\sim 1/N$ в качестве κ_1 можно взять любую точку интервала, содержащего данное решение.

Сделаем следующее общее замечание. Отсутствие второго корня в P_0 при условии (21) непосредственно трудно установить при любых N и произвольных параметрах, однако легко доказать, что если такие дополнительные корни есть, то их не менее двух. При этом подсчет общего числа гарантированно существующих корней привел бы к выводу о существовании более чем N линейно-независимых решений соответствующей алгебраической задачи на собственные значения, что проводит к противоречию. В дальнейшем мы всегда подразумеваем аналогичные соображения, что обеспечивает отсутствие каких-либо корней, кроме тех, существование которых строго установлено.

Решения типа 2 удобно параметризовать числами k, p:

$$k_1 = k, \quad k_2 = ip \quad \text{при } J_y > 0;$$
$$k_1 = \pi - k, \quad k_2 = ip + \pi \quad \text{при } J_y < 0\ ,$$
$$0 < k < \pi,\ p > 0\ . \qquad (23)$$

Уравнение (10) в обоих случаях ($J_y > 0$, $J_y < 0$) имеет вид

$$\cos\ k + \operatorname{ch}\ p = 2|h_m| \text{ или } |\cos\kappa|^2 = |h_m|,\ \kappa = \frac{1}{2}(k - ip) \qquad (24)$$

и однозначно определяет монотонно растущую функцию $p(k)$ с k, изменяющимся в интервале $(k_0\ ,\ \pi)$ для $|h_m| < 1$ и $(0,\ \pi)$ для $|h_m| > 1$.

Обозначая аргументы комплексных чисел $\cos\ \kappa$ и $\sin\ [(N+1)\kappa]$ соответственно 2ψ и $-4\Phi_N$, уравнение (9) можно записать как

$$\exp(i\varphi) \equiv \frac{(1-|h_m|\exp(-i\psi))\,(1\mp h_a\exp(i\psi))}{(1-|h_m|exp\,(i\psi))\,(1\mp h_a\exp(-i\psi))} = \\ = \exp(i\Phi_N), \qquad h_a \equiv \frac{H}{J_a}\,, \tag{25}$$

где верхний знак относится к случаю $J_y > 0$, а нижний — к $J_y < 0$. Величины ψ, Φ_N связаны с параметрами k, $p = p(k)$ соотношениями

$$\mathrm{tg}\,(\psi/2) = \mathrm{tg}\,(k/2)\ \mathrm{th}\,(p/2), \\ \mathrm{tg}\,(\Phi_N/4) = \mathrm{ctg}\,[(N+1)k/2]\ \mathrm{th}\,[(N+1)p/2]\ . \tag{26}$$

Исследование функций $\psi(k)$, $\Phi_N(k)$ приводит к следующим выводам относительно решений уравнения (25).

При $|h_m| < 1$ и любом знаке J_y в каждом интервале P_l с $l = 2m+1, \ldots, N-1$, где m определено в (19), обязательно имеется один корень уравнения (25). Кроме того, при этом существует еще одно решение либо типа 1, соответствущее значению κ_1 в интервале P_m , либо типа 2, соответствующее значению k в интервале P_{2m} .

Для $|h_m| > 1$ $(J_y > 0\ ,\ J_y < 0)$ в каждом интервале P_l с $l = 1, \ldots, N-1$ также обязательно имеется один корень уравнения (25). В интервале же P_0 при $J_y < 0$ решение отсутствует. При $J_y > 0$ решение в P_0 появляется только в том случае, если выполнено условие

$$1-h_a < \frac{\gamma^2}{(N+1)\ \mathrm{cth}\,[(N+1)p_0/2]}\left(\frac{h_m}{h_m-1}\right)^{1/2}, \\ \mathrm{ch}\ p_0 = 2h_m - 1\ . \tag{27}$$

Анализируя (27), можно получить достаточные, но более простые условия отсутствия решения в интервале P_0 в виде системы неравенств

$$\gamma^2 > 1-h_a > \gamma\left[\gamma + (1-\gamma^2)^{1/2}\right]/(N+1), \\ \gamma > \left[(N+1)^2+1\right]^{-1/2}\ . \tag{28}$$

Из (28) видно, что при достаточно больших N решение в P_0 отсутствует, если поле $H < J_a$, а анизотропия $\gamma \neq 0$, причем это N можно выбрать не зависящим от близости поля H к J_m . При $H > J_a$ непосредственно из (27) видно, что решение в P_0 существует.

