

# 具有长程相互作用 $S=1/2$ $XY$ 链的研究<sup>\*</sup>

李嘉亮<sup>1)2)</sup> 类淑国<sup>3)</sup>

1) 常熟理工学院江苏省新型功能材料重点建设实验室, 常熟 215500)

2) 常熟理工学院物理与电子科学系, 常熟 215500)

3) 南京工业大学应用物理系, 南京 210009)

(2008 年 1 月 6 日收到, 2008 年 2 月 22 日收到修改稿)

采用平均场 Jordan - Wigner 变换分析方法, 研究了外场中且具有  $Z$  方向均匀长程相互作用自旋  $-1/2$   $XY$  链的热力学性质, 得到了系统格点的亥姆赫兹自由能、内能、比热、磁化强度、磁化率等热力学量的解析表达式及其数值解, 讨论了系统的一级和二级相变, 数值结果在退化条件下与其他文献的结果符合很好.

关键词:  $XY$  链, 平均场 Jordan-Wigner 变换, 长程相互作用

PACC: 7540F, 3420F, 0570F

## 1. 引 言

低维磁性系统有着许多奇异的特性, 例如 Haldane 提出<sup>[1]</sup>整数自旋的反铁磁海森伯链在其无序基态和激发态之间存在一个有限能隙, 而半整数自旋的反铁磁海森伯链则无此能隙, 这一判据已经被许多理论和实验工作所证实<sup>[2,3]</sup>. 理论上一些低维磁性系统模型可以严格求解, 如低维量子自旋模型的精确 Bethe-Ansatz 数值解<sup>[4]</sup>. 实验上用低维量子自旋模型也可以描述很多实验, 如可以用来描述  $\text{Cs}_2\text{CoCl}_4$  等材料的实验结果<sup>[5]</sup>. 最近的研究发现, 低维磁性系统还可以被广泛的应用在量子信息、量子计算机、量子点、核自旋、非线性激发等前沿物理方向<sup>[6-8]</sup>, 因此, 低维磁性系统一直以来就是凝聚态物理领域理论与实验研究的热门课题之一.

在众多的低维磁性系统模型中, 各向同性及各向异性的  $XY$  模型作为研究系统的标准模型, 被应用的极为广泛<sup>[9,10]</sup>, 使用这个模型可以得到低维磁性系统丰富的物理图像.

从热力学相变的角度, 只具有最近邻相互作用的一维 Ising 模型由于没有足够的邻域不存在长程序, 因此, 有限温度时没有热力学相变, 如果将自旋相互作用由最近邻扩展到多近邻, 直至无穷即引入

长程相互作用<sup>[11]</sup>, 则在一定条件下会出现与高维 Ising 模型相似的热力学相变. 此外, 理论研究发现, 发生在极低温度( $T \rightarrow 0$ )时由量子涨落驱动而产生的量子相变, 在相变点附近体系的外参数有很小的改变就能导致体系的物理性质有本质改变. 虽然绝对零度是一个在实验上不可能实现的理想状态, 但是与零温量子临界点相联系的量子临界区有助于理解凝聚态物质系统中更广泛范围内的行为, 包括稀土磁性绝缘体、高温超导体等.

长程相互作用对系统热力学性质的影响近年来也被人们广泛的关注<sup>[12-14]</sup>, 外场中具有长程相互作用各向同性  $S=1/2$   $XY$  模型的热力学性质也得到了相应的研究. 本文采用一种平均场 Jordan-Wigner 变换分析方法对外场中,  $Z$  方向具有均匀长程相互作用各向异性的  $S=1/2$   $XY$  链进行了研究, 惊奇的发现我们的方法在退化条件下与传统的热力学 Bethe 积分方程方法及文献 [13] 在各向同性时采用的 Gaussian 积分方法相符很好. 在该理论框架下我们得到了系统非常简洁清晰的物理图像, 数值结果表明各热力学量随温度及外场的变化情况符合热力学与统计物理学规律.

