

受限一维无自旋费米子系统的性质研究*

王婵娟 陈阿海 高先龙†

(浙江师范大学物理系, 金华 321004)

(2011年9月26日收到; 2011年11月1日收到修改稿)

本文借助于一维自旋 1/2-XXZ 模型的 Bethe-ansatz 精确解, 利用局域密度近似 (LDA), 讨论了谐振势中一维无自旋费米子的密度分布, 得出了 $\bar{\rho}-u$ 相图 (这里的 $\bar{\rho}$ 为无量纲的粒子数密度变量, u 为相互作用强度). 对相图的分析表明, 随着原子密度和近邻相互作用的变化, 系统出现五个不同的混合量子相. 通过对热力学硬度 S_p 的计算, 发现其可作为体系的序参量, 其奇异点可用以度量受限体系中量子相变的发生.

关键词: 局域密度近似, XXZ 模型, 相图, 热力学硬度

PACS: 75.10.Jm, 71.15.Mb

1 引言

在过去几十年中, 一维体系由于其 Luttinger 液体的特有性质一直引起人们广泛的关注. 对于一维强关联费米模型 (比如无自旋近邻相互作用费米子模型, t-J 模型, Hubbard 模型等) 的探讨以及这些模型中的输运和响应性质的研究已引起人们的广泛关注 [1-13]. 一维量子自旋 1/2 海森堡模型, 是研究纠缠, 量子临界现象和相变行为的简洁而重要的模型之一 [8,9]. 一维 XXZ 模型是各向异性海森堡模型的特殊情况, 通过 Jordan-Wigner 变换 [14], 我们可以把此模型同晶格系统中具有近邻相互作用的一维无自旋费米子模型联系起来.

量子多体相互作用模型, 比如 Ising 模型, XXZ 模型和一维 Hubbard 模型等, 仍然能够用 Bethe-ansatz 等方法解析求解. 然而当系统存在如外场或 (冷原子系统中的) 束缚势等作用导致的不均匀性时, 相应的模型往往无法解析求解 (例外的情形有无限深势阱中的近邻相互作用费米子系统 [10], 谐振势束缚系统中具有无穷大排斥相互作用的费米子系统等 [11]). 此类体系的求解一般需借助于平均场方法, 密度泛函理论 [12] 或严格的数值

方法如量子蒙特卡罗 (QMC) 和密度矩阵重整化群 (DMRG) [13] 等. 局域密度近似 (LDA) 是推断系统基本性质的重要方法之一 [15], 已经被广泛应用于一维晶格系统基本性质的研究 [16,17], 比如用以分析一维光晶格中的超冷费米子 [18,19], 一维金属中的弗里德尔振荡 [20], Hubbard 模型中的 Mott 能隙 [16] 和量子自旋链的特性 [20] 等.

在 LDA 中, 非均匀系统的交换关联能是通过均匀系统的局域近似来处理的. 局域密度近似的结果通常能较好的反映非均匀体系的相变特点. 在相互作用不太强或者外势变化缓慢时, 采用 LDA 计算系统性质往往能得到比较好的结果 [21]. 相比于精确对角化或者 DMRG 等数值方法, LDA 在描述系统的基本性质方面具有计算时间短, 没有尺寸大小的限制等特点.

均匀晶格系统中的一维无自旋费米子的相互作用和金属—绝缘体相变的相互关系已经得到了很好的理解. 而本文主要研究与实际冷原子实验有关联的处于谐振势中的一维无自旋费米子系统. 我们采用建立在一维自旋 $-1/2$ XXZ 模型 Bethe-ansatz 严格解基础上的局域密度近似, 给出了该系统的密度分布以及相应的相图. 通过相图我们发现, 随着系统的密度和相互作用的变化, 系统将出现

* 国家自然科学基金 (批准号: 10974181, 11174253) 和浙江省自然科学基金 (批准号: R6110175) 资助的课题.

† E-mail: gaoxl@zjnu.edu.cn

五个不同的量子混合相. 同时, 我们利用热力学硬度 S_ρ 作为体系的序参量, 验证了相图中的相变点.

