第 55 卷 第 8 期 2006 年 8 月
1000-3290/2006/55(08)/3880-05

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.55, No.8, August, 2006

外磁场中海森伯反铁磁模型的代数结构和压缩态解*

金 硕[1)†] 解炳昊[2)]

1)(北京航空航天大学物理系,北京 100083)

2)(北京信息工程学院,北京 100101)

(2006 年 1 月 11 日收到,2006 年 4 月 13 日收到修改稿)

外磁场中的 XYZ 海森伯反铁磁模型,其哈密顿量在自旋波近似下具有 $so(3,2)$ 李代数结构.利用代数对角化方法,可得到压缩态形式的能量本征态和相应的能量本征值.用此方法进一步讨论本征态的基本性质,并建立反铁磁模型与特定类型的双模耦合谐振子的联系.

关键词:海森伯反铁磁模型,代数对角化,压缩态

PACC:0365F,7540F

1.引 言

海森伯模型是一个基本的物理模型[1,2],对于描述和解释自旋相互作用系统的各种性质起着重要的基础性作用,因此长期以来是物理学领域里的重要研究内容之一.最近十几年的研究发现海森伯互作用也存在于非局域的自旋系统以及量子点、核自旋等物理学前沿领域[3—6],使人们认识到对此基础模型的研究仍具有广泛的应用价值[7—9].从作用性质上看,海森伯模型可分为铁磁型和反铁磁型,前者的相邻格点上价电子的自旋倾向于同向排列,后者则倾向于反向排列;从空间各方向的作用强度上看,海森伯模型可以分为 XXX,XXZ,XYZ 三类(前面的类型可看作是后面类型的特殊情况).在理论研究中,一个基本的问题就是要找到模型的精确解,即哈密顿量的精确对角化.到目前为止,对于一维自旋 1/2 的 XXX 反铁磁模型,应用 Bethe-Ansatz 方法或数值计算方法,其能谱结构的数值解已经被较好地解决[10].然而,由于多体问题自身的复杂性,对于高维及任意自旋的情况寻求严格解是极其困难的.在实际问题的研究中,普遍采用的是一种近似理论——自旋波理论[11,12].对于 XXX 和 XXZ 反铁磁模型,几十年来应用自旋波理论已给出了很好的解析结果,而对于 XYZ 反铁磁模型,作者在文献中一直没有看到类似于 XXX 和 XXZ 模型的显性解析解.对于 XXZ 反铁磁模型,其哈密顿量具有 $su(1,1)$ 代数结构,应用 $su(1,1)$ 代数对角化方法可以实现哈密顿量的对角化[13],.不同于 Bogoliubov 变换,代数对角化方法可同时得到作为压缩态的系统本征态和能量本征值.在本文中,我们将把这种方法推广到外磁场中的 XYZ 反铁磁模型.首先将论证外磁场中的 XYZ 反铁磁模型,其哈密顿量具有 $so(3,2)$ 代数结构.在此基础上,利用代数对角化方法研究模型的解析解,得到作为压缩数态的能量本征态及其相应的能量本征值,并讨论本征态的基本性质.此外,还将给出此模型与双模耦合谐振子的联系.

2.外磁场中 XYZ 海森伯反铁磁模型的 $so(3,2)$ 代数结构

外磁场中 XYZ 海森伯反铁磁模型的哈密顿量以 H_{XYZ}^{M} 表示为(取磁场沿 Z 轴方向)

$$H_{XYZ}^{M} = -J\sum_{\langle i,j\rangle}(\eta_x S_i^x S_j^x + \eta_y S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z) + \sum_i \boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{S}_i \qquad (J<0,\eta_x,\eta_y>0), \quad (1)$$

式中,$\langle i,j\rangle$ 表示近邻束缚,M 代表外磁场.取双格子近似模型,并采用 Holstein-Primakoff 变换[11]

---

* 国家自然科学基金(批准号:11447103)、北京航空航天大学'蓝天计划'和北京市教育委员会科技发展计划(批准号:KM200610772007)资助的课题.