## 2. 系统的模型与配分函数

外场中具有  $Z$  方向均匀长程相互作用  $S=1/2$  —

<sup>\*</sup> 江苏省新型功能材料重点建设实验室开放基金(批准号 D6KFJJ004)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: lj1502@yahoo.com.cn

维各向异性 XY 链模型的哈密顿量为

$$H = -J \sum_{j=1}^N [(1+\gamma)S_j^x S_{j+1}^x + (1-\gamma)S_j^y S_{j+1}^y] - \frac{I}{N} \sum_{j,k=1}^N S_j^z S_k^z - h \sum_{j=1}^N S_j^z, \quad (1)$$

式中  $S_j^\alpha$  ( $\alpha = x, y, z$ ) 表示格点  $j$  上的自旋  $S = \frac{1}{2}$  的自旋算符,  $N$  为系统格点的数目,  $J$  是最近邻相互作用参量,  $\gamma$  为各向异性参量,  $I$  为  $Z$  方向的长程相互作用参量,  $h$  为横向外场参量. 利用自旋升降算符

$$S_j^x = \frac{1}{2}(S_j^+ + S_j^-), \quad S_j^y = \frac{1}{2i}(S_j^+ - S_j^-), \quad (2)$$

以及 Jordan-Wigner 变换<sup>[15]</sup>

$$\begin{aligned} S_j^+ &= \left[ \exp\left(i\pi \sum_{l=1}^{j-1} c_l^\dagger c_l\right) \right] c_j^+, \\ S_j^- &= c_j \left[ \exp\left(-i\pi \sum_{l=1}^{j-1} c_l^\dagger c_l\right) \right], \\ S_j^z &= c_j^\dagger c_j - \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (3)$$

哈密顿函数(1)式可以变换为

$$\begin{aligned} H &= -J \sum_{j=1}^N \left[ \frac{1}{2}(c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\gamma}{2}(c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger + c_{j+1} c_j) \right] \\ &\quad - \frac{I}{N} \sum_{j,k=1}^N c_j^\dagger c_j c_k^\dagger c_k - (h-I) \sum_j c_j^\dagger c_j \\ &\quad + \frac{N}{2} \left( h - \frac{I}{2} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

我们采用平均场理论来处理哈密顿(4)中的四算符项, 引入自洽场  $D = c_j^\dagger c_j$  则在自洽平均场近似下, 哈密顿(4)可写为

$$\begin{aligned} H &= -\frac{J}{2} \sum_{j=1}^N \left[ (c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j) \right. \\ &\quad \left. + \gamma(c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger + c_{j+1} c_j) \right] \\ &\quad + (I - 2ID - h) \sum_{j=1}^N c_j^\dagger c_j \\ &\quad + \frac{N}{2} \left( h - \frac{I}{2} \right) + IND^2. \end{aligned} \quad (5)$$

引入傅里叶变换

$$\begin{aligned} c_j &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \exp(ikj) c_k, \\ k &= \frac{2\pi n}{N} \quad (n = 1, 2, 3, \dots, N), \end{aligned}$$

(5)式可以改写为

$$\begin{aligned} H &= - \sum_k \left[ [J \cos(k) + (h - I + 2ID)] c_k^\dagger c_k \right. \\ &\quad \left. + \frac{iJ\gamma}{2} \sin(k) (c_{-k}^\dagger c_k^\dagger + c_{-k} c_k) \right] \\ &\quad + \frac{N}{2} \left( h - \frac{I}{2} \right) + IND^2 \\ &= - \sum_k \left[ A c_k^\dagger c_k + \frac{iB}{2} (c_{-k}^\dagger c_k^\dagger + c_{-k} c_k) \right] \\ &\quad + \frac{N}{2} \left( h - \frac{I}{2} \right) + IND^2. \end{aligned} \quad (6)$$

引入 Bogoliubov 变换

$$\begin{aligned} c_k &= U_k \alpha_k + iV_k \alpha_{-k}^\dagger, \\ c_k^\dagger &= U_k \alpha_k^\dagger - iV_k \alpha_{-k}, \\ U_{-k} &= U_k, \quad V_{-k} = -V_k. \end{aligned}$$

将上式代入(6)式系统的哈密顿函数  $H$  为

$$\begin{aligned} H &= - \sum_k \left[ \sqrt{A^2 + B^2} \alpha_k^\dagger \alpha_k - \frac{1}{2} \sqrt{A^2 + B^2} + \frac{1}{2} A \right] \\ &\quad + \frac{N}{2} \left( h - \frac{I}{2} \right) + IND^2, \end{aligned} \quad (7)$$

