

Σολιτόνια και Θερμοδυναμική ενός Ολοκληρώσιμου Μαγνητικού Συστήματος

N. Θεοδωρακόπουλος και N. X. Μπακάλης

Κέντρο Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών
Α. Βασ. Κωνσταντίνου 48, 116 35 ΑΘΗΝΑ

Το ιστροπικό πρότυπο με λογαριθμικές αλληλεπιδράσεις μεταξύ πρώτων γειτόνων είναι το μόνο γνωστό κλασσικό διάκριτο μαγνητικό σύστημα που επιδέχεται ακριβείς σολιτονικές λύσεις (πλήρως ολοκληρώσιμο). Το σύνολο των αλληλεπιδρώντων σολιτονίων είναι δυνατόν να περιγραφεί πλήρως, σε κλασσικό επίπεδο, τις θερμοδυναμικές ιδιότητες του ανωτέρω προτύπου. Αυτό που είναι λιγώτερο προφανές, και που προκύπτει από την αριθμητική επίλυση των σχετικών ολοκληρωτικών εξισώσεων, είναι ότι, σε χαμηλές θερμοκρασίες, οι βασικές προβλέψεις του (ημι)κλασσικού αερίου αλληλεπιδρώντων σολιτονίων και του καθαρά κβαντικού αναπτύγματος Bethe για το πρότυπο Heisenberg με spin 1/2, ευρίσκονται σε πλήρη αντιστοιχία.

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Το χαμιλτονιανό πρότυπο

$$H = -JS^2 \sum_{n=1}^N \ln(S^2 + \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1}) \quad (1)$$

περιγράφει N διανύσματα σπίν μήκους S , ευνοεί την σιδηρομαγνητική τάξη και είναι το μόνο γνωστό διάκριτο μαγνητικό σύστημα με την ιδιότητα της πλήρους ολοκληρωσιμότητας σε κλασσικό επίπεδο. Η δυναμική του χαρακτηρίζεται από σολιτόνια με εσωτερικό βαθμό ελευθερίας (envelope solitons) [1-4]. Η ημικλασσική κβάντωση έχει ήδη μελετηθεί [5] και το σολιτονικό φάσμα ευρίσκεται σε πλήρη αντιστοιχία με το φάσμα του προτύπου Heisenberg. Στο όριο χαμηλών ενεργειών τα δύο φάσματα ταυτίζονται.

Στην ειδική περίπτωση $S=1/2$ το πρότυπο Heisenberg επιδέχεται λύση μέσω του αναπτύγματος Bethe [6] και η ασυμπτωτική (κβαντική) συμπεριφορά των θερμοδυναμικών μεγεθών έχει μελετηθεί με βάση την αριθμητική επίλυση του αναπτύγματος [7,8]. Μία αναλυτική εξεύρεση των χαρακτηριστικών εκθετών και σταθερών δέν κατέστη ως τώρα δυνατή. Κατά συνέπεια το μονοδιάστατο ιστροπικό πρότυπο Heisenberg, ένα από τα θεμελιώδη παραδείγματα της κβαντικής φυσικής, εξακολουθεί να παρουσιάζει άγνωστες πτυχές.

Στην εργασία αυτή αξιοποιούμε την ιδιότητα της πλήρους ολοκληρωσιμότητας του προτύπου (1) για να αναδιατυπώσουμε την [κλασσική] στατιστική μηχανική στον χώρο φάσεων των σολιτονίων. Τα χαρακτηριστικά (μικροσκοπικά) μεγέθη, όπως η διαθέσιμη πυκνότητα καταστάσεων εξαρτώνται από τις ημιενέργειες που προκύπτουν σαν λύσεις του "σολιτονικού αναπτύγματος Bethe" [9], δηλαδή της αναδιατυπωμένης στατιστικής μηχανικής.

α. Οι σολιτονικές λύσεις χαρακτηρίζονται από δύο παραμέτρους w, k , όπου $0 < w < \infty$ και $0 < k < \pi$. Συναρτήσει των δύο αυτών παραμέτρων είναι δυνατόν να ευρεθούν η ενέργεια E , η μαγνήτιση M και η κανονική ορμή P που αντιστοιχούν σε μία σολιτονική λύση [5].