2 模型和计算方法

2.1 模型

对于一维量子线或一维光晶格中的无自旋费米子, 可用紧束缚模型来描述. 考虑了谐振势束缚和近邻相互作用的一维无自旋费米子的哈密顿量可表示为

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -t \sum_i^{N_s} (\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+1} + \text{H.c.}) \\ & + V \sum_i^{N_s} \left(\hat{n}_i - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{i+1} - \frac{1}{2} \right) \\ & + V_2 \sum_i^{N_s} \left(i - \frac{N_s + 1}{2} \right)^2 \hat{n}_i, \end{aligned} \quad (1)$$

其中 $\hat{c}_i^\dagger (\hat{c}_i)$ 表示实空间中第 i 个格点的产生 (湮没) 算符. $\hat{n}_i = \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i$ 为粒子数算符. t 是系统的近邻间隧穿率 (在接下来的计算中我们取 t 为能量的标度, 令 $t = 1$). 在该模型中我们只考虑最近邻相互作用, V 为最近邻相互作用强度, 其中 $V > 0$ 表示最近邻格点之间的排斥相互作用, $V < 0$ 则为吸引相互作用. N_s 为格点数, V_2 为相应外势强度. 在我们的计算中, 系统长度 N_s 的选取总是保证费米子都束缚在系统中而没有溢出.

在没有外势的均匀情况下 ($V_2 = 0$), 对于半充满的系统, 在较强的相互作用下: $V = 2t$ 系统处于 Tomonaga-Luttinger 液体和公度的电荷密度波临界点, 也可理解为金属—绝缘体相变点, 即 $V < 2t$ 时系统处于 Tomonaga-Luttinger 液体相; $V > 2t$ 时系统处于公度的电荷密度态. 此模型的金属—绝缘体相变明显不同于标准的 Hubbard 模型: 在半充满时, 金属—绝缘体相变发生于任何非零的同格点相互作用. 无自旋费米子模型可通过 Jordan-Wigner 变换^[14] 转换为 XXZ 模型,

$$\hat{H} = -J \sum_i^{N_s} (\hat{s}_i^x \hat{s}_{i+1}^x + \hat{s}_i^y \hat{s}_{i+1}^y) + \Delta \sum_i^{N_s} \hat{s}_i^z \hat{s}_{i+1}^z. \quad (2)$$

相比较于方程 (1): $J = 2t, \Delta = V$. 此模型可用 Bethe-ansatz 方法严格求解. $|\Delta| > 1$ 时系统有能隙, $\Delta > 1$ 时为 Ising 区, $\Delta \leq -1$ 时为铁磁相, $-1 < \Delta < 1$ 时系统无能隙, 基态具有反铁磁长程

序. 系统中存在横向磁场时, 方程 (2) 的 $U(1)$ 对称性被破坏, 则系统不再具有可积性, 需寻求近似解或数值解. 此模型可以描述准一维自旋 $-1/2$ 反铁磁材料 Cs_2CoCl_4 的低温行为. 方程 (1) 中的最后一项在自旋系统中对应着与格点位置有关的横向磁场 $\sum h_i \hat{s}_i^z$, 其中 $h_i = V_2 [i - (N_s + 1)/2]^2$.

谐振势的加入必然导致非均匀密度分布. 模型 (1) 没有解析解, 对其研究通常借助于数值方法. 在本文中我们主要采用基于精确 Bethe-ansatz 解的局域密度近似研究此系统中粒子数密度分布等基态性质. 随着粒子数和粒子间相互作用强度的变化, 系统中的粒子将呈现不同的分布特点. 根据粒子密度分布在不同参数区域的特点, 可以得到系统的相图. 我们取 $\tilde{\rho}$ 和 u 作为相应参数, 讨论系统的 $\tilde{\rho}$ - u 相图, 其中 $\tilde{\rho}$ 为无量纲的约化粒子数密度变量 ($\tilde{\rho} = N_f \sqrt{V_2}/t$), u 为以 t 为标度的相互作用强度 ($u = V/t$), N_f 为费米子的数目.

