

05,12

Вариационная модель низкоразмерного магнетика

© Ю.Б. Кудасов, Р.В. Козабаранов

Саровский физико-технический институт, Национальный исследовательский ядерный университет „МИФИ“, Саров, Россия

Российский федеральный ядерный центр —

Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Саров, Россия

E-mail: kudasov@ntc.vniief.ru

Поступила в Редакцию 26 марта 2020 г.

В окончательной редакции 26 марта 2020 г.

Принята к публикации 2 апреля 2020 г.

Развивается метод нелокальной пробной вариационной функции для квантовых одномерных систем на примере XXZ-цепочки спина 1/2 с альтернированным магнитным полем. Построена четырехузловая пробная волновая функция для фермионного представления модели. Результаты, полученные в модели с расширенной пробной волновой функцией, демонстрируют значительное повышение точности расчета энергии основного состояния в области критического поведения по сравнению с решениями, полученными ранее. Рассмотрены методы расчета экспериментально наблюдаемой спиновой корреляционной функции.

Ключевые слова: одномерные квантовые магнетики, XXZ-цепочка в альтернированном магнитном поле, вариационная теория, метод Гутцвиллера, основное состояние.

DOI: 10.21883/FTT.2020.09.49779.21H

1. Введение

В последние десятилетия появилось много примеров одномерных (1D) и квазиодномерных магнитных систем, как в кристаллических структурах [1], так и в молекулярных магнетиках и кластерах [2]. В качестве 1D-магнетиков могут выступать как простые цепочки с различными типами взаимодействий и анизотропии, так и сложные структуры: лестничные системы, периодические группы магнитных ионов — декорированные цепочки и т.д. [3]. Гейзенберговская цепочка спина 1/2 является одной из фундаментальных и наиболее тщательно исследованных моделей магнетизма [4]; известны строгие решения методом анзаца Бете, а также различные аналитические и численные методы. При этом в последнее время в 1D-цепочках были обнаружены новые экзотические состояния: основное состояние с симметрией E8 в поперечном магнитном поле в CoNb_2O_6 [5], бозе-стекло в $(\text{Yb}_{1-x}\text{Lu}_x)_4\text{As}_3$ [6] и т.д.

Для цепочки с антиферромагнитным (АФМ) взаимодействием в однородном продольном магнитном поле известны аналитические решения для энергии основного состояния [4,7,8] и спектра возбуждений [9,10], который является бесщелевым в полях ниже критического [11]. В то же время, во многих изотропных одномерных и квазиодномерных магнетиках наблюдается спиновая щель [1]. В цепочках спина 1/2 ее возникновение часто объясняется альтернированным эффективным полем, которое, в свою очередь, является следствием взаимодействия Дзялошинского–Мория [12] или возникает в результате воздействия поперечного однородного магнитного поля на анизотропную зигагообразную цепочку [2].

Точное аналитическое решение для основного состояния и спектра возбуждений гейзенберговской цепочки с альтернированным магнитным полем отсутствует. В случае изотропной АФМ-цепочки были найдены асимптотические решения при малых значениях альтернированного магнитного поля (h_{st}): преобразованием к уравнениям синус-Гордона было получено решение в очень узкой области вблизи; $h_{st} = 0$ [13] и в более широком диапазоне полей — методом ренормгруппы матрицы плотности (DMRG) [14]. Переход к фермионному представлению при помощи преобразования Йордана–Вигнера [15] открывает возможность применения хорошо разработанных методов теории сильно коррелированных Ферми-систем. Недавно XXZ-цепочка с альтернированным магнитным полем была подробно исследована методом среднего поля для фермионного представления с поправками по теории возмущений до второго порядка, а также методом точной диагонализации на конечных кластерах [16]. Во многих случаях такой подход дает неудовлетворительные результаты. В частности, для XY-цепочки в пределе $h_{st} \rightarrow 0$ расходится энергия основного состояния, а для изотропной цепочки расходится спиновая щель.

В работе [17] была предложена новая вариационная волновая функция основного состояния анизотропной гейзенберговской цепочки в фермионном представлении. Она является нелокальным обобщением пробной вариационной функции Гутцвиллера [18], которая позволила практически точно вычислить энергию основного состояния модели Хаббарда на бесконечномерной решетке, а также успешно использовалась при пониженной размерности решетки вплоть до одномерной

цепочки [19]. Пробная волновая функция Гутцвиллера позволяла управлять внутриузловыми корреляциями, а ее обобщение дало возможность учесть нелокальные корреляции между ближайшими соседями [20]. Такая обобщенная пробная волновая функция хорошо описывает основное состояние модели Хаббарда даже в одномерном случае. Поскольку фермионное представление гейзенберговской цепочки содержит взаимодействие только между ближайшими соседями, обобщенная нелокальная пробная волновая функция представляется хорошим инструментом описания ее основного состояния.

В настоящей статье развивается метод, предложенный в работе [17]. Нелокальная пробная волновая функция расширяется на четырехузловой кластер. Вычисляется энергия основного состояния длинной АФМ-ХХЗ-цепочки в альтернированном магнитном поле. Проводится сравнение полученных результатов с теорией среднего поля [16] и вариационной моделью в двухузловом приближении [17]. Предложены методы вычисления спиновой корреляционной функции.

