

ТОЧНО РЕШАЕМЫЕ ДВУМЕРНЫЕ КВАНТОВЫЕ СПИНОВЫЕ МОДЕЛИ

Д. В. Дмитриев, В. Я. Кривнов, А. А. Овчинников*

*Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля Российской академии наук
117977, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 19 июня 1998 г.

Предложен метод построения точной волновой функции основного состояния двумерной модели со спином $1/2$. Метод основан на представлении волновой функции в виде произведения спинов четвертого ранга, относящихся к узлам решетки, на метрические спиноры, соответствующие связям между ближайшими узлами. Построенная функция является точной волновой функцией 14-параметрической модели. Детально исследован частный случай этой модели, зависящий от одного параметра. Основное состояние всегда является невырожденным синглетом, а спиновые корреляторы экспоненциально уменьшаются с расстоянием. Метод может быть обобщен для моделей со спином $1/2$ на других типах решеток.

1. ВВЕДЕНИЕ

Квантовые спиновые системы с фрустрированными взаимодействиями в последнее время являются объектом повышенного интереса [1–10]. Особый интерес представляют модели такого типа, для которых удается сконструировать точное основное состояние. Первым примером такой модели является известная модель Маюмдара—Гоша [11]. Эта модель представляет цепочку спинов $1/2$ с антиферромагнитными взаимодействиями J_1 и J_2 ближайших и следующих за ближайшими спинов, причем $J_2 = J_1/2$. Основное состояние этой модели двукратно вырождено, состоит из димеризованных синглетов, и имеется щель в спектре возбуждений. Другим примером точно решаемой модели является одномерная модель с билинейным и биквадратичным взаимодействиями и спином 1, исследованная Аффлеком, Кеннеди, Либом и Тасаки [12] (модель АКЛТ). Ее основное состояние имеет структуру типа валентных связей на каждой соседней паре спинов. Оно не вырождено, спиновые корреляторы в основном состоянии экспоненциально уменьшаются с расстоянием, и имеется щель в спектре возбуждений. Таким образом, эта модель обладает свойствами, предсказанными Холдейном [13] для одномерной гейзенберговской антиферромагнитной модели со спином 1. Основное состояние типа валентных связей является точным и для систем большей размерности, но со спином $d/2$ (d — координационное число решетки) [14]. Одномерная модель АКЛТ была впоследствии обобщена и исследована в ряде работ [15], где было также показано, что волновая функция основного состояния может быть представлена в виде шпура от произведения матриц, описывающих спиновые состояния узлов цепочки («матричная» форма). Оба приведенных выше примера характеризуются тем, что полный гамильтониан модели представляется в виде суммы ячеечных гамильтонианов (не коммутирующих между собой) и точная волновая функция основного состояния всей системы

* E-mail: ovchin@glas.apc.org

является собственной функцией с наименьшей энергией каждого ячеечного гамильтониана.

В нашей работе [16] была рассмотрена точно решаемая одномерная фрустрированная модель со спином $1/2$, свойства которой во многом подобны свойствам модели АКЛТ. Волновая функция основного состояния имеет специальную рекуррентную форму и, как было показано нами, может быть сведена к матричному виду. Необходимо, однако, отметить, что как рекуррентная, так и матричная формы являются существенно одномерными конструкциями и их непосредственное обобщение на системы более высокой размерности невозможно. Отметим в этой связи работу [17], где предложен метод построения точной волновой функции основного состояния для моделей со спином $3/2$ на гексагональной решетке. Этот метод применим и к другим системам со спином $d/2$.

В данной работе будет рассмотрен класс моделей со спином $1/2$, для которых точная волновая функция основного состояния будет представлена в альтернативной форме. В одномерном случае эта волновая функция сводится к найденной нами ранее в [16], но она допускает обобщение на системы более высокой размерности. Анализ двумерной модели составляет основное содержание работы.

Статья построена следующим образом. В разд. 2 рассмотрен метод построения точной волновой функции для одномерной модели с $s = 1/2$. В разд. 3 построена точно решаемая двумерная модель. Исследование свойств этой модели с использованием численных расчетов проведено в разд. 4. В разд. 5 обсуждается возможность обобщения нашего рассмотрения на другие типы решеток. В Приложении приведено доказательство невырожденности основного состояния двумерной модели при наличии циклических граничных условий.

2. ОДНОМЕРНАЯ МОДЕЛЬ

В [16] мы исследовали одномерную однопараметрическую модель, содержащую два спина $1/2$ в элементарной ячейке и включающую обменные взаимодействия соседних спинов, следующих за соседними и спинов, разделенных двумя узлами решетки. Точная волновая функция основного состояния циклической цепочки может быть представлена в виде

$$\Psi_0 = \text{Tr}[A(1, 2) A(3, 4) \dots A(N - 1, N)], \quad (1)$$

где $A(2i - 1, 2i)$ — матрица 2×2 , относящаяся к i -ой элементарной ячейке.

Ниже мы представим волновую функцию Ψ_0 в более удобной для дальнейшей обобщения на другие типы решеток форме и приведем общий вид гамильтониана, для которого Ψ_0 является точной волновой функцией основного состояния.

Рассмотрим цепочку $N = 2M$ спинов $1/2$. Волновая функция этой системы описывается спинором N -го ранга:

$$\Psi = \Psi^{\lambda\mu\nu\dots\tau}, \quad (2)$$

где индексы $\lambda, \mu, \nu, \dots, \tau = 1, 2$ соответственно разным проекциям спина $1/2$.

Разобьем систему на пары соседних спинов. Тогда волновую функцию можно записать в виде произведения M спиноров второго ранга:

$$\Psi = \Psi^{\lambda\mu}(1)\Psi^{\nu\rho}(2)\dots\Psi^{\sigma\tau}(M). \quad (3)$$

Составим теперь из (3) скаляр, упрощая (3) по парам индексов:

$$\Psi_s = \Psi^\lambda_{\nu}(1)\Psi^\nu_{\kappa}(2)\dots\Psi^\sigma_{\lambda}(M). \quad (4)$$

Здесь индексы внизу соответствуют ковариантным компонентам спинора, которые связаны с контравариантными (индексы вверх) посредством метрического спинора

$$g_{\lambda\mu} = g^{\lambda\mu} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

$$\Psi_\lambda = g_{\lambda\mu}\Psi^\mu, \quad \Psi^\lambda = g^{\mu\lambda}\Psi_\mu. \quad (6)$$

Таким образом, скалярную функцию (4) можно представить в виде

$$\Psi_s = \Psi^{\lambda\mu}(1)g_{\mu\nu}\Psi^{\nu\rho}(2)g_{\rho\kappa}\dots\Psi^{\sigma\tau}(M)g_{\tau\lambda}. \quad (7)$$

Скалярная функция Ψ_s не зависит от поворота системы координат, и, следовательно, соответствует синглетному состоянию.

Спинор второго ранга, описывающий пару спинов $1/2$, можно представить в виде

$$\Psi^{\lambda\mu} = c_t\Psi_t^{\lambda\mu} + c_s\Psi_s^{\lambda\mu}, \quad (8)$$

где $\Psi_t^{\lambda\mu}$ и $\Psi_s^{\lambda\mu}$ — симметричный и антисимметричный спиноры второго ранга соответственно, а c_t и c_s — произвольные константы. Известно, что симметричный спинор второго ранга описывает систему со спином 1 и, следовательно, пара спинов $1/2$ в этом случае образует триплет. Если $\Psi_s^{\lambda\mu}$ — антисимметричный спинор второго ранга, который сводится к скаляру, умноженному на $g_{\lambda\mu}$, то пара спинов находится в синглетном состоянии. Таким образом, отношение констант c_t и c_s определяет соотношение весов триплетной и синглетной компонент на паре спинов $s = 1/2$ и является параметром модели. В частности, при $c_s = 0$ в волновой функции (8) содержится только триплетная, а при $c_t = 0$ только синглетная компоненты.

Вообще говоря, мы можем выбирать отношение коэффициентов c_s/c_t разным в различных парах, но для сохранения трансляционной симметрии ограничимся случаем, когда это отношение одно и то же во всех парах.

