Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Х. Фрам, Я. Г. Грелик, А. Сил, Персистентные токи
в открытых спиновых цепочках, *ТМФ*, 2012, том 171,
номер 2, 340–352

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6904>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 52.23.180.231

26 апреля 2023 г., 09:33:03

© 2012 г.

Х. Фрам*, Я. Г. Грелик*, А. Сил†

ПЕРСИСТЕНТНЫЕ ТОКИ В ОТКРЫТЫХ СПИНОВЫХ ЦЕПОЧКАХ

В квантовой спиновой цепочке непараллельные граничные магнитные поля могут приводить к возникновению продольного (спинового) тока. С помощью функционального подхода формулируется спектральная задача для модели Гейзенберга со спином $1/2$ с интегрируемыми граничными условиями, которая имеет вид бесконечной иерархии нелинейных интегральных уравнений. На основе этих уравнений вычисляются поправки к энергии основного состояния антиферромагнитной цепочки, связанные с конечной длиной цепочки, и индуцированный спиновый ток в случае граничных параметров, лежащих в определенном диапазоне значений.

Ключевые слова: интегрируемая спиновая цепочка, граничные поля, анзац Бете, Y -система.

1. ВВЕДЕНИЕ

Варьируя граничные условия, можно получить информацию о свойствах модели, существенных для ее полного описания; так, исследование модели при всевозможных граничных условиях помогает обнаружить скрытые соотношения между различными решеточными реализациями одной и той же непрерывной модели (см., например, работу [1]). С другой стороны, определенные физические явления могут быть реализованы только при определенном выборе граничных условий. В настоящей работе мы рассматриваем задачу такого рода, а именно перенос спинов в квантовой спиновой цепочке (см. также работу [2]). Подходящий выбор открытых граничных условий позволяет добавлять или изымать заряды и может, таким образом, привести к возникновению персистентного тока в основном состоянии цепочки. Естественно ожидать, что вариации амплитуд и относительной ориентации граничных полей должны оказывать существенное влияние на величину спинового тока или на соответствующую восприимчивость. В процессе поиска непертурбативных результатов для указанных величин значительные усилия были направлены на

*Institut für Theoretische Physik, Leibniz Universität Hannover, Hannover, Germany.
E-mail: frahm@itp.uni-hannover.de

†Institut für Theoretische Elektrotechnik und Photonik, Universität Siegen, Siegen, Germany

решение интегрируемых квантовых цепочек с открытыми граничными условиями общего вида [3]–[9].

В настоящей работе мы рассматриваем граничную задачу для изотропной цепочки Гейзенберга со спином $1/2$ с открытыми граничными условиями. Модель задается гамильтонианом

$$\mathcal{H}_{XX} = \sum_{j=1}^{L-1} [\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z] + L + h^- \begin{pmatrix} \cos \vartheta^- \cos \xi^- \\ \cos \vartheta^- \sin \xi^- \\ \sin \vartheta^- \end{pmatrix} \cdot \vec{\sigma}_1 + h^+ \begin{pmatrix} \cos \vartheta^+ \cos \xi^+ \\ \cos \vartheta^+ \sin \xi^+ \\ \sin \vartheta^+ \end{pmatrix} \cdot \vec{\sigma}_L, \quad (1)$$

в котором через σ_j^α , $\alpha = x, y, z$, обозначены матрицы Паули в узле решетки с номером j , образующие вектор $\vec{\sigma}_j = (\sigma_j^x, \sigma_j^y, \sigma_j^z)$ в пространстве состояний со спином $1/2$. Оставшиеся переменные задают граничные поля с напряженностью $h^\pm$ в сферических координатах $(\vartheta^\pm, \xi^\pm)$; эти поля действуют в узлах с номерами 1 и L . Заметим, что вращательная симметрия совокупности внутренних узлов цепочки нарушена вследствие наложения непараллельных магнитных полей на границе. Таким образом, разработанные методы решения спектральной задачи для модели (2), наиболее известным из которых является алгебраический анзац Бете, в данном случае неприменимы. Ниже мы даем обзор некоторых функциональных методов, введенных в недавней работе [9] для исследования спектра указанной модели, и применяем их для вычисления тока, индуцированного граничными полями.

Интегрируемость спиновой цепочки (1) при произвольных граничных полях можно показать, построив ее в рамках предложенного в работе [10] обобщения квантового метода обратной задачи рассеяния на случай открытых границ. Этот подход применим к общему классу интегрируемых систем, которые характеризуются зависящей от разности аргументов R -матрицей $R(\lambda, \mu) = R(\lambda - \mu) \in \text{End}(V \otimes V)$, удовлетворяющей уравнению Янга–Бакстера

$$R_{12}(\lambda - \mu) R_{13}(\lambda - \nu) R_{23}(\mu - \nu) = R_{23}(\mu - \nu) R_{13}(\lambda - \nu) R_{12}(\lambda - \mu). \quad (2)$$

Индексы величины R_{jk} обозначают, в каких пространствах из тензорного произведения $V_1 \otimes V_2 \otimes V_3$ соответствующая матрица R действует нетривиально. Для гамильтониана (1) нам потребуется хорошо известное решение уравнения Янга–Бакстера (2) с $V_j = \mathbb{C}^2$ для шестивершинной модели:

$$R(\lambda) = \begin{pmatrix} a(\lambda) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b(\lambda) & c(\lambda) & 0 \\ 0 & c(\lambda) & b(\lambda) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a(\lambda) \end{pmatrix}, \quad a(\lambda) = \lambda + i, \quad b(\lambda) = \lambda, \quad c(\lambda) = i. \quad (3)$$