Отдельно рассмотрим возможность появления корня в интервале P_N для различных полей. Для $J_y > 0$ в этом интервале корни отсутствуют при всех значениях поля и всех $N > 4$. Для $J_y < 0$ корень появляется в P_N тогда и только тогда, когда выполняется неравенство

$$1-h_a < \frac{\gamma^2}{(N+1)\ \mathrm{th}\,[(N+1)p(\pi)/2]}\left[\frac{|h_m|}{1+|h_m|}\right]^{1/2}, \\ \mathrm{ch}\,[p(\pi)] = 2|h_m| + 1\ . \tag{29}$$

Более простым достаточным условием отсутствия корня в P_N является

$$1-h_a > \gamma^2/(N+1)\ . \tag{30}$$

Из (29), (30) следует, что корень в P_N при $H > J_a$ существует для всех $N > 4$, а при $H < J_a$ такого корня нет при достаточно больших N.

Подведем итог по числу решений «зонного» типа.

Если $H < |J_m| < J_a$ $(\gamma < \sqrt{2})$ или $H < J_a < |J_m|$ $(\gamma > \sqrt{2})$, то имеются $2(m-1)+1$ решения типа 1, $N-1-2m$ решения типа 2 и одно решение, тип которого (1 или 2) зависит от конкретных значений параметров. Суммарное число этих корней равно $N-1$. При достаточно больших N (условия этого определяются неравенствами (21), (29)) других корней «зонного» типа при указанных значениях полей нет.

Если $|J_m| < H < J_a$, то имеется $N-1$ решение только типа 2. Других корней «зонного» типа здесь при достаточно больших N (условия (27), (29)) тоже нет.

В полях $H > J_a$ всегда имеются в точности N решений «зонного» типа, причем часть из них может быть типа 1 лишь при $\gamma > \sqrt{2}$, так как в этом случае $J_a < |J_m|$.

Таким образом, в полях $H < J_a$ при достаточно больших N не хватает одного корня. Этот недостающий корень соответствует решениям типа 3,4, к анализу которых мы переходим.

5. Квазивырождение

Вначале заметим, что спектр фермионов ε (8) в случае решений типа 3, 4 удобно выразить через $\kappa_{1,2}$:

$$\varepsilon^2 = \cos^{-2}(\kappa_{1,2})\left[J_g^2\cos^2(\kappa_{1,2}) \mp H^2\right]\times \\ \times\left[J_{ag}^2 \mp \cos^{2}(\kappa_{1,2})\right], \tag{31}$$

где верхний знак относится к случаю $J_y > 0$, а нижний — к $J_y < 0$. Решения типа 3 возможны только при $J_y > 0$ и «импульсах» вида (13). Соотношение (10) однозначно определяет в этом случае монотонно растущую функцию $k(p)$, с учетом которой уравнение (9) принимает вид

$$(\mathrm{ch}^2\, p - h_m^2)\, (J_{ag}^2 - \mathrm{ch}^2\, p) =$$

$$= J_{ag}^2 (\mathrm{ch}^2\, p - h_g^2)\, \mathrm{sh}^2\, p\, \frac{\sin^2 [(N+1)k(p)]}{\mathrm{sh}^2\, [(N+1)p]}\ ,$$

$$J_{ag} \equiv J_a/J_g\ ,\ h_g \equiv H/J_g\ ,\ J_g \equiv (J_x|J_y|)^{1/2}\ . \qquad (32)$$

Исследование функций в правой и левой частях (32) показывает, что условие существования корня этого уравнения при $H < J_m$ совпадает с условием (21) отсутствия второго решения типа 1 в интервале P_0, а при $J_m < H < J_g'$ — с условием (27) отсутствия решения типа 2 в P_0. Поле J_g' определяется из (32) требованием, чтобы при $H \to J_g'$ выполнялись предельные соотношения $\mathrm{ch}\, p \to J_g'/J_m$, $k(p) \to 0$ (при $H = J_g'$ реализуется квазиполиномиальный вид решения — замечание после формулы (8)). Отметим, что J_g' зависит от N, но разность $J_g - J_g'$ является быстро убывающей функцией при $N \to \infty$:

$$J_g - J_g' \cong \Delta^4/(8J_a^2\, J_x)(N+1)(J_y/J_x)^N\ . \qquad (33)$$

Явный вид решения уравнения (32) можно записать только при больших N. В нулевом приближении $\mathrm{ch}\, p = J_{ag}$, а асимптотическая формула для поправки при $N \to \infty$ равномерно в интервале полей $0 < H < J_g'$ имеет вид

$$J_{ag}^2 - \mathrm{ch}^2\, p = 4A\, \sin^2 [(N+1)k_g](J_y/J_x)^{N+1}\ , \qquad (34)$$

где $\cos k_g = H/J_g$, $A = (J_a^2 - H^2)\Delta^2 J_g^{-2}\left|J_xJ_y - H^2\right|^{-1}$.