2. Фермионное представление

Гамильтониан ХХЗ-цепочки спина 1/2 в альтернированном магнитном поле может быть записан через спиновые операторы в безразмерном виде

$$\hat{H} = \sum_i^N \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+1}^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_{i+1}^+ \right) + \Delta \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z + h_{st} (-1)^i \hat{S}_i^z \right], \quad (1)$$

где $\hat{S}_i^{+(-)}$ и \hat{S}_i^z — операторы повышения и понижения и z -ой проекции спина на i -ом узле, h_{st} — z -компонента альтернированного магнитного поля. Константа анизотропии $\Delta > 0$ соответствует АФМ-взаимодействию, $\Delta < 0$ — ферромагнитному (ФМ), $\Delta = 0$ — ХУ-модели. Видно, что альтернированное магнитное поле разбивает цепочку на две подрешетки А и В (четные и нечетные узлы цепочки).

Преобразование Йордана–Вигнера позволяет перейти от спиновых операторов к операторам рождения (уничтожения) бесспиновых фермионов \hat{c}_i^+ (\hat{c}_i) на i -ом узле цепочки

$$\hat{S}_i^+ = \hat{c}_i^+ e^{i\pi \sum_j^{i-1} \hat{n}_j}, \quad \hat{S}_i^- = e^{-i\pi \sum_j^{i-1} \hat{n}_j} \hat{c}_i, \quad \hat{S}_i^z = \hat{n}_i - \frac{1}{2}, \quad (2)$$

где $\hat{n}_i = \hat{c}_i^+ \hat{c}_i$ — оператор числа частиц. Состоянию узла, занятого фермионом, соответствует $\hat{S}_i^z = 1/2$, свободного узла $\hat{S}_i^z = -1/2$. Здесь удобно перейти к операторам рождения и уничтожения фермиона на узлах подрешеток А и В, т.е. $\hat{a}_i^+ \equiv \hat{c}_i^+$ при $i \in \{A\}$ и $\hat{b}_i^+ \equiv \hat{c}_i^+$ при $i \in \{B\}$. Тогда в фермионном представлении гамильтониан (1) принимает вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad (3)$$

где

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \sum_j^{N/2} \left(\hat{a}_j^+ \hat{b}_j + \hat{a}_{j+1}^+ \hat{b}_j + h.c. \right) + \sum_j^{N/2} h_{st} \left(\hat{a}_j^+ \hat{a}_j - \hat{b}_j^+ \hat{b}_j \right), \quad (4)$$

$$\hat{H}_1 = \Delta \sum_j^{N/2} \left(\hat{a}_j^+ \hat{a}_j - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{b}_j^+ \hat{b}_j - \frac{1}{2} \right) + \Delta \sum_j^{N/2} \left(\hat{b}_j^+ \hat{b}_j - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{a}_{j+1}^+ \hat{a}_{j+1} - \frac{1}{2} \right). \quad (5)$$

В выражениях (4) и (5) суммирование проводится по номерам суперячеек цепочки, включающих по одному узлу подрешетки А и В. Квадратичная по операторам рождения (уничтожения) часть гамильтониана собрана в выражении (4): сумма x -членов и магнитной части гамильтониана (1). Биквадратичная часть возникает благодаря z -членам. Она соответствует эффективному парному взаимодействию фермионов на ближайших узлах. Таким образом, мы пришли к задаче о коррелированных фермионах на цепочке.

Квадратичная часть гамильтониана может быть легко диагонализирована. Для этого сначала выполняется Фурье-преобразование операторов: $\hat{a}_j^+ = 2/N \sum \exp(i\mathbf{R}_j \mathbf{k}) \hat{a}_k^+$ и $\hat{b}_j^+ = 2/N \sum \exp(i\mathbf{R}_j \mathbf{k}) \hat{b}_k^+$, а затем унитарное преобразование \hat{U} :

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_k^+ &= \cos(\theta_k) \hat{a}_k^+ + \sin(\theta_k) \hat{b}_k^+, \\ \hat{\beta}_k^+ &= -\sin(\theta_k) \hat{a}_k^+ + \cos(\theta_k) \hat{b}_k^+, \end{aligned} \quad (6)$$

где

$$\sin(2\theta_k) = \cos(k/2) / \sqrt{\cos^2(k/2) + h_{st}^2}.$$

В диагональном представлении гамильтониан (4) примет вид

$$\hat{H}_{0d} = \hat{U} \hat{H}_0 \hat{U}^{-1} = \sum_k \varepsilon_k \left(\hat{\alpha}_k^+ \hat{\alpha}_k - \hat{\beta}_k^+ \hat{\beta}_k \right), \quad (7)$$