Каждое решение $R(\lambda)$ фиксирует структурные константы соответствующей алгебры Янга–Бакстера,

$$R_{12}(\lambda - \mu) T_1(\lambda) T_2(\mu) = T_2(\mu) T_1(\lambda) R_{12}(\lambda - \mu), \quad (4)$$

с генераторами $T^\alpha_\beta(\lambda)$, $\alpha, \beta = 1, 2$. Произведения $T_1(\lambda) = T(\lambda) \otimes I$ и $T_2(\lambda) = I \otimes T(\lambda)$ представляют собой вложения матрицы монодромии $T(\lambda)$ в произведение вспомогательных пространств $V_1 \otimes V_2$. Матрица $T(\lambda)$ и ее обратная имеют вид

$$T(\lambda) = \begin{pmatrix} A(\lambda) & B(\lambda) \\ C(\lambda) & D(\lambda) \end{pmatrix}, \quad T^{-1}(\lambda) = \frac{1}{(d_q T)(\lambda - i/2)} \sigma^y T^t(\lambda - i) \sigma^y.$$

Скалярный множитель $(d_q T)(\lambda) = A(\lambda + i/2)D(\lambda - i/2) - B(\lambda + i/2)C(\lambda - i/2)$ является центральным элементом алгебры Янга–Бакстера, он известен под названием квантового определителя. Верхний индекс t обозначает транспонирование (ниже мы используем обозначение t_j для транспонирования в j -м вспомогательном пространстве).

Для части гамильтониана (1), отвечающей внутренности цепочки, выберем фундаментальное представление

$$T(\lambda) = T_0(\lambda) = R_{0L}(\lambda) \dots R_{02}(\lambda) R_{01}(\lambda) \quad (5)$$

для векторов со спином $1/2$ во вспомогательном пространстве V_0 . Квантовый определитель произведения (5) равен $(d_q T)(\lambda - i/2) = (1 + \lambda^2)^L$.

Конструкция Складина для открытых спиновых цепочек базируется на представлениях двух алгебр $\mathcal{U}^+(\lambda)$ и $\mathcal{U}^-(\lambda)$, заданных соотношениями

$$\begin{aligned} R_{12}(\lambda - \mu) \mathcal{U}_1^-(\lambda) R_{12}(\lambda + \mu - i) \mathcal{U}_2^-(\mu) &= \mathcal{U}_2^-(\mu) R_{12}(\lambda + \mu - i) \mathcal{U}_1^-(\lambda) R_{12}(\lambda - \mu), \\ R_{12}(\mu - \lambda) \mathcal{U}_1^{+t_1}(\lambda) R_{12}(-\lambda - \mu - i) \mathcal{U}_2^{+t_2}(\mu) &= \\ = \mathcal{U}_2^{+t_2}(\mu) R_{12}(-\lambda - \mu - i) \mathcal{U}_1^{+t_1}(\lambda) R_{12}(\mu - \lambda). \end{aligned} \quad (6)$$

Будем называть алгебры $\mathcal{U}^+(\lambda)$ и $\mathcal{U}^-(\lambda)$ соответственно правой и левой алгебрами отражения. Рассматривая их произведение во вспомогательном пространстве, получаем, что след

$$\tau(\lambda) = \text{tr}\{\mathcal{U}^+(\lambda) \mathcal{U}^-(\lambda)\} \quad (7)$$

задает трансфер-матрицу. Матрица $\tau(\lambda)$ представляет собой основной объект нашего исследования: поскольку $[\tau(\lambda), \tau(\mu)] = 0$, она порождает семейство коммутирующих операторов, допускающих одновременную диагонализацию.

Построение в явном виде интегрируемых открытых граничных условий для моделей, возникающих из алгебры Янга–Бакстера с R -матрицей (3), основано на представлениях $K^\pm(\lambda) = K(\lambda \pm i/2, \pm)$ алгебр отражений (6), задаваемых в виде матриц размера 2×2 :

$$K(\lambda, \pm) = \frac{1}{\alpha^\pm} \begin{pmatrix} \alpha^\pm + \lambda \sin \vartheta^\pm & \lambda e^{-i\xi^\pm} \cos \vartheta^\pm \\ \lambda e^{i\xi^\pm} \cos \vartheta^\pm & \alpha^\pm - \lambda \sin \vartheta^\pm \end{pmatrix}.$$

Заметим, что $\text{tr} K(\lambda, \pm) = 2$ и $K(0, \pm) = I_2$. Это решение уравнений отражения было найдено впервые независимо в работах [11], [12] и рассмотрено в рациональном пределе в работе [13]. В настоящей работе мы используем параметризацию граничных матриц в терминах угловых координат $(\vartheta^\pm, \xi^\pm)$, задающих направление граничного поля, модуль которого равен $h^\pm = i/\alpha^\pm$, как в гамильтониане (1). Считая величины $\vartheta^\pm$ вещественными, рассмотрим два класса граничных полей: с одной стороны,

вещественные поля $\xi^\pm$ приводят к эрмитовым гамильтонианам, с другой стороны, при чисто мнимых полях $\xi^\pm$ граничные условия типа переноса допускают накачку частиц в цепочку.