Для получения значения ε, соответствующего рассматриваемому решению (это значение обозначаем в дальнейшем как ε_0), следует в формуле (31) положить $\kappa_1 = ip$ и подставить в нее (34). Оставляя лишь главный нетривиальный член асимптотики по N, получаем

$$\varepsilon_0 \cong 2B\, |\sin [(N+1)k_g]|\, (J_y/J_x)^{(N+1)/2}\ , \qquad (35)$$

где $B = \Delta(J_a^2 - H^2)J_a^{-1}\, |J_xJ_y - H^2|^{-1/2}$.
Отметим, что в пределе $H \to J_g'$ выражение (35) преобразуется в вид

$$\varepsilon_0 \cong \frac{2\Delta^3(N+1)}{J_a\, J_g} \left(J_y/J_x\right)^{(N+1)/2}\ . \qquad (36)$$

Полагая в (35) $H = 0$, приходим к результату работы [1].

Из (35), (36) видно, что энергия, соответствующая решению типа 3, при $N \to \infty$ является быстро убывающей функцией N во всей области существования этого решения. Таким образом, рождение фермиона с такой энергией приводит к экспоненциально малому по N изменению энергии системы, т.е. к квазивырождению.

Интересно, что зависимость ε_0 от поля H имеет, как видно из (35), характерные осцилляции. А именно, для каждого N существует дискретное множество полей (сгущающееся при $N \to \infty$), в которых имеется точное вырождение $\varepsilon_0 = 0$. Поля определяются равенством $H_l = J_g \cos [\pi l/(N+1)]$, где $l = 1, 2, \ldots, N/2$. Эти осцилляции являются «продолжением» на анизотропный случай таких же полевых осцилляций в изотропной XY-модели, полученных в [4].

Обратим еще раз внимание на то, что решение типа 3 существует в интервале полей $0 < H < J_g'$, а при переходе поля через верхнюю границу тип решения меняется, как будет видно, на тип 4.

Анализ уравнений (9), (10) показывает, что для решений типа 4 в случае $J_y > 0$ реализуется вариант а) из (14), а для $J_y < 0$ — вариант б). Тип 4в) вообще не реализуется. Для корней типа 4а),4б) уравнения (9), (10) удобно представить в переменных $p = (p_1 + p_2)/2$, $p' = (p_1 - p_2)/2$, причем с учетом (10) p, p' удовлетворяют условиям $0 < p' < p$. Уравнение (10) однозначно определяет монотонно убывающие функции $p'(p)$ (разные для разных знаков J_y), с учетом которых уравнение (9) преобразуется в уравнения относительно p. Рассмотрим последовательно сначала случай $J_y > 0$, а затем $J_y < 0$.

Для $J_y > 0$ уравнение для p формально получается из (32) после замены в последнем $\sin^2 [(N+1)k(p)]$ на $-\mathrm{sh}^2 [(N+1)p'(p)]$. Его анализ приводит к выводу о существовании одного корня при $J_g' < H < J_a$, где J_g' определено выше, если выполнено условие отсутствия «зонного» решения в интервале P_0, выражаемое неравенством, обратным (27). Асимптотическая формула при $N \to \infty$ для этого корня имеет вид

$$J_{ag}^2 - \mathrm{ch}^2\, p \cong A\, Q_N^2 \left(J_x^{-1}\Big[H + (H^2 - J_xJ_y)^{1/2}\Big]\right)^{2(N+1)}, \qquad (37)$$

где $Q_N = 1 - \exp [-2(N+1)p_g]$, $\mathrm{ch}\, p_g = H/J_g$.
Соответствующее значение ε ($\kappa_2 = ip$ в (31)) равно

$$\varepsilon_0 \cong BQ_N \left(J_x^{-1} \Big[H + (H^2 - J_xJ_y)^{1/2}\Big]\right)^{N+1}\ , \qquad (38)$$

где основание показательной функции от N в рассматриваемом интервале полей меньше единицы. При $H \to J_g'$ выражение (38) переходит в (36), что обеспечивается, в частности, фактором

Q_N в (37), (38). Для всех полей вне малой (в меру малости N^{-1}) окрестности J_g' этим фактором можно пренебречь. При $J_y \to 0$ из (38) следует результат работы [3].