Заметим, что волновая функция (4) имеет матричную форму (1), где матрицы $A(2i-1, 2i)$ представляют собой смешанный спинор второго ранга:

$$A_{\lambda\nu}(1, 2) = \Psi^\lambda_{\nu}(1) = c_t \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\alpha_1\beta_2 + \beta_1\alpha_2) & \beta_1\beta_2 \\ -\alpha_1\alpha_2 & -\frac{1}{2}(\alpha_1\beta_2 + \beta_1\alpha_2) \end{pmatrix} - c_s \frac{1}{2}(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2) I, \quad (9)$$

где α_i и β_i означают проекции спина s_i вверх и вниз соответственно, а I — единичная матрица.

Подберем теперь такой гамильтониан H , для которого волновая функция (7) является точной волновой функцией основного состояния. Для этого рассмотрим часть системы (ячейку), состоящую из двух соседних пар спинов. В волновой функции (7) соответствующий двум парам спинов множитель является спинором второго ранга:

$$\Psi^{\lambda\mu}(i)g_{\mu\nu}\Psi^{\nu\rho}(i+1). \quad (10)$$

Следовательно, в общем случае в волновой функции (10) из шести мультиплетов, которые образуют две пары спинов 1/2, присутствуют только два — один синглет и один триплет. Поскольку четыре спина 1/2 образуют два синглета и три триплета, конкретный вид присутствующих в волновой функции (10) компонент синглета и триплета зависит от отношения c_s/c_t . Ячеечный гамильтониан, действующий в спиновом пространстве соседних пар спинов, можно записать в виде суммы проекторов на отсутствующие четыре мультиплета с произвольными положительными коэффициентами $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$:

$$H_{i,i+1} = \sum_{k=1}^4 \lambda_k P_k^{i,i+1}, \quad (11)$$

где $P_k^{i,i+1}$ — проектор на отсутствующие мультиплеты в соответствующем ячейном гамильтониане.

Тогда волновая функция (7) является точной волновой функцией основного состояния ячейного гамильтониана $H_{i,i+1}$ с нулевой энергией, поскольку

$$H_{i,i+1} |\Psi_s\rangle = 0, \quad (12)$$

а $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ являются энергиями возбуждений соответствующих мультиплетов.

Полный гамильтониан всей системы можно записать в виде суммы некоммутирующих между собой ячейных гамильтонианов:

$$H = \sum_{i=1}^N H_{i,i+1}, \quad (13)$$

и, поскольку каждый член $H_{i,i+1}$ в (13), действуя на Ψ_s , дает нуль,

$$H |\Psi_s\rangle = 0. \quad (14)$$

Невырожденность основного состояния этого гамильтониана была строго доказана в работе [16].

Так как конкретный вид присутствующих и отсутствующих в волновой функции (7) мультиплетов на каждом двух соседних парах спинов зависит от параметра модели c_s/c_t , то и проекторы в (11) зависят от параметра c_s/c_t . Каждый проектор может быть представлен в виде

$$\begin{aligned} P_k^{1,2} = & J_{12}^{(k)}(s_1s_2 + s_3s_4) + J_{13}^{(k)}(s_1s_3 + s_2s_4) + J_{14}^{(k)}s_1s_4 + \\ & + J_{23}^{(k)}s_2s_3 + J_1^{(k)}(s_1s_2)(s_3s_4) + J_2^{(k)}(s_1s_3)(s_2s_4) + \\ & + J_3^{(k)}(s_1s_4)(s_2s_3) + C^{(k)}, \end{aligned} \quad (15)$$

и такое представление для фиксированного значения параметра c_s/c_t является единственным.

Подставляя полученные выражения для проекторов в (11), мы получим общий вид ячейных гамильтонианов $H_{i,i+1}$. Поскольку гамильтонианы $H_{i,i+1}$ имеют одинаковый вид для любого i , приведем здесь выражение для $H_{1,2}$:

$$H_{12} = J_{12}(s_1s_2 + s_3s_4) + J_{13}(s_1s_3 + s_2s_4) + J_{14}s_1s_4 + J_{23}s_2s_3 + \\ + J_1(s_1s_2)(s_3s_4) + J_2(s_1s_3)(s_2s_4) + J_3(s_1s_4)(s_2s_3) + C, \quad (16)$$

где все обменные интегралы зависят от параметра модели и спектра возбужденных состояний $J_i = J_i(c_s/c_t, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4)$. В частности, при $c_s = 0$, выбирая $\lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4$ и $\lambda_1/\lambda_2 = 3$, получим для $H_{1,2}$ выражение в виде

$$H_{1,2} = L_1L_2 + \frac{1}{3}(L_1L_2)^2 + \frac{2}{3}, \quad (17)$$

где $L_1 = s_1 + s_2$ и $L_2 = s_3 + s_4$.

Гамильтониан (17) имеет форму гамильтониана АКЛТ, что неудивительно, поскольку при $c_s = 0$ два спина $1/2$ пары эффективно образуют спин 1. Заметим, однако, что при $c_s = 0$ имеется и множество других форм гамильтониана $H_{1,2}$, соответствующих другому выбору величин λ_k .

В общем случае гамильтониан (16) содержит как билинейные, так и четырехспиновые взаимодействия. Последние можно исключить, если положить $J_1 = J_2 = J_3 = 0$ и разрешить эти уравнения относительно $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$. Однако, поскольку условие $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4 > 0$ выполняется, вообще говоря, не во всей области значений параметра c_s/c_t , то и упрощенный гамильтониан будет иметь основное состояние, описываемое волновой функцией (7) только в области, где $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ положительны. Отличные от нуля обменные интегралы $J_{12}, J_{13}, J_{14}, J_{23}$ и константа C зависят только от параметра c_s/c_t . Явный вид этой зависимости приведен в [16]. Там же вычислена и спиновая корреляционная функция основного состояния $\langle s_i s_j \rangle$, которая экспоненциально уменьшается с корреляционной длиной ~ 1 .

Подчеркнем, что спиновые корреляторы $\langle s_i s_j \rangle$ не зависят от выбора $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ при фиксированном значении параметра c_s/c_t , поскольку волновая функция основного состояния четырехпараметрического множества гамильтонианов одна и та же.

3. ДВУМЕРНАЯ МОДЕЛЬ

Рассмотрим квадратную решетку с циклическими граничными условиями, содержащую $M \times M$ узлов. Заменяем каждый узел решетки квадратом (рис. 1), в вершинах которого находятся спины $s = 1/2$, так что полное число спинов равно $4M^2$. В дальнейшем, однако, во избежание недоразумений мы по-прежнему будем именовать эти квадраты узлами. Волновая функция такой системы будет описываться произведением спиноворов четвертого ранга:

$$\Psi = \prod_{\mathbf{n}} \Psi^{\lambda_a \mu_a \nu_a \rho_a}(\mathbf{n}). \quad (18)$$

Составим из (18) скаляр аналогично (7):

$$\Psi_s = \prod_{\mathbf{n}} \Psi^{\lambda_a \mu_a \nu_a \rho_a}(\mathbf{n}) g_{\nu_a \lambda_{a+\mathbf{a}}} g_{\rho_a \mu_{a+\mathbf{b}}}, \quad (19)$$

где \mathbf{a} и \mathbf{b} — единичные векторы в x и y направлениях.

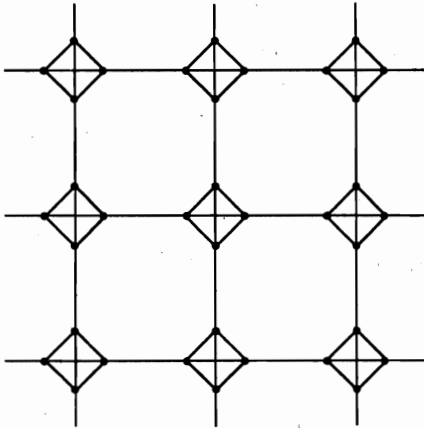


Рис. 1

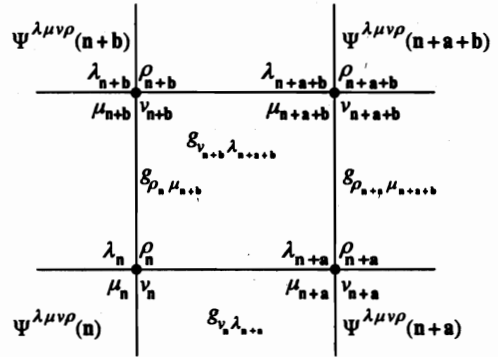


Рис. 2

Рис. 1. Двумерная решетка, на которой определена спиновая модель

Рис. 2. Графическое соответствие волновой функции модели. Индексы узельных спинов зависят от номера узла (на рисунке не указано)

Синглетную волновую функцию (19) удобно сопоставить графически квадратной решетке, где каждому узлу соответствует спинор четвертого ранга $\Psi^{\lambda\mu\nu\rho}$ (имеющий одинаковый вид для всех узлов) и каждому отрезку, соединяющему узлы, соответствует метрический спинор $g_{\lambda\mu}$ (рис. 2).

