

磁场对一维 Heisenberg 链低能行为的影响*

高 阳 章豫梅 陈 鸿

(同济大学物理系, 上海 200092)

(1999 年 12 月 13 日收到, 2000 年 2 月 21 日收到修改稿)

用 Jordan-Wigner 变换和玻色化方法研究了一维 1/2 自旋 Heisenberg 链. 在外加磁场作用下, 模型的 Fermi 速度与 Fermi 动量均被改变, 从而玻色化过程也受到影响. 对一维 Heisenberg 链的反铁磁相 (AFM) 与顺磁相 (PM) 分别做了讨论, 得出了模型基态能及磁化与外加磁场的关系并给出了公度-非公度阈值磁场 h'_{cl} 及上阈值磁场 h_{c2} .

关键词: Heisenberg 链, 磁场, 强关联

PACC: 7510J, 7560E, 7550E

1 引 言

近年来, 在外加磁场下的量子自旋链引起了人们的广泛兴趣^[1-5]. 对于各向异性的 XXZ 链, 在反铁磁态 (AFM) 下, 单粒子基态与第一激发态之间有一个能隙, 但在顺磁态 (PM) 下却没有能隙. 这就导致了在外加磁场下两种态表现出不同的特性. 在反铁磁态中, 有一个阈值磁场 (h'_{cl}) 导致公度 (C) 非公度 (IC) 相变^[6]. 当外场 (h) 小于 h'_{cl} 时, 能隙仍然存在; 当 $h > h'_{cl}$ 时, 能隙消失, 磁化 m 随 h 的增大而增大, 直到在另一阈值磁场 h_{c2} 达到饱和. 另一方面, 对于顺磁态, 由于能带的连续性, C-IC 相变不存在, 但在上阈值磁场 h_{c2} 处的部分磁化 (PtM) 饱和和磁化 (SFM) 相变仍然存在.

事实上, 很早以前就已经有关于在纵场下的 XXZ 链的严格解^[1]. 但这种严格解不能给出模型的所有信息, 因此, 各种近似方法已应用到此模型上以得到清晰的低能图象. 文献 [2] 用实空间重整化群 (RSRG) 方法定性得出了模型的低能行为, 并分析了参数空间中的重整化流. 文献 [3] 用玻色化方法对模型映射^[6]得到了阈值磁场 h_{cl} . 虽然方法很巧, 但其中有一个缺陷: 文中磁场能是在玻色化后的哈密顿量中引入的, 其 Fermi 速度仍是引入磁场前的速度 (对应于 $m = 0$). 但我们知道对于自旋链, 在 Jordan-Wigner 变换后, 单粒子能谱的 Fermi 速度与 Fermi 动量均依赖于 m . 因此我们应在线性化和玻

色化前将 Fermi 图象中关于 m 的整个 Hilbert 空间分解为一系列关于 m 的子空间. 当无外场时, PM 和 AFM 相中的基态的 m 均为零, 故而只需考虑 $m = 0$ 的 Hilbert 子空间. 但外场的引入会导致能带交叉, $m \neq 0$ 子空间中的基态能可能小于 $m = 0$ 的, 所以我们必须考虑所有的 Hilbert 子空间基态能, 其最小值才是整个 Hilbert 空间的基态能.

2 无外场的 XXZ 链

模型的哈密顿量为^[6,7]

$$H = J \sum_i \left[\frac{1}{2} (S_i^- S_{i+1}^+ + S_i^+ S_{i+1}^-) + \Delta S_i^z S_{i+1}^z \right], \quad (1)$$

其中 $J > 0$, Δ 是各向异性参量. 由严格结果^[1], $\Delta < -1$ 为铁磁相, $-1 < \Delta < 1$ 为顺磁相, $\Delta > 1$ 为反铁磁相. 通过 Jordan-Wigner^[8]变换, 我们得到方程 (1) 的 Fermi 图象,

$$H_F = J \sum \left[\frac{1}{2} (C_i^- C_{i+1} + \text{H. c.}) + \Delta (C_i^+ C_{i+1} - \frac{1}{2} \chi C_{i+1}^+ C_i - \frac{1}{2}) \right]. \quad (2)$$