Следуя подходу Складина, введем спиновые степени свободы, рассмотрев одевание

$$\mathcal{U}^-(\lambda) = T(\lambda - i/2)K(\lambda - i/2, -)\sigma^y T^\dagger(-\lambda - i/2)\sigma^y = \begin{pmatrix} \mathcal{A}^-(\lambda) & \mathcal{B}^-(\lambda) \\ \mathcal{C}^-(\lambda) & \mathcal{D}^-(\lambda) \end{pmatrix},$$

которое является представлением левой алгебры отражений. В совокупности с представлением в комплексных числах

$$\mathcal{U}^+(\lambda) = \frac{1}{2}K(\lambda + i/2, +) = \begin{pmatrix} \mathcal{A}^+(\lambda) & \mathcal{B}^+(\lambda) \\ \mathcal{C}^+(\lambda) & \mathcal{D}^+(\lambda) \end{pmatrix}$$

правой алгебры отражений это приводит к явному представлению трансфер-матрицы (7), нормированной условием $\tau(i/2) = (d_q T)(-i/2)$. Из $\tau(\lambda)$ гамильтониан (1) получается с помощью формулы $\mathcal{H}_{XXX} = i\partial \ln \tau(i/2)$. По построению собственные значения $\Lambda(\lambda)$ матриц $\tau(\lambda)$ являются полиномиальными функциями спектрального параметра с асимптотикой

$$\Lambda(\lambda) \sim \frac{(-1)^L \operatorname{ch} \phi}{\alpha^+ \alpha^-} \lambda^{2L+2}, \quad \operatorname{ch} \phi \equiv \sin \vartheta^+ \sin \vartheta^- + \cos \vartheta^+ \cos \vartheta^- \cos(\xi^+ - \xi^-). \quad (8)$$

2. TQ-УРАВНЕНИЯ

Для диагональных граничных матриц, т.е. в случае $|\vartheta^\pm| = \pi/2$, спектр модели можно получить на основе алгебраического анзаца Бете, дающего собственные значения $\Lambda(\lambda)$ трансфер-матрицы. Собственные векторы получаются с помощью действия операторов $\mathcal{B}^-(\lambda)$ на полностью поляризованный псевдовакуум $|0\rangle$ [10]. В общем случае непараллельных граничных полей состояние $|0\rangle$ перестает быть собственным для трансфер-матрицы, и алгебраический метод становится неприменимым. Использование более общих алгебраических подходов (см., например, работы [6], [7]) ограничено системами малых размеров. Другая возможность состоит в применении функциональных методов. В рамках метода Складина разделения переменных спектральную задачу можно переписать в виде разностного уравнения второго порядка – так называемого TQ-уравнения [8], [14]. То же уравнение можно получить, применяя метод слияния [5], [9], с помощью которого можно генерировать соотношения между коммутирующими трансфер-матрицами, действующими в квантовом пространстве спиновой цепочки и получающимися из R-матриц, которые действуют во вспомогательных пространствах старших размерностей. Исходя из соотношения (7) определим новую трансфер-матрицу t_2 как

$$t_2(\lambda - i) = t_1(\lambda - i)t_1(\lambda) - \delta(\lambda), \quad \tau(\lambda + i/2) = \frac{(-1)^L}{\alpha^+ \alpha^-} t_1(\lambda).$$

Фактически она представляет собой низший ($k = 2$) уровень бесконечной иерархии уравнений

$$t_k(\lambda - i(k-1)) = t_{k-1}(\lambda - i(k-1))t_1(\lambda) - \delta(\lambda)t_{k-2}(\lambda - i(k-1)), \quad (9)$$

где $k = 2, 3, \dots$ и $t_0(\lambda) \equiv 1$, с некоторыми скалярными функциями, которые зависят только от параметров $\alpha^\pm$, входящих в граничные матрицы:

$$\delta(\lambda) = \frac{(\lambda^2 + 1)^{2L+1}}{4\lambda^2 + 1} (\lambda - \alpha^+) (\lambda + \alpha^+) (\lambda - \alpha^-) (\lambda + \alpha^-).$$

Формально иерархию слияний (9) можно решить для матрицы $t_1(\lambda - i/2)$, связанной с трансфер-матрицей цепочки спина $1/2$: полученное выражение

$$t_1(\lambda - i/2) = \frac{t_k(\lambda + i/2 - i(k+1) + i)}{t_{k-1}(\lambda + i/2 - ik)} + \delta(\lambda - i/2) \frac{t_{k-2}(\lambda + i/2 - i(k-1) - i)}{t_{k-1}(\lambda + i/2 - ik)}$$

относится к классу TQ -уравнений общего вида [5]. В самом деле, перенормируя трансфер-матрицы слияния $t_k(\lambda)$ в соответствии с формулой

$$t_k(\lambda) = \frac{1}{2^k} \frac{\text{sh}((k+1)\phi)}{\text{sh } \phi} \left[\prod_{\ell=1}^{k-1} (\lambda + i\ell)^{2L+1} \prod_{\ell=1}^{k-1} (\lambda + i\ell + i/2)^{-1} \right] \tau_k(\lambda)$$