где $\varepsilon_k = \sqrt{\cos^2(k/2) + h_{st}^2}$. Таким образом, мы приходим к точному решению ХУ-цепочки В альтернированном магнитном поле. Далее мы исследуем основное состояние АФМ-цепочки, которому соответствуют половинное заполнение в зоне β и незаполненные состояния в зоне α :

$$|\tilde{\varphi}\rangle = \prod_k \hat{\beta}_k^+ |0\rangle. \quad (7a)$$

Дальнейшее исследование можно выполнять как в базе новых операторов $\hat{\alpha}_k^+$ и $\hat{\beta}_k^+$, так и в исходных операторах \hat{a}_k^+ и \hat{b}_k^+ . Первый путь, однако, оказывается менее удобным, поскольку взаимодействие фермионов (5). В новых операторах становится более сложным (охватывает не только ближайших соседей на цепочке). Поэтому

представляем полученное точное решение ХУ-цепочки в операторах $\hat{\alpha}_k^\dagger$ и $\hat{\beta}_k^\dagger$ путем обратного преобразования

$$|\varphi_0\rangle = \hat{U}^{-1}|\tilde{\varphi}_0\rangle. \quad (8)$$

3. Пробная волновая функция

3.1. Двухузловой кластер

Основная идея метода нелокальной пробной волновой функции состоит в деформации исходной волновой функции, которая является точной при отсутствии взаимодействия. В случае АФ-цепочки такой исходной функцией является решение для ХУ-цепочки (8). Мы начнем с нелокальной пробной волновой функции с двухузловым кластером, предложенной в работе [17]. Сначала необходимо выделить все возможные состояния пары узлов — ближайших соседей [20]. Для бесспиновых фермионов имеем [17]:

$$\begin{aligned} \hat{Y}_1 &= \sum_i (1 - \hat{n}_i^A) (1 - \hat{n}_{i+1}^B), & \hat{Y}_2 &= \sum_i \hat{n}_i^A (1 - \hat{n}_{i+1}^B), \\ \hat{Y}_3 &= \sum_i (1 - \hat{n}_i^A) \hat{n}_{i+1}^B, & \hat{Y}_4 &= \sum_i \hat{n}_i^A \hat{n}_{i+1}^B. \end{aligned} \quad (9)$$

Узлы в паре принадлежат различным подрешеткам $i \in A$ и $i + 1 \in B$. Собственное значение этих проекционных операторов в случае любого однородного состояния цепочки представляет собой вероятность появления данной конфигурации на паре ближайших соседей: $y_k = N^{-1} \langle \hat{Y}_k \rangle$. Здесь можно заметить, что собственные значения не являются независимыми. Кроме очевидного условия нормировки $\sum_k y_k = 1$ имеется условие,

связанное с половинным заполнением цепочки фермионами: $y_2 + y_3 + 2y_4 = 1$. Таким образом, мы имеем только два независимых оператора. Удобно использовать симметризованные операторы $\hat{M} = \hat{Y}_3 - \hat{Y}_2$ и $\hat{P} = \hat{Y}_3 + \hat{Y}_2$ и их собственные значения $m = N^{-1} \langle \hat{M} \rangle$, $p = N^{-1} \langle \hat{P} \rangle$. Величину m можно рассматривать как АФМ намагниченность (взаимную намагниченность подрешеток), а p — вероятность состояния, когда один из пары ближайших соседей занят, а другой свободен.

Теперь пробную волновую функцию с двухузловым кластером можно представить в символическом виде аналогичном гутцвиллеровской пробной функции [17]:

$$|\psi\rangle = g_p^{\hat{P}} g_m^{\hat{M}} |\psi_0\rangle, \quad (10)$$

где g_p и g_m — положительные параметры, $|\psi_0\rangle$ — исходная волновая функция (8). Оператор в правой части $g_p^{\hat{P}} g_m^{\hat{M}}$ инвариантен по отношению к перестановкам частиц, трансляциям вдоль цепочки и ее инверсии. Поэтому пробная волновая функция сохраняет антисимметричность по отношению к перестановкам частиц и пространственную симметрию исходной волновой функции. Для прояснения физического смысла можно

разложить $|\psi_0\rangle$ по конфигурациям $|\Gamma\rangle$, т.е. перейти в координатное представление при помощи обратного преобразования Фурье по всем k :

$$|\psi_0\rangle = g_p^{\hat{P}} g_m^{\hat{M}} |\psi_0\rangle = \sum_{\Gamma} A_{\Gamma} g_p^{\hat{P}} g_m^{\hat{M}} |\Gamma\rangle, \quad (11)$$

где

$$|\psi_0\rangle = \sum_{\Gamma} A_{\Gamma} |\Gamma\rangle, \quad |\Gamma\rangle = \prod_{\{i\}} a_i^\dagger \prod_{\{j\}} b_j^\dagger |0\rangle.$$

Здесь $\{i\}$ и $\{j\}$ — наборы занятых узлов подрешеток А и В. Отсюда видно, что вариационные параметры изменяют вероятности появления определенных конфигураций пар ближайших соседей в многочастичной волновой функции [17]. В дальнейшем будем использовать приближение работы [20]:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{\{m,p\}} R(m,p) = \sum_{\{m,p\}} W(m,p) g_p^{2Np} g_m^{2Nm}. \quad (12)$$