由标准 Abelian 玻色化^[9]可得到上式的玻色形式

$$H = J a v_F \int dx : \frac{1}{2} [(\partial_x \Phi)^2 + \Pi^2] : - J a \int dx \frac{\Delta}{2\pi^2 a^2} \cos(\beta \Phi) + E_F, \quad (3)$$

其中 $v_F = \sqrt{1 + 4\Delta/\pi}$, $\beta^2 = 16\pi/\sqrt{1 + 4\Delta/\pi}$, a 为晶

* 国家自然科学基金 (批准号: 19904007) 资助的课题.

格常量 Φ , Π 满足 $[\Phi(x), \Pi(y)] = i\delta(x-y)$; E_F 为 Fermi 图象中的零点能, 此项的引入是为了使 Fermi 图象的真空态(填满到 $k_F = \pi/2a$)与 Bose 图象的真空态相等. 由重整化质量法^[10], 我们可用如下方程的基态来近似哈密顿量(3)的基态,

$$H = Jav_F \int dx \left\{ \frac{1}{2} [(\partial_x \Phi)^2 + \Pi^2] + \frac{1}{2} \mu^2 \Phi^2 \right\} + E_F - E_B + \text{const.}, \quad (4)$$

其中 μ 为重整化质量, E_B 为 Bose 图象中的零点能, 此项的引入是为了去掉 Bose 算符的正规顺序.

以方程(4)的基态作为方程(3)的近似基态对方程(3)的 μ 作变化, 经计算, 我们可得到每个格点上的近似基态能,

$$e_0 = E_0/JN = e_{SG} + e_F - e_B, \quad (5)$$

其中

$$e_{SG} = \frac{v_F}{4\pi} \sqrt{1 + \gamma^2} - \frac{\Delta}{2\pi^2} \left(\frac{\gamma}{1 + \sqrt{1 + \gamma^2}} \right)^{\beta/4\pi}, \quad (6)$$

$$e_F = \langle 0 | H_F | 0 \rangle = -\frac{1}{\pi} - \frac{\Delta}{\pi^2}, \quad (7)$$

$$e_B = \frac{1}{4\pi} \left(1 + \frac{2\Delta}{\pi} \right), \quad (8)$$

其中 $\gamma = \mu/\Delta$, Δ 为带宽截止^[11], μ 满足变分条件

$$\partial_\mu e_0(\mu) = 0. \quad (9)$$

由此方程可得到

$$\gamma^2 - \frac{\Delta\beta^2}{2\pi^2 v_F} \left(\frac{\gamma}{1 + \sqrt{1 + \gamma^2}} \right)^{\beta/4\pi} = 0. \quad (10)$$

PM 和 AFM 相间的临界各向异性参量 Δ_0 可由方程(10)决定. 在 AFM 相中, $\mu > 0$; 在 PM-AFM 相变点, $\lim_{\Delta \rightarrow \Delta_0^+} \mu = 0$. 这样, 我们得到 $\Delta_0 \approx 2.6$, 此结果与严格解 $\Delta_0 = 1$ 相比有差异, 这是因为玻色化方法所包含的大动量散射截止与动量转移截止之间存在复杂关系^[11].

3 外加磁场的影响

我们在一个 N 格点的 XXZ 链中加入一个沿 z 方向的纵场, 则哈密顿量为

$$H = J \sum_i \left[\frac{1}{2} (S_i^- S_{i+1}^+ + S_i^+ S_{i+1}^-) + \Delta S_i^z S_{i+1}^z - h S_i^z \right], \quad (11)$$

其中 $h (> 0)$ 是以 $g\mu_B$ 为单位的场强. 由于 z 方向的总磁矩仍为运动常量, 所以哈密顿量(11)式的本征态空间可分解为一系列关于 m 的子空间的和. 对