Для $J_y < 0$ уравнение (9) имеет вид

$$(\mathrm{sh}^2\, p + h_m^2)\,(J_{ag}^2 - \mathrm{sh}^2\, p) =$$

$$= J_{ag}^2\,(\mathrm{sh}^2\, p - h_g^2)\,\mathrm{ch}^2\, p\, \frac{\mathrm{ch}^2\,[(N+1)p'(p)]}{\mathrm{ch}^2\,[(N+1)p]}\ . \qquad (39)$$

Его исследование приводит к выводу о существовании одного корня во всем интервале полей $0 < H < J_a$ при выполнении неравенства, обратного (29). Асимптотические формулы для этого корня и значения ε_0 даются выражениями (37), (38), в которых следует принять $Q_N = 1$.

Таким образом, для полей $H < J_a$ и $0 < \gamma < \infty$ в системе, кроме зонных, реализуется одно особое решение, если N превышает некоторое критическое значение N_c . Это значение при заданных параметрах модели можно определить из соотношений (21), (27), (29). При этом из грубых достаточных условий (22), (28), (30) следует, в частности, что для $J_y > 0$ особое решение существует при всех $N > 4$ (т.е. $N_c = 4$) в области значений параметров, удовлетворяющих совокупности условий

$$0 < \gamma < 1\ ,$$

$$H/J_a < \min\left\{(1-\gamma^2),\ (1-[\gamma^2+\gamma(1-\gamma^2)^{1/2}])\right\}.$$

6. Теория возмущений

Для лучшего понимания природы квазивырождения и его связи с появлением дальнего порядка при $N \to \infty$ рассмотрим исследуемую XY-модель с точки зрения теории возмущений (ТВ), исходя из модели Изинга $\hat{H}_0$, что соответствует $J_y = 0$, $H = 0$ в (1), при включении слабого поперечного поля H или малого обмена J_y . Подчеркнем следующие очевидные и существенные для дальнейшего моменты: $\hat{H}_0$ имеет двукратно вырожденный основной уровень энергии E_0 , причем соответствующие состояния $|+\rangle$ и $|-\rangle$ являются произведением (тензорным) состояний отдельных узлов; при этом все узельные состояния вектора $|+\rangle$ ортогональны узельным состояниям вектора $|-\rangle$ (при больших N это соответствует макроскопическому различию состояний $|+\rangle$,$|-\rangle$). Кроме того, существует симметрия $\hat{H} = \hat{H}_0 + V$ (вращение на π вокруг оси z), которая переводит состояния $|+\rangle, |-\rangle$ друг в друга и относительно которой пространство вырождения $\left\{E_0\right\}$ уровня E_0 распадается на два одномерных, определяемых векторами $|+\rangle \pm |-\rangle$.

При включении возмущения V происходит расщепление уровня E_0 , которое описывается эквивалентным оператором ТВ. Общая структура его слагаемого порядка m имеет вид

$$P_0 V (R_0 V)^{m-1} P_0\ ,$$
$$R_0 \equiv (1-P_0)\,(\hat{H}_0 - E_0)^{-1}(1-P_0)\ , \qquad (40)$$

где P_0 — проектор на $\left\{E_0\right\}$, $V \sim H$ либо $V \sim J_y$. В силу упомянутых выше фактов ясно, что если $m < N$ при $V \sim H$ или $m < N/2$ при $V \sim J_y$, то все слагаемые в (40) могут переводить каждое из состояний $|\pm\rangle$ только само в себя, давая одинаковые поправки к ним, что не приводит к расщеплению E_0 . Только начиная с $m = N$ для $V \sim H$ или с $m = N/2$ для $V \sim J_y$ в (40) появляются слагаемые с ненулевым матричным элементом между $|+\rangle$ и $|-\rangle$, что и приводит к формированию собственных состояний $|+\rangle \pm |-\rangle$ и экспоненциально малому расщеплению $\sim (H/J_x)^N$ или $\sim (J_y/J_x)^{N/2}$ уровня E_0 . При этом число слагаемых, которые могут дать вклад в первую неисчезающую поправку ТВ, не более N, что не меняет быстро убывающий характер зависимости расщепления от N. При большей размерности ν решетки увеличивается скорость убывания за счет увеличения энергий возбуждения промежуточных состояний до величин порядка $J_x\, N^{(\nu-1)/\nu}$.