† E-mail:jinshuo@buaa.edu.cn

$$S_a^z = -s + a^\dagger a,$$
$$S_a^\dagger = (2s)^{1/2}\left(1 - \frac{a^\dagger a}{2s}\right)^{1/2} a, \quad (2)$$
$$S_a^- = (S_a^\dagger)^\dagger,$$
$$S_b^z = s - b^\dagger b,$$
$$S_b^\dagger = (2s)^{1/2} b^\dagger\left(1 - \frac{b^\dagger b}{2s}\right)^{1/2}, \quad (3)$$
$$S_b^- = (S_b^\dagger)^\dagger,$$

式中 $a^\dagger$，a 和 $b^\dagger$，b 分别表示子格 A 和 B 上的产生、湮没玻色算子. 这里要求粒子数 $n_a = a^\dagger a$，$n_b = b^\dagger b$ 都不能超出 $2s$. 在低温低激发的情况下(大 s 近似)，哈密顿量中的四次方项可以忽略. 再应用变换

$$a_i = N^{-1/2}\sum_K \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}_i)\, a_K,$$
$$a_i^\dagger = N^{-1/2}\sum_K \exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}_i)\, a_K^\dagger, \quad (4)$$
$$b_j = N^{-1/2}\sum_K \exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}_j)\, b_K,$$
$$b_j^\dagger = N^{-1/2}\sum_K \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}_j)\, b_K^\dagger \quad (5)$$

得到自旋波近似下外磁场中的 XYZ 反铁磁模型在动量空间的哈密顿量，

$$H_{XYZ}^M = 2ZsJ\left[Ns - \left(\sum_K H_K^M - 1\right)\right], \quad (6)$$

$$\begin{aligned} H_K^M = {} & a_K^\dagger a_K + a_{-K}^\dagger a_{-K} + b_K^\dagger b_K + b_{-K}^\dagger b_{-K} \\ & + \nu_K(a_K b_{-K}^\dagger + a_{-K} b_K^\dagger + a_K^\dagger b_{-K} + a_{-K}^\dagger b_K) \\ & + \rho_K(a_K b_K + a_K^\dagger b_K^\dagger + a_{-K} b_{-K} + a_{-K}^\dagger b_{-K}^\dagger) \\ & + \mu(b_K^\dagger b_K - a_K^\dagger a_K + b_{-K}^\dagger b_{-K} - a_{-K}^\dagger a_{-K}), \end{aligned} \quad (7)$$

式中，$2N$ 是整个的格子数，

$$\nu_K = \frac{\eta_x - \eta_y}{2}\gamma_K,$$
$$\rho_K = \frac{\eta_x + \eta_y}{2}\gamma_K, \quad (8)$$
$$\mu = \frac{|\boldsymbol{B}|}{2ZsJ},$$
$$\gamma_K = Z^{-1}\sum_R \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}) = \gamma_{-K},$$

其中 R 为联系其他近邻原子的矢量，求和指标遍及所有的近邻，Z 为近邻数. 我们发现哈密顿量 $H_K^{(M)}$ 可以写成李代数 $so(3,2)$ 的生成元的线性组合，即

$$H_K^M = E_3^K + \mu F_3^K + \rho_K(E_+^K + E_-^K) + \nu_K(F_+^K + F_-^K). \quad (9)$$

$so(3,2)$ 代数共有 10 个生成元，它们的实现形式可以写成

$$\begin{aligned} E_+^K &= a_K^\dagger b_K^\dagger + a_{-K}^\dagger b_{-K}^\dagger, \\ E_-^K &= a_K b_K + a_{-K} b_{-K}, \\ E_3^K &= \frac{1}{2}(n_K^a + n_{-K}^a + n_K^b + n_{-K}^b + 2), \\ F_+^K &= a_K b_{-K}^\dagger + a_{-K} b_K^\dagger, \\ F_-^K &= a_K^\dagger b_{-K} + a_{-K}^\dagger b_K, \\ F_3^K &= \frac{1}{2}(n_K^b + n_{-K}^b - n_K^a - n_{-K}^a), \\ U_+^K &= b_{-K}^\dagger b_K^\dagger, \\ U_-^K &= b_K b_{-K}, \\ V_+^K &= a_{-K}^\dagger a_K^\dagger, \\ V_-^K &= a_K a_{-K}. \end{aligned} \quad (10)$$