2.2 计算方法

2.2.1 局域密度近似

对于非均匀系统的处理是通过局域密度近似来实现的. 我们首先求解方程 (1) 中当 $V_2 = 0$ 时的化学势 $\mu_{\text{hom}}(n, u)$: 定义为 $\mu_{\text{hom}}(n, u) = \partial E_{\text{hom}}(n, u)/\partial n$, 此处 $n = \langle \hat{n} \rangle$. 而 $E_{\text{hom}}(n, u)$ 是通过方程 (2) 求得的. 在此方程中, 基态能具有严格解, 可由一组耦合方程给出^[23-25] (具体公式见文献 [14]). 对基态能的微分得到化学势. 在图 1 中, 我们给出了均匀体系中不同相互作用强度下化学势随密度分布的变化关系. 可以看出在 $-2 < u < 2$ 时, 系统无能隙. 而在 $u > 2$ 时, 系统出现能隙. 在均匀系统的基础上引入局域密度近似, 即非均匀系统中任意一点的化学势可用均匀系统中具有相同费米子密度的化学势来近似表示. 由总能量泛函 $E[n] = \sum_i E_{\text{hom}}(n, u)|_{n \rightarrow n_i} + V_2 \sum_i [i - (N_s + 1)/2]^2 n_i$ 的极小, 可以推导出非均匀气体的局域平衡条件 (也称为 Euler-Lagrange 方程)

$$\mu_0 = \mu_{\text{hom}}(n, u)|_{n \rightarrow n_i} + V_2 \left(i - \frac{N_s + 1}{2} \right)^2, \quad (3)$$

μ_0 为常数. 费米子密度满足粒子数守恒

$$N_f = \sum_i^{N_s} n_i. \quad (4)$$

给定粒子数 N_f , 外势强度 V_2 以及相互作用强度 u 后, 自洽耦合求解方程 (3) 和 (4) 可求非均匀体系的密度分布和化学势 μ_0 . 需要指出的是, 这里的局域密度近似等价于密度泛函理论框架中对无相互作用的动能泛函部分也用了局域密度近似, 但不同于 Thomas-Fermi 近似, 在那里相互作用完全被忽略. 这里的局域密度近似虽然利用了动能的无相互作用近似, 但同时也考虑了均匀体系的相互作用效应.

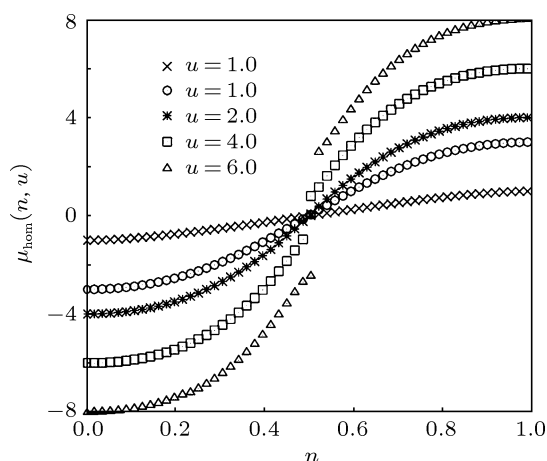


图 1 均匀体系中不同的相互作用强度下化学势 $\mu_{\text{hom}}(n, u)$ 随密度分布 n 的变化关系

3 计算结果与讨论

3.1 相图

我们首先采用局域密度近似来求解受限一维无自旋费米子系统的密度分布. 我们定义无量纲的约化粒子数密度 $\tilde{\rho} = N_f \sqrt{V_2/t}$. 定义 $\tilde{\rho}$ 的原因是: 不同的 N_f, V_2 组合, 只要 $\tilde{\rho}$ 相同, 密度分布近似重合. 选择外势强度 $V_2/t = 0.002$, 晶格长度 $N_s = 300$, 相互作用强 $u = 10$. 变化粒子数 N_f , 从而得到相应费米子数下的密度分布. 其中晶格长度的选择总是保证密度分布在边界处平滑趋于零, 即费米子被束缚在谐振势系统中. 在谐振势下, 费米子密度随格点和粒子数变化的三维图见图 2. 从图 2 可以看出, 系统的密度分布具有半充满 ($n = 0.5$) 的绝缘体平台和 band 绝缘体 ($n = 1$) 平台.

在图 3 中, 我们同时变化相互作用 u 和 $\tilde{\rho}$, 根据密度分布的不同我们得出五种不同的量子相区域从而得到 $\tilde{\rho}-u$ 相图. 当系统密度较小时, 在谐振势

的作用下, 粒子集中于势阱中央, 系统密度分布类似于倒置抛物线, 为金属相 (密度分布见图 3 中的插图, 记为 A 相, 势阱中密度分布 $n < 0.5$). 粒子间

