

反铁磁链的自旋 Peierls 相变*

王治国 丁国辉 许伯威

(上海交通大学应用物理系, 上海 200030)

(1998 年 4 月 29 日收到; 1998 年 8 月 27 日收到修改稿)

通过费米-玻色变换将一维自旋 1/2 反铁磁链映射为连续玻色场形式, 讨论了模型基态能量和激发态能量, 证明了此系统存在自旋 Peierls 相变, 并给出了模型基态能量密度与晶格畸变大小的关系. 数值计算的结果验证了上述理论的正确性.

PACC: 7120; 0370; 0550

1 引 言

格点间具有自旋相互作用的一维磁系统是不稳定的. 在有限温度下, 这类系统趋于二聚化或称为自旋 Peierls 态. 最近, 具有自旋 Peierls 态的无机化合物 CuGeO_3 的发现^[1] 重新引起了人们研究这类一维自旋磁系统的兴趣^[2-6]. Castilla 等人^[6] 提出一维反铁磁 Heisenberg 模型可以从理论上解释二聚化现象. 本文选取格点间电子具有交错相互作用的一维自旋 1/2 反铁磁 Heisenberg 链来研究二聚化效应. 交错相互作用反铁磁链在单态基态和三态激发态之间存在能隙^[7]. 能隙和格点链的畸变大小有关. 这里首先采用玻色化方法和高斯波泛函方法从理论上得到系统的基态与系统晶格畸变之间的关系, 其关系表明系统晶格畸变越大, 基态的能量越低, 肯定了这类系统一定存在二聚化效应(即自旋 Peierls 相变). 结果同时说明基态和激发态之间存在的能隙也是晶格畸变大小的函数. 最后, 在有限尺度条件下计算了系统的基态能量, 得到了和理论基本一致的结果.

2 连续化和玻色化形式

格点电子具有交错相互作用的一维自旋 1/2 反铁磁 Heisenberg 链模型的哈密顿量可以写为

$$H = \sum_n \left[\frac{1}{2} (1 + (-1)^n \delta) (S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+) + \Delta (1 + (-1)^n \delta) S_n^z S_{n+1}^z \right]. \quad (1)$$

δ 表示模型晶格畸变, 其最大值为 1, 此时晶格间相对位移为晶格常数 a . 在 $\Delta = 1, \delta = 0$ 时模型简化为各向同性自旋 1/2 反铁磁 Heisenberg 模型. $\Delta = 0, \delta = 0$ 时模型为自旋 1/2 XY 模型.

我们对模型(1)实施 Jordan-Wigner 变换, 令

* 国家自然科学基金(批准号: 19675026)资助的课题.

$$c(n) = e^{i\pi \sum_{j=1}^{n-1} S^+(j) S^-(j)} S^-(n), \quad (2)$$

并引入连续费米场算符 $\psi(x)$, 将算符在两个费米点附近展开,

$$c_n = \sqrt{a} \psi(x) = \sqrt{a} [e^{ik_F x} \psi_L + e^{-ik_F x} \psi_R] = \sqrt{a} [i^n \psi_L + i^{-n} \psi_R], \quad (3)$$

再运用连续化条件

$$\psi(x+a) + \psi(x-a) = 2\psi(x), \quad \psi(x+a) - \psi(x) = a\partial\psi/\partial x, \quad (4)$$

可得到格点反铁磁链的连续哈密顿量

$$\begin{aligned} H = & a \int dx [i\psi_L^\dagger(x) \partial\psi_L(x) - i\psi_R^\dagger(x) \partial\psi_R(x)] + \delta \int dx [i\psi_R^\dagger(x) \psi_L(x) - i\psi_L^\dagger(x) \psi_R(x)] \\ & + 4\Delta a \int \psi_R^\dagger(x) \psi_R(x) \psi_L^\dagger(x) \psi_L(x) dx - 2\Delta a \int [\psi_R^\dagger(x) \psi_L(x) + \psi_L^\dagger(x) \psi_R(x)]^2 dx. \end{aligned} \quad (5)$$

上式中存在左右运动子 ψ_R, ψ_L 的耦合, 模型仍无法直接求解. 为简化之, 引入费米-玻色变换^[8]

$$\psi_R(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon}} e^{i\sqrt{4\pi}\phi_R(x)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon}} \exp[i\sqrt{\pi}(\phi(x) - \int_{-\infty}^x \Pi(y) dy)], \quad (6a)$$

$$\psi_L(x) = \frac{i}{\sqrt{2\pi\epsilon}} e^{-i\sqrt{4\pi}\phi_L(x)} = \frac{i}{\sqrt{2\pi\epsilon}} \exp[-i\sqrt{\pi}(\phi(x) + \int_{-\infty}^x \Pi(y) dy)]. \quad (6b)$$