此代数的非零对易关系为(略掉动量角标)

$$\begin{aligned} [E_+, E_-] &= -E_3, \\ [E_3, E_\pm] &= \pm E_\pm, \\ [F_+, F_-] &= F_3, \\ [F_3, E_\pm] &= \pm F_\pm, \\ [E_3, U_\pm] &= \pm U_\pm, \\ [F_3, U_\pm] &= \mp U_\pm, \\ [E_3, V_\pm] &= \pm V_\pm, \\ [F_3, V_\pm] &= \pm V_\pm, \\ [E_\pm, V_\mp] &= \mp F_\mp, \\ [E_\pm, V_\mp] &= \mp F_\mp, \\ [F_\pm, U_\pm] &= \pm E_\pm, \\ [E_\pm, F_\pm] &= \mp V_\pm, \\ [F_\pm, V_\mp] &= \mp E_\mp, \\ [E_\pm, U_\mp] &= \mp F_\pm, \\ [E_\pm, F_\mp] &= \mp U_\pm, \\ [V_+, V_-] &= -(E_3 + F_3), \\ [U_+, U_-] &= -(E_3 - F_3). \end{aligned} \quad (11)$$

应该指出，外磁场存在时系统的动力学代数结构为 $so(3,2)$，外磁场对应于生成元 F_3，它使得系统哈密顿量中出现的生成元个数增加. 在 $so(3,2)$ 代数结构中，$\{E_+^K, E_-^K, E_3^K\}$ 构成子代数 $su(1,1)$，而 $\{F_+^K, F_-^K, F_3^K\}$ 构成子代数 $su(2)$. 这两个子代数的生成元彼此不完全对易，即不存在 $su(1,1)\oplus su(2)$ 子代数，这使得原有的 $su(1,1)$ 和 $su(2)$ 代数方法不足以解决问题，问题的复杂性要求我们必须使用较大的框架. 另外，当参数 $\eta_x = \eta_y$ 时，系统的代数结构将退化到 $su(1,1)$ 的情况，即对应于 XXZ 反铁磁模型[13].

3. 外磁场中 XYZ 反铁磁模型的压缩态解

类似于 XXZ 反铁磁模型的情况,我们引入幺正算子[14]

$$W(r_K,\theta_K) = \exp\{r_K[\cos\theta_K E_+^K + \sin\theta_K(V_+^K - U_+^K) - \mathrm{H.C.}]\}, \tag{12}$$

式中,E_+^K,V_+^K,U_+^K 取方程(10)中的形式,r_K,θ_K 是待定的状态参数. 利用 $so(3,2)$ 对易关系式(11)以及量子力学算符公式

$$\exp(A)B\exp(-A) = B + [A,B] + \frac{1}{2!}[A,[A,B]] + \cdots, \tag{13}$$

经过冗长的计算,得到在状态参数和系统参数满足约束方程

$$\begin{aligned}
&\rho_K(\cosh^2 r_K - \cos2\theta_K\sinh^2 r_K) + \cos\theta_K\sinh2r_K = 0,\\
&\nu_K(\cosh^2 r_K + \cos^2\theta_K\sinh^2 r_K) + \mu\sin2\theta_K\sinh^2 r_K = 0,\\
&\mu\sin\theta_K\sinh2r_K + \rho_K\sin2\theta_K\sinh^2 r_K - \nu_K\cos\theta_K\sinh^2 r_K = 0
\end{aligned} \tag{14}$$

的条件下,有关系式

$$W^\dagger(r_K,\theta_K)H_K^M W(r_K,\theta_K) = \Omega_E^K E_3^K + \Omega_F^K F_3^K. \tag{15}$$

这里,

$$\begin{aligned}
\Omega_E^K &= \cosh2r_K + \rho_K\cos\theta_K\sinh2r_K,\\
\Omega_F^K &= \mu(1 + 2\sin^2\theta_K\sinh^2 r_K) + \nu_K\sin2\theta_K\sinh^2 r_K.
\end{aligned} \tag{16}$$