Таким образом, вес состояния определяется числом конфигураций $W(m,p)$ и вариационными множителями с заданными значениями m и p . Он рассчитывается вариационным кластерным методом (метод Кикучи), который на цепочке является точным [21]. Отметим также, что распределение в правой части (12) имеет острый экспоненциальный пик и при больших значениях длины цепочки N можно ограничиться рассмотрением конфигураций в очень узкой области вблизи максимума [20]. Эти конфигурации определяются условиями максимума

$$\frac{\partial \ln[R(m,p)]}{\partial m} = 0, \quad \frac{\partial \ln[R(m,p)]}{\partial p} = 0, \quad (13)$$

что в случае пробной волновой функции (10) приводит к [17]:

$$g_p = \frac{(p^2 - m^2)^{1/4}}{(1 - p)^{1/2}}, \quad g_m = \left[\frac{(1 - m)(p + m)}{(1 + m)(p - m)} \right]^{1/4}. \quad (14)$$

3.2. Четырехузловой кластер

Теперь рассмотрим пробную волновую функцию в случае более сложной пробной функции, содержащей кластеры длиной 4 узла решетки. Будем обозначать проекционные операторы для состояний кластера из 4 узлов как \hat{Z}_λ (аналогично \hat{Y}_λ) и соответствующие собственные значения как $z_\lambda = N^{-1} \langle \hat{Z}_\lambda \rangle$. Для них удобно ввести индексы в виде цифр шестнадцатеричной системы счисления: последовательность 4 занятых или свободных узлов можно представить четырехзначным числом в двоичном виде. Например, на рис. 1 состояние a (верхняя строчка) соответствует 0010 (ноль — незанятый узел, изображенный светлым кружком; 1 — занятый узел, изображен темным кружком). В шестнадцатеричной системе счисления получаем $\lambda = 2$. Таким образом, любое состояние описывается шестнадцатеричной цифрой от 0

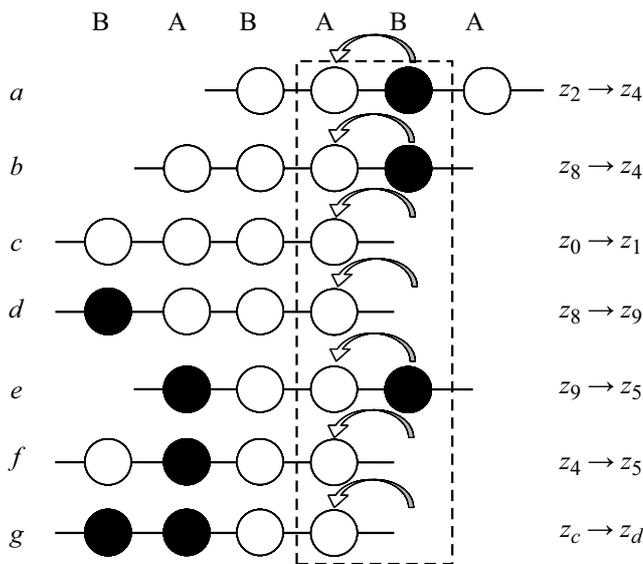


Рис. 1. Перескок фермиона в кластере из четырех узлов: занятые узлы — темные кружки, свободные — светлые. ВА обозначают принадлежность узла к подрешетке. Строки *a, b* показывают изменение состояния центрального и смежных кластеров (показаны только левые смежные кластеры) при перескоке. Слева показаны изменения типа кластера (типы *b* и *d* образованы инверсией кластера).

до *f*. Отметим также, что мы придерживаемся последовательности узлов подрешеток ВАВА. Последовательность АВАВ получается из нее операцией инверсии (нумерация \hat{Z}_λ изменяется соответственно).

Нормировка и симметрия конфигураций в кластере приводят к дополнительным условиям для Z_λ

$$\sum z_\lambda = 1,$$

$$\begin{aligned} z_1 + z_2 + z_3 - z_4 - z_8 - z_c &= 0, \\ z_6 + z_7 - z_c - z_d &= 0, \\ -z_1 + z_4 + z_6 + z_7 - z_9 - z_d &= 0, \\ -z_1 + z_4 + z_6 + z_7 - z_9 - z_d &= 0, \\ -z_2 - z_6 + z_8 + z_9 + z_b - z_e &= 0, \end{aligned} \quad (15)$$

Кроме того, удобно выразить числа заполнения узлов подрешеток и АФМ намагниченность через вероятности конфигураций кластеров

$$\begin{aligned} n_A &= z_4 + z_5 + z_6 + z_7 + z_c + z_d + z_e + z_f, \\ n_B &= z_8 + z_9 + z_a + z_b + z_c + z_d + z_e + z_f, \\ n_B - n_A &= m. \end{aligned} \quad (16)$$

Отсюда видно, что мы имеем всего 10 независимых переменных, В качестве которых мы используем $z_0, z_3, z_5, z_6, z_9, z_a, z_c, z_e, z_f, m$.