每个子空间,

$$m = M/N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle 0 | S_i^z | 0 \rangle. \quad (12)$$

在线性化与玻色化之前, 必须注意到磁场的引入使 Fermi 动量从 $\pm k_F$ 变到 $\pm k'_F = \pm k_F (1 + 2m)^{3/4}$, 其中 m 取值从 0 到 1/2. 这种变化使哈密顿量(3)式中的 $\cos(\beta\Phi)$ 项中的宗量由 $(\beta\Phi)$ 变为 $(\beta\Phi + 2k'_F x)$. 此时, 存在一个临界磁化 m_0 : 当 $m > m_0$, Φ 随 x 变化很快, $\cos(\beta\Phi + 2k'_F x)$ 项由于振荡而可忽略. 从物理上来看, 磁场的引入导致 Fermi 面的移动^[3], 整个 Hilbert 空间中的基态与激发态之间的能隙消失, 我们称之为非公度相; 当 $m < m_0$, Φ 随 x 缓慢变化, $\cos(\beta\Phi + 2k'_F x)$ 项起作用, 故能隙仍存在. 我们称之为公度相. 与文献[3]不同, 我们认为使 m 从零变到非零的磁场 h_{cl} 并非 C-IC 相变点, 而使系统能隙消失的临界磁场 h'_{cl} 才是真正的公度-非公度相变点.

3.1 非公度相的行为

类比于哈密顿量(3)式, 当 $m > m_0$ 时, 哈密顿量退化为

$$H = Jav_F \int dx \left\{ \frac{1}{2} [(\partial_x \tilde{\Phi})^2 + \tilde{\Pi}^2] + \tilde{E}_F - \tilde{E}_B + \tilde{H}_m \right\}, \quad (13)$$

其中 $\tilde{v}_F = \sqrt{1 + \frac{4\Delta}{\pi} \cos(\pi m) \cdot \cos(\pi m)}$. 对应每一个固定的 m , 基态能为

$$\tilde{e}_0(m) = \tilde{e}_{\text{free}} + \tilde{e}_F - \tilde{e}_B + \tilde{e}_m, \quad (14)$$

其中

$$\tilde{e}_{\text{free}} = \frac{\tilde{v}_F}{4\pi}, \quad (15)$$

$$\tilde{e}_F = -\frac{1}{\pi} \cos(\pi m) - \frac{\Delta}{\pi^2} \cos^2(\pi m) + \Delta m^2, \quad (16)$$

$$\tilde{e}_B = \frac{1}{4\pi} \cos(\pi m) + \frac{\Delta}{2\pi^2} \cos^2(\pi m), \quad (17)$$

$$\tilde{e}_m = -m \cdot h. \quad (18)$$

为求最低基态能, 对上式中的 m 变分,

$$\partial_m \tilde{e}_0(m) = 0. \quad (19)$$

此式决定了 m 与 h 的关系,

$$\tilde{h}(m) = \left(-\frac{\Delta \cos(\pi m)}{4\pi \tilde{v}_F} + \frac{3\Delta}{2\pi} \right) \sin(2\pi m) + \left(\frac{5}{4} - \frac{\tilde{v}_F}{4\cos(\pi m)} \right) \sin(\pi m) + 2\Delta m. \quad (20)$$

当 $h > h_{cl}$ 时, 最低基态能出现在磁化饱和处 ($m =$

1/2), 其值 $\tilde{e}_0 = -\frac{1}{2}h + \frac{\Delta}{4}$ 从 Bose 与 Fermi 哈密顿量(13)和(2)中均可得出.