将方程(15)两边同时作用到 Fock 空间中的参考态 $|n_a^K,n_b^K\rangle$ 上,可得到本征方程

$$\begin{aligned}
&H_K^M W(r_K,\theta_K)|n_a^K,n_b^K\rangle\\
&= \left(\Omega_a^K n_a^K + \Omega_b^K n_b^K + \frac{1}{2}\Omega_E^K\right)W(r_K,\theta_K)|n_a^K,n_b^K\rangle,
\end{aligned} \tag{17}$$

式中,$W(r_K,\theta_K)|n_a^K,n_b^K\rangle$ 是本征态,两支非简并的磁振子的能量分别为

$$\begin{aligned}
\Omega_a^K &= \frac{\Omega_E^K + \Omega_F^K}{2},\\
\Omega_b^K &= \frac{\Omega_E^K - \Omega_F^K}{2}.
\end{aligned} \tag{18}$$

至此,得到了哈密顿量(7)式的能量本征方程. 我们看到,系统的本征态 $W(r_K,\theta_K)|n_a^K,n_b^K\rangle$ 是压缩数态[15]. 对于给定的系统参数,通过求解方程组(14),可得到状态参数 r_K,θ_K 的数值,从而确定出系统的本征态及两支磁振子的能量. 需注意的是,在系统参数确定后解方程组(14)时,可能会得到多组解,这些解在物理上并不都是合理的,而必须舍去零点振动能 $\frac{1}{2}\Omega_E^K$ 为负的解,在剩余的解中给出 Ω_E^K 最小值的那一组解对应的为基态解,在这里不详细举例说明.

4. 本征态的讨论

下面我们讨论一些对本征态的基本性质. 本征态 $W(r_K,\theta_K)|n_a^K,n_b^K\rangle$ 表达式(17)中参考数态的粒子数可以取任意非负整数,若将它们取为零,则本征态是压缩真空态,对应于系统的基态. 显然,对于不同的 K 模,零点能的取值是不同的.

在本征态 $W(r_K,\theta_K)|n_a^K,n_b^K\rangle$ 中,两子格中激发量子的平均粒子数为

$$\langle N_{a,b}^K\rangle = \frac{1}{2}[(n^K + 1)\cosh2r_K + (1 + 2\sin^2\theta_K\sinh^2 r_K) \times (n_{a,b}^K - n_{b,a}^K) - 1]. \tag{19}$$

这里 $n^K = n_a^K + n_b^K$ 代表参考数态中的总粒子数. 由此可见,参考态中的粒子数和激发量子的平均粒子数存在数值上的‘压缩’关系,本征态被称作压缩数态也可以在这种意义下来理解.

在两个子格上的自旋 Z 分量的平均值分别为

$$\langle s_A^Z\rangle = -Ns + \sum_K\langle a^\dagger a\rangle_k, \tag{20}$$

$$\langle s_B^Z\rangle = Ns - \sum_K\langle b^\dagger b\rangle_k. \tag{21}$$

应用代数方法可以得到

$$\begin{aligned}
\langle a^\dagger a\rangle_K &= \frac{1}{2}\cosh2r_K(n_a^K + n_a^{-K} + n_b^K + n_b^{-K} + 2)\\
&\quad - \frac{1}{2}(1 + 2\sin^2\theta_K\sinh^2 r_K)\\
&\quad \times (n_b^K + n_b^{-K} - n_a^K - n_a^{-K}) - 1,
\end{aligned} \tag{22}$$

$$\begin{aligned}
\langle b^\dagger b\rangle_K &= \frac{1}{2}\cosh2r_K(n_a^K + n_a^{-K} + n_b^K + n_b^{-K} + 2)\\
&\quad + \frac{1}{2}(1 + 2\sin^2\theta_K\sinh^2 r_K)\\
&\quad \times (n_b^K + n_b^{-K} - n_a^K - n_a^{-K}) - 1.
\end{aligned} \tag{23}$$

对于压缩真空态(零激发态),

$$\langle s_A^Z \rangle = -Ns + \sum_K \cosh 2r_K - 1, \tag{24}$$

$$\langle s_B^Z \rangle = Ns - \sum_K \cosh 2r_K - 1. \tag{25}$$

可见,在零激发态中,子格的自旋取向并非绝对一致,这种自旋取向一定程度上的无序性来源于反铁磁体中自旋振子的零点运动.另外,对零激发态而言,外磁场对于两子格上的自旋偏离度的影响是相同的.