Для полного определения волновой функции (19) необходимо задать вид узельного спинора $\Psi^{\lambda\mu\nu\rho}$. Для этого проведем классификацию произвольного спинора четвертого ранга, упрощая и симметризуя его по различным парам индексов. В результате будем иметь спиноры следующего вида:

- 1) симметричный по всем индексам спинор четвертого ранга $Q^{\lambda\mu\nu\rho}$;
- 2) три линейно независимых произведения симметричного и антисимметричного спиноров второго ранга: $\varphi^{\lambda\mu} g_{\nu\rho}$, $\varphi^{\lambda\nu} g_{\mu\rho}$, $\varphi^{\lambda\rho} g_{\mu\nu}$;
- 3) два линейно независимых произведения двух метрических спиноров и скалярной функции: $g_{\lambda\mu} g_{\nu\rho} \chi$, $g_{\lambda\nu} g_{\mu\rho} \chi$.

В соответствии с этой классификацией произвольный спинор четвертого ранга может быть записан в виде

$$\Psi^{\lambda\mu\nu\rho} = c_1 Q^{\lambda\mu\nu\rho} + c_2 \varphi_1^{\lambda\mu} g_{\nu\rho} + c_3 \varphi_2^{\lambda\nu} g_{\mu\rho} + c_4 \varphi_3^{\lambda\rho} g_{\mu\nu} + c_5 g_{\lambda\mu} g_{\nu\rho} \chi_1 + c_6 g_{\lambda\nu} g_{\mu\rho} \chi_2. \quad (20)$$

Заметим, однако, что, поскольку система четырех спинов $1/2$ содержит один квинтет, три триплета и два синглета, выражение (20) еще не полностью определяет вид $\Psi^{\lambda\mu\nu\rho}$ и необходимо определить конкретный вид спиноров $\varphi_1^{\lambda\mu}$, $\varphi_2^{\lambda\nu}$, $\varphi_3^{\lambda\rho}$ и скалярных функций χ_1 и χ_2 .

Каждый симметричный спинор второго ранга $\varphi^{\lambda\mu}$ описывает триплетное состояние системы, которое в данном случае является линейной комбинацией трех базисных триплетных функций $\varphi_{i1}^{\lambda\mu}$, $\varphi_{i2}^{\lambda\mu}$, $\varphi_{i3}^{\lambda\mu}$. Тогда можно определить девять линейно независимых спиноров, описывающих триплетные состояния четырех спинов $s = 1/2$:

$$\begin{aligned}
 &\varphi_{t1}^{\lambda\mu} g_{\nu\rho}, \varphi_{t2}^{\lambda\mu} g_{\nu\rho}, \varphi_{t3}^{\lambda\mu} g_{\nu\rho}, \\
 &\varphi_{t1}^{\lambda\nu} g_{\mu\rho}, \varphi_{t2}^{\lambda\nu} g_{\mu\rho}, \varphi_{t3}^{\lambda\nu} g_{\mu\rho}, \\
 &\varphi_{t1}^{\lambda\rho} g_{\mu\nu}, \varphi_{t2}^{\lambda\rho} g_{\mu\nu}, \varphi_{t3}^{\lambda\rho} g_{\mu\nu}.
 \end{aligned}
 \tag{21}$$

Произведения двух метрических спиноров и скалярной функции $g_{\lambda\mu}g_{\nu\rho}\chi_1$ и $g_{\lambda\nu}g_{\mu\rho}\chi_2$ описывают синглетные состояния четырех спинов $s = 1/2$. Так как имеются две независимые синглетные функции χ_{s1} и χ_{s2} , то существуют четыре линейно независимых скаляра, описывающих синглетные состояния четырех спинов $s = 1/2$:

$$\begin{aligned}
 &g_{\lambda\mu}g_{\nu\rho}\chi_{s1}, g_{\lambda\mu}g_{\nu\rho}\chi_{s2}, \\
 &g_{\lambda\nu}g_{\mu\rho}\chi_{s1}, g_{\lambda\nu}g_{\mu\rho}\chi_{s2}.
 \end{aligned}
 \tag{22}$$

В результате конкретный вид спинора четвертого ранга $\Psi^{\lambda\mu\nu\rho}$ (и, следовательно, волновой функции (19)), описывающего систему четырех спинов $s = 1/2$, определяется $1 + 9 + 4 = 14$ величинами, являющимися параметрами модели.

Подберем теперь такой гамильтониан H , для которого волновая функция (19) является точной волновой функцией основного состояния. Этот гамильтониан будем искать, как и в одномерном случае, в виде суммы ячеечных гамильтонианов, действующих в пространстве двух соседних четверок спинов:

$$H = \sum_n H_{n,n+a} + \sum_n H_{n,n+b}.
 \tag{23}$$

Первый член в (23) является суммой ячеечных гамильтонианов в горизонтальном направлении, а второй — в вертикальном. Ячеечные гамильтонианы вдоль каждого из направлений имеют одинаковый вид, но «горизонтальный» и «вертикальный» гамильтонианы, вообще говоря, различны. Ввиду этого в дальнейшем будем рассматривать лишь гамильтонианы $H_{1,2}$ и $H_{1,3}$ (рис. 3), описывающие взаимодействия «узлов» в x и y направлениях соответственно.

Для того чтобы волновая функция (19) являлась точной собственной функцией гамильтониана H , достаточно, чтобы спиноры шестого ранга

$$\Psi^{\lambda_1\mu_1\nu_1\rho_1}(1)\Psi^{\lambda_2\mu_2\nu_2\rho_2}(2)g_{\nu_1\lambda_2},
 \tag{24}$$

$$\Psi^{\lambda_1\mu_1\nu_1\rho_1}(1)\Psi^{\lambda_3\mu_3\nu_3\rho_3}(3)g_{\rho_1\mu_3}
 \tag{25}$$

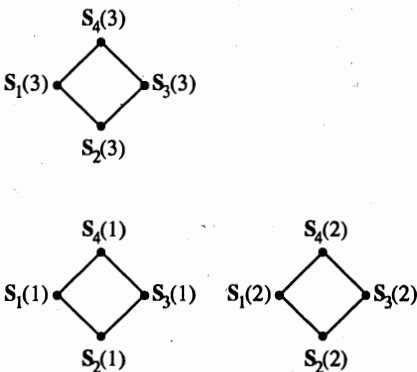


Рис. 3. Узлы решетки, связанные взаимодействиями $H_{1,2}$ и $H_{1,3}$

являлись собственными функциями соответствующих ячеечных гамильтонианов $H_{1,2}$ и $H_{1,3}$.

В общем случае, когда узельный спинор $\Psi^{\lambda\mu\nu\rho}$ не симметричен ни по каким индексам, возможные состояния двух четверок спинов $s = 1/2$ состоят из 70 мультиплетов. Волновая функция, представленная спинором шестого ранга, содержит только 20 из них. В силу этого ячеечные гамильтонианы $H_{1,2}$ и $H_{1,3}$ могут быть представлены в виде суммы проекторов на 50 отсутствующих мультиплетов:

$$\begin{aligned} H_{1,2} &= \sum_{k=1}^{50} \lambda_k P_k^{1,2}, \\ H_{1,3} &= \sum_{k=1}^{50} \mu_k P_k^{1,3}, \end{aligned} \tag{26}$$

где положительные константы λ_k и μ_k являются энергиями возбуждений $H_{1,2}$ и $H_{1,3}$, а конкретный вид проекторов зависит от 14 параметров модели.

Поскольку

$$H_{n,n+a} |\Psi_s\rangle = 0, \quad H_{n,n+b} |\Psi_s\rangle = 0, \tag{27}$$

то и для полного гамильтониана (23) будем иметь

$$H |\Psi_s\rangle = 0. \tag{28}$$

Таким образом, Ψ_s является волновой функцией основного состояния полного гамильтониана H , так как он является суммой неотрицательно определенных ячеечных гамильтонианов. Кроме того, можно строго доказать (см. Приложение), что основное состояние H является невырожденным.