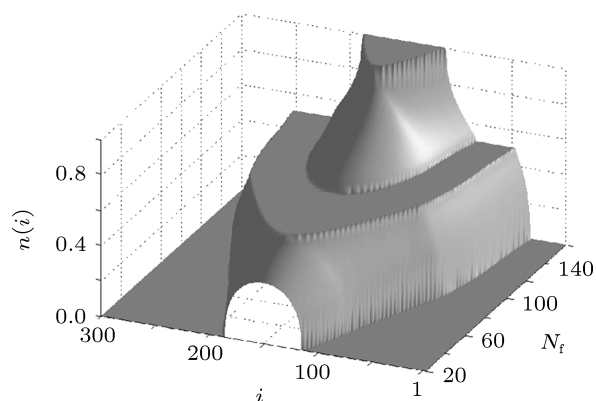


图 2 在谐振势的作用下, 粒子密度随格点和粒子数变化的三维演化图 (在该图中相互作用强度 $u = 10$, 外势强度 $V_2/t = 0.002$, 晶格长度 $N_s = 300$)

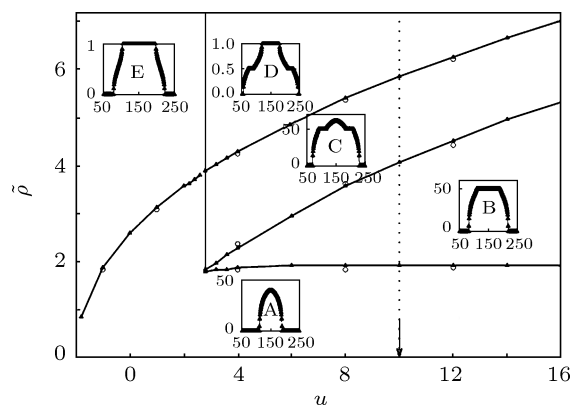


图 3 无自旋费米子的 $\tilde{\rho}-u$ 相图 (实线区分出五个不同的混合相 (A,B,C,D,E), 在 $u = -1, 1, 4, 8, 12$ 处我们用小圆圈标出了通过测量体系的热力学硬度而计算出的临界点的位置 (具体见图 4), 图中的虚竖线对应于给定 $u = 10$, 变化 $\tilde{\rho}$, 系统经历的区域随着约化粒子数密度的减小依次经历四种不同的相, 从上到下依次为 D,C,B 和 A 相. 此时对应于图 2 所做出的三维演化图)

相互作用强度较弱 ($u \leq 2.8$) 但费米子密度较大时, 系统呈现金属-band 绝缘体混合相 (记为 E 相), 势阱中间处的晶格被填满. 当粒子间相互作用强度足够大时, 随着费米子约化数密度的增大, 系统依次出现金属-绝缘相混合相 (记为 B 相, 势阱中间出现 $n = 0.5$ 的平台), 金属-绝缘体-金属混合相 (记为 C 相, $n = 0.5$ 的平台处出现 $n > 0.5$ 的金属相), 金属绝缘体金属-band 绝缘体混合相 (记为 D 相, 系统在 $n = 0.5$ 和 $n = 1$ 处各有一个平台, 中间连接着金属相)^[26,27]. 在金属-绝缘相混

合相区域内, 势阱中间的绝缘相的范围会随着相互作用的增加而增大, 而在金属 $-band$ 绝缘体混合相的区域内, $band$ 绝缘相的范围会随着的约化数密度的增加而增大. 可以测试不同的 N_f, V_2 组合, 但 $\bar{\rho}$ 相同的情况, 我们将会得出非常相近的相图曲线.

3.2 热力学硬度

由于外势引入而形成的相变可以通过测量体系的局域压缩比, 保真度 [28], 或者热力学硬度来界定. 这里我们讨论热力学硬度在不同参数情况下的变化情况定义热力学硬度 [29]

$$S_\rho = \frac{\delta\mu_0}{\delta N_f} = \frac{\delta^2 E}{\delta N_f^2}. \quad (5)$$

通过计算热力学硬度, 根据其奇异点的位置确定各相变点, 判断其是否可作为系统的一个序参量. 原则上 S_ρ 的数值计算需要能量或化学势的精确数值, 而通过 LDA 我们可以方便快捷地做到这一点. 同精确的数值方法如密度矩阵重整化群的结果相比, LDA 方法算出的能量或化学势的相对误差在 3% 以内.