β. Για την περιγραφή του χώρου φάσεων, όπως αυτός διαμορφώνεται από τα αλληλεπιδρώντα σολιτόνια, απαιτείται η γνώση της χωρικής μετατόπισης (space-shift) που προκύπτει από την αλληλεπίδραση δύο σολιτονίων. Αξιοποιώντας την ισοδυναμία με την διάκριτη μη γραμμική εξίσωση Schrödinger (DNLS), μπορούμε να υπολογίσουμε αυτήν την μετατόπιση [10,11]

$$\Delta(w, k; w', k') = \frac{1}{2w} \ln \left[\frac{\cosh 2(w' + w) - \cos 2(k - k')}{\cosh 2(w' - w) - \cos 2(k - k')} \right] \quad (2)$$

γ. ο αριθμός καταλήψεως $n(\Gamma)$ που αντιστοιχεί στο σημείο $\Gamma = (w, k)$ του χώρου φάσεως δίδεται από τον ορισμό της ημιενέργειας $\epsilon(\Gamma) = -k_B T \ln[n(\Gamma)]$ και την ολοκληρωτική εξίσωση

$$\epsilon(\Gamma) = E(\Gamma) + (1/2\pi\beta) \int d\Gamma' \Delta(\Gamma', \Gamma) \exp[-\beta\epsilon(\Gamma')] \quad (3)$$

όπου $\beta = 1/k_B T$ και $E(\Gamma) = 8w$ η ενέργεια ενός σολιτονίου. Η εξίσωση (3) αποτελεί την βάση της στατιστικής μηχανικής για σωμάτια των οποίων η αλληλεπίδραση δεν έχει αποτέλεσμα την σκέδαση, αλλά μόνο μία χωρική μετατόπιση [12]. Σε κλασσικό επίπεδο, αγνοεί την παρουσία των γραμμικών ταλαντώσεων (μαγνόνια), προσέγγιση κατ'αρχήν δικαιολογημένη από την μορφή του ημικλασσικού φάσματος [5].

δ. Υπό την προϋπόθεση ότι $w \ll 1$ (που πληρούται σε χαμηλές θερμοκρασίες) είναι δυνατόν να προχωρήσουμε στην απλοποίηση της διδιάστατης ολοκληρωτικής εξισώσεως (3) κατά τον εξής τρόπο: κατ'αναλογία με τον φορμαλισμό της περιόδωσης Sine-Gordon [13] προσεγγίζουμε την χωρική μετατόπιση με τον τύπο

$$\Delta(w, k; w', k') = (2\pi/w) \min(w, w') \delta(k - k') \quad (4)$$

Αναμένεται ότι η προσέγγιση θα είναι ασυμπτωτικά επιτυχής άν το k παραμένει μεγαλύτερο του w δηλ. $w \leq T, k \leq \sqrt{T}$. Σ' αυτήν την περίπτωση τα σολιτόνια που έχουν διαφορετική τιμή της παραμέτρου k "αποσυνδέονται" και το πρόβλημα ανάγεται στην επίλυση της μονοδιάστατης ολοκληρωτικής εξισώσεως

$$\beta\epsilon(w, k) = 8\beta w + 8 \int_0^{\infty} dw' \frac{\min(w, w')}{(w'^2 + \sin^2 k)^2} \exp[-\beta\epsilon(w', k)] \quad (5)$$

Τα βασικά θερμοδυναμικά μεγέθη απαιτούν περιορισμένη γνώση της συναρτήσεως $\beta\epsilon(w, k)$. Συγκεκριμένα, χρειαζόμαστε τα μεγέθη $v_0(k, \beta) =$

$\lim_{w \rightarrow 0} \partial[\beta\epsilon(w, k)]/\partial w$ και $C_{-}(k, \beta) = \lim_{w \rightarrow \infty} [\beta\epsilon(w, k) - v_{-}w]$, όπου $v_{-} = \lim_{w \rightarrow \infty} \partial[\beta\epsilon(w, k)]/\partial w = 8\beta$. Συναρτήσει των μεγεθών v_0 και C_{-} , η ολική πυκνότητα των σολιτονίων είναι

$$n_s = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi/2} dk \left[1 - \left(\partial v_0 / \partial v_{-} \right)_k \right] \quad (6)$$