式中  $\alpha_k^\dagger \alpha_k$  是对角化之后系统的粒子数算符由费米子特性系统的配分函数可表为

$$\begin{aligned} Z &= \exp\left[-\frac{\beta N}{2} \left( h - \frac{I}{2} \right) - \beta IND^2\right] \\ &\quad \times \text{Tr} \left[ \exp \sum_k \beta \left[ \sqrt{A^2 + B^2} \alpha_k^\dagger \alpha_k \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{2} \sqrt{A^2 + B^2} + \frac{1}{2} A \right] \right], \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \ln Z &= -\frac{\beta N}{2} \left( h - \frac{I}{2} \right) - \beta IND^2 \\ &\quad + \sum_k \ln(1 + e^{\beta \epsilon_k(D)}) - \frac{1}{2} \sum_k \beta \epsilon_k(D) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_k \beta A, \end{aligned} \quad (9)$$

式中  $\beta = 1/k_B T$ ,  $A = J \cos(k) + h - I + 2ID$ ,  $B = J\gamma \sin(k)$ ,  $\epsilon_k(D) = \sqrt{A^2 + B^2}$ .

### 3. 系统的各热力学量

#### 3.1. 系统的格点自由能

由(9)式可以得到系统的格点自由能为

$$\begin{aligned} F &= \frac{1}{2} \left( h - \frac{I}{2} \right) + ID^2 - \frac{1}{\beta N} \sum_k \ln(1 + e^{\beta \epsilon_k(D)}) \\ &\quad + \frac{1}{2N} \sum_k \epsilon_k(D) - \frac{1}{2N} \sum_k A. \end{aligned} \quad (10)$$

由自由能极值条件  $\frac{\partial F}{\partial D} = 0$  可以得到自洽场  $D$  的自洽表达式为

$$D = \frac{1}{2N} \sum_k \frac{A}{\epsilon_k(D)} \tanh\left(\frac{\beta \epsilon_k(D)}{2}\right) + \frac{1}{2}, \quad (11)$$

式中各函数和变量均满足(9)式.

### 3.2. 系统的格点内能

由(9)式可以得到系统的格点内能为

$$U = \frac{1}{2} \left( h - \frac{I}{2} \right) + ID^2 - \frac{1}{2N} \sum_k \epsilon_k(D) \tanh\left(\frac{\beta \epsilon_k(D)}{2}\right) - \frac{1}{2N} \sum_k A, \quad (12)$$

式中各函数和变量形式依然是满足(9)式.

### 3.3. 系统的格点比热

由(12)式可以得到系统的格点比热为

$$C = \frac{I}{NT^2} \sum_k \left[ \frac{A}{2\epsilon_k(D)} \tanh\left(\frac{\beta \epsilon_k(D)}{2}\right) + \frac{A}{4T} \operatorname{sech}^2\left(\frac{\beta \epsilon_k(D)}{2}\right) + \frac{1}{2} \right] \times 2I \frac{\partial D}{\partial \beta} + \frac{I}{NT^2} \sum_k \frac{\epsilon_k^2(D)}{4} \operatorname{sech}^2\left(\frac{\beta \epsilon_k(D)}{2}\right)$$

### 3.6. 有限温度时系统的相变

系统的二级相变由(14)式在  $M^z \rightarrow 0$  时得到, 一级相变由下面的方程组决定<sup>[13]</sup>:

$$F(D) = F\left(\frac{1}{2}\right), \\ D - \frac{1}{2N} \sum_k \frac{A}{\epsilon_k(D)} \tanh\left(\frac{\beta \epsilon_k(D)}{2}\right) - \frac{1}{2} = 0. \quad (16)$$

## 4. 数值结果与讨论

在我们的推导过程中, 保留了最近邻相互作用常数  $J$ , 在以下各热力学量的具体数值计算过程中定义  $J$  为新的能量标度, 同时取玻尔兹曼常量  $k_B = 1$ . 相应的外场  $h$ 、远程相互作用  $I$  等参量在具体的

$$- \frac{2I}{T^2} D \frac{\partial D}{\partial \beta}. \quad (13)$$

由(11)式自洽求导有

$$\frac{\partial D}{\partial \beta} = \frac{1}{N} \sum_k \left( \frac{B^2}{\epsilon_k^3(D)} \tanh\left(\frac{\beta \epsilon_k(D)}{2}\right) + \frac{\beta A^2}{2\epsilon_k^2(D)} \operatorname{sech}^2\left(\frac{\beta \epsilon_k(D)}{2}\right) \right) \times I \frac{\partial D}{\partial \beta} + \frac{1}{N} \sum_k \frac{A}{4} \operatorname{sech}^2\left(\frac{\beta \epsilon_k(D)}{2}\right),$$

式中各函数和变量均满足(9)式.