Для больших N расщепление остается малым вплоть до значения возмущения, близко приближающегося к величине щели J_x в спектре $\hat{H}_0$. Однако реальной применимости ТВ могут помешать не дающие расщепления поправки, неравномерно сдвигающие уровни энергии $\hat{H}_0$ уже в низших порядках ТВ, что может приводить к их пересечению и тем самым к неприменимости ТВ. Как показывают точные результаты, в рассматриваемом здесь случае этого не происходит и ТВ действительно дает правильную картину расщепления для всех $H < J_x$ или $J_y < J_x$ при достаточно больших N. Однако если примененить предложенную процедуру описания к антиферромагнитной изинговской цепочке со спином 1, включая изотропное zy $(J_y = J_z)$ антиферромагнитное возмущение, то, если справедлива гипотеза Холдейна [7], релизуется описанная выше картина пересечения уровней при некотором значении анизотропии.

Таким образом, рассмотрение в рамках ТВ позволяет сделать вывод о том, что наличие в больших системах квазивырождения (аномально малого расщепления с характерной экспоненциальной зависимостью от N, $\sim \xi^N$, $\xi < 1$) можно считать признаком того, что каждое из соответствующих состояний является суперпозицией одних и тех же макроскопически различных состояний.

Теперь подробно опишем для нашей простейшей ситуации механизм появления дальнего порядка. Пока число узлов мало, основное состояние $2^{-1/2}(|+\rangle - |-\rangle)$ системы является чистым, невырожденным, отделенным наблюдаемой энергетической щелью от остальных состояний. (Во избежание недоразумений напомним, что мы имеем дело с прообразами истинных состояний в подпространстве $\{E_0\}$, где определен эквивалентный гамильтониан ТВ (40).) Это чистое состояние при $N \to \infty$ переходит в такое предельное $|\infty\rangle$, которое является смесью предельных макроскопически различимых однородных состояний $|\infty, +\rangle$ и $|\infty, -\rangle$, поскольку для любых локальных наблюдаемых (корреляторов) K

$$\langle \infty |K| \infty \rangle = 2^{-1}(\langle \infty, + |K| \infty, + \rangle + \langle \infty, - |K| \infty, - \rangle). \tag{41}$$

Ненулевой предел коррелятора $\langle (S_0^x - \langle S_0^x \rangle) \times (S_n^x - \langle S_n^x \rangle) \rangle$ при $n \to \infty$, вычисленный в [2] для состояния $|\infty\rangle$, как раз и является достаточным условием разложимости его в смесь однородных состояний [5]. Компоненты $|\infty \pm \rangle$ разложения (41), по-видимому, уже неразложимы и поэтому представляют собой реально наблюдаемые различные термодинамические состояния, в которых имеется упорядочение ($\langle S_n^x \rangle \neq 0$).

Заметим, что второе состояние квазивырожденного дублета $|+\rangle + |-\rangle$ в пределе $N \to \infty$ совпадает с $|\infty\rangle$. Это проявляется в однофермионных состояниях типа 3, 4, параметры которых прямо связаны с параметрами, характеризующими поведение корреляторов в состоянии $|\infty\rangle$. А именно, параметры, определяющие пространственно немонотонную часть корреляторов $\sim \exp(-pn)\cos(kn)$ при больших n в полях $H < J_g$ [2], в точности совпадают с действительной и мнимой частью параметров $k_{1,2}$ решения типа 3, существующего в той же области полей. В поле $J_g < H < J_a$ также параметры решения типа 4, $p_{1,2}$, определяют параметр $p_1 - p_2$ экспоненциально затухающей части корреляторов [2].

Рассуждения в данном разделе допускают некоторые обобщения, что позволяет говорить о существовании некоторого класса квантовых решетчатых систем, находящихся в окрестности изингоподобных моделей, для которых реализуется описанный выше механизм квазивырождения и установления дальнего порядка при $N \to \infty$, несмотря на невырожденность основного состояния при конечных N.