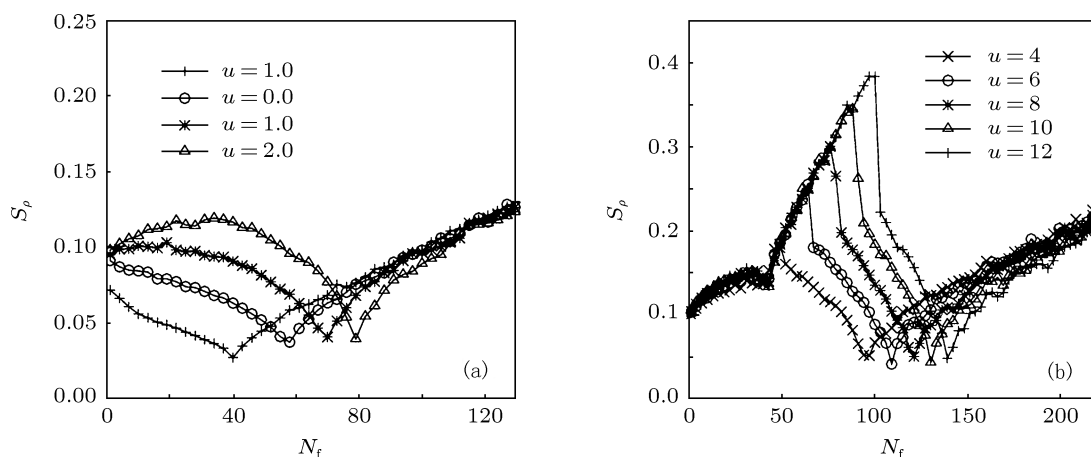


图 4 谐振势下无自旋费米子体系的热力学硬度 (其中外势强度 $V_2/t = 0.002$, 晶格长度 $N_s = 300$)

4 结论及展望

通过一维自旋 $-1/2$ XXZ 模型的 Bethe-ansatz 解, 我们利用局域密度近似的办法研究了受限的无自旋费米子的晶格系统, 得到了 $\bar{\rho}-u$ 相图. 对相图的分析表明, 系统中存在五种不同的混合量子相. 为了验证相图中的相变点, 找出一个可以度量相变的序参量, 我们计算了体系的热力学硬度, 发

在图 4 中, 我们计算了相图中不同区域的热力学硬度. 图 4(a), (b) 分别对应相图中的两个区域: $-2 \leq u \leq 2.8$ 和 $u \geq 2.8$. 我们发现在一定的粒子数的位置, 热力学硬度出现奇异, 其数值减小后再增大, 即出现拐点对应于不可压缩的绝缘体相的出现. 但与均匀系统的不可压缩的绝缘体相不同, 那里热力学硬度趋于 0. 而对于受限系统, 由于束缚势带来的非均匀性, 在势阱中间出现不可压缩的绝缘体相的同时, 系统的边界处总是会出现金属相 ($n \neq 0$), 从而导致此相区仍然具有一定的可压缩性, 即热力学硬度仍为有限值. 当 $-2 \leq u \leq 2.8$ 时, 对于某一固定的相互作用强度 u , 仅有一个拐点 (见图 4(a)), 对应于相图中由 A 相至 E 相的相变临界点. 而当 $u \geq 2.8$ 时, 对于某一固定的相互作用 u , 存在三个拐点 (见图 4(b)), 分别对应于相图中由 A 相至 B 相, B 相至 C 相, C 相至 D 相的相变临界点. 在相图 (图 3) 中 $u = -1, 1, 4, 8, 12$ 处我们标出了通过测量体系的热力学硬度而计算出的临界点的位置, 我们发现通过热力学硬度确定的临界点与相图中的相变点能很好的相符, 从而确定其可作为系统的一个序参量.

现奇异点的出现和系统出现不可压缩的绝缘体相存在一一对应关系, 从而可以精确度量受限系统中混合量子相的转变. 本文的方法可以进一步推广用于研究无序和最近邻相互作用的竞争, 讨论 Anderson 局域化和 Mott 绝缘体相的竞争关系. 从均匀体系中推导出的化学势也可用于含时密度泛函理论之中, 研究局域外势等引起的量子淬火对系统的影响.