### 3.4. 系统的格点磁化强度

由(9)式可以得到系统的格点磁化强度为

$$M_z = \frac{1}{N} \sum_k \frac{A}{\epsilon_k(D) (1 + e^{-\beta \epsilon_k(D)})} - \frac{1}{2N} \sum_k \frac{A}{\epsilon_k(D)} = \frac{1}{2N} \sum_k \frac{A}{\epsilon_k(D)} \tanh\left(\frac{\beta \epsilon_k(D)}{2}\right). \quad (14)$$

我们发现当  $\gamma = \alpha$  (即各向同性) 时, 用我们的自洽场方法所得到的(14)式与文献[13, 14]使用不同方法所得到的  $M_z$  表达式完全符合.

### 3.5. 系统的格点磁化率

由(14)式得

$$\chi = \frac{\frac{1}{N} \sum_k \frac{\beta A^2}{4\epsilon_k^2(D)} \operatorname{sech}^2\left(\frac{\beta \epsilon_k(D)}{2}\right) + \frac{1}{N} \sum_k \frac{B^2}{2\epsilon_k^3(D)} \tanh\left(\frac{\beta \epsilon_k(D)}{2}\right)}{1 - \frac{1}{N} \sum_k \frac{I\beta A^2}{2\epsilon_k^2(D)} \operatorname{sech}^2\left(\frac{\beta \epsilon_k(D)}{2}\right) - \frac{1}{N} \sum_k \frac{IB^2}{\epsilon_k^3(D)} \tanh\left(\frac{\beta \epsilon_k(D)}{2}\right)}. \quad (15)$$

图形表示中用相对于新的能量标度  $J$  的相对量来处理. 即外场表示为  $h/J$ , 长程相互作用表示为  $I/J$ , 温度表示为  $T/J$ . 具体的严格推导比较容易, 这里就不进行具体的讨论了.

### 4.1. 有限温度时系统的相图

对方程(16)进行了自洽求解, 计算了无外场情况下取不同各向异性参量  $\gamma = 0.0, 0.5$  时相变点随远程相互作用参量  $I/J$  变化的相图.

图1中  $T_c/J$  是一级相变的边界线,  $T_s/J$  是二级相变的边界线,  $P_c$  是两线交点即三相点. 数值结果表明在  $\gamma = 0.0$  时用平均场方法所得的数值结果与文献[13]采用其他方法所得的结果完全相符. 图中三相点下弯曲的虚线部分是属两级相变对应的亚

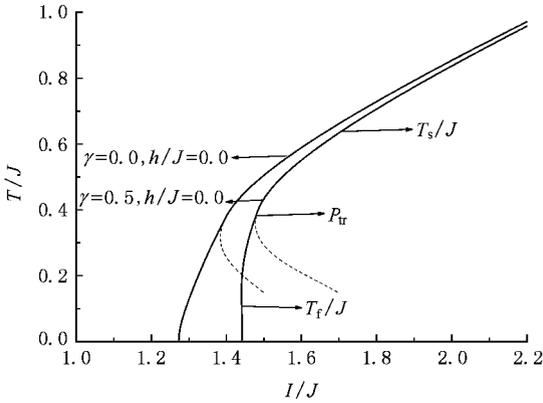


图 1  $h=0.0, \gamma=0.0, 0.5$  时相变点随长程相互作用的变化

稳解<sup>[13]</sup> 相图中的各项数据为在下面的各热力学量数值计算提供了很好的参量取值依据。

### 4.2. 各热力学量随外场的变化情况

对方程(10)–(15)进行了自洽求解, 计算了  $T/J=0$  时在不同长程相互作用参量  $I/J$  及不同

各向异性参量  $\gamma$  情况下格点磁化强度  $M_z$ , 格点内能  $U$  及磁化率  $\chi$  随外场的变化情况。

图 3(a)–(c) 给出了磁化强度、内能及磁化率随外场的变化情况, 数值结果表明在我们的取值范围内有明显的一级相变情况发生, 如当  $I/J=0.8$  时,  $H/J=0.3318$ , 而且各图的相变点符合很好。数据与文献 13 完全一致。

图 3(a)–(c) 数值结果表明各向异性参量的不同明显影响了磁化强度趋于一常量的规律而  $h_c/J$  随各向异性的增加而增加, 这也正是各向异性与长程相互作用彼此竞争的必然结果。