Конкретный вид проекторов, как уже отмечалось выше, зависит от 14 параметров модели, и в общем случае ячеечные гамильтонианы (26), выраженные через скалярные произведения типа $(s_i s_j)$, $(s_i s_j)(s_k s_l)$ и т. д., имеют чрезвычайно громоздкий вид. Поэтому рассмотрим несколько частных случаев.

В случае, когда узельный спинор $\Psi^{\lambda\mu\nu\rho}$ является симметричным спинором четвертого ранга $Q^{\lambda\mu\nu\rho}$ (что соответствует двумерной модели АКЛТ [12]), из шести мультиплетов на каждой четверке спинов в волновой функции (19) присутствует только квинтетная компонента. Спиноры шестого ранга (24) и (25) являются симметричными по двум тройкам индексов и, следовательно, содержат четыре мультиплета с $S = 0, 1, 2, 3$, образованные из двух квинтетов. Поэтому ячеечный гамильтониан (в этом случае $H_{1,2}$ и $H_{1,3}$ совпадают) имеет вид

$$H_{1,2} = \sum_{k=1}^{66} \lambda_k P_k^{1,2}. \tag{29}$$

Если положить $\lambda_k = 1$ ($k = 1, 66$), то (29) можно записать в виде

$$H_{1,2} = P_4(S_1 + S_2) + [1 - P_2(S_1)P_2(S_2)], \tag{30}$$

где S_i — полный спин четверки спинов $s = 1/2$ на i -ом узле $S_i = s_1(i) + s_2(i) + s_3(i) + s_4(i)$, а $P_l(S)$ является проектором на состояние со спином $S = l$.

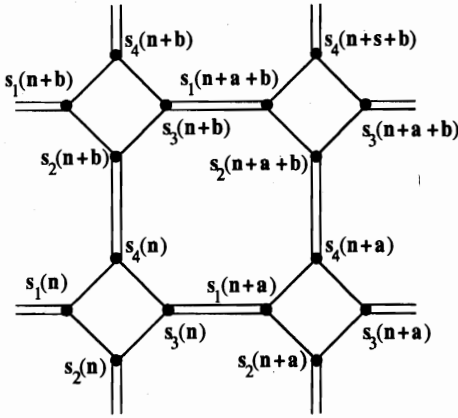


Рис. 4. Картина независимых синглетных пар (двойные линии)

Заметим, что если заменить четыре спина $s = 1/2$ на каждом узле на один спин $S = 2$ и рассматривать волновую функцию (19) как волновую функцию, описывающую систему из M^2 спинов $S = 2$, то второй член в гамильтониане (30) исчезнет, и мы придем к гамильтониану двумерной модели АКЛТ:

$$H_{1,2} = P_4(S_1 + S_2) = \frac{1}{28} S_1 S_2 + \frac{1}{40} (S_1 S_2)^2 + \frac{1}{180} (S_1 S_2)^3 + \frac{1}{2520} (S_1 S_2)^4. \quad (31)$$

Другой интересный частный случай соответствует ситуации, когда система распадается на независимые одномерные цепочки. Это происходит, если узельный спинор $\Psi^{\lambda\mu\nu\rho}$ сводится к произведению двух спиноров второго ранга, описывающих по два спина $1/2$. Например,

$$\Psi^{\lambda\mu\nu\rho}(s_1, s_2, s_3, s_4) = \varphi^{\lambda\nu}(s_1, s_3) \varphi^{\mu\rho}(s_2, s_4). \quad (32)$$

В этом случае гамильтонианы $H_{1,2}$ и $H_{1,3}$ содержат взаимодействия не восьми, а четырех спинов $1/2$ и имеют вид (16).

Наиболее простым является случай, когда узельный спинор $\Psi^{\lambda\mu\nu\rho}$ является произведением четырех спиноров первого ранга:

$$\Psi^{\lambda\mu\nu\rho}(s_1, s_2, s_3, s_4) = \varphi^\lambda(s_1) \varphi^\mu(s_2) \varphi^\nu(s_3) \varphi^\rho(s_4). \quad (33)$$

В этом случае система распадается на независимые синглетные пары (рис. 4) и полный гамильтониан системы имеет вид

$$H = \sum_{i,j} \left(s_i s_j + \frac{3}{4} \right), \quad (34)$$

где s_i и s_j — спины, образующие синглетные пары.

4. СПИНОВЫЕ КОРРЕЛЯТОРЫ В ОСНОВНОМ СОСТОЯНИИ

Рассмотрим теперь проблему вычисления нормы и корреляционной функции модели, описываемой волновой функцией (19). Выражение для нормы волновой функции $G = \langle \Psi_s | \Psi_s \rangle$ имеет вид

$$\begin{aligned}
 G &= \prod_{\mathbf{n}} \langle \Psi^{\lambda'_i \mu'_i \nu'_i \rho'_i}(\mathbf{n}) | \Psi^{\lambda_i \mu_i \nu_i \rho_i}(\mathbf{n}) \rangle g_{\nu_i \lambda_{i+1}} g_{\rho_i \mu_{i+1}} g_{\nu'_i \lambda'_{i+1}} g_{\rho'_i \mu'_{i+1}} = \\
 &= \prod_{\mathbf{n}} R^{\lambda'_i \mu'_i \nu'_i \rho'_i}_{\lambda_i \mu_i \nu_i \rho_i} = \prod_{\mathbf{n}} R_{\alpha_i \beta_i \alpha_{i+1} \beta_{i+1}}, \quad \alpha_i, \beta_i = \{1, 2, 3, 4\}, \quad (35)
 \end{aligned}$$

где $R_{\alpha_i \beta_i \alpha_{i+1} \beta_{i+1}}$ — матрица $4 \times 4 \times 4 \times 4$.

Согласно правилам отбора по проекции полного спина S^z , в выражении $\langle \Psi^{\lambda'_i \mu'_i \nu'_i \rho'_i}(\mathbf{n}) | \Psi^{\lambda_i \mu_i \nu_i \rho_i}(\mathbf{n}) \rangle$ отличными от нуля являются лишь 70 элементов из 256. Следовательно, и матрица R также содержит не более 70 отличных от нуля элементов. Если рассматривать элементы матриц R как бoльцмановские веса вершин, то проблема вычисления нормы сводится к классической 70-вершинной модели.

Поскольку точное решение для 70-вершинной модели неизвестно, для вычисления нормы и средних необходимо использовать численные методы.

Для вычисления вышеуказанных средних мы провели расчеты методом Монте-Карло на решетках до 20×20 узлов. Как было отмечено выше, волновая функция основного состояния модели зависит от 14 параметров и ее полное исследование, естественно, невозможно. При проведении численных расчетов мы ограничились случаем, когда спинор $\Psi^{\lambda\mu\nu\rho}$ зависит от одного параметра α :

$$\Psi^{\lambda\mu\nu\rho} = \cos \alpha \cdot Q^{\lambda\mu\nu\rho} + \sin \alpha \cdot (A^{\lambda\mu\nu\rho} - Q^{\lambda\mu\nu\rho}), \quad (36)$$

где $\alpha \in [-\pi/2; \pi/2]$, $Q^{\lambda\mu\nu\rho}$ — симметричный по всем индексам спинор, а

$$A^{\lambda\mu\nu\rho} = \varphi^\lambda(s_1)\varphi^\mu(s_2)\varphi^\nu(s_3)\varphi^\rho(s_4). \quad (37)$$

В этом случае мы имеем однопараметрическую модель с двумя известными предельными случаями. Один из них соответствует значению $\alpha = \pi/4$, для которого $\Psi^{\lambda\mu\nu\rho} = A^{\lambda\mu\nu\rho}$, и система распадается на независимые синглетные пары (рис. 4); а другой соответствует $\alpha = 0$ (в этом случае наша модель сводится к двумерной модели АКЛТ, когда спины на каждом узле образуют квинтет).