在变换中, 参量 ϵ 是为了消除紫外发散而引入的大动量截断的倒数, 对于格点模型正好可

取 $\epsilon = a$. 考虑对易关系 $[\phi_R(x), \phi_L(y)] = \frac{i}{4}$, 从(6a, b)得到

$$\psi_R^\dagger(x) \psi_R(x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} (\partial_x \phi(x) + \partial_0 \phi(x)), \quad \psi_L^\dagger(x) \psi_L(x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} (\partial_x \phi(x) - \partial_0 \phi(x)), \quad (7a)$$

$$\psi_R^\dagger(x) \psi_L(x) = \frac{-i}{2\pi\epsilon} e^{-i\sqrt{4\pi}\phi(x)}, \quad \psi_L^\dagger(x) \psi_R(x) = \frac{i}{2\pi\epsilon} e^{i\sqrt{4\pi}\phi(x)}. \quad (7b)$$

这样我们就可以把模型的哈密顿量写成相互作用玻色场的形式

$$\begin{aligned} H = & a \int \frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{2\Delta}{\pi}\right) \Pi^2(x) + \left(1 + \frac{2\Delta}{\pi}\right) (\partial_x \phi(x))^2 \right] dx \\ & - \int \frac{\delta}{\pi a} \cos(\sqrt{4\pi}\phi(x)) dx + \int \frac{\Delta}{\pi^2 a} \cos(2\sqrt{4\pi}\phi(x)) dx. \end{aligned} \quad (8)$$

3 模型的基态能量和能隙

对上节得到的哈密顿量的玻色化形式进行重新标度, 令

$$\tilde{\Pi}(x) = \left[\frac{1 - \frac{2\Delta}{\pi}}{1 + \frac{2\Delta}{\pi}} \right]^{\frac{1}{4}} \Pi(x), \quad \tilde{\phi}(x) = \left[\frac{1 + \frac{2\Delta}{\pi}}{1 - \frac{2\Delta}{\pi}} \right]^{\frac{1}{4}} \phi(x), \quad (9)$$

则有

$$H = a \left\{ \int_{\mathcal{V}_F} \frac{1}{2} [\tilde{\Pi}^2(x) + (\partial_x \tilde{\phi}(x))^2] dx - \int \frac{\delta}{\mathcal{V}_F \pi a^2} \cos(\beta \tilde{\phi}(x)) dx + \int \frac{a}{\beta^2} \cos(\beta \tilde{\phi}(x)) dx \right\}, \quad (10)$$

$$\nu_F = \sqrt{\left(1 - \frac{2\Delta}{\pi}\right)\left(1 + \frac{2\Delta}{\pi}\right)}, \beta^2 = 16\pi \sqrt{\frac{1 - \frac{2\Delta}{\pi}}{1 + \frac{2\Delta}{\pi}}},$$

$$aa^2 = \frac{16\pi\Delta}{\pi + 2\Delta}, \beta^2 = 4\pi \sqrt{\frac{1 - \frac{2\Delta}{\pi}}{1 + \frac{2\Delta}{\pi}}}. \quad (11)$$

在哈密顿量(10)中, 因为 $\beta > \beta'$, 所以哈密顿量中第一个相互作用项对模型能量的影响要比第二项大. 我们考虑 Coleman 相变条件^[9,10] $\beta^2 = 8\pi$, 对应 $\Delta = 3\pi/10$, 此时哈密顿量中第二项相互作用项对模型能量的贡献就为零. 这时哈密顿量可简化为

$$H = a\nu_F \int \left\{ \frac{1}{2} [\tilde{\Pi}^2(x) + (\partial_x \tilde{\phi}(x))^2] - \frac{\alpha'}{\beta^2} \cos(\beta' \tilde{\phi}(x)) \right\} dx, \quad (12)$$

$$\beta'^2 = 2\pi, \alpha' = \frac{\delta\beta'^2}{\nu_F \pi a^2} = \frac{5}{2a^2} \delta, \nu_F = \frac{8}{10}. \quad (13)$$

很显然, 此时模型等价于 sine-Gordon 模型. 这样我们就可采用高斯波泛函方法很方便地讨论模型的能态. 在高斯波泛函的基态波函数基础上, 模型的能量密度为^[11]

$$\varepsilon(m^2) = \frac{1}{2} I_0(m^2) - \frac{m^2}{4} I_1(m^2) - \frac{\alpha'}{\beta^2} Z(m^2). \quad (14)$$