3.2 公度相的行为

随着磁场的引入, 当场强 $h < h_{cl}$ 时, 磁化 m 保持为零; 当 $h_{cl} < h < h'_{cl}$ 时, 磁化 $m < m_0$, $m = 0$ 的基态与 $m \neq 0$ 的基态间的拓扑型激发——所有从

$$\begin{aligned} \Delta e &= \frac{1}{JN}Ja \left[\frac{L}{2\pi} \int_{k_F}^k dk \alpha(k) + \int_{-k}^{k_F} dk \alpha(k) \right] \\ &= \frac{\pi v_F}{2} \left[m \sqrt{m^2 + \left(\frac{\gamma}{\pi v_F} \right)^2} + \left(\frac{\gamma}{\pi v_F} \right)^2 \ln \frac{m + \sqrt{m^2 + \left(\frac{\gamma}{\pi v_F} \right)^2}}{\gamma/\pi v_F} \right], \end{aligned} \quad (22)$$

其中色散关系 $\omega(k) = \sqrt{\mu^2 + [v_F(k - v_F)]^2}$. 上式中对 m 作变分便可得到磁化与磁场的关系

$$h(m) = \pi v_F \sqrt{m^2 + \left(\frac{\gamma}{\pi v_F} \right)^2}. \quad (23)$$

4 一些特殊的结果

至此, 我们得出了系统基态能量与磁化, 外场与磁化的函数关系. 下面我们分析由以上式子得到的一些特殊结果:

1) $m = 1/\chi$ 饱和点) 方程(20)给出上阈值磁场 $h_{cl} = \Delta + 1$; 方程(14)–(17)给出基态能, 这些结果与严格解完全一致^[1].

2) $\Delta = \alpha$ (XY 模型) 方程(14)–(18)给出: $\tilde{e}_0 = -\frac{1}{\pi} \cos(\pi m) - mh$. 此结果也与严格解符合^[1].

3) $m \rightarrow 0 +$ 方程(23)给出: $h(m) \approx \lambda \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{m}{\gamma/\pi v_F} \right)^2 \right]$. 由此可得出 $h_{cl} = \gamma$ (由定义, γ 为无量纲的有效质量, 即能隙) 及 $m \propto \sqrt{h - h_{cl}}$. 这也与文献[3]的结果一致.

4) 方程(20)决定了 C-IC 相变点的临界磁场 $h'_{cl} = \tilde{h}(m_0)$. 其中 m_0 是由方程(14)及方程(21)共同决定的临界磁化. 与文献[3]不同的是, h'_{cl} 不同于产生磁化的临界磁场 h_{cl} ($= h(0)$).

图 1(a) 给出了顺磁相中每格点基态能(e_0)与磁化(m)的关系. 其中 $\Delta = \Delta_0/2$. 在 PM 相中 ($\Delta = \Delta_0/2$), e_0 随 h 的引入立即下降; 但在图 1(b) 表示的 AFM 相中 ($\Delta = 2\Delta_0$), 有一个临界磁场 h'_{cl} 导致

$m = 0$ 到 $m \neq 0$ 的子拓扑型激发(某个 m 到 $m + N^{-1}$ 的激发)的和——仍然存在, 即能隙仍存在, 可以证明, 这种拓扑型激发等效于粒子在玻色低激发态中填充. 此时, 系统的基态能量为

$$e'_0 = e_0 + \Delta e + e_m, \quad (21)$$

其中 e_0 即 $m = 0$ 时由(5)式决定的基态能量, 磁场能 $e_m = -m \cdot h$, Δe 是粒子填充玻色低激发态的能量, 由低激发态的色散关系可以得到