### 4.3. 各热力学量随温度的变化情况

我们同样对方程(10)–(15)进行了自洽求解, 着重讨论各热力学量随温度的变化情况。

图 4(a)–(c) 计算了各向异性参量  $\gamma=0.0$ , 长程相互作用  $I/J=1.7$  而外场分别取  $h/J=0.0, 0.05, 0.1$  时, 各热力学量随温度的变化情况。我们发现当外场非零时没有发现两级相变。这是因为在

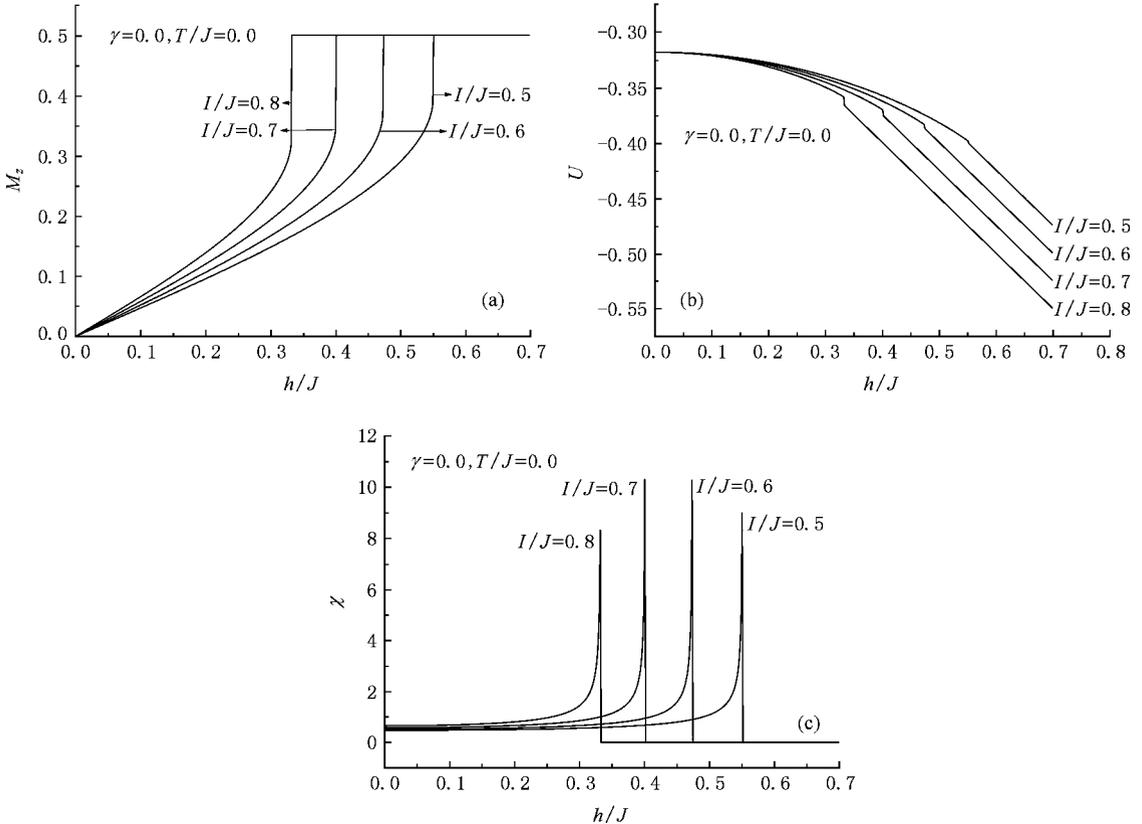


图 2 格点磁化强度  $M_z$ (a) 格点内能  $U$ (b) 格点磁化率  $\chi$ (c) 在温度  $T/J=0.0$ , 各向异性  $\gamma=0.0$  而长程相互作用参量分别取  $I/J=0.5, 0.6, 0.7, 0.8$  时随外场的变化