и предполагая существование предела $\lim_{k \rightarrow \infty} \tau_k(\lambda - ik - i/2) \equiv q(\lambda)$, получим разностное уравнение

$$\begin{aligned} \Lambda(\lambda)q(\lambda) &= \frac{(-1)^L e^\phi}{\alpha^+ \alpha^-} \frac{1}{2\lambda} (\lambda - i/2)^{2L+1} q(\lambda + i) + \\ &+ \frac{(-1)^L e^{-\phi}}{\alpha^+ \alpha^-} \frac{1}{2\lambda} (\lambda + i/2)^{2L+1} \left[\prod_{\sigma=\pm} (\lambda - i/2 - \alpha^\sigma) (\lambda - i/2 + \alpha^\sigma) \right] q(\lambda - i), \end{aligned}$$

решения которого определяют собственные значения $\Lambda(\lambda)$ трансфер-матрицы $\tau(\lambda)$. Применяя преобразование

$$q(\lambda) = (\mp 1)^{i\lambda} e^{i\lambda\phi} Q(\lambda) [\Gamma(-i\alpha^+ + 1/2 + i\lambda) \Gamma(-i\alpha^- + 1/2 + i\lambda)]^{-1},$$

можно выделить в $Q(\lambda)$ экспоненциальную зависимость от ϕ , тем самым воспроизведя TQ -уравнение, ранее полученное в рамках функционального анзаца Бете [8]:

$$\begin{aligned} \pm \Lambda(\lambda)Q(\lambda) &= \frac{(-1)^L}{2\lambda\alpha^+\alpha^-} (\lambda - i/2)^{2L+1} (\lambda - \alpha^+ + i/2) (\lambda - \alpha^- + i/2) Q(\lambda + i) + \\ &+ \frac{(-1)^L}{2\lambda\alpha^+\alpha^-} (\lambda + i/2)^{2L+1} (\lambda + \alpha^+ - i/2) (\lambda + \alpha^- - i/2) Q(\lambda - i). \quad (10) \end{aligned}$$

В дополнение к явной зависимости от $\alpha^\pm$ в (10) граничные условия входят в это уравнение через асимптотическое поведение (8) собственных значений $\Lambda(\lambda)$ трансфер-матрицы $\tau(\lambda)$.

Легко видеть, что в случае граничных условий, отвечающих $\text{ch } \phi = \pm 1$, уравнение (10) решается подстановкой четного многочлена

$$Q(\lambda) = \prod_{j=1}^M (\lambda - \lambda_j)(\lambda + \lambda_j),$$

корни λ_j которого задаются уравнениями Бете

$$\left(\frac{\lambda_j + i/2}{\lambda_j - i/2}\right)^{2L+1} \frac{\lambda_j + \alpha^+ - i/2}{\lambda_j - \alpha^+ + i/2} \frac{\lambda_j + \alpha^- - i/2}{\lambda_j - \alpha^- + i/2} = - \prod_{k=1}^M \frac{\lambda_j - \lambda_k + i}{\lambda_j - \lambda_k - i} \frac{\lambda_j + \lambda_k + i}{\lambda_j + \lambda_k - i}. \quad (11)$$

Это исчерпывает случаи применимости алгебраического анзаца Бете и случаи более общих граничных полей, приводящие к спектрально-эквивалентным моделям. С другой стороны, при $\text{ch } \phi \neq \pm 1$ для $Q(\lambda)$ неизвестно ни одного простого анзаца. При больших $|\lambda|$ из выражения (10) следует, что решение растет экспоненциально как $Q \sim e^{-i\phi\lambda}$ [8]. С помощью этого наблюдения, подкрепленного исследованиями распределений нулей и собственных значений трансфер-матриц t_k при больших k в иерархии слияния для цепочек конечной длины, можно вывести систему “обрезанных” уравнений Бете, сходную с системой (11). Решение последней можно использовать при вычислении определенных собственных значений гамильтониана (1) (см. работу [9] и рис. 1).

3. Y-СИСТЕМА И НЕЛИНЕЙНЫЕ ИНТЕГРАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

В настоящем разделе аналитические свойства собственных значений трансфер-матрицы $t_k(\lambda)$ в иерархии слияния (9) используются непосредственно для вычисления энергии основного состояния гамильтониана (1). Введем определение

$$y_k(\lambda) \equiv \frac{t_k(\lambda - ik/2)t_{k-2}(\lambda - i(k-2)/2)}{\prod_{\ell=1}^{k-1} \delta(\lambda - ik/2 + i\ell)}.$$

Из этого выражения получается так называемая универсальная форма [15] уравнений термодинамического анзаца Бете:

$$y_k(\lambda - i/2)y_k(\lambda + i/2) = (1 + y_{k-1}(\lambda))(1 + y_{k+1}(\lambda)),$$

где $k = 2, 3, \dots$ и $y_1 \equiv 0$. Вычисляя логарифмическую производную этих уравнений и производя преобразование Фурье, получим бесконечную иерархию нелинейных интегральных уравнений (НИУ) для функций y_k , ведущие члены которой задаются аналитическими свойствами функций y_k . Распределение нулей и полюсов функций y_k задает определенное собственное состояние системы.