και η ολική ενέργεια

$$E = -\frac{1}{\pi} \int_0^{\pi/2} dk \quad \partial C_{\infty} / \partial \ln \beta \quad (7)$$

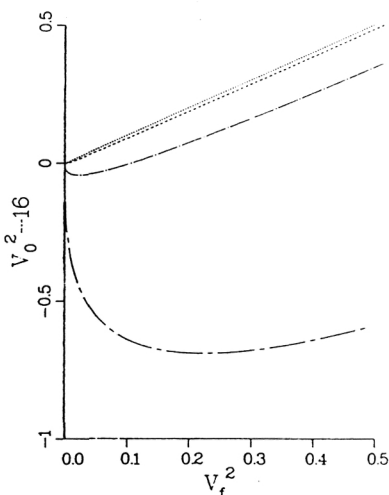
ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΣΧΟΛΙΑ

Η ολοκληρωτική εξίσωση (5) αντιστοιχεί στην συνήθη διαφορική εξίσωση

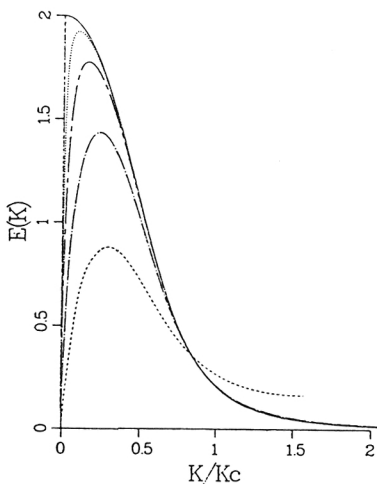
$$\frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{8}{(1+at^2)^2} \exp(-x) \quad (8)$$

όπου $x \leftrightarrow \beta e$, $t \leftrightarrow w/\sin^2 k$ και $a = \sin^4 k$, με την αρχική συνθήκη $x(0)=0$ και την τελική συνθήκη $v_{\infty} = \lim dx/dt = 8\beta \sin^2 k$. Αν θεωρήσουμε το μη αυτόνομο μηχανικό σύστημα $^t \pi$ που περιγράφει η εξίσωση (8), είναι σαν να ζητείται η αρχική ταχύτητα $v_0 = dx/dt(t=0)$ και η τελική θέση $C_{\infty} = \lim [x(t) - v(t)t]$ ως συνάρτηση των β και k (που ορίζουν τα v_{∞} και a). Η αριθμητική επίλυση της εξισώσεως (9) οδηγεί στα εξής συμπεράσματα:

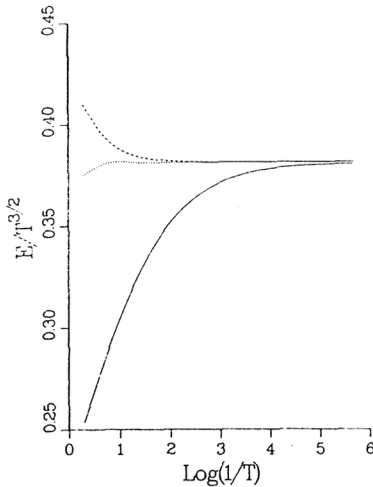
- (i) η "ταχύτητα" v_0 σαν συνάρτηση της v_{∞} φθάνει πολύ σύντομα το ασυμπτωτικό όριο $\beta \rightarrow \infty$ (Σχ.1).
- (ii) η συνάρτηση $E(k) = -(1/\pi) \partial C_{\infty} / \partial \ln \beta$ (πυκνότητα σολιτονικής ενέργειας)



Σχ.1: Το τετράγωνο της αρχικής ταχύτητας v_0^2 του μηχανικού συστήματος (8) ως συνάρτηση του τετραγώνου της τελικής ταχύτητας v_{∞}^2 για διάφορες τιμές του β . Η διακεκομμένη γραμμή αντιστοιχεί στο όριο $\beta \rightarrow \infty$. Οι υπόλοιπες τρεις καμπύλες αντιστοιχούν, από πάνω προς τα κάτω, σε $\beta=100, 10$ και 1 αντιστοίχως.