В рассматриваемой модели на каждом узле решетки находятся четыре спина $s = 1/2$ и нумерация каждого спина определяется номером узла решетки, которому он принадлежит, и его собственным номером на этом узле. Поэтому спиновая корреляционная функция имеет вид

$$f_{ij}(\mathbf{r}) = \langle s_i(\mathbf{n})s_j(\mathbf{n} + \mathbf{r}) \rangle. \quad (38)$$

Однако при определении спиновой структуры основного состояния удобнее рассматривать более наглядную величину $F(\mathbf{r})$:

$$F(\mathbf{r}) = \sum_{i,j=1}^4 \langle s_i(\mathbf{n})s_j(\mathbf{n} + \mathbf{r}) \rangle = \langle \mathbf{S}(\mathbf{n})\mathbf{S}(\mathbf{n} + \mathbf{r}) \rangle. \quad (39)$$

Функция $F(\mathbf{r})$ не меняется при изменении знака α . Это связано с тем, что в спиноре $(A^{\lambda\mu\nu\rho} - Q^{\lambda\mu\nu\rho})$ отсутствует квинтетная компонента и, следовательно, все функции этого спинора ортогональны всем функциям симметричного спинора

$$\langle Q^{\lambda' \mu' \nu' \rho'} | (A^{\lambda\mu\nu\rho} - Q^{\lambda\mu\nu\rho}) \rangle = 0 \quad (40)$$

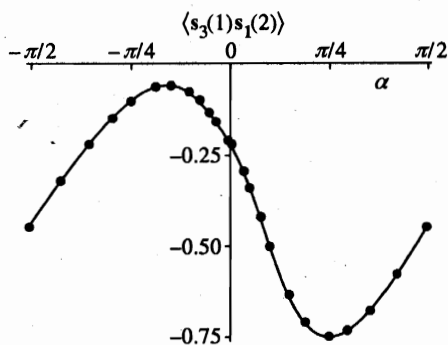


Рис. 5

Рис. 5. Зависимость спинового коррелятора $\langle s_3(1)s_1(2) \rangle$ от параметра α

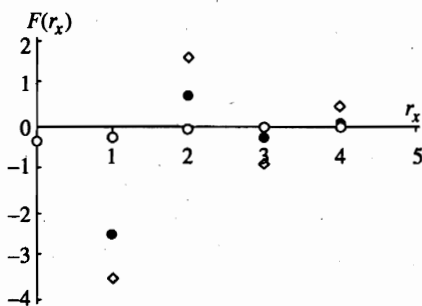


Рис. 6

Рис. 6. Зависимость спинового коррелятора $F(r_x)$ от расстояния вдоль оси x при различных значениях параметра α . (\diamond — $\alpha = 0$, \bullet — $\alpha = \pi/10$, \circ — $\alpha = \pm\pi/2$)

для всех $\lambda, \mu, \nu, \rho, \lambda', \mu', \nu', \rho'$.

Кроме того, поскольку оператор полного спина на узле S коммутирует с $S^2 = \sum_{i,j=1}^4 s_i s_j$, то и

$$\langle Q^{\lambda' \mu' \nu' \rho'} \left| \sum_{i=1}^4 s_i \right| (A^{\lambda \mu \nu \rho} - Q^{\lambda \mu \nu \rho}) \rangle = 0. \tag{41}$$

Как следует из уравнений (35), (40) и (41), величины $\sin \alpha$ и $\cos \alpha$ будут входить в норму и в среднее $\langle \Psi | S(\mathbf{n})S(\mathbf{n} + \mathbf{r}) | \Psi \rangle$ только в четных степенях, и, следовательно, $F(\mathbf{r})$ не меняется при изменении знака α . Заметим, однако, что симметрией относительно замены знака α обладает только суммарный коррелятор $F(\mathbf{r})$, а не $f_{ij}(\mathbf{r})$. Это видно, например, из рис. 5, где в качестве иллюстрации приведена зависимость $f_{31}(\mathbf{a})$ от α .

На рис. 6 показаны зависимости $F(\mathbf{r})$ для некоторых значений параметра α . Оказывается, что во всех случаях корреляционная функция экспоненциально уменьшается с ростом \mathbf{r} , причем в отличие от одномерной модели предэкспоненциальный множитель также зависит от \mathbf{r} . На рис. 7 приведена зависимость корреляционного радиуса r_c от параметра α . В точке $\alpha = 0$ (двумерная модель АКЛТ) корреляционный радиус максимален, а при увеличении α он уменьшается, и при $\alpha = \pi/4$, когда система распадается на независимые синглетные пары (рис. 4), равен нулю. При дальнейшем увеличении α корреляционный радиус растет и при $\alpha = \pi/2$ достигает своего второго максимума. Функция $r_c(\alpha)$, как и корреляционная функция $F(\mathbf{r})$, симметрична относительно α . Из рис. 7 видно, что существуют две области параметра α , соответствующие состояниям с разной симметрией. В области $|\alpha| < \pi/4$ корреляционная функция $F(\mathbf{r})$ имеет антиферромагнитный характер:

$$F(\mathbf{r}) \propto (-1)^{r_x+r_y} e^{-|\mathbf{r}|/r_c}, \tag{42}$$

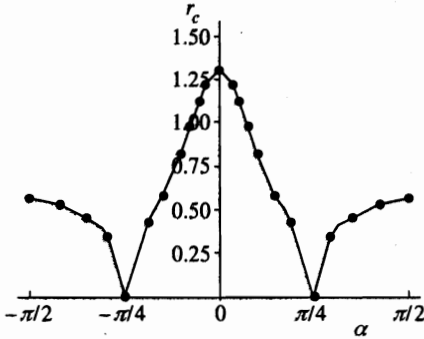


Рис. 7

Рис. 7. Зависимость радиуса корреляции от параметра α

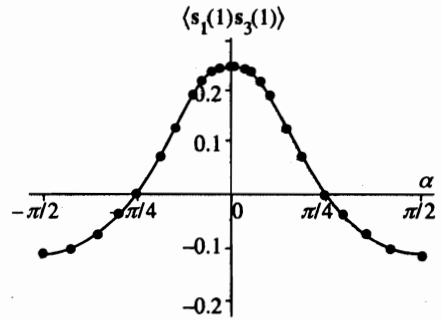


Рис. 8

Рис. 8. Зависимость спинового коррелятора на одном узле от параметра α

тогда как спины на одном узле связаны между собой ферромагнитным образом, $\langle s_i(\mathbf{n})s_j(\mathbf{n}) \rangle > 0$. С другой стороны, в области $\pi/4 < |\alpha| < \pi/2$ корреляционная функция $F(\mathbf{r})$ всегда отрицательна:

$$F(\mathbf{r}) \propto -e^{-|\mathbf{r}|/r_c}, \tag{43}$$

и отрицательны также все корреляторы на одном узле (рис. 8).

Эти области имеют две общие граничные точки $\alpha = \pm\pi/4$, где $r_c = 0$. Если значению $\alpha = \pi/4$ соответствует тривиальное разбиение системы на независимые синглетные пары, то случай $\alpha = -\pi/4$ более интересен.

В этом случае

$$\Psi^{\lambda\mu\nu\rho} = 2Q^{\lambda\mu\nu\rho} - A^{\lambda\mu\nu\rho} \tag{44}$$

и матрица $\langle \Psi^{\lambda'\mu'\nu'\rho'} | \Psi^{\lambda\mu\nu\rho} \rangle$, которая входит в уравнение для нормы (35) и средних, преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \langle \Psi^{\lambda'\mu'\nu'\rho'} | \Psi^{\lambda\mu\nu\rho} \rangle &= 4 \langle Q^{\lambda'\mu'\nu'\rho'} | Q^{\lambda\mu\nu\rho} \rangle - 2 \langle A^{\lambda'\mu'\nu'\rho'} | Q^{\lambda\mu\nu\rho} \rangle - \\ &- 2 \langle Q^{\lambda'\mu'\nu'\rho'} | A^{\lambda\mu\nu\rho} \rangle + \langle A^{\lambda'\mu'\nu'\rho'} | A^{\lambda\mu\nu\rho} \rangle. \end{aligned} \tag{45}$$

Симметричность спинора $Q^{\lambda\mu\nu\rho}$ по всем индексам приводит к тому, что

$$\langle Q^{\lambda'\mu'\nu'\rho'} | Q^{\lambda\mu\nu\rho} \rangle = \langle A^{\lambda'\mu'\nu'\rho'} | Q^{\lambda\mu\nu\rho} \rangle = \langle Q^{\lambda'\mu'\nu'\rho'} | A^{\lambda\mu\nu\rho} \rangle. \tag{46}$$