Пробная волновая функция для кластеров длиной 4 узла в явном виде может быть представлена как

$$|\psi\rangle = g_0^{\hat{Z}_0} g_3^{\hat{Z}_3} g_5^{\hat{Z}_5} g_6^{\hat{Z}_6} g_9^{\hat{Z}_9} g_a^{\hat{Z}_a} g_c^{\hat{Z}_c} g_e^{\hat{Z}_e} g_f^{\hat{Z}_f} g_m^M |\psi_0\rangle, \quad (17)$$

где \hat{Z}_λ — проекционные операторы независимых переменных, g_λ — соответствующие вариационные параметры.

Вычислим число конфигураций цепочки с заданными значениями z_λ методом псевдоансамбля Кикучи [22,23]. Для этого сначала найдем число конфигураций в приближении независимых кластеров

$$\ln W_A = -N \sum_\lambda z_\lambda \ln z_\lambda, \quad (18)$$

а затем вычислим корреляционный множитель [22,23]:

$$\begin{aligned} \ln W_c &= \frac{N}{2} \sum_\lambda (z_\lambda + z_{\lambda+1}) \ln(z_\lambda + z_{\lambda+1}) \\ &+ \frac{N}{2} \sum_\lambda (z_\lambda + z_{\lambda+8}) \ln(z_\lambda + z_{\lambda+8}). \end{aligned} \quad (19)$$

Тогда окончательно получаем

$$W = W_c / W_a \quad (20)$$

и определяем необходимые условия максимума $R = W g_m^{2Nm} \prod_\lambda g_\lambda^{2Nz_\lambda}$ как

$$\frac{\partial \ln R}{\partial z_\lambda} = 0. \quad (21)$$

Энергия основного состояния

Полная энергия системы должна быть выражена через набор независимых параметров m, p для двухузлового представления и z_λ, m для четырехузлового представления. Формально она принимает вид

$$E = q' \langle \varepsilon_k \rangle_0 - \frac{mh_{st}}{2} + \frac{\Delta}{4} (1 - 2p), \quad (22)$$

где $\langle \varepsilon_k \rangle_0$ — кинетическая энергия невзаимодействующих электронов. Полученные аналитические выражения представлены в работе [17]. Заметим, что выражение (22) справедливо как для двухузлового, так и для четырехузлового приближений. В последнем случае параметр p выражается как

$$P = z_2 + z_3 + z_4 + z_5 + z_a + z_b + z_c + z_d. \quad (23)$$

Энергия в выражении (22) должна быть представлена через независимые переменные, по которым В дальнейшем производится минимизация энергии.

При деформации исходной волновой функции кинетическая энергия электронов повышается (минимальное значение соответствует исходной волновой функции), что определяется функцией q' . С другой стороны, изменение вероятностей различных конфигураций позволяет снизить потенциальную энергию. Энергия основного состояния определяется минимизацией полной энергии по независимым параметрам. Основной проблемой при расчете является вычисление функции q' . Для двухузловой волновой функции результаты расчета энергии основного состояния приведены в работе [17].

Рассмотрим подробно вычисление функции q' для четырехузловой пробной функции. Прежде всего, как обычно [20] $q' = q/\bar{q}$, где \bar{q} — значение функции q для невзаимодействующих электронов. Вероятность появления

$$Q_0 = \sum z_\lambda \frac{\prod_{\lambda'} g_{\lambda'}}{\prod_{\lambda''} g_{\lambda''}}. \quad (24)$$

Здесь суммирование производится по всем конфигурациям z_λ , которые содержат в центральной части пустой и занятый узел ($\lambda = 2, 3, 4, 5, a, b, c, d$). Например, вероятность появления конфигурации, изображенной на рис. 1 в верхней строке a составляет z_2 . С учетом изменения веса после перескока ($z_2 \rightarrow z_4$) получаем $z_2 g_m^{-2}$ (в сумме (24) в числителе находятся g_λ , которые появляются в новом состоянии, в знаменателе — те, которые исчезают). Еще один пример, переход $z_2 \rightarrow z_5$ приводит к слагаемому $z_3 g_3^{-1} g_m^{-2} g_5$. Сумма всех переходов приводит к выражению (24).

Приближение (24) соответствует результату, полученному для двухузловой пробной функции. В действительности при перескоке изменяются состояния не только центрального кластера, но и кластеров сдвинутых влево и вправо. На рис. 1 в качестве примера показаны все возможные изменяющиеся кластеры со сдвигом влево для центрального кластера z_2 . Поэтому окончательное выражение для функции q принимает вид

$$q = \sum_\lambda \left(z_\lambda \frac{\prod_{\lambda'} g_{\lambda'}}{\prod_{\lambda''} g_{\lambda''}} K_{\lambda_L} K_{\lambda_R} \right), \quad (25)$$