Σχ.2: Η ενεργειακή πυκνότητα $E(k) = -\partial C_{\infty} / \partial \ln \beta$ ως συνάρτηση του k/k_c , όπου $k_c = \beta^{-1/2}$, για διάφορες τιμές του β . Η συνεχής γραμμή αντιστοιχεί στο όριο $\beta \rightarrow \infty$. Οι υπόλοιπες τέσσερις καμπύλες αντιστοιχούν, από πάνω προς τα κάτω, σε $\beta=10^6, 10^4, 10^2$ και 1 αντιστοίχως.



Σχ.3: Το πηλίκιο $E/T^{3/2}$, όπου E η ολική ενέργεια του συστήματος, ως συνάρτηση της θερμοκρασίας (συνεχής γραμμή). Στο ίδιο διάγραμμα φαίνεται το διπλάσιο της πυκνότητας των σολιτονίων n_s , όπως αυτή υπολογίζεται από τις εξισώσεις (6) και (8) (διάστικτη γραμμή). Τέλος η διακεκομμένη καμπύλη αδεικνύει το ίδιο μέγεθος όταν η σταθερά a στο δεξιό σκέλος της (8) λαμβάνει την τιμή μηδέν (scaling limit).

που εμφανίζεται στο ολοκλήρωμα (7) πλησιάζει και αυτή το ασυμπτωτικό όριο, αν και με λιγώτερο ταχύ ρυθμό (Σχ.2).

(iii) αναλυτικότερα, η μεν ενέργεια πλησιάζει την τιμή $0.3814 T^{3/2}$, η δε πυκνότητα σολιτονίων την τιμή $0.1907 T^{1/2}$ ("αραιό αέριο σολιτονίων") (Σχ.3). Αυτό είναι συνεπές με την αρχή της ισοκατανομής της ενεργείας και προκύπτει από την "κλασσική" λογική της μεθόδου που εφαρμόζουμε. Η τιμή της σταθεράς $2(2\pi)^{1/2}/\Gamma(1/4)^2 = 0.3814$ αντιστοιχεί σε 1.0787 αν γίνει η απαραίτητη μετατροπή για $s=1/2$, και απέχει ελάχιστα από την τιμή 1.042 που προκύπτει από την θεωρία των (μη αλληλεπιδρώντων) μαγνόνων. Η τιμή αυτή βέβαια βρίσκεται μέσα στα όρια της ακρίβειας εκτενών αριθμητικών υπολογισμών του αναπτύγματος Bethe [7,8].

(iv) Συμπερασματικά, η σολιτονική διατύπωση της θερμοδυναμικής του κλασσικού προτύπου (1), αγνοώντας τα μαγνόνια, οδηγεί, στο όριο $T \rightarrow 0$ σε αποτελέσματα ταυτόσημα με εκείνα του χβαντικού αναπτύγματος Bethe.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Y. Ishimori, J. Phys. Soc. Jpn. 51, 3414 (1982)
- [2] L. D. Faddeev, in: Recent advances in field theory and statistical mechanics, Proc. Les Houches Summer School 1982, eds. J. B. Zuber and R. Stora (North-Holland, 1984).
- [3] F. D. M. Haldane, J. Phys. C 15, L1309 (1982)
- [4] N. Papanicolaou, J. Phys. A 20, 3637 (1987)
- [5] N. Theodorakopoulos, Phys. Lett. A 130, 249 (1988)
- [6] H. Bethe, Z. Phys. 71, 205 (1931)
- [7] P. Schlottmann, Phys. Rev. Lett. 54, 2131 (1985); Phys. Rev. B 33, 4880 (1986)
- [8] M. Takahashi and M. Yamada, J. Phys. Soc. Jpn. 54, 2808 (1985)
- [9] N. Theodorakopoulos and E.W. Weller, Phys. Rev. B 37, 6200 (1988)
- [10] N. Theodorakopoulos, unpublished
- [11] N. J. Ablowitz and J. F. Ladik, J. Math. Phys. 17, 1011 (1976)
- [12] C. N. Yang and C. P. Yang, J. Math. Phys. 10, 1115 (1969)
- [13] K. Sasaki, Phys. Rev. B 33, 2214, (1986)