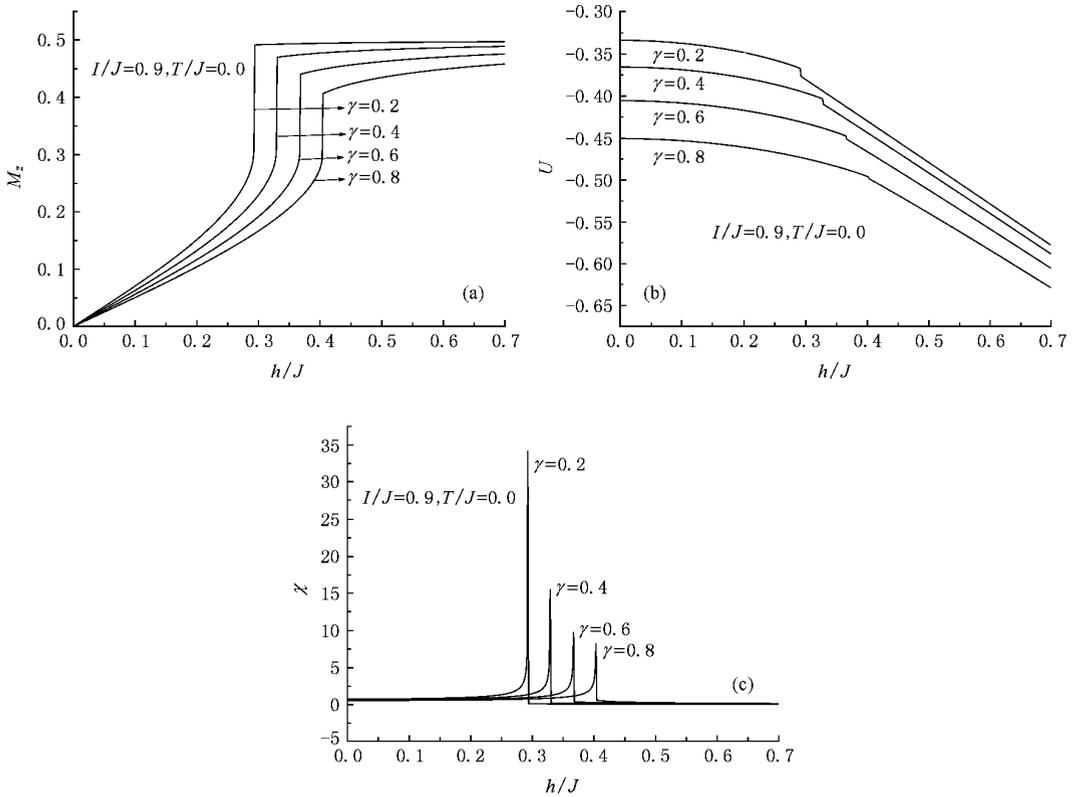


图3 格点磁化强度  $M_z$ (a) 格点内能  $U$ (b) 格点磁化率  $\chi$ (c) 在温度  $T/J=0.0$ , 长程相互作用  $I/J=0.9$  而各向异性参量分别取  $\gamma=0.2, 0.4, 0.6, 0.8$  时随外场的变化