7. Заключение

Для разомкнутой конечной ($N > 4$) анизотропной XY-цепочки с поперечным магнитным полем проведена классификация однофермионных состояний и найдено распределение соответствующих уровней энергии для всех значений параметров J_x, J_y, H. Для такой системы обнаруживаются два класса решений «зонного» типа (типы 1 и 2), энергия которых определяется формальным законом дисперсии безграничной цепочки $\varepsilon(k)$ при разрешенных вещественных значениях k, и одно особое решение, которое также может быть двух типов (типы 3 и 4) и имеет энергию, соответствующую комплексным k.

Состояния типа 1 содержат в своей конструкции два вещественных «импульса» $k_{1,2} > 0$, при которых $\varepsilon(k)$ принимает одинаковые значения, т. е. такие решения возможны, когда спектр $\varepsilon(k)$ немонотонный (при $k > 0$), и соответствуют обобщенным стоячим волнам. Эти решения реализуются в полях $H < |J_m|$, в которых имеется указанная немонотонность $\varepsilon(k)$.

Состояния типа 2 существуют при всех полях и имеют в своей конструкции один вещественный «импульс» k_1. Выполнение же граничных условий обусловлено слагаемыми, быстро убывающими при удалении от границ и содержащими «импульс» k_2 вида ip или $\pi + ip$.

В полях $H < J_a$ имеется $N - 1$ решение «зонного» типа и одно особое решение, энергия которого с ростом длины цепочки экспоненциально быстро (по N) стремится к нулю. При $N \to \infty$ последнее приводит к вырождению в системе, в частности к вырождению основного состояния. Более точно, область, где при конечных N реализуется особое решение (типа 3, 4), определяется неравенствами (21), (27), (29). Из них, в частности, следует, что если модель близка к изотропной или поле приближается снизу к критическому J_a, то N должно быть достаточно большим, $N > N_c >> 1$. В то же время существует широкая область значений параметров, для которых особое решение существует при всех $N > 4$ ($N_c = 4$).

Во всей области значений параметров, где существует особое решение, известные расчеты корреляторов, выполненные в [2] для кольца, свидетельствуют о том, что предельное основное состояние в нем является смесью однородных макроскопически различных состояний. Эти расчеты выполнены для модели с одинаковыми знаками обменных параметров, но, используя характерное квазивырождение как правдоподобный критерий наличия дальнего порядка в системе, мы можем считать, что он существует и при разных знаках обменов, если $H < J_a$.

Проведенный в работе неформальный анализ с точки зрения теории возмущений придает достоверность утверждению о связи квазивырождения с наличием дальнего порядка. Этот анализ позволяет описать один из возможных сценариев появления порядка в системах, имеющих невырожденное основное состояние в конечном объеме. А именно, такое состояние может оказаться суперпозицией двух векторов, которые с ростом числа узлов становятся макроскопически различными,сохраняя в ней при $N \to \infty$ ненулевые веса. В этом пределе такая суперпозиция превращается в смесь макроскопически различимых состояний, отдельные компоненты которой имеют ту же плотность энергии, что и смесь. Фактически это означает неединственность термодинамического предела для основного состояния (точка фазового перехода первого рода), причем именно компоненты разложения представляют собой чистые термодинамические фазы (если они, в свою очередь, не разлагаются в подобную смесь). Их можно было бы сразу получить или методом квазисредних, или производя предельный переход при подходящих граничных условиях. Если учесть обычно имеющийся в такой ситуации элемент симметрии, переводящий указанные компоненты друг в друга, то в процессе перехода $N \to \infty$ будет наблюдаться квазивырождение.

1. E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, *Ann. Phys.(N.Y.)* **16**, 406 (1961).
2. E. Barouch and B. McCoy, *Phys.Rev.* **A3**, 786 (1971).
3. P. Pfeuty, *Ann.Phys.(N.Y.)* **57**, 79 (1970).
4. В. М. Конторович, В. М. Цукерник, *ЖЭТФ* **62**, 355 (1972).
5. Д. Рюэль, *Статистическая механика*, Мир, Москва (1971).
6. I. Affleck, *J. Phys.: Condens. Matter.* **1**, 3047 (1989).

Classification of states and macroscopic degeneracy of an open *XY*-chain in a transverse field

A. A. Loginov and Yu. V. Pereverzev

For an open *XY*-chain a structure of the spectrum is determined rigorously. All single-fermion states are classified in the whole range of anisotropy and transverse field values. An interpretation of the quasi-degeneracy is presented and the general nature of ordering in a certain class of systems with a locally non-degenerate ground state is explained.