- [1] Pierre F, Maldague 1997 *Phys. Rev. B* **16** 2437
- [2] Loh E Y, Campbell D K 1998 *Synth. Met.* **27A** 499
- [3] Schulz H J 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 2831
- [4] Stafford C A, Millis A J, Shastry B S 1990 *Phys. Rev. B* **43** 13660
- [5] Fye R M, Martins M J, Scalapino D J, Wagner J, Hanke W 1991 *Phys. Rev. B* **44** 6909
- [6] Giamarchi T, Millis A J 1992 *Phys. Rev. B* **46** 9325
- [7] Carmelo J M P, Horsch P 1992 *Phys. Rev. Lett.* **68** 871
Carmelo J M P, Horsch P, Ovchinnikov A A 1992 *Phys. Rev. B* **46** 14728
- [8] Wang Y H, Xia Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7479 (in Chinese) [王彦辉, 夏云 2009 物理学报 **58** 7479]
- [9] Song J, Cao Z L 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 696 (in Chinese) [宋军, 曹卓良 2005 物理学报 **54** 696]
- [10] Wei B B, Cao J P, Gu S J, Lin H Q arXiv:0807.2154v1.
- [11] Guan L, Chen S, Wang Y, Ma Z Q 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 160402
- [12] Gao X L 2010 *Phys. Rev. B* **81** 104306
- [13] Zhang S J, Jiang J J, Liu Y J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 531 (in Chinese) [张松俊, 蒋建军, 刘拥军 2008 物理学报 **57** 531]
- [14] Jordan P, Wigner E 1928 *Z. Phys.* **47** 631
Yang C N, Yang C P 1966 *Phys. Rev.* **150** 321
- [15] Bergkvist S, Henelius P, Rosengren A 2004 *Phys. Rev. A* **70** 053601
- [16] Lima N A, Oliveira L N, Cappelle K 2002 *Europhys. Lett.* **60** 601
- [17] Lima N A, Silva M F, Oliveira L N, Cappelle K 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 146402
- [18] Gao X L, Rizzi M, Polini M, Fazio R, Tosi M P, Campo Jr. V L, Capelle K 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 030404
- [19] Gao X L, Polini M, Tosi M P, Campo V L, Capelle K, Rigol M 2007 *Phys. Rev. B* **73** 165120
- [20] Alcaraz F C, Capelle K 2007 *Phys. Rev. B* **76** 035109
- [21] Schenk S, Dzierzawa M, Schwab P, Eckern U 2008 *Phys. Rev. B* **78** 165102
- [22] Gaudin M 1975 *Phys. Rev. Lett.* **26** 1301
- [23] Bethe H Z 1931 *Phys.* **71** 205
- [24] Kohn W, Sham L J 1965 *Phys. Rev.* **140** A 1133
- [25] Capelle K, Vignale G 2002 *Phys. Rev. B* **65** 113106
- [26] Elliott H, Lieb, Wu F Y 1968 *Phys. Rev. Lett.* **20** 1445
- [27] Peres N M R, Sacramento P D, Campbell D K, Carmelo J M P 1998 *Phys. Rev. B* **59** 11
- [28] Gu S J 2010 *Int. J. Mod. Phys. B* **24** 4371
Hu J H, Wang J J, Gao X L, Okumura M, Igarashi R, Yamada S, Machida M 2010 *Phys. Rev. B* **82** 014202
- [29] Scarola V W, Pollet L, Oitmaa J, Troyer M 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 135302, 135305

One-dimensional spinless fermions in a confined system*

Wang Chan-Juan Chen A-Hai Gao Xian-Long[†]

(Department of Physics, Zhejiang Normal University, Jinhua 321004, China)

(Received 26 September 2011; revised manuscript received 1 November 2011)

Abstract

According to the exact analytical Bethe-ansatz solution of the one-dimensional spin-1/2 XXZ model, we perform a numerical study of one-dimensional spinless fermions in an optical lattice in the presence of harmonic potential by using a local density approximation. We study the density profile, and obtain the $\tilde{\rho}$ - u phase diagram (here $\tilde{\rho} = N_t \sqrt{V_2}/t$ is the characteristic dimensionless density and $u = V/t$ is the interaction strength scaled in units of the hopping parameter t). With the increases of particle density and nearest-neighbour interaction, the system undergoes five different quantum phases. Through calculating the thermodynamic stiffness S_ρ , we find that it can be used as an order parameter. Its singular points can measure the quantum phase transitions in such a confined system.

Keywords: local density approximation, XXZ model, phase diagram thermodynamic stiffness

PACS: 75.10.Jm, 71.15.Mb

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10974181, 11174253), and the Natural Science Foundation of Zhejiang Province (Grant No. R6110175).

[†] E-mail: gaoxl@zjnu.edu.cn