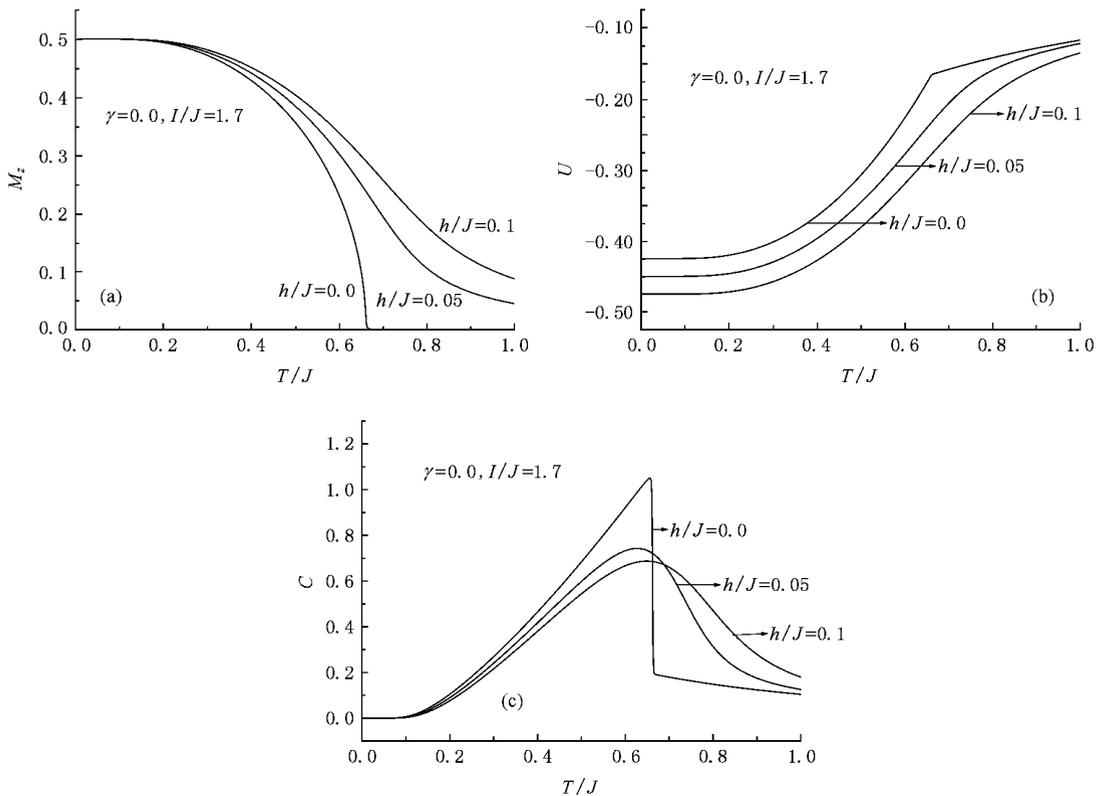


图4 格点磁化强度  $M_z$ (a), 格点内能  $U$ (b) 格点比热  $C$ (c) 在各向异性  $\gamma=0.0$ , 长程相互作用  $I/J=1.7$  而各外场参量分别取  $h/J=0.0, 0.05, 0.1$  时随温度的变化

外场的条件下有限温度不足以完全破坏自旋的部分有序性,因此没有相变.各热力学量随温度的变化趋势与热力学理论相符,比热随温度的变化趋势也与使用其他理论方法<sup>[13-16]</sup>的结果相一致.

图 5 (a)到(c)计算了  $h/J=0.0$ ,长程相互作用  $I/J=1.5$  而各向异性参量分别取  $\gamma=0.2, 0.6$  时各

热力学量随温度的变化情况.数据结果表明当各向异性小时有两级相变,这是因为当各向异性参量小时哈密顿函数中的前两项只是微扰而后两项(ISING 相)起主要作用,此时只可能有两级相变,而随着各向异性作用的加强前两项的作用随之加强从而出现一级相变.