其中 m 为系统的重正化质量, 满足重正化质量方程

$$m^2 = \alpha' Z(m^2), \quad (15)$$

$$Z(m^2) = \exp\left(-\frac{\beta'^2}{4} I_1(m^2)\right), \quad (16)$$

$$I_0(m^2) = \int \frac{d^d p}{2\pi} \sqrt{p^2 + m^2}, \quad I_1(m^2) = \int \frac{d^d p}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{p^2 + m^2}}. \quad (17)$$

在重正化质量方程(15)中, 积分 $I_1(m^2)$ 是发散的. 为了消除发散, 我们引入动量空间的紫外截断 Λ , 则可得到

$$Z = \exp\left(-\frac{1}{2} \ln \frac{\sqrt{\alpha'^{-1} \Lambda^2 + \sqrt{\alpha'^{-1} \Lambda^2 + Z}}}{\sqrt{Z}}\right). \quad (18)$$

结合本模型的特点, 令 $(2\Lambda)^{-1} = a$, 并考虑重正化质量比动量截断小得多, 则

$$Z = \left(\frac{4}{ma}\right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (19)$$

所以

$$m = \alpha'^{\frac{2}{3}} \sqrt[3]{\frac{a}{4}} = \left(\frac{5}{4}\right)^{\frac{2}{3}} \delta^{\frac{2}{3}} a^{-1}, \quad (20)$$

$$\varepsilon(m^2) = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{(2a)^2} (1 + m^2(2a)^2)^{\frac{1}{2}} - \frac{m^2}{2\pi}. \quad (21)$$

这样, 对应于一个 δ 的固定值, 系统基态和激发态之间存在能隙, 能隙的大小正比于重正化质量, 即正比于 $\delta^{2/3}$, 也就是说系统的晶格畸变的大小影响着系统的能隙. 从能量密度中, 我们还可以看到系统晶格畸变的程度越强, 系统的基态能量越低, 系统也越稳定.

系统的基态能量密度随晶格畸变大小变化的关系是

$$\epsilon(0) - \epsilon(m^2) \propto m^2 \propto \delta^4. \quad (22)$$

对于实际的材料中晶格畸变会引起系统弹性能的变化.若取定晶格畸变大小为 δ ,则系统格点弹性能的增加量正比于 δ^2 .在 δ 的取值较小时,由于晶格畸变所引起的自旋相互作用能的减少量将大于弹性能的增加量,所以系统会产生晶格畸变,即存在自旋 Peierls 相变.当晶格畸变 δ 的值增大到某一确定值 δ_c 时,系统总能量达到极小值,系统达到稳定的基态. δ_c 的值即为实际材料中晶格畸变大小.

4 数值计算结果

在上节我们从理论上得到了自旋 1/2 反铁磁 Heisenberg 模型具有自旋 Peierls 相变.系统有晶格畸变时的基态能量密度和系统没有晶格畸变时的基态能量密度的差与晶格畸变强度的三分之四次方成正比.本节我们用数值计算方法来分析反铁磁 Heisenberg 模型的性质.我们采用 Lanczos 方法^[12]计算有限长度反铁磁 Heisenberg 链的基态能量.有限长度反铁磁 Heisenberg 链的基态是由自旋方向顺序相反的态组成.为了得到基态能量密度,我们将有限格点链的基态能量除于其对应的格点数,即用单个自旋的平均能量 ϵ 来表示能量密度.我们计算了格点数分别取 8, 10, 12, 14, 16(由于计算机本身的原因无法计算更大格点数时的能量),参量 δ 取从 0 到 1, 间隔为 0.01 时模型的基态能量密度;结果列于表 1.

表 1 能量密度 ϵ (作为 δ 的函数)的值

δ	N=8	N=10	N=12	N=14	N=16
0.00	-0.43158	-0.43503	-0.43578	-0.43638	-0.43829
0.01	-0.43301	-0.43586	-0.43670	-0.43769	-0.43936
0.02	-0.43436	-0.43672	-0.43789	-0.43917	-0.44065
0.03	-0.43567	-0.43781	-0.43935	-0.44077	-0.44213
0.04	-0.43704	-0.43923	-0.44101	-0.44250	-0.44375
0.05	-0.43858	-0.44092	-0.44284	-0.44433	-0.44549
0.06	-0.44033	-0.44283	-0.44478	-0.44625	-0.44733
0.07	-0.44229	-0.44489	-0.44683	-0.44825	-0.44926
0.08	-0.44442	-0.44706	-0.44896	-0.45032	-0.45127
0.09	-0.44668	-0.44931	-0.45116	-0.45246	-0.45334
0.1	-0.44904	-0.45165	-0.45343	-0.45466	-0.45549
0.2	-0.47573	-0.47757	-0.47865	-0.47932	-0.47973
0.3	-0.50543	-0.50657	-0.50719	-0.50755	-0.50776
0.4	-0.53706	-0.53775	-0.53811	-0.53831	-0.53841
0.5	-0.57021	-0.57062	-0.57082	-0.57092	-0.57097
0.6	-0.60457	-0.60479	-0.60490	-0.60495	-0.60498
0.7	-0.63990	-0.64000	-0.64005	-0.64007	-0.64009
0.8	-0.67599	-0.67604	-0.67606	-0.67606	-0.67607
0.9	-0.71273	-0.71274	-0.71275	-0.71275	-0.71275
1.0	-0.75000	-0.75000	-0.75000	-0.75000	-0.75000