В работе [9] мы показали, что для параметров $h^\pm = \pm(n^\pm/2 + (\alpha')^\pm)^{-1}$, где $0 < (\alpha')^\pm < 1/2$, $n^+ = n^- = n \in \mathbb{N}_0$, и при выполнении асимптотического условия $\text{ch } \phi \geq 1$ (см. (8)) собственное значение, отвечающее основному состоянию трансфер-матрицы, можно вычислить, решив бесконечную иерархию уравнений

$$\begin{aligned} \ln y_2(x) &= (L+1) \ln b_1^0(x) - \ln b_2^{n^+}(x) - \ln b_2^{n^-}(x) + s * \ln(1 + y_3), \\ \ln y_k(x) &= \ln b_1^0(x) - \ln b_k^{n^+}(x) - \ln b_k^{n^-}(x) + \\ &\quad + s * \ln(1 + y_{k-1}) + s * \ln(1 + y_{k+1}), \quad k > 2, \end{aligned} \quad (12)$$

при четном L . Заметим, что в вычислениях участвует только модуль $h^\pm$. Символом $s * f$ в формулах обозначена свертка функции f с ядром $s(x) = 1/2 \text{ch}(\pi x)$.

Рис. 1. Влияние недиагональных граничных членов на поправки, связанные с конечной длиной цепочки, к собственному значению энергии антиферромагнитного состояния с параметрами $\alpha^+ = 5i/3$ и $\alpha^- = -7i/5$ с разными знаками при различных значениях размера решетки L . Вычисления производились вплоть до $\text{ch } \phi = 1$ в рамках Y -системы (результаты показаны значками +) и сравнивались со значениями, полученными с помощью “обрезанных” уравнений Бете из работы [9] (значки $\circ$) и с помощью точной диагонализации (сплошные линии).

Тогда низшая функция $y_2(x)$ задает логарифмическую производную собственного значения с помощью интегрального представления

$$\partial \ln \Lambda(x) = \partial \ln \Lambda_g(x) - \pi \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{2} \frac{\text{sh}(\pi(x-y))}{\text{ch}^2(\pi(x-y))} \ln(1+y_2(y)), \quad (13)$$

в котором $\Lambda_g(x)$ представляет собой решение функционального уравнения

$$\Lambda_g(x+i/2)\Lambda_g(x-i/2) = \frac{(x-\alpha^+)(x-\alpha^-)}{\alpha^+\alpha^-} \frac{(x+\alpha^+)(x+\alpha^-)}{\alpha^+\alpha^-} \frac{(x^2+1)^{2L+1}}{4x^2+1}.$$

Это уравнение можно решить, перейдя в фурье-пространство [8]. В вышеприведенной иерархии ведущие члены в правой части строятся из функций

$$h_c(x) \equiv \frac{\text{ch}(\pi x) - \cos(\pi \alpha')}{\text{ch}(\pi x) + \cos(\pi \alpha')} \quad \text{для } k \in \{n+2\mathbb{N}\},$$

$$h_s(x) \equiv \frac{\text{ch}(\pi x) - \sin(\pi \alpha')}{\text{ch}(\pi x) + \sin(\pi \alpha')} \quad \text{для } k \in \{n+1+2\mathbb{N}\},$$

причем члены h_c и h_s чередуются при последовательном изменении значения индекса k . Все ведущие члены можно представить в виде матрицы следующего вида:

$$b_k^n(x) = \begin{pmatrix} \text{th}^2 |\pi x/2| & h_c(x) & h_s(x) & h_c(x) & \dots \\ 1 & 1 & h_c(x) & h_s(x) & \dots \\ 1 & 1 & 1 & h_c(x) & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix},$$

где номер строки отвечает верхнему индексу $n = 0, 1, \dots$, а номер столбца – нижнему индексу $k = 1, 2, \dots$.

Численное решение бесконечной системы уравнений вида (12) требует введения контролируемой схемы обрезания. В стандартном подходе термодинамического анзаца Бете [16], т. е. для периодических граничных условий, такое приближение обосновано тем обстоятельством, что, во-первых, только несколько первых членов НИУ содержат ненулевой ведущий член, во-вторых, асимптотическое решение

$$y_k \sim y_k^\infty = \frac{\text{sh}((k-1)\phi) \text{sh}((k+1)\phi)}{\text{sh}^2 \phi} \quad (14)$$

уже само по себе удовлетворяет иерархии (12) в пределе $x \rightarrow \pm\infty$ без ведущих членов. Заменяя $y_k(x)$ на указанное постоянное асимптотическое значение при некотором достаточно большом k , получим конечную систему НИУ, которая может быть весьма эффективно решена численно.

В случае открытых граничных условий НИУ содержат неоднородные члены на всех уровнях k , а потому асимптотические условия (14) задают лишь поведение при больших x . Тем не менее результаты нашего численного анализа с применением постоянных асимптотических выражений для y_k^∞ в качестве приближений для предельной функции, как оказалось, обеспечивают достаточно хорошую сходимость системы.