куда входят поправочные множители для сдвига на единицу влево и вправо, соответственно

$$K_{\lambda_L} = \sum_{\lambda_L} \left(z_{\lambda_L} \frac{\prod_{\lambda'_L} g_{\lambda'_L}}{\prod_{\lambda''_L} g_{\lambda''_L}} K_{\lambda_{LL}} \right) / \sum_{\lambda_L} z_{\lambda_L},$$

$$K_{\lambda_R} = \sum_{\lambda_R} \left(z_{\lambda_R} \frac{\prod_{\lambda'_R} g_{\lambda'_R}}{\prod_{\lambda''_R} g_{\lambda''_R}} K_{\lambda_{RR}} \right) / \sum_{\lambda_R} z_{\lambda_R}. \quad (26)$$

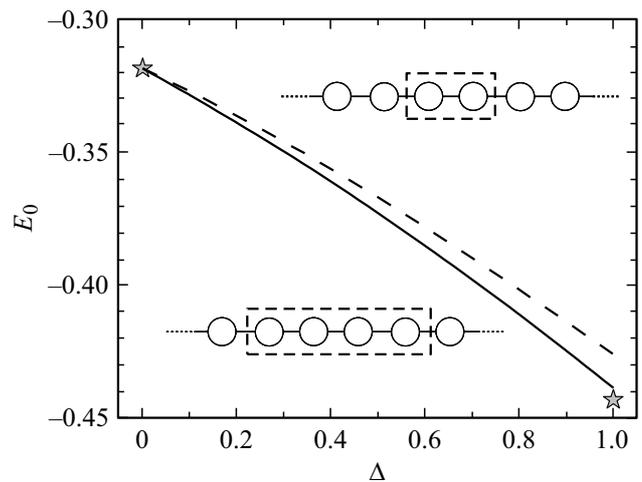


Рис. 2. Энергия основного состояния XXZ-цепочки в зависимости от анизотропии в вариационной теории: двухузловая (пунктирная линия) и четырехузловая (сплошная линия) волновые функции. Точные решения отмечены звездочками.

В эти выражения, в свою очередь, входят поправочные множители для сдвига на два узла влево и вправо

$$K_{\lambda_{LL}} = \sum_{\lambda_{LL}} \left(z_{\lambda_{LL}} \frac{\prod_{\lambda'_{LL}} g_{\lambda'_{LL}}}{\prod_{\lambda''_{LL}} g_{\lambda''_{LL}}} \right) / \sum_{\lambda_{LL}} z_{\lambda_{LL}},$$

$$K_{\lambda_{RR}} = \sum_{\lambda_{RR}} \left(z_{\lambda_{RR}} \frac{\prod_{\lambda'_{RR}} g_{\lambda'_{RR}}}{\prod_{\lambda''_{RR}} g_{\lambda''_{RR}}} \right) / \sum_{\lambda_{RR}} z_{\lambda_{RR}}. \quad (27)$$

В целом, методика вычисления аналогична использованной ранее для модели Хаббарда [20].

Из общего вида выражений (24)–(27) и из рис. 1 видно, что вероятность перескока определяется областью размерами 4 узла для двухузловой функции и 8 узлов для четырехузловой пробной функции.

На рис. 2 представлены результаты расчета энергии основного состояния XXZ-цепочки в нулевом магнитном поле для различных значений параметра анизотропии для двух пробных волновых функций. В случае XY-цепочки ($\Delta = 0$) результаты совпадают с точным решением, для изотропной цепочки ($\Delta = 1$) четырехузловая пробная волновая функция дает гораздо лучшее решение, чем двухузловая.

В магнитном поле для сильно анизотропных цепочек $\Delta \gg 1$ оба решения вариационной теории, полученные выше, и теория среднего поля с поправками по теории возмущений до 2-ого порядка [16] хорошо согласуются между собой. Наибольшие трудности представляет область $0 \leq \Delta \leq 1$. На рис. 3 представлены результаты расчета энергии основного состояния XY-цепочки и изотропной гейзенберговской цепочки в альтернированном магнитном поле для вариационной теории и теории среднего поля с поправками [16]. В случае XY-цепочки