5. 与双模耦合谐振子的关系

不同的物理模型,即使对称性不同其哈密顿量也可能会具有相同的代数结构.对于不同物理模型的哈密顿量,如果经过各自对应的李代数实现形式可以变换成相同的李代数生成元的组合形式,那么,它们应当具有相同的能谱结构.在文献[15]中,我们用代数对角化方法讨论过一般的具有 $so(3,2)$ 结构的双模耦合谐振子模型.实际上,方程(9)还可以通过代数生成元的具体实现对应于哈密顿量

$$H' = \frac{1-\mu}{2}a_1^\dagger a_1 - \frac{1+\mu}{2}a_2^\dagger a_2 + \rho(a_1 a_2 + a_1^\dagger a_2^\dagger) + \nu(a_1 a_2^\dagger + a_1^\dagger a_2). \tag{26}$$

这里及下面略去参数和算符中的动量指标 K.对于每一个动量模,利用公式 $a_j = (m\omega_j x_j + \mathrm{i}p_j)/\sqrt{2m\omega_j}$,上述哈密顿量可以转化到 X-P 空间的双模耦合谐振子模型

$$H' = \sum_{j=1,2}\left[\frac{p_j^2}{2m} + \frac{\omega_j^2}{2}mx_j^2\right] + \lambda_1\omega_1\omega_2 m x_1 x_2 + \lambda_2\frac{p_1 p_2}{m}. \tag{27}$$

(26),(27)式间参数对应关系为

$$\begin{aligned} &\frac{\sqrt{\omega_1\omega_2}}{2}(\lambda_1 - \lambda_2) = \rho, \\ &\frac{\sqrt{\omega_1\omega_2}}{2}(\lambda_1 + \lambda_2) = \nu, \\ &1 - 2\omega_1 = 2\omega_2 - 1 = \mu. \end{aligned} \tag{28}$$

显然,哈密顿量 H^M 和 H' 应该具有相同的能谱结构.可以看出,在自旋波近似下,外磁场中的 XYZ 反铁磁模型子格上的 K 模振动,可以映射到一个具有 X-X 和 P-P 耦合的二维的谐振子,其耦合系数由动量 K 和反铁磁模型的系统参数决定.此外,文献[16]中采用了另一种 Ansatz 方法讨论了 n 维耦合的谐振子情况,本文中的 H^M 还可与文献[16]中 $n=2$ 情况给出的哈密顿量相对应,这是因为 $so(3,2)$ 代数同构于 $sp(4,R)$ 代数.

6. 结　　论

本文研究外磁场中的 XYZ 海森伯反铁磁模型,采用不同于传统的 Bogoliubov 变换的做法,借助于系统的代数结构来研究问题,给出了在自旋波近似下的解析形式的能量本征态和本征值.虽有所局限,但这种解析解的形式相对比较明了,便于我们了解系统本征态的性质.首先,在自旋波近似下,我们得到系统哈密顿量具有 $so(3,2)$ 代数结构,即哈密顿量可以写成 $so(3,2)$ 代数生成元的线性组合形式.在此基础上,利用代数对角化方法,得到了系统在各动量模中的能量本征态和本征值,同时也得到了激发磁量子的能量值.XYZ 海森伯反铁磁模型具有丰富的本征态和能谱结构,本征态可以表示为量子光学中已经被研究过的压缩数态,本征态和本征值中的参数需要通过求解方程组来得到.从解的结果看,磁场的存在使得两支激发磁振子消除简并.我们研究了系统本征态的基本性质和相关参数,通过计算验证了反铁磁体中自旋振子的零点运动可导致一定程度的自旋取向无序性.对零激发态而言,外磁场对于两个子格上的自旋偏离度的影响是相同的.本问题的解析解退化到无外磁场的 XXZ 海森伯反铁磁模型,可得到文献[12]中的结果,这印证了解的合理性.另外,对于考虑到模型中存在各向异性晶体场的情形以及亚铁磁情形($s_a \neq s_b$),都可以应用本文中的方法来求解.由于具有相同的代数结构,外磁场中 XYZ 海森伯反铁磁模型在自旋波近似下与特定类型的双模谐振子模型存在对应关系,即子格上的 K 模振动,可以唯一地映射到一个具有 X-X 和 P-P 耦合的二维谐振子.这样,具有 X-X 和 P-P 耦合的二维谐振子的性质,可以通过参数转化反映到自旋波近似下的 XYZ 海森伯反铁磁模型中来,本文对此未作具体讨论.