为了得到能量密度 $\epsilon(\delta)$ 和 $\epsilon(0)$ 的差与参量 δ 的函数关系, 我们假定

$$\epsilon_N(0) - \epsilon_N(\delta) = A\delta^{\lambda(N)}, \quad (23)$$

则得到 $\lambda(N)$ 与 N 的关系, 见表 2.

表 2 $\lambda(N)$ 与 N 的关系

N	8	10	12	14	16	∞
$\lambda(N)$	1.2396	1.30967	1.26691	1.2206	1.25801	1.2591

从 $\lambda(N)$ 的值近似相等可以验证, 我们的假设是正确的. $N \rightarrow \infty$ 时 $\lambda(\infty)$ 的值是利用统计平均值对有限格点模型进行外推得到的.

5 结果与讨论

从理论角度和数值计算方法都得到了一维自旋 1/2 反铁磁 Heisenberg 模型的基态能量密度. 从两种方法得到的结果可以看到: 对于具有电子交错相互作用的自旋 1/2 反铁磁 Heisenberg 模型, 基态能量密度和模型的晶格畸变强度有着密切的关系, 随着模型的晶格畸变强度的出现和增大, 模型的基态能量密度变低, 当考虑由晶格畸变在实际材料中产生的弹性能的增加时, 则系统在某一确定畸变值时能量密度达到极小, 因此在电子交错相互作用的反铁磁 Heisenberg 模型中存在自旋 Peierls 相变.

从理论中得到不存在二聚化结构时模型的基态能量密度和有二聚化结构出现时模型的基态能量密度的差与晶格畸变程度的三分之四次方成正比, 数值计算给出的幂次略小于理论估计值. 这一方面是因为数值计算中计算的是有限个格点的情况, 存在一些误差; 另一方面是我们在理论中使用模型在连续化极限下的高斯波泛函近似, 可能与格点模型的数值计算产生差异.

- [1] M. Hase, I. Terasaki and K. Uchinokura, *Phys. Rev. Lett.*, **70**(1993), 3651.
- [2] J. Riera and A. Dobry, *Rhys. Rev.*, **B51**(1995), 16098.
- [3] S. Haas and E. Dagotto, *Phys. Rev.*, **B52**(1995), 14396.
- [4] A. Dobry and J. A. Riera, *Phys. Rev.*, **B56**(1997), R2912.
- [5] M. C. Martin, M. Hase, K. Hirota, *et al.*, *Phys. Rev.*, **B56**(1997), 3173.
- [6] G. Castilla, S. Chakravarty and V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.*, **75**(1995), 1823.
- [7] M. Nishi, O. Fujita and J. Akimitsu, *Phys. Rev.*, **B50**(1994), 6508.
- [8] R. Shanker, *Int. Mod. Phys.*, **B4**(1990), 2371.
- [9] S. Coleman, *Phys. Rev.*, **D11**(1975), 2088.
- [10] Z. J. Chen, Y. M. Zhang, B. W. Xu, *Commun. Theor. Phys.*, **23**(1995), 297.
- [11] B. W. Xu and Y. M. Zhang, *J. Phys.*, **A25**(1992), L1039.
- [12] H. H. Roomany, H. W. Wyld and L. E. Holloway, *Phys. Rev.*, **D21**(1980), 1577.

SPIN-PEIERLS TRANSITION OF THE ANTIFERROMAGNETIC CHAIN*

WANG ZHI-GUO DING GUO-HUI XU BO-WEI

(*Department of Applied Physics, Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200030*)

(Received 29 April 1998; revised manuscript received 27 August 1998)

ABSTRACT

By using the Fermi-Bose transformation, the antiferromagnetic chain is mapped into the bosonic field, and the energy density of the ground state and the excite states of the model are given. The relationship between the energy density of the ground state and the strength of distortion of the model is obtained. The results show that there exists a spin-Peierls transition in the model. Finally, the numerical simulation is performed to verify the above theoretical prediction.

PACC: 7120; 0370; 0550

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 19675026).