4. ПЕРСИСТЕНТНЫЙ ТОК

Выражение (13) можно использовать в качестве асимптотического приближения при $y_k^\infty > 1$ (т. е. при $\text{ch} \phi \geq 1$), при противоположных знаках граничных полей

$$h^\pm = \pm \frac{1}{n^\pm/2 + (\alpha')^\pm}, \quad 0 < (\alpha')^\pm < \frac{1}{2},$$

и при фиксированных $n^\pm \in \mathbb{N}_0$ ¹⁾. Однако изменение знака одного из параметров $h^\pm$ переводит ϕ в $\phi \pm i\pi$, но оставляет неизменными асимптотические выражения для y_k^∞ из формулы (14). Аналитическое продолжение представления (13) в точку $x = i/2$ приводит к собственному значению энергии гамильтониана (1)

$$E = i\partial \ln \Lambda(i/2) = E_g - \pi \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{2} \frac{\text{ch}(\pi y)}{\text{sh}^2(\pi y)} \ln(1 + y_2)(y). \quad (15)$$

¹⁾При выводе НИУ (12) мы ограничили граничные поля условием $n^+ = n^-$. В процессе численного решения уравнений было обнаружено, однако, что ошибка, связанная с нарушением данного условия, имеет тот же порядок, что и ошибка, возникающая в силу обрезания бесконечной иерархии (см. рис. 1).

Части энергии E_g , отвечающие внутренней и граничной частям цепочки, вычислены в работе [8], и эти результаты остаются справедливыми при произвольных граничных условиях и при всех $0 < |h^\pm| < \infty$:

$$E_g = \psi\left(\frac{|\alpha^+|}{2}\right) - \psi\left(\frac{|\alpha^+|+1}{2}\right) + \frac{1}{|\alpha^+|} + \\ + \psi\left(\frac{|\alpha^-|}{2}\right) - \psi\left(\frac{|\alpha^-|+1}{2}\right) + \frac{1}{|\alpha^-|} + \pi - 2 \ln 2 - 1 + (2 - 4 \ln 2)L, \quad (16)$$

где ψ – дигамма-функция. Поправки, задаваемые корреляциями между границами в системе конечного размера, содержатся во втором члене в выражении (15) и определяют зависимость от энергии, изображенную на рис. 1.

В рамках предложенной модели мы можем исследовать возможность возникновения персистентных токов, индуцированных граничными членами [2]. В этой связи особый интерес представляет область вблизи точно решаемой точки анзаца Бете $\sinh \phi = 1$, что предполагает возможность непертурбативного анализа флуктуаций тока в одномерной задаче диффузии [17]. При этом z -компонента локального тока между узлами m и $m+1$ имеет вид

$$J_m = \frac{1}{2}(\sigma_m^+ \sigma_{m+1}^- - \sigma_m^- \sigma_{m+1}^+).$$

Чтобы вычислить математическое ожидание оператора тока J_m в собственном состоянии гамильтониана (1), необходимо добавить соответствующий член с источником к гамильтониану. Заметим, что изменение параметра $\xi^+ \rightarrow \xi^+ + i\kappa$ в правом граничном узле L можно учесть с помощью твиста взаимодействия между спинами, расположенными в узлах с номерами m и $m+1$,

$$\sigma_m^x \sigma_{m+1}^x + \sigma_m^y \sigma_{m+1}^y \rightarrow \frac{1}{2}(e^\kappa \sigma_m^+ \sigma_{m+1}^- + e^{-\kappa} \sigma_m^- \sigma_{m+1}^+) \equiv \mathcal{H}_{m,m+1}^\kappa,$$

с применением твиста

$$R_{0j} \rightarrow M_j R_{0j} M_j^{-1} = M_0^{-1} R_{0j} M_0, \quad M = \begin{pmatrix} e^{\kappa/2} & 0 \\ 0 & e^{-\kappa/2} \end{pmatrix},$$

сохраняющего энергию и действующего в фундаментальном представлении R_{0j} , $m < j \leq L$, матрицы монодромии $T(\lambda) = R_{0L}(\lambda) \dots R_{01}(\lambda)$. Тем самым этот твист порождает искомым член с источником, с помощью которого можно получить оператор тока путем простого дифференцирования гамильтониана:

$$J \equiv \partial_\kappa \mathcal{H}_{m,m+1}^\kappa|_{\kappa=0} = \frac{1}{2}(\sigma_m^+ \sigma_{m+1}^- - \sigma_m^- \sigma_{m+1}^+).$$

В соответствии с теоремой Фейнмана–Хеллмана [18], [19] ток получается из соотношения $\langle J \rangle = \partial_\kappa \langle \mathcal{H}_{XX}^\kappa \rangle|_{\kappa=0}$ для вещественных собственных значений гамильтониана (1) с помощью замены $\xi^+ \rightarrow \xi^+ + i\kappa$. Эту величину можно получить непосредственно из выражения (12), наложив соответствующие граничные условия. Удобно работать непосредственно с Y -системой, продифференцированной по κ при $\kappa = 0$:

$$\frac{\partial_\kappa y_2}{y_2} = s * \frac{\partial_\kappa y_3}{1 + y_3}, \quad \frac{\partial_\kappa y_k}{y_k} = s * \frac{\partial_\kappa y_{k-1}}{1 + y_{k-1}} + s * \frac{\partial_\kappa y_{k+1}}{1 + y_{k+1}}. \quad (17)$$

Рис. 2. Масштабированный ток JL , полученный из Y -системы, как функция вещественного аргумента ϑ^+ при фиксированных значениях параметров $n^\pm = 2$, $(\alpha')^+ = 1/6$, $(\alpha')^- = 1/5$, $\vartheta^- = 0$, $\xi^+ = 0$ и $\xi^- = i\pi/2$ для различных значений размера цепочки L ; экстраполяция вплоть до термодинамического предела $L \rightarrow \infty$ показана значками $*$. Для сравнения приведены результаты, полученные с помощью точной диагонализации при $L = 8$ (сплошная линия).

