第38卷 第11期
1989年11月

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol. 38, No. 11
Nov., 1989

有任意带满的紧束缚哈密顿量的实空间重整化群研究

蒋 祺 陶瑞宝[1)]

复旦大学物理系

1988年12月24日收到

本文运用实空间重整化群方法研究了有任意带满的无自旋的 Fermi 系统的行为. 对于一维,求得了系统的基态能、相关函数和相关的临界分量,并与各向同性的 $s=1/2$ 的 X-Y 模型进行了比较. 对于 $D>1$ 维,定性地讨论了系统的相关函数及临界分量.

一、引 言

近年来,应用重整化群方法研究推广了的 Ising 模型及其它相关的经典模型的临界行为已取得相当大的成功[1]. 这种方法也被推广到一些量子自旋系统,比如自旋为 s 的 Heisenberg 和 X-Y 模型的研究中[2-4]. 而对于量子 Fermi 系统,尽管 Fermi 算符间的反对易关系提出了特殊的问题,最近仍在运用零温实空间重整化群方法的研究中取得了进展[5-10]. 实空间重整化群方法 (RSRG) 的引人之处在于它的非微扰特征,应用于相应的物理系统时不需要象微扰展开方法那样依赖于小参数的选取,因此与量子力学中的变分原理一样,特别适用于研究参数变化范围宽广的问题.

零温 Block RSRG 方法直接对系统的哈密顿量进行重整化[11],其变换顺序如下:1) 把原始哈密顿量H分为 Block 哈密顿量 H_0 和 Block 之间的互作用部分 H_i,每个 Block 包含 n_s 个格点;2) 精确求解 H_0 的本征值和本征态,仅保留基态和几个最低的激发态(这些态的选择必须使系统变换前后的对称性保持不变),并以这些态作为基矢构成一个子空间;3) 将原始哈密顿量 H 投影到这个子空间,得到一个新的哈密顿量 H', H' 与 H 有相同的形式和对称性;4) 比较 H' 和 H,它们包含相同的物理参数,而且变换前后的物理参数间存在着一定的 Recursion 关系,因此研究 H 的重整化变换等价于研究由有限个物理参数构成的参数空间中的点运动的轨迹. 很显然,这种方法依赖于基的选择,运用这种方法可以求解临界行为、基态能和相关函数等等.

量子自旋 1/2 系统和量子 Fermi 系统之间通过 Wigner-Jordan 变换

$$c_j^{\dagger}=\prod_{i<j}(-s_i^z)s_j^{\dagger},\quad c_j=\prod_{i<j}(-s_i^z)s_j^{-} \tag{1}$$

1) 中国高等科学技术中心(世界实验室)理论物理分中心.

存在着某种对应关系，例如一维情况下处于横向磁场中的各向同性的 X-Y 模型等价于一个无自旋、无互作用的一维自由 Fermi 系统，对前者已运用关于自旋的 RSRG 方法进行了系统的研究[3]，但是还没有人使用关于 Fermi 系统的 RSRG 方法求解此问题，本文对有任意带满的一维自由 Fermi 系统，直接运用 Fermi 系统的实空间重整化变换，求得了基态能、相关函数和临界分量等．比较两种方法的结果，可以发现电子系统与自旋系统的相关函数的行为是不同的．我们的方法比自旋重整化变换简洁、清楚，且有利于推广到一些较复杂的自旋和电子系统以及它们的高维情形．推广一维的方法和结果到二维和三维．对 $D>1$ 维自由电子系统和 X-Y 模型不再存在对应关系，讨论了带边和带心的行为，给出了相关函数和相关的临界分量等．

二、一维情况下的重整化群变换

对一维无自旋的紧束缚电子系统、给出以下哈密顿量：

$$H=-t\sum_{i=1}^{N}(c_i^+c_{i+1}+c_{i+1}^+c_i)-u\sum_{i=1}^{N}c_i^+c_i. \tag{2}$$

这里 t 是最近邻格点间的跃迁矩阵元；u 是化学势，对于半满带情况，$u=0$，目前对于 Fermi 系统，例如窄带的 Hubbard 模型和无序电子系统的重整化群研究，几乎都限于半满带情况[6-9]，这简化了问题的复杂性． 对于本问题，如果 $u=0$，则重整化变换后的 $u'=u=0$，故 $u^*=0$，是一个不动点，因此 (2) 式的重整化变换只需寻找 t 的 Recursion 关系，如果 u 任意取值，则由于每个 u 值对应于一定的带占满程度，定义了一种依赖于 u 值的实空间重整化变换．