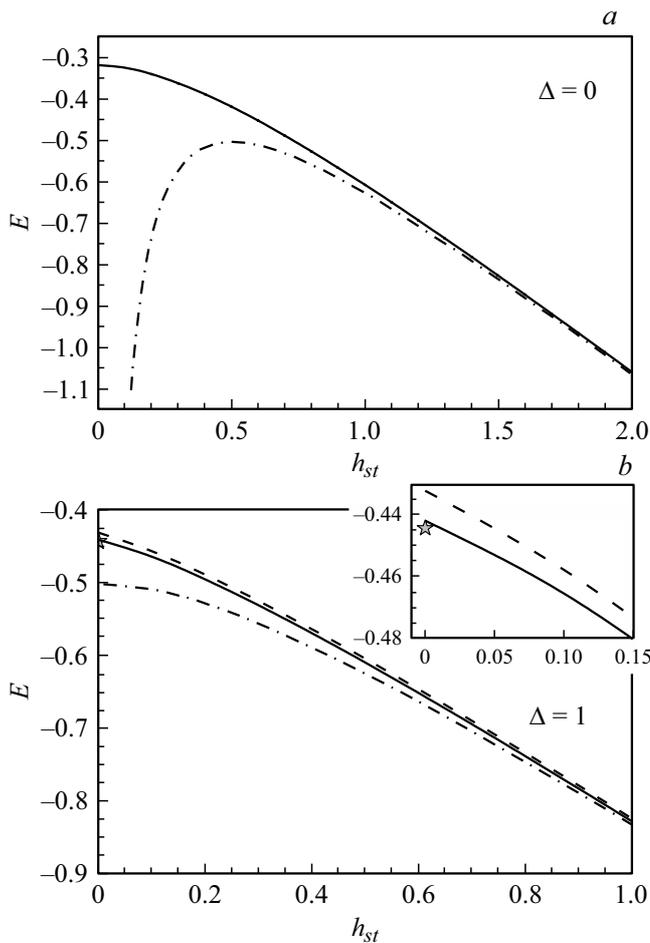


Рис. 3. Энергия основного состояния XXZ-цепочки в альтернированном магнитном поле: теория среднего поля с поправками 2-ого порядка [16] (штрих-пунктирная линия), двухузловая (пунктирная линия) [17] и четырехузловая (сплошная линия) волновые функции.

оба решения в рамках вариационной теории совпадают с точным решением, в то время как теория среднего поля приводит к расходимости [16]. При больших значениях альтернированного магнитного поля все решения асимптотически совпадают друг с другом. При $h_{st} \rightarrow 0$ четырехузловая волновая функция значительно улучшает решение по сравнению с двухузловой.

4. Спиновая корреляционная функция

Наиболее сложной для вычислений является область при $h_{st} \rightarrow 0$ для изотропной цепочки, поскольку система демонстрирует критическое поведение [7,8]: корреляционная длина неограниченно возрастает. При этом размеры кластера оказываются принципиальными для корректного вычисления физических характеристик, в том числе и спиновой корреляционной функции. В работе [17] для двухузловой пробной функции была вычислена АФМ-намагниченность m в области критического

поведения. На рис. 4, *a* сравниваются результаты расчета двух- и четырехузловой пробной функции с моделью DMRG [14], которая хорошо описывает критическую область. Видно, что в сильных магнитных полях результаты для обеих функций совпадают, а в области $h_{st} \rightarrow 0$ четырехузловая функция позволяет продвинуться почти на порядок в область слабых полей по сравнению с двухузловой функцией.

Важной характеристикой основного состояния является экспериментально наблюдаемая спин-спиновая корреляционная функция. Нелокальная корреляционная функция для ближайших соседей в спиновых переменных имеет вид [17] $\langle \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z \rangle = (1 - 2\rho)/4$. В обсуждаемом выше методе корреляционные функции возникают естественным образом: ими фактически являются параметры z_λ . Для четырехузловой пробной функции можно построить зависимость $\langle \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+n}^z \rangle$ от координаты, т. е. от n .

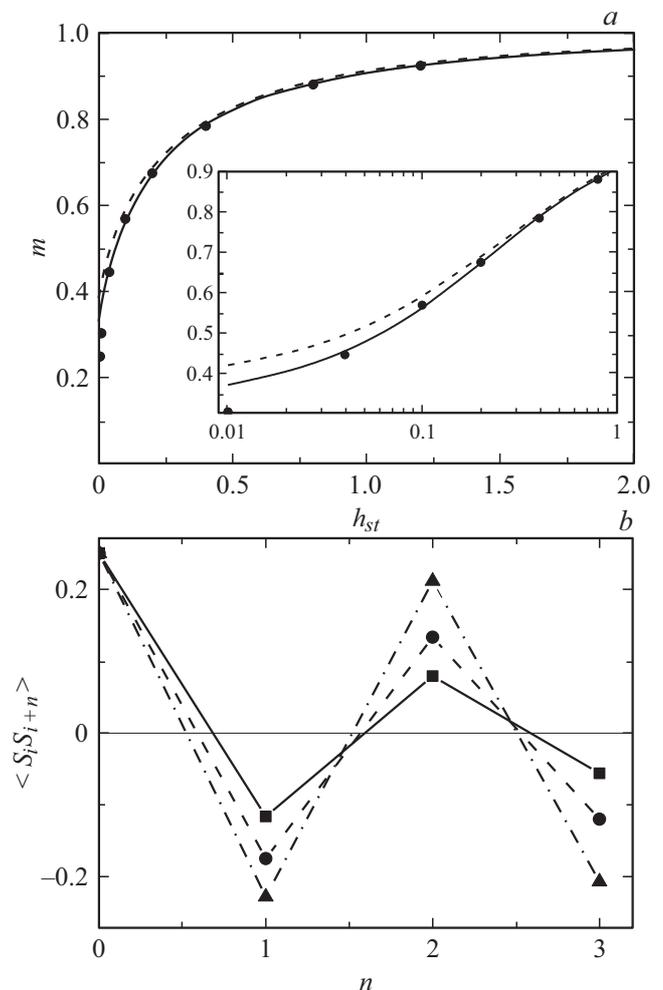


Рис. 4. (а) АФМ-намагниченность изотропной цепочки как функция альтернированного магнитного поля: пунктирная линия — двухузловая пробная функция [17], сплошная линия — четырехузловая пробная функция [17], точки — расчеты DMRG [14]; (б) спин-спиновая корреляционная функция из четырехузловой пробной функции для $h_{st} = 0$ (сплошная), $h_{st} = 0.2$ (штриховая) и $h_{st} = 1$ (штрихпунктирная).