Заметим, что данная линейная система не содержит неоднородных членов, и ее решение зависит от набора итерированных функций $\{y_k\}$. Нетривиальное решение при $\phi > 0$ можно получить, выбрав подходящие начальные значения, из асимптотических выражений (14) с учетом соотношения $\partial_\kappa y_k^\infty = \partial_\kappa \phi \partial_\phi y_k^\infty$, формул (8) и равенства

$$\partial_\phi y_k^\infty = 2 \frac{\text{sh}(k\phi) \text{ch}(k\phi) k \text{sh} \phi - \text{sh}(k\phi) \text{ch} \phi}{\text{sh}^2 \phi} \xrightarrow{\phi \rightarrow 0} \frac{2k^2(k^2 - 1)}{3} \phi,$$

которые также можно использовать для обрезания системы при $k \gg 1$. Тогда график тока на рис. 4 можно получить на основе интегрального представления

$$\langle J \rangle = -\frac{\pi}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\text{ch}(\pi x)}{\text{sh}^2(\pi x)} \frac{\partial_\kappa y_2}{1 + y_2} \Big|_{\kappa=0}. \quad (18)$$

Даже в случае $\phi = 0$, решаемом с помощью анзаца Бете, в системе может присутствовать ненулевой персистентный ток, что видно из данных, полученных, например, с помощью точной диагонализации. Поскольку при умножении $\partial_\phi y_k^\infty \rightarrow 0$

на $\partial_\kappa \phi \rightarrow \infty$ имеет место конечный предел,

$$\partial_\kappa y_k^\infty = \partial_\kappa \phi \partial_\phi y_k^\infty \sim -\frac{2ik^2(k^2 - 1)}{3} \sin(\xi^+ - \xi^-) \cos \vartheta^+ \cos \vartheta^-,$$

можно непосредственно рассмотреть интегральное представление (18), чтобы найти условие, при котором ток равен нулю, в случае, точно решаемом с помощью анзаца Бете: поскольку граничные параметры в формуле (8) подчиняются уравнению

$$\sin(\xi^+ - \xi^-) = \mp i \left(\frac{\operatorname{tg} \vartheta^+}{\cos \vartheta^-} - \frac{\operatorname{tg} \vartheta^-}{\cos \vartheta^+} \right),$$

ток в самом деле исчезает при $\vartheta^+ = \vartheta^-$ в силу обращения в ноль решения иерархии (17), $\partial_\kappa y_k = 0$ при всех $k = 2, 3, \dots$.

5. ОБЗОР РЕЗУЛЬТАТОВ И ПЕРСПЕКТИВЫ

Мы проанализировали спектральную задачу для XXX -цепочки Гейзенберга с граничными условиями общего вида, применив метод функционального анзаца Бете. Как с помощью метода Складина разделения переменных [8], так и с помощью иерархии слияния, описанной в разделе 2, интегрируемые структуры, лежащие в основе этих описаний, дают возможность выразить спектральную задачу для трансфер-матрицы этой модели в терминах разностного уравнения второго порядка, или TQ -уравнения. Это уравнение необходимо дополнить условием, задающим асимптотическое поведение собственных значений трансфер-матрицы. Для решеточных моделей с компактной реализацией симметрии решение этого функционального уравнения, как правило, получается с помощью полиномиального анзаца для Q -функций. Уравнения Бете, задающие корни многочлена Q , можно получить непосредственным образом. Такой анзац не приводит, однако, к решению TQ -уравнения в случае граничных условий общего вида: при этом нарушается асимптотическое поведение собственных значений (см. работы [8], [20]).

Альтернативный подход состоит в применении аналитических свойств собственных значений трансфер-матрицы с целью преобразовать иерархию слияния в бесконечный набор связанных нелинейных интегральных уравнений (см. раздел 3). В случае граничных параметров, в которых $\operatorname{sh} \phi > 1$, мы вывели данные уравнения для собственного значения, эволюционирующего в антиферромагнитное основное состояние цепочки с параллельными граничными полями. Зависимость от размера системы в уравнениях присутствует только в ведущих членах. На основе НИУ мы представили первые результаты для спинового тока в присутствии недиагональных граничных полей; эти результаты находятся в полном согласии с данными, полученными с помощью точной диагонализации систем малого размера.

Остается целый ряд открытых проблем, которые будут предметом дальнейших исследований. До сих пор описание спектральной задачи в терминах иерархии НИУ ограничивалось описанием основного состояния антиферромагнитной цепочки Гейзенберга при $\operatorname{sh} \phi > 1$. Чтобы распространить этот подход на низколежащие возбужденные уровни над этим основным состоянием или на ферромагнитную часть

спектра, необходимо принимать в расчет различия в аналитических свойствах соответствующих собственных значений трансфер-матрицы. Необходимо идентифицировать эти собственные значения и вычислить получающиеся при этом ведущие члены НИУ.