把一维链分成元胞的集合，每个元胞包含 n_s 个格点（n_s 是奇数），那么 (2) 式的哈密顿量H可分为元胞哈密顿量 H_0^j 和元胞间互作用 $H_1^{j,j+1}$ 的和

$$\begin{aligned}
H&=\sum_j H_0^j+\sum_j H_1^{j,j+1},\\
H_0^j&=-u\sum_{i=1}^{n_s}c_{j,i}^+c_{j,i}-t\sum_{i=1}^{n_s-1}(c_{j,i}^+c_{j,i+1}+\text{H.c.}),\\
H_1^{j,j+1}&=-t(c_{j,n_s}^+c_{j+1,1}+\text{H.c.}).
\end{aligned} \tag{3}$$

与自旋系统一样，对于电子系统需要精确求解元胞哈密顿量 H_0^j 的本征值和本征态． 如果 $u=u_k$，这对应于 n_s 个格点上有 k 个电子占据（$1\leqslant k\leqslant n_s$），则 H_0^j 的基态被求得

$$|0'\rangle'=a_k^+a_{k-1}^+\cdots a_2^+a_1^+|\text{vac}\rangle, \tag{4}$$

$$a_r^+=\left(\frac{2}{n_s+1}\right)^{1/2}\sum_{i=1}^{n_s}\sin\left(\frac{i\pi r}{n_s+1}\right)c_i^+. \tag{5}$$

这里 $|\text{vac}\rangle$ 表示真空态．对应的基态能为

$$E_0=\sum_{r=1}^{k}\left(-u_k-2t\cos\left(\frac{\pi r}{n_s+1}\right)\right). \tag{6}$$

如果元胞内有 $k+1$ 个电子，则基态和基态能为

$$|1\rangle'=a_{k+1}^{+}|0\rangle,\quad E_1=E_0-u_k-2t\cos\left(\frac{\pi(k+1)}{n_s+1}\right). \tag{7}$$

对于无自旋系统，每个原始格点只有两个状态：空态 $|0\rangle$ 和占据态 $|1\rangle$，如果把一个元胞看作是一个新的"格点"，则可以把 $|0\rangle'$ 和 $|1\rangle'$ 看作是"格点"的空态和占据态。把 (3) 式的 H 投影到这些基所构成的子空间里，有

$$H'=-u'\sum_{j=1}^{N/n_s}c_j'^{+}c_j'-t'\sum_{j=1}^{N/n_s}(c_j'^{+}c_{j+1}'+\text{H.c.})+\sum_{i=1}^{N/n_s}E'. \tag{8}$$

不难求得

$$u'=u_k+2t\cos\left(\frac{k\pi}{n_s+1}\right), \tag{9a}$$

$$E'=E_0. \tag{9b}$$

而元胞间的耦合矩阵元 t' 由

$$t'c_j'^{+}c_{j+1}'\approx tc_{j,n_s}^{+}c_{j+1,1} \tag{10}$$

给出，可得

$$t'=(-1)^{k+1}\left(\frac{2}{n_s+1}\right)t\sin^2\left(\frac{k\pi}{n_s+1}\right). \tag{11}$$

显然由 (8) 式可知，重整化后的哈密顿量 H' 与 H 有相同的形式，进一步，如果 $u'=u_k'$，即 n_s 个元胞"格点"构成的新元胞里仍有 k 个电子，那么 (9) 和 (11) 式构成 Recursion 关系，这定义了一种 k 重整化变换，在进行了 n 次重整化后，无量纲参数 $(u/t)_k$ 有如下的 Recursion 关系：

$$\left(\frac{u}{t}\right)_k^{(n+1)}=\frac{1}{(-1)^{k+1}\left(\frac{2}{n_s+1}\right)\sin^2\left(\frac{k\pi}{n_s+1}\right)}\times\left[\left(\frac{u}{t}\right)_k^{(n)}+2\cos\left(\frac{k\pi}{n_s+1}\right)\right], \tag{12}$$