Следовательно, уравнение (45) примет вид

$$\langle \Psi^{\lambda'\mu'\nu'\rho'} | \Psi^{\lambda\mu\nu\rho} \rangle = \langle A^{\lambda'\mu'\nu'\rho'} | A^{\lambda\mu\nu\rho} \rangle = \delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'}\delta_{\rho\rho'}. \tag{47}$$

Тогда из уравнения для нормы (35) имеем

$$G = \prod_n \langle \Psi^{\lambda'_n \mu'_n \nu'_n \rho'_n}(\mathbf{n}) | \Psi^{\lambda_n \mu_n \nu_n \rho_n}(\mathbf{n}) \rangle g_{\nu_n \lambda_{n+r}} g_{\rho_n \mu_{n+r}} g_{\nu'_n \lambda'_{n+r}} g_{\rho'_n \mu'_{n+r}} = \prod_n \delta_{\lambda_n \lambda'_n} \delta_{\mu_n \mu'_n} \delta_{\lambda_{n+r} \lambda'_{n+r}} \delta_{\mu_{n+r} \mu'_{n+r}} = 2^{2M^2}. \tag{48}$$

При получении последнего равенства мы учитывали тот факт, что $\delta_{\nu\nu'} g_{\nu\lambda} g_{\nu'\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'}$. Вычислим теперь среднее $\langle \Psi | s_i(\mathbf{n}) s_j(\mathbf{n} + \mathbf{r}) | \Psi \rangle$. В случае, если узлы \mathbf{n} и $\mathbf{n} + \mathbf{r}$ не является соседями, $\langle \Psi | s_i(\mathbf{n}) s_j(\mathbf{n} + \mathbf{r}) | \Psi \rangle$ разбивается на произведение средних:

$$\langle \Psi | s_i(\mathbf{n}) s_j(\mathbf{n} + \mathbf{r}) | \Psi \rangle = 2^{2M^2-8} \langle \Psi^{\lambda' \mu' \nu' \rho'}(\mathbf{n}) | s_i(\mathbf{n}) | \Psi^{\lambda \mu \nu \rho}(\mathbf{n}) \rangle \times \langle \Psi^{\lambda'' \mu'' \nu'' \rho''}(\mathbf{n} + \mathbf{r}) | s_j(\mathbf{n} + \mathbf{r}) | \Psi^{\lambda'' \mu'' \nu'' \rho''}(\mathbf{n} + \mathbf{r}) \rangle \times \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'} \delta_{\rho\rho'} \delta_{\lambda''\lambda''} \delta_{\mu''\mu''} \delta_{\nu''\nu''} \delta_{\rho''\rho''} = 0. \tag{49}$$

Таким образом, при $\alpha = -\pi/4$ все корреляторы на несоседних узлах равны нулю. В случае же, если узлы \mathbf{n} и $\mathbf{n} + \mathbf{r}$ является соседями, то соответствующий коррелятор примет вид

$$\langle \Psi | s_i(1) s_j(2) | \Psi \rangle = 2^{2M^2-7} \langle \Psi^{\lambda' \mu' \nu' \rho'}(1) | s_i(1) | \Psi^{\lambda \mu \nu \rho}(1) \rangle \times \langle \Psi^{\lambda'' \mu'' \nu'' \rho''}(2) | s_j(2) | \Psi^{\lambda'' \mu'' \nu'' \rho''}(2) \rangle \times g_{\nu\lambda''} g_{\nu'\lambda''} \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\rho\rho'} \delta_{\mu''\mu''} \delta_{\nu''\nu''} \delta_{\rho''\rho''}. \tag{50}$$

Точное вычисление последнего выражения дает следующие результаты (рис. 3):

$$\begin{aligned} \langle s_i(1) s_j(2) \rangle &= -\frac{25}{768} \quad i = 1, 2, 4, \quad j = 2, 3, 4, \\ \langle s_i(1) s_1(2) \rangle &= \langle s_3(1) s_j(2) \rangle = -\frac{15}{256}, \\ \langle s_3(1) s_1(2) \rangle &= -\frac{27}{256}. \end{aligned} \tag{51}$$

Из уравнения (51) следует, что

$$\sum_{i,j=1}^4 \langle s_i(1) s_j(2) \rangle = -\frac{3}{4},$$

как и в случае независимых синглетов ($\alpha = \pi/4$). Можно также показать, что все корреляторы на одном узле равны нулю.

Для того чтобы выписать в явном виде ячеечный гамильтониан $H_{1,2}$ при $\alpha = -\pi/4$, введем следующие обозначения:

$$\begin{cases} l_1 = s_1(1) + s_2(1) + s_4(1), \\ l_2 = s_2(2) + s_3(2) + s_4(2), \end{cases} \quad \begin{cases} s_1 = s_3(1), \\ s_2 = s_1(2), \end{cases} \tag{52}$$

$$\begin{cases} h_1 = l_1 s_1 + l_2 s_2, \\ h_2 = l_1 s_2 + l_2 s_1. \end{cases}$$

Тогда ячеечный гамильтониан $H_{1,2}$ при выборе $\lambda_k = 1$ ($k = 1, 50$) в (26) примет вид

$$H_{1,2} = P_{1/2}(l_1)P_{1/2}(l_2)P_1(s_1 + s_2) + P_{3/2}(l_1)P_{3/2}(l_2)h_3 + \\ + P_{3/2}(l_1)P_{1/2}(l_2)h_4 + P_{1/2}(l_1)P_{3/2}(l_2)h_5, \quad (53)$$

где

$$h_3 = \frac{207}{256} + \frac{49}{64}s_1s_2 + \frac{3}{64}l_1l_2 + \frac{1}{16}(s_1s_2)(l_1l_2) - \frac{15}{64}h_2 - \frac{1}{32}h_2^2 + \\ + \frac{1}{64}(6h_1(l_1l_2) + 4h_1^2(l_1l_2) - 14h_1^2(l_1l_2)^2 + \text{h.c.}), \quad (54)$$

$$h_4 = \frac{3}{4} - \frac{7}{8}s_1s_2 + \frac{1}{4}l_1s_2 + \frac{1}{4}[(l_1s_1)(l_1s_2) + \text{h.c.}],$$

$$h_5 = \frac{3}{4} - \frac{7}{8}s_1s_2 + \frac{1}{4}l_2s_1 + \frac{1}{4}[(l_2s_2)(l_2s_1) + \text{h.c.}].$$

Ячеечный гамильтониан $H_{1,3}$ имеет такой же вид (53) с заменой обозначений в соответствии с рис. 3:

$$\begin{cases} l_1 = s_1(1) + s_2(1) + s_3(1), \\ l_2 = s_1(3) + s_3(3) + s_4(3), \end{cases} \quad \begin{cases} s_1 = s_4(1), \\ s_2 = s_2(3). \end{cases} \quad (55)$$

Особый интерес представляет случай, соответствующий значению $\alpha = \pm\pi/2$. К сожалению, в этом случае не удастся получить точные выражения для корреляционной функции, однако удастся выписать в явном виде гамильтониан. Поскольку при $\alpha = \pm\pi/2$ в узельном спиноре $\Psi^{\lambda\mu\nu\rho}$ отсутствует квинтетная компонента, в волновой функции двух соседних узлов (24) и (25) будет отсутствовать компонента с $S = 3$. Более детальный анализ показывает, что в волновой функции двух соседних узлов присутствуют 19 мультиплетов. Поэтому общий вид ячеечного гамильтониана в этом случае имеет вид

$$H_{1,2} = \sum_{k=1}^{51} \lambda_k P_k^{1,2} \quad (56)$$

При определенном выборе λ_k в (56), ячеечный гамильтониан примет вид

$$H_{12} = P_2(l_1 + s_1) + P_2(l_2 + s_2) + P_{1/2}(l_1)P_{1/2}(l_2)P_1(s_1 + s_2) + \\ + P_{3/2}(l_1)P_{1/2}(l_2)P_{1/2}(l_1 + s_1 + s_2) + P_{3/2}(l_2)P_{1/2}(l_1)P_{1/2}(l_2 + s_2 + s_1), \quad (57)$$

где для соседних узлов по горизонтали и вертикали использовались обозначения (52) и (55) соответственно.