Например, для ближайших соседей спиновая корреляционная функция будет представлять собой следующую комбинацию z_λ

$$\langle \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z \rangle = \left(\sum_{\lambda=0}^3 z_\lambda + \sum_{\lambda=c}^f z_\lambda \right) - \sum_{\lambda=4}^b z_\lambda / 4. \quad (28)$$

Для соседей следующих за ближайшими получается аналогичное выражение. Для изотропной цепочки зависимость $\langle \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+n}^z \rangle$ показана на рис. 4, *b* при различных значениях альтернированного магнитного поля. Видно, что в системе существует сильный ближний АФМ-порядок. Спиновая корреляционная функция может быть исследована экспериментально, например, при помощи магнитной дифракции нейтронов. К сожалению, экспериментальные исследования в системах с альтернированным магнитным полем (Yb_3As_4 [24], бензоат меди [25]) были сосредоточены на изучении формирования щели в спектре магнитных возбуждений при помощи неупругого рассеяния нейтронов. Поэтому пока прямые экспериментальные данные по спиновой корреляционной функции в основном состоянии отсутствуют.

5. Заключение

Разработан вариационный метод расчета энергии основного состояния и корреляционных функций в анизотропной гейзенберговской цепочке спина 1/2. Два варианта пробных функций, двухузельная [17] и четырехузельная (настоящая работа), дают близкие результаты в широком диапазоне параметров анизотропии и альтернированного магнитного поля. Наиболее сложным случаем для расчета является изотропная гейзенберговская цепочка в слабом альтернированном магнитном поле. Здесь четырехузельная пробная функция позволяет заметно улучшить результаты расчета

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] А.Н. Васильев, М.М. Маркина, Е.А. Попова. Физика низких температур **31**, 272 (2005).
- [2] L. Bogani, A. Vindigni, R. Sessoli, D. Gatteschi. J. Mater. Chem. **18**, 4750 (2008).
- [3] T.S. Nunner, T. Kopp. Phys. Rev. B **69**, 104419 (2004).
- [4] D.C. Mattis. The Many-Body Problem: An Encyclopedia of Exactly Solvable Models in One Dimension. World Scientific, London (1993). 958 p.
- [5] R. Coldea, D.A. Tennant, E.M. Wheeler, E. Wawrzynska, D. Prabhakaran, M. Telling, K. Habicht, P. Smeibidl, K. Kiefer. Science **327**, 177 (2010).
- [6] G. Kamieniarz, R. Matysiak, P. Gegenwart, A. Ochiai, F. Steglich. Phys. Rev. B **94**, 100403 (2016).
- [7] M. Takahashi. Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models. Cambridge University Press, Cambridge (2005). 252 p.
- [8] R.B. Griffiths. Phys. Rev. **133**, A768 (1964).
- [9] J. Des Cloizeaux, J.J. Pearson. Phys. Rev. **128**, 2131 (1962).
- [10] L.D. Faddeev, L.A. Takhtajan. Phys. Lett. A **85**, 375 (1981).
- [11] J.D. Johnson. J. Appl. Phys. **52**, 1991 (1981).
- [12] M. Oshikawa, I. Affleck. Phys. Rev. Lett. **79**, 2883 (1997).
- [13] I. Affleck, M. Oshikawa. Phys. Rev. B **60**, 1038 (1999).
- [14] N. Shibata, K. Ueda. J. Phys. Soc. Jpn. **70**, 3690 (2001).
- [15] P. Jordan, E. Wigner. Z. Phys. **47**, 631 (1928).
- [16] S. Paul, A.K. Ghosh. J. Magn. Magn. Mater. **362**, 193 (2014).
- [17] Yu.B. Kudasov, R.V. Kozabaranov. Phys. Lett. A **382**, 1120 (2018).
- [18] M.C. Gutzwiller. Phys. Rev. **137**, A1726 (1965).
- [19] F. Gebhard. The Mott Metal-Insulator Transition: Models and Methods. Springer-Verlag, Berlin (1997). 280 p.
- [20] Ю.Б. Кудасов. УФН **173**, 121 (2003).
- [21] Д.М. Займан, Модели беспорядка: Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем. Мир, М. (1982).
- [22] R. Kikuchi. Phys. Rev. **81**, 988 (1951).
- [23] R. Kikuchi. Prog. Theor. Phys. Supplement **115**, 1 (1994).
- [24] M. Kohgi, K. Iwasa, J.-M. Mignot, B. Fäk, P. Gegenwart, M. Lang, A. Ochiai, H. Aoki, T. Suzuki. Phys. Rev. Lett. **86**, 2439 (2001).
- [25] D.C. Dender, P.R. Hammar, D.H. Reich, C. Broholm, G. Aeppli. Phys. Rev. Lett. **79**, 1750 (1997).

Редактор Т.Н. Василевская