故可求得一个不动点

$$\left(\frac{u}{t}\right)_k^{*}=\frac{-2\cos\left(\frac{k\pi}{n_s+1}\right)}{1-(-1)^{k+1}\left(\frac{2}{n_s+1}\right)\sin^2\left(\frac{k\pi}{n_s+1}\right)}. \tag{13}$$

由 (12) 式可知，这个不动点是不稳定点，由于 k 可取从 1 到 n_s 的整数值，故有 n_s 个不稳定的不动点，由 (12) 式还可求得一个稳定的不动点 $(u/t)_k^*=\infty$，即由任何

$$(u/t)_k\neq(u/t)_k^*$$

的点开始迭代，流向总朝着 $(u/t)_k=\infty$，这与文献[3]的结论一致，但我们以解析形式而不依赖于数值计算给出了所有的不动点的表达式。

然而，由 (9a) 式可以知道，即使原始系统 $u=u_k$，即由 n_s 个格点构成的元胞内包含 k 个电子，但在将元胞重整化变换为一个"格点"后，则由 n_s 个这种"格点"构成的新元

胞可能不包含 k 个电子，即 $u' \neq u'_k$，这意味着对每一步重整化变换，(9a) 式不构成 Recursion 关系. 因此仅仅当每次迭代后包含 n_s 格点的元胞都有 k 个电子占据时——这对应于 k 重整化变换——(9) 和 (11) 式才有物理意义，显然对于半满带情况，$u=0$，或 $k=(n_s+1)/2$，(9) 和 (11) 式构成 Recursion 关系，进一步可以发现，如果迭代开始时的 $(u/t)_k=(u/t)_k^*$，那么对于迭代 n 次后，总有 $u^{(n)}=u_k^{(n)}$，即 n 次迭代后的元胞内仍有 k 个电子占据，因此 (9) 和 (11) 式对任意迭代步都是正确的. 由于有 n_s 个不稳定的不动点值，因此可以研究带满情况对应于这些值的系统的基态能和相关函数.

由 (9b) 式对大系统 $N\to\infty$ 可以得每个格点的基态能

$$E_g=-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{ku_k^{(n)}+2t_k^{(n)}\cos\left(\frac{(k+1)\pi}{2(n_s+1)}\right)\sin\left(\frac{k\pi}{2(n_s+1)}\right)\csc\left(\frac{\pi}{2(n_s+1)}\right)}{n_s^{n+1}}. \quad (14)$$

这里 $u_k^{(0)}=u$，$t_k^{(0)}=t$. 对于半满带情况，$u=0$，或者 $k=(n_s+1)/2$，则由 (14) 式可得

$$E_g=-\left(\cot\frac{\pi}{2(n_s+1)}-1\right)\left(\frac{n_s+1}{n_s(n_s+1)-2}\right)t. \quad (15)$$

如果元胞取得越大，则应越接近精确的结果[10]

$$E_g=-\frac{2t}{\pi}\cos\left(\left(n-\frac{1}{2}\right)\pi\right).$$

这里对于半满带，$n=1/2$. 令 $n_s\to\infty$，则由 (15) 式得到 $E_g=-2t/\pi$，与精确结果一致.

现在研究相关函数 $g(r)$，定义 $g(r)=\langle c_{i+r}^{+}c_i\rangle$，一般认为[6]，$g(r)$ 应有形式

$$g(r)\sim r^{-\eta},$$

在新的基下重写 $g(r)$，可以求得(为忽略元胞的边界效应，选取元胞中心的格点进行计算)

$$g(r)=\sin^2\left(\frac{k\pi}{2}\right)\left(\frac{2}{n_s+1}\right)g'(r/n_s). \quad (16)$$

这里 $g'(r/n_s)$ 是重整化后的相关函数，根据标度假定，临界分量 η 依赖于 k，可得

$$\eta_k=-\ln\left[\left(\frac{2}{n_s+1}\right)\sin^2\left(\frac{k\pi}{2}\right)\right]\Big/\ln n_s. \quad (17)$$

考虑带边的情况，即 $k=1$，n_s，当 $n_s\to\infty$ 时，有 $\eta=1$，这与精确结果一致[6]. 对所有 $k=$ 奇数，(17) 式给出所有 $\eta_k=1$. 当带满程度 $k=$ 偶数时，(17) 式是不合适的，必须在元胞尺度内进行算术平均，所得出的 η 随 k 缓慢变化，不过可以在 $k=$ 奇数的区间进行内插，近似地求得在任意带满情况，$\eta\approx 1$. 也可以比较电子系统与自旋系统的分量 η，在一维各向同性的 X-Y 模型中[3]，相关函数为 $g(r)=\langle s_{i+r}^z s_i^z\rangle$，当外加横向磁场 h 与互作用矩阵元 J 的比 $(h/J)_k<1$ 时，$g(r)\sim r^{-1/2}$，有 $\eta=1/2$；而当 $(h/J)_k=1$ 时，$\eta=1$，显然电子系统与自旋系统的相关函数的行为存在着差别.