Наши результаты свидетельствуют о том, что спиновые корреляционные функции экспоненциально уменьшаются с корреляционной длиной ~ 1 при произвольном параметре α . Мы полагаем также, что экспоненциальный характер уменьшения корреляционной функции имеет место и для 14-параметрической модели, т.е. для любого выбора узельного спинора $\Psi^{\lambda\mu\nu\rho}$. На это указывают частные случаи: разбиение системы на одномерные цепочки с точно известными экспоненциально уменьшающимися

корреляторами и двумерная модель АКЛТ, для которой экспоненциальный характер падения корреляционной функции был строго доказан [14]. Кроме того, об этом также свидетельствуют полученные численные результаты для различных значений однопараметрической модели.

5. ОБОБЩЕНИЕ МОДЕЛИ НА ДРУГИЕ ТИПЫ РЕШЕТОК

Волновая функция (7), (19) может быть обобщена на любые типы решеток. Общий принцип построения волновой функции для системы спинов $1/2$ состоит в следующем:

1) каждой связи на данной решетке ставим в соответствие два индекса, пробегающих значения 1 и 2, по одному на каждый конец связи;

2) каждой связи ставим в соответствие метрический спинор $g_{\lambda\mu}$ с индексами концов этой связи;

3) каждому узлу решетки (узел здесь, естественно, понимается в том же смысле, что и в разд. 3), из которого исходят m связей, ставим в соответствие спинор m -го ранга, с индексами прилегающих к узлу концов связей;

4) волновая функция есть произведение всех спиноров в узлах решетки и всех метрических спиноров.

Очевидно, что каждый индекс в построенной волновой функции будет встречаться дважды, поэтому волновая функция является скалярной и, следовательно, синглетной.

Построенная таким образом волновая функция описывает систему, в которой каждый узел решетки содержит спины $s = 1/2$ в количестве, равном количеству исходящих из узла связей.

Для полного определения волновой функции необходимо определить конкретный вид всех узельных спиноров. При этом коэффициенты, которые будут определять их вид, будут являться параметрами модели.

Гамильтониан такой модели является суммой ячеечных гамильтонианов, которые действуют в спиновом пространстве подсистемы, образованной спинами на двух связанных между собой узлах:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} H_{ij}. \quad (58)$$

Каждый ячейный гамильтониан представляет собой сумму проекторов с произвольными положительными коэффициентами на все возможные в соответствующей двухузельной подсистеме мультиплеты, кроме тех, которые присутствуют в построенной волновой функции:

$$H_{i,j} = \sum_k \lambda_k P_k^{i,j}. \quad (59)$$

Тогда $H_{i,j} |\Psi_s\rangle = 0$ и, следовательно, $H |\Psi_s\rangle = 0$.

Таким образом, Ψ_s есть точная волновая функция основного состояния.

Заметим, что любые два узла решетки могут быть связаны двумя, тремя и более связями, поскольку это не противоречит принципу построения волновой функции. Кроме того, общий принцип построения волновой функции верен не только для трансляционно-симметричных решеток, но и вообще для любого графа. В качестве

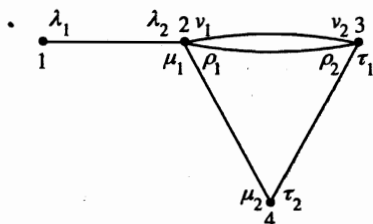


Рис. 9. Пример графа, соответствующего волновой функции (60)

примера рассмотрим систему, показанную на рис. 9. Волновая функция такой системы имеет вид

$$\Psi_s = \Psi^{\lambda_1}(1)\Psi^{\lambda_2\mu_1\nu_1\rho_1}(2)\Psi^{\rho_2\nu_2\tau_1}(3)\Psi^{\mu_2\tau_2}(4)g_{\lambda_1\lambda_2}g_{\mu_1\mu_2}g_{\nu_1\nu_2}g_{\rho_1\rho_2}g_{\tau_1\tau_2} \quad (60)$$

и описывает систему, содержащую 10 спинов 1/2.

В случае, если рассматриваемая решетка имеет свободные концы связей (что имеет место для систем с открытыми граничными условиями), построенная таким образом волновая функция будет представлять собой спинор, ранг которого равен количеству свободных концов. Следовательно, основное состояние такой системы будет 2^l -кратно вырождено (l — количество свободных концов). Для открытой одномерной цепочки, например, основному состоянию соответствуют четыре функции — синглет и три компоненты триплета. Для решеток большей размерности это вырождение зависит от размера решетки и экспоненциально растет с увеличением ее границ.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы предложили метод построения точной волновой функции для класса двумерных спиновых моделей. В общем случае эта модель зависит от 14 параметров и ее гамильтониан представляется в виде суммы гамильтонианов соседних четверок спинов. Точная волновая функция основного состояния всей системы является также точной волновой функцией каждого ячеечного гамильтониана. Поскольку в точной волновой функции присутствуют 20 из 70 мультиплетов двух соседних четверок, ячеечные гамильтонианы являются суммами проекторов с положительными коэффициентами на оставшиеся 50 мультиплетов. Эти коэффициенты являются энергиями возбуждений соответствующих мультиплетов. Различным значениям коэффициентов будут соответствовать разные гамильтонианы. При этом, однако, и сама волновая функция основного состояния, и спиновые корреляторы в основном состоянии, будут одними и теми же для всех гамильтонианов. Это означает, что волновая функция основного состояния является, согласно определению Шастри и Сазерленда [18], суперстабильной.

Для частного случая модели, зависящей от одного параметра, проведены расчеты Монте-Карло спиновых корреляционных функций в основном состоянии. При всех значениях параметра спиновые корреляторы экспоненциально уменьшаются с расстоянием, хотя корреляторы ближайших спинов сложным образом зависят от параметра модели. Есть основания ожидать, что и в общей 14-параметрической модели спиновые корреляции уменьшаются экспоненциально.

В заключение считаем своим приятным долгом поблагодарить профессора М. Я. Овчинникову за полезные обсуждения вопросов, затронутых в работе. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 96-03-32186 и 97-03-33727), а также Программы поддержки ведущих научных школ (грант № 96-15-97492).

ПРИЛОЖЕНИЕ

В разд. 3 была построена синглетная волновая функция

$$\Psi_s = \prod_{\mathbf{n}} \Psi^{\lambda_n \mu_n \nu_n \rho_n}(\mathbf{n}) g_{\nu_n \lambda_{n+a}} g_{\rho_n \mu_{n+b}} \quad (\text{П.1})$$

для системы $4M^2$ спинов $s = 1/2$ на квадратной решетке. Для построенной волновой функции был специальным образом подобран гамильтониан

$$H = \sum_{\mathbf{n}} H_{\mathbf{n}, \mathbf{n}+\mathbf{a}} + \sum_{\mathbf{n}} H_{\mathbf{n}, \mathbf{n}+\mathbf{b}}, \quad (\text{П.2})$$

для которого волновая функция (П.1) является основным состоянием с нулевой энергией:

$$H |\Psi_s\rangle = 0. \quad (\text{П.3})$$

Покажем теперь, что основное состояние системы невырождено, т. е. что волновая функция, удовлетворяющая уравнению (П.3), единственна.

Заметим, что поскольку гамильтониан (П.2) представляет собой сумму неотрицательно определенных ячеечных гамильтонианов, любая функция, удовлетворяющая уравнению (П.3), должна удовлетворять всем ячеечным уравнениям

$$H_{i,j} |\Psi\rangle = 0. \quad (\text{П.4})$$

Это означает, что уравнения (П.3) и (П.4) эквивалентны.

Доказательство невырожденности основного состояния гамильтониана (П.2) будем проводить следующим образом. Вначале мы запишем общий вид волновой функции для рассматриваемой системы. Затем получим общий вид волновой функции, удовлетворяющей одному из ячеечных уравнений (П.4). Замечая, какие условия накладывает на общий вид волновой функции каждое ячеечное уравнение, и одновременно выполняя эти условия для всех ячеечных уравнений, мы получим общий вид волновой функции, удовлетворяющей всем уравнениям (П.4) и, следовательно, удовлетворяющей полному гамильтониану (П.2).