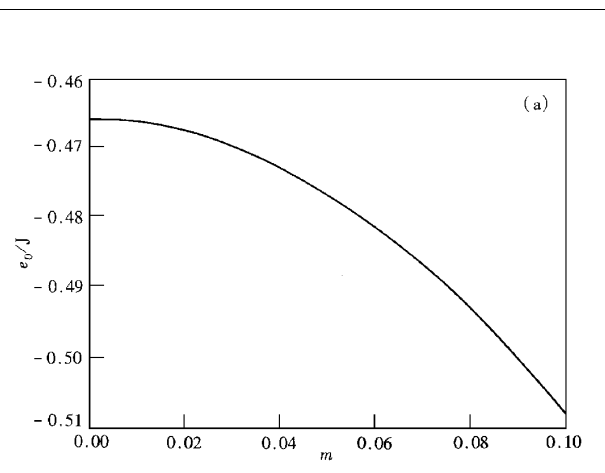


图 1(a) PM 相中基态能(e_0)与磁化(m)的关系图 参量 $\Delta = \Delta_0/2$; m 为无量纲量

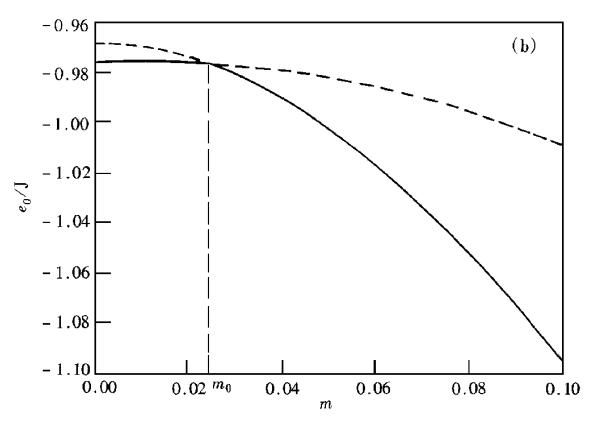


图 1(b) AFM 相中基态能(e_0)与磁化(m)的关系图 参量 $\Delta = 2\Delta_0$, 实线代表整个 Hilbert 空间的基态能; m 为无量纲量

C-IC 相变; 当 $h < h'_{cl}$ 时, e_0 由方程(21)决定, 对应于 $m < m_0$ 系统为公度相; 当 $h > h'_{cl}$ 时, 能隙消失,

基态被磁化, 系统为非公度相, $m > m_0$ 的子空间的基态能量小于 $m < m_0$. 这样, 整个空间的基态能由方程 (14) 决定直到在上阈值磁场 h_{c2} 达到饱和. 在图 2