Кроме того, остаются технические сложности, затрудняющие численное решение НИУ, в особенности при больших значениях $\text{ch } \phi$. Эти сложности могут быть преодолены с помощью подбора точного обрезания бесконечной иерархии уравнений, похожего на обрезание для $sl(2)$ -модели [21]. К тому же случай $0 < \text{ch } \phi < 1$, отвечающий эрмитовым граничным членам в гамильтониане (1), не описывается представленным подходом. В этом диапазоне параметров аналитические свойства функций y_k изменяются. Для вывода НИУ необходима схема, отличная от той, которая использовалась при выводе уравнений (12), и похожая на схему, которая применялась для исследования возбужденных состояний периодической XXZ -цепочки [22].

Наконец, представленные в настоящей работе методы необходимо распространить на более общие модели. Для анизотропных XXZ -цепочек с недиагональными граничными членами такое обобщение может быть основано на соответствующих TQ -уравнениях, которые были получены с помощью процедуры слияния в работе [5]. Функциональный подход к построению спектра этой модели позволит вычислить флуктуации тока в эквивалентной неравновесной задаче: XXZ -модель можно отобразить на асимметричный процесс исключения, описывающий диффузию частиц в твердом ядре в случае размерности один [17]. Дальнейшее развитие возможно на основе различных начальных представлений алгебры Янга–Бакстера (4), например на основе систем со старшими спинами или на основе спиновых бозонных моделей типа Янеса–Кумминга с “противоположно вращающимися” членами, которые нарушают $U(1)$ -симметрию [20].

Благодарности. Работа поддержана Deutsche Forschungsgemeinschaft (гранты № FR 737/6 и SE 1742/1-2), а также NTH School for Contacts in Nanosystems.

Список литературы

- [1] F. C. Alcaraz, M. N. Barber, M. T. Batchelor, *Ann. Phys.*, **182**:2 (1988), 280–343.
- [2] J. Cao, Y. Wang, *Nucl. Phys. B*, **792**:3 (2008), 284–299.
- [3] J. Cao, H.-Q. Lin, K.-J. Shi, Y. Wang, *Nucl. Phys. B*, **663**:3 (2003), 487–519.
- [4] R. I. Nepomechie, *J. Phys. A*, **37**:2 (2004), 433–440, arXiv: hep-th/0304092.
- [5] W.-L. Yang, R. I. Nepomechie, Y.-Z. Zhang, *Phys. Lett. B*, **633**:4–5 (2006), 664–670, arXiv: hep-th/0511134.
- [6] P. Baseilhac, K. Koizumi, *J. Statist. Mech.*, **9** (2007), 09006, 27 pp., arXiv: hep-th/0703106.
- [7] W. Galleas, *Nucl. Phys. B*, **790**:3 (2008), 524–542, arXiv: 0708.0009.
- [8] H. Frahm, A. Seel, T. Wirth, *Nucl. Phys. B*, **802**:3 (2008), 351–367, arXiv: 0803.1776.
- [9] H. Frahm, J. H. Grelík, A. Seel, T. Wirth, *J. Phys. A*, **44**:1 (2011), 015001, 19 pp., arXiv: 1009.1081.
- [10] E. K. Sklyanin, *J. Phys. A*, **21**:10 (1988), 2375–2389.
- [11] H. J. de Vega, A. González Ruiz, *J. Phys. A*, **26**:12 (1993), L519–L524.
- [12] S. Ghoshal, A. Zamolodchikov, *Internat. J. Modern Phys. A*, **9**:21 (1994), 3841–3885, arXiv: hep-th/9306002.
- [13] P. P. Kulish, *Low-Dimensional Models in Statistical Physics and Quantum Field Theory* (Schladming, Austria, March 4–11, 1995), Lecture Notes in Physics, **469**, eds. H. Grosse, L. Pittner, Springer, Berlin, 1996, arXiv: hep-th/9507070.

- [14] E. K. Sklyanin, *Quantum Group and Quantum Integrable Systems* (Tianjin, China, April 5–13, 1991), Nankai Lectures in Mathematical Physics, ed. M. L. Ge, World Scientific, Singapore, 1992, arXiv: hep-th/9211111.
- [15] A. Kuniba, T. Nakanishi, J. Suzuki, *Internat. J. Modern Phys. A*, **9**:30 (1994), 5215–5266, arXiv: hep-th/9309137.
- [16] M. Takahashi, *Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1999.
- [17] J. de Gier, F. H. L. Essler, *J. Statist. Mech.*, **12** (2006), P12011, 44 pp.
- [18] R. P. Feynman, *Phys. Rev.*, **56**:4 (1939), 340–343.
- [19] H. Hellman, *Einführung in die Quantenchemie*, Deuticke, Leipzig, 1937.
- [20] L. Amico, H. Frahm, A. Osterloh, T. Wirth, *Nucl. Phys. B*, **839**:3 (2010), 604–626, arXiv: 1005.5681.
- [21] J. Suzuki, *J. Phys. A*, **32**:12 (1999), 2341–2359, arXiv: cond-mat/9807076.
- [22] A. Klümper, J. R. Reyes Martínez, C. Scheeren, M. Shiroishi, *J. Stat. Phys.*, **102**:3–4 (2000), 937–951, arXiv: cond-mat/0004379.