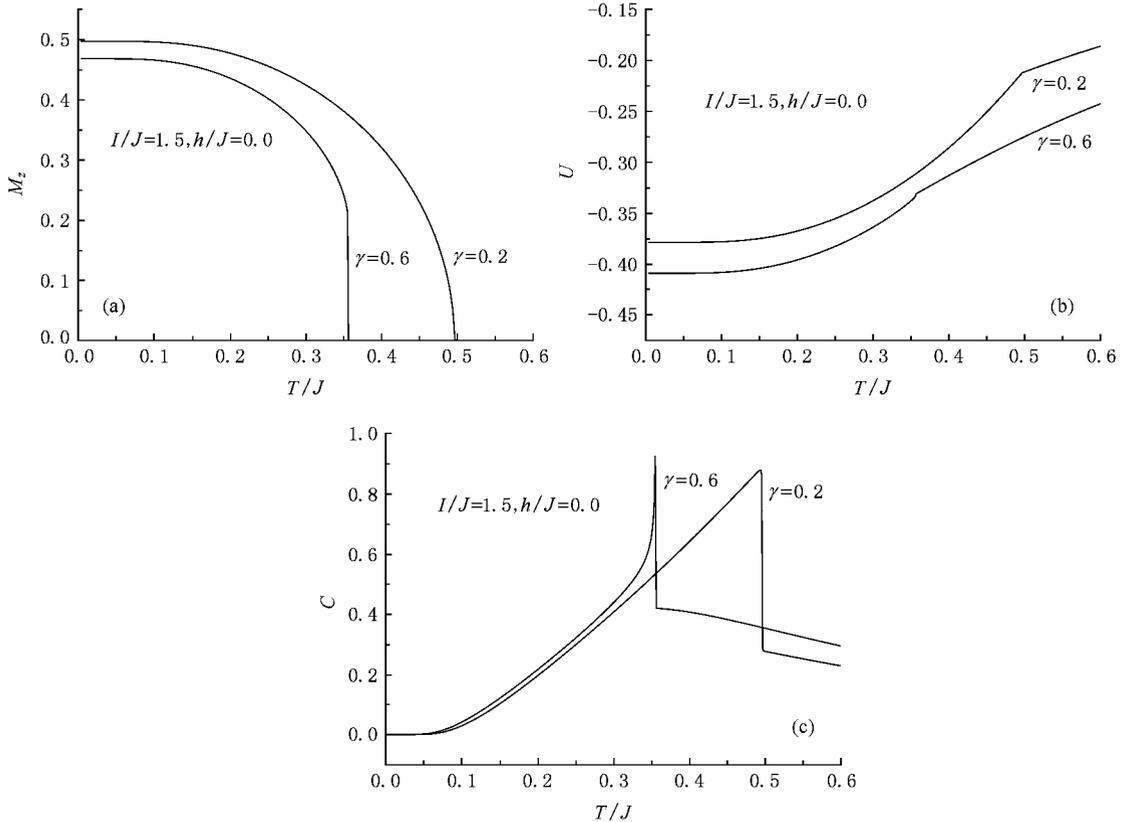


图 5 格点磁化强度  $M_z$ (a) 格点内能  $U$ (b) 格点比热  $C$ (c) 在外场  $h/J=0.0$ ,长程相互作用  $I/J=1.5$  而各向异性参量分别取  $\gamma=0.2, 0.6$  时随温度的变化

## 5. 结 论

基于外场中具有  $Z$  方向均匀长程相互作用  $S=1/2$  XY 模型,我们采用平均场 Jordan-Wigner 变换

分析方法着重研究了各向异性参量  $\gamma$  与长程相互作用参量  $I/J$  竞争对系统的影响,所得的数值解在退化条件下与其他文献符合很好,而普遍条件下所得的数值结论则未见有文献报道.

真诚的感谢童培庆教授的指导和帮助.

[1] Handane F D M 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 1153

[2] Botet R, Julien R 1983 *Phys. Rev. B* **27** 613

[3] Katsumata K, Hori H, Takeuchi T, Date M, Kamagigishi A, Renard 1989 *Phys. Rev. Lett.* **63** 86

[4] Yang C N, Yang C P 1966 *Phys. Rev.* **150** 321

[5] Yoshizawa H, Shirane G, Shiba H, Hirakawa K 1983 *Phys. Rev. B* **28** 3904

[6] Verstraete F, Popp M, Cirac J I 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 027901-1

[7] Imamoglu A, Divencenzo D P 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 4 204

- [ 8 ] Weng Z M , Chen H 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1911 ( in Chinese )  
[ 翁紫梅、陈 浩 2007 物理学报 **56** 1911 ]
- [ 9 ] Tong P Q , Zhong M 2001 *Physica B* **304** 91
- [ 10 ] Tong P Q , Zhong M 2002 *Phys. Rev. B* **65** 064421-1
- [ 11 ] Suzuki M 1966 *J. Phys. Soc. Japan.* **21** 2140
- [ 12 ] Wang C Y , Kong X M 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4365 ( in Chinese )
- [ 王春阳、孔祥木 2005 物理学报 **54** 4365 ]
- [ 13 ] Goncalves L L , Coutinho L P S , Lima J P 2005 *Physica A* **345** 71
- [ 14 ] Lou Ping 2005 *Phys. Rev. B* **72** 0644351
- [ 15 ] Fradkin E 1991 *Field Theories of Condensed Matter Systems* ( Addison-Wesley , Redwood City ) Chap. 4
- [ 16 ] Klumper A 1998 *Eur. Phys. J. B* **5** 677

## Study of the $XY$ chain with long-range interactions<sup>\*</sup>

Li Jia-Liang<sup>1,2,†</sup> Lei Shu-Guo<sup>3)</sup>

<sup>1</sup> *Jiangsu Laboratory of Advanced unctional Materials , Changshu 215500 , China )*

<sup>2</sup> *Department of Physics , Changshu Institute of Technology , Changshu 215500 , China )*

<sup>3</sup> *Department of Applied Physics , Nanjing University of Technology , Nanjing 210009 , China )*

( Received 6 January 2008 ; revised manuscript received 22 February 2008 )

### Abstract

Using the mean-field Jordan-Wigner transformation analysis , we have studied the one-dimensional spin-1/2  $XY$  chain with  $Z$ -directional uniform long-range interactions in the external magnetic field. We have obtained such results as the Helmholtz free energy , internal energy , specific heat , magnetization and isothermal susceptibility. We also discuss the first and second-order phase transitions of the system at a finite temperature. Our results agree with results published in literature.

**Keywords** :  $XY$  chain , mean-field Jordan-Wigner transformation , long-range interactions

**PACC** : 7540F , 3420F , 0570F

<sup>\*</sup> Project supported by the Open Foundation of Jiangsu Laboratory of Advanced Functional Materials , China . ( Grant No. 06KFJJ004 ) .

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail jlj502@yahoo.com.cn