[1] Heisenberg W 1928 *Phys*. *Z*. **49** 619
[2] Anderson P W 1951 *Phys*. *Rev*. **83** 1260
[3] Loss D, Divincenzo D P 1998 *Phys*. *Rev*. A **57** 120
[4] Burkard G, Loss D, Divencenzo D P 1999 *Phys*. *Rev*. B **59** 2070
[5] Imamoglu A, Awschalom D D, Burkard G *et al* 1999 *Phys*. *Rev*. *Lett*. **83** 4204
[6] Zheng S B, Guo G C 2000 *Phys*. *Rev*. *Lett*. **85** 2392
[7] Li D J, Mi X W, Deng K *et al* 2006 *Chin*. *Phys*. **15** 39
[8] Dong Z H, Feng S P 1998 *Acta Phys*. *Sin*. **7** 348
[9] Zhong J 1990 *Acta Phys*. *Sin*. **39** 486 (in Chinese) [钟 健 1990 物理学报 **39** 486]
[10] Pan F, Dai L R, Zhang D *et al* 2004 *Int*. *J*. *Mod*. *Phys*. C **15** 247
[11] Holstein T, Primakoff H 1940 *Phys*. *Rev*. **58** 1098
[12] Li Z Z 2002 *Solid State Theory* (Beijing: Higher Education Press) p77 (in Chinese) [李正中 2002 固体物理 (北京:高等教育出版社) 第 77 页]
[13] Xie B H, Zhang H B, Chen J L 2002 *Commun*. *Theor*. *Phys*. **38** 292
[14] Zhang W M, Feng D H 1990 *Rev*. *Mod*. *Phys*. **62** 867
[15] Xie B H, Jin S, Yan W X *et al* 2004 *Eur*. *Phys*. *J*. D **30** 411
[16] Pan F, Draayer J P 2001 *J*. *Phys*. *A* **34** 2637

Algebraic structure and squeezed state solutions of the *XYZ* antiferromagnetic Heisenberg model in an external magnetic field*

Jin Shuo[1)†] Xie Bing-Hao[2)]

1)(*Department of Physics*, *Beijing University of Aeronautics and Astronautics*, *Beijing* 100083, *China*)

2)(*Beijing Information Technology Institute*, *Beijing* 100101, *China*)

(Received 11 January 2006, revised manuscript received 13 April 2006)

Abstract

On the linear spin-wave frame, the *XYZ* antiferromagnetic Heisenberg model in an external magnetic field is proposed to have an $so(3,2)$ algebraic structure. The energy eigenvalues and the squeezed state solutions are obtained by making use of algebraic diagonalization. Some properties of the energy eigenvalues are investigated. The connection with the model of the special two-mode harmonic oscillators is also established.

Keywords: antiferromagnetic Heisenberg model, algebraic diagonalization, squeezed state

PACC: 0365F, 7540F

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11447103), the "Blue Sky Program" of Beijing University of Aeronautics and Astronautics, China and the Science and Technology Development Program of Beijing Committee of Education, China (Grant No. KM200610772007).

† E-mail: jinshuo@buaa.edu.cn