Любая волновая функция рассматриваемой системы может быть записана в виде

$$\Psi = \sum_{\lambda \mu \nu \rho} c(\lambda \mu \nu \rho) \cdot \prod_{\mathbf{j}} \Phi^{\lambda \mu \nu \rho}(\mathbf{j}), \quad (\text{П.5})$$

где сумма берется по $4M^2$ индексам $\lambda_i, \mu_i, \nu_i, \rho_i$; $c(\lambda \mu \nu \rho)$ — коэффициенты, зависящие от этих индексов, а $\Phi^{\lambda \mu \nu \rho}(\mathbf{j})$ — произвольные узельные спиноры четвертого ранга (на разных узлах спиноры, вообще говоря, могут быть различными).

Потребуем, чтобы волновая функция (П.5) удовлетворяла ячеечному уравнению

$$H_{n,n+a} |\Psi\rangle = 0. \tag{П.6}$$

По построению синглетной волновой функции (П.1), к которой подбирался ячеечный гамильтониан $H_{n,n+a}$, любая волновая функция на узлах n и $n+a$, удовлетворяющая условию (П.6), является линейной комбинацией 64 функций, присутствующих в выражении

$$\Psi^{\lambda_n \mu_n \nu_n \rho_n}(n) \Psi^{\lambda_{n+a} \mu_{n+a} \nu_{n+a} \rho_{n+a}}(n+a) g_{\nu_n \lambda_{n+a}}, \tag{П.7}$$

поскольку ячеечный гамильтониан $H_{n,n+a}$ по определению является суммой проекторов на все отсутствующие в выражении (П.7) мультиплеты ($\Psi^{\lambda_n \mu_n \nu_n \rho_n}(n)$ и $\Psi^{\lambda_{n+a} \mu_{n+a} \nu_{n+a} \rho_{n+a}}(n+a)$) — определенные узельные спиноры, входящие в волновую функцию (П.1)). Заметим, что эти 64 функции могут быть линейно зависимы (что имеет место, например, для двумерной модели АКЛТ).

Таким образом, общий вид волновой функции, удовлетворяющей уравнению (П.6), можно записать следующим образом:

$$\Psi = \sum_{\lambda \mu \nu \rho} c(\lambda \mu \nu \rho | \nu_n \lambda_{n+a}) g_{\nu_n \lambda_{n+a}} \Psi^{\lambda_n \mu_n \nu_n \rho_n}(n) \times \tag{П.8}$$

$$\times \Psi^{\lambda_{n+a} \mu_{n+a} \nu_{n+a} \rho_{n+a}}(n+a) \prod_{j \neq n, n+a} \Phi^{\lambda_j \mu_j \nu_j \rho_j}(j),$$

где $c(\lambda \mu \nu \rho | \nu_n \lambda_{n+a})$ — коэффициенты, зависящие от индексов $\lambda_i, \mu_i, \nu_i, \rho_i$, кроме индексов ν_n и λ_{n+a} , а $\Phi^{\lambda_j \mu_j \nu_j \rho_j}(j)$ — произвольные узельные спиноры.

Сравнивая функции (П.5) и (П.8), приходим к следующим условиям, которые следует наложить на функцию (П.5), чтобы получить общий вид волновой функции, удовлетворяющей уравнению (П.6).

1. Спиноры на узлах n и $n+a$ должны совпадать с узельными спинорами волновой функции (П.1):

$$\Phi^{\lambda_n \mu_n \nu_n \rho_n}(n) = \Psi^{\lambda_n \mu_n \nu_n \rho_n}(n), \tag{П.9}$$

$$\Phi^{\lambda_{n+a} \mu_{n+a} \nu_{n+a} \rho_{n+a}}(n+a) = \Psi^{\lambda_{n+a} \mu_{n+a} \nu_{n+a} \rho_{n+a}}(n+a).$$

2. Коэффициенты $c(\lambda \mu \nu \rho)$ имеют вид

$$c(\lambda \mu \nu \rho) = c(\lambda \mu \nu \rho | \nu_n \lambda_{n+a}) g_{\nu_n \lambda_{n+a}}. \tag{П.10}$$

Из уравнения

$$H_{n,n+b} |\Psi\rangle = 0 \tag{П.11}$$

следуют аналогичные условия на общий вид волновой функции (П.5):

$$\Phi^{\lambda_n \mu_n \nu_n \rho_n}(n) = \Psi^{\lambda_n \mu_n \nu_n \rho_n}(n),$$

$$\Phi^{\lambda_{n+b} \mu_{n+b} \nu_{n+b} \rho_{n+b}}(n+b) = \Psi^{\lambda_{n+b} \mu_{n+b} \nu_{n+b} \rho_{n+b}}(n+b), \tag{П.12}$$

$$c(\lambda \mu \nu \rho) = c(\lambda \mu \nu \rho | \rho_n \mu_{n+b}) \cdot g_{\rho_n \mu_{n+b}}.$$

Для одновременного выполнения всех ячеечных уравнений (П.4) нужно совместить условия, которые эти уравнения накладывают на общий вид волновой функции (П.5). Совмещая поочередно эти условия, на каждом шаге мы будем получать общий вид волновой функции, удовлетворяющей уравнениям, соответствующим этим условиям. Выполнив все условия, мы получим общий вид волновой функции, удовлетворяющей всем ячеечным уравнениям (П.4) и, следовательно, удовлетворяющей уравнению (П.3):

$$\Psi_s = \sum_{\lambda\mu\nu\rho} c(\lambda\mu\nu\rho|\lambda\mu\nu\rho) \prod_j \Psi^{\lambda_j\mu_j\nu_j\rho_j}(j) g_{\nu_j\lambda_{j+1}} g_{\rho_j\mu_{j+1}}, \quad (\text{П.13})$$

где $c(\lambda\mu\nu\rho|\lambda\mu\nu\rho) = c$ — константа.

Сравнивая волновые функции (П.1) и (П.13), легко видеть, что общий вид волновой функции, удовлетворяющей уравнению (П.3), совпадает с точностью до произвольного множителя с волновой функцией Ψ_s . Следовательно, Ψ_s является невырожденной волновой функцией основного состояния гамильтониана (П.2).

Литература

1. E. Dagotto, *Int. J. Mod. Phys. B* **5**, 907 (1991).
2. P. Sen and B. K. Chakrabarti, *Int. J. Mod. Phys. B* **6**, 2439 (1992).
3. T. Tonegawa and I. Harada, *J. Phys. Soc. Jap.* **56**, 2153 (1987).
4. A. V. Chubukov and T. Jolicœur, *Phys. Rev. B* **44**, 12050 (1991).
5. A. V. Chubukov, *Phys. Rev. B* **44**, 4693 (1991).
6. D. J. J. Farnell and J. B. Parkinson, *J. Phys. Condens. Matter.* **6**, 5521 (1994); R. Bursill, G. A. Gehring, D. J. J. Farnell, J. B. Parkinson, Tao Xiang, and Chen Zeng, *J. Phys. Condens. Matter.* **7**, 8605 (1995).
7. V. Ya. Krivnov and A. A. Ovchinnikov, *Phys. Rev. B* **53**, 6435 (1996).
8. K. Nomura and K. Okamoto, *Phys. Lett. A* **169**, 433 (1992).
9. C. E. I. Carneiro, M. J. de Oliveira, and W. F. Wreszinski, *J. Stat. Phys.* **79**, 347 (1995).
10. S. R. White and I. Affleck, *Phys. Rev. B* **54**, 9862 (1996).
11. C. K. Majumdar and D. K. Ghosh, *J. Math. Phys.* **10**, 1388, 1399 (1969).
12. I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 799 (1987); *Commun. Math. Phys.* **115**, 477 (1988).
13. F. D. M. Haldane, *Phys. Lett. A* **93**, 464 (1983); *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1153 (1983).
14. T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, *J. Stat. Phys.* **53**, 383 (1988).
15. A. Klumper, A. Schadschneider, and J. Zittartz, *Z. Phys. B* **87**, 281 (1992); *Europhys. Lett.* **24**(4), 293 (1993); C. Lange, A. Klumper, and J. Zittartz, *Z. Phys. B* **96**, 267 (1994).
16. D. V. Dmitriev, V. Ya. Krivnov, and A. A. Ovchinnikov, *Phys. Rev. B* **56**, 5985 (1997).
17. H. Niggemann, A. Klumper, and J. Zittartz, *Z. Phys. B* **104**, 103 (1997).
18. B. Sutherland and S. Shastry, *J. Stat. Phys.* **33**, 477 (1983).