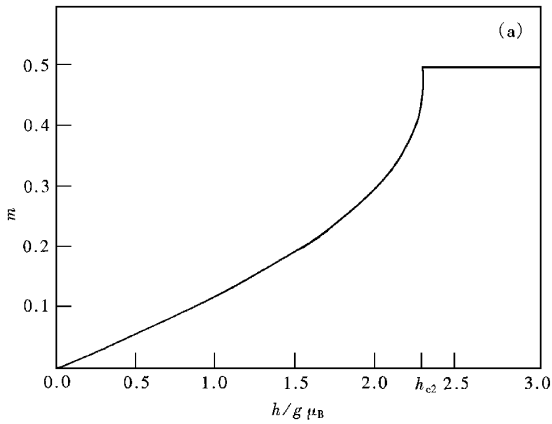


图 2(a) PM 相中磁化 (m) 与外磁场 (h) 的关系图 参量 $\Delta = \Delta_0/2$; m 为无量纲量

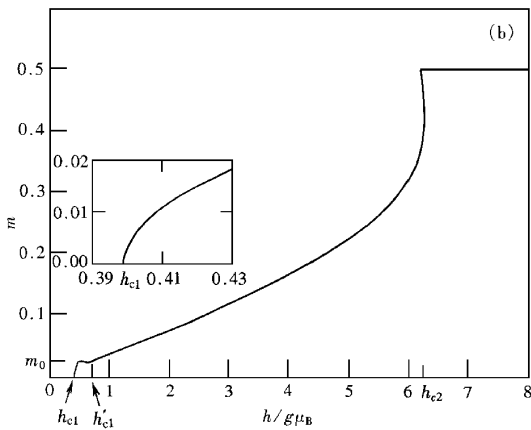


图 2(b) AFM 相中磁化 (m) 与外磁场 (h) 的关系图 参量 $\Delta = 2\Delta_0$

(a) 和图 2(b) 中我们给出了 $\Delta = \Delta_0/2$ 和 $2\Delta_0$ 时的磁化曲线. 在 PM 相中, 随着磁场的引入立即有磁化产生, 但在 AFM 相中, 在 h_{c1} 以下, m 保持为零, 当 $h_{c1} < h < h'_{c1}$ 时, $m \neq 0$ 但能隙仍存在, 系统保持为不公度相. 在 h'_{c1} 处, 发生 C-IC 相变, m 单调上升直到在 h_{c2} 达到饱和. 同时, 我们发现在图 2(b) 中, 当 $h \rightarrow h'_{c1}$ 时出现了不连续, 这是由于在相变点附近, 相互作用非常强, 我们采用的近似方法产生的误差较大. 但只要各向异性参量 Δ 不是非常大, 玻色化方法就能给出相当合理的结果. 最后我们相信由于磁场的引入, 模型的关联函数及相图也会发生改变.

5 结 语

我们用玻色化方法研究了纵场下各向异性的 XXZ 链. 对比关于 m 的不同 Hilbert 子空间的基态能, 得到了模型的最低基态能量. 同时计算了 PM 与 AFM 相的磁化. 在 PM 相中, 基态随着外场的出现而立即磁化, 因而基态能也立即降低. 但在 AFM 相中, 在场强 $h < h_{c1}$ 时, 系统磁化保持为零, 随着外场的增大, 在达到下阈值 h'_{c1} 前, 系统仍为不公度相. 在临界点发生 C-IC 相变. 在两种相中均有上阈值 $h_{c2} = \Delta + 1$ 使磁化达到饱和. 最后, 本文结果的一些特殊情况与严格解作了比较.

总之, 我们相信玻色化方法对处理自旋问题是一个相对简单的而有效的方法.

作者感谢中国科学院理论物理研究所覃绍京副教授的有益讨论.

[1] C. N. Yang, C. P. Yang, *Phys. Rev.*, **150**(1966), 321; **150**(1966), 327; **151**(1966), 258.
 [2] A. Langari, *Phys. Rev.*, **B58**(1998), 14467.
 [3] R. Chitra, T. Giamarchi, *Phys. Rev.*, **B55**(1997), 5816.
 [4] M. E. Zhitomirsky, I. A. Zaliznyak, *Phys. Rev.*, **B53**(1996), 3482.
 [5] I. Harada, S. Mori, *Physica*, **B246-247**(1998), 250.
 [6] H. J. Schulz, *Phys. Rev.*, **B22**(1980), 5274.

[7] A. Luther, L. Peshel, *Phys. Rev.*, **B12**(1975), 3908.
 [8] E. Fradkin, In "Field Theories of Condensed Matter Systems" (Addison-Wesley, Redwood City, 1991), Chap. 4.
 [9] R. Shankar, In "Low-Dimensional Quantum Field Theories for Condensed Matter Physics", edited by L. Yu S. Lundqvist, G. Morandi (World Scientific, 1995).
 [10] B. W. Xu, Y. M. Zhang, *J. Phys.*, **A25**(1992), 1093.
 [11] J. Solyom, *Advan. Phys.*, **28**(1979), 201; 303.

EFFECT OF EXTERNAL MAGNETIC FIELD ON LOW-ENERGY BEHAVIOR OF ONE-DIMENSIONAL HEISENBERG CHAIN*

GAO YANG ZHANG YU-MEI CHEN HONG

(*Department of Physics , Tongji University , Shanghai 200092 , China*)

(Received 13 December 1999 ; revised manuscript received 21 February 2000)

ABSTRACT

Spin-1/2 anisotropic Heisenberg chain in longitudinal external magnetic field is studied by traditional Jordan-Wigner transformation and bosonization method. In the presence of an external field , both Fermi velocity and Fermi momentum are changed , thus the bosonization procedure is also changed. The antiferromagnetic phase and paramagnetic phase are discussed and the dependence of ground state energy and magnetization on the field are calculated and depicted for some typical cases.

Keywords : Heisenberg chain , magnetic field , strong correlation

PACC : 7510J , 7560E , 7550E

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 19904007).