还可求得动力学临界分量 z，z 被定义为

$$\left|\frac{t'}{t}\right|_k = n_s^{-z_k}, \tag{18}$$

$$z_k = -\frac{\ln\left[\frac{2}{(n_s+1)}\sin^2\left(\frac{k\pi}{n_s+1}\right)\right]}{\ln n_s}. \tag{19}$$

当 $n_s \to \infty$ 时,在带边 $k=1$, $z=3$; 而在带心 $k=(n_s+1)/2$, $z=1$, 这与精确值一致[11].

以上求得了一维无自旋的紧束缚电子系统在任意带满情况下的基态能、相关函数及相关的临界分量,必须指出以上各物理量仅仅是化学势 u 取 n_s 个特殊值时求得的,一般地如果 (u/t) 取任意值,则每次迭代以后,所需保留的最低能态是不一样的,因此重整化变换不能使各物理参量的 Recursion 关系成立,这是零温重整化方法的局限性.

三、高维情况

本节讨论 $D>1$ 维的情况,在高维,量子 X-Y 模型和自由电子系统不再存在对应关系,故拟推广前节求解一维的方法到二维和三维. 首先讨论二维正方点阵(如图 1 所示),一般地取每个元胞有 $n_s = l^2$ 个格点 (n_s 为奇数),对于全满情况,每个格点占据一个电子,半满时每个格点有 1/2 个电子,对任意带满情况,例如有 k 个电子,记为 $u=u_k$,这里 $k\in\{1,n_s\}$. 按图 1 所示的方法,进行与前节同样步骤的 k 重整化变换(如果这可能),首先在 k 和 $k+1$ 子空间分别求解元胞的本征态并仅保留其最低能态,并以这些最低能态为基构成新的空间,将原始哈密顿量投影到这个空间,得到一个新的哈密顿量,新旧哈密顿量有相同的形式,而变换前后的各物理参数 u, t 存在 Recursion 关系. 由此对无量纲参数 $(u/t)_k$ 的 Recursion 关系可以解出一个不动点 $(u/t)_k^*$, 对应于 k 的取值,可以有 n_s 个这样的不动点,然而,仔细研究图 1 所示的变换,可以发现,除少数几个 u_k 值外,不能进行这种 k 重整化变换,这意味着由此变换所求得的不动点不能达到,仅仅在 $k=1$, n_s 和 $(n_s+1)/2$ 时,变换前后的 $(u/t)_k$ 构成 Recursion 关系,其不动点分别为

$$\left(\frac{u}{t}\right)_1^* = -\frac{4\cos\left(\frac{\pi}{l+1}\right)}{1-\left(\frac{2}{l+1}\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{l+1}\right)} = -\left(\frac{u}{t}\right)_{n_s}^*, \tag{20a}$$

$$\left(\frac{u}{t}\right)_{\frac{n_s+1}{2}}^* = 0. \tag{20b}$$

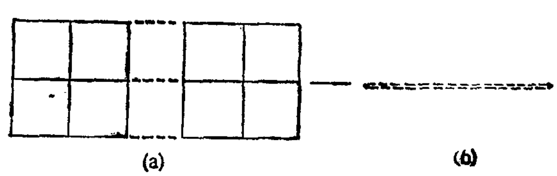

图 1 二维正方点阵变换的图形表示(这里 $n_s = l^2 = 9$) (a) 中的一个元胞经变换成为 (b) 中的一个点; (a) 中的虚线表示元胞间的耦合; (b) 中的双虚线表示重整化后的格点间的耦合

对 D 维系统，有

$$\left(\frac{u}{t}\right)_1^* = -\left(\frac{u}{t}\right)_{n_s}^* = -\frac{2D\cos\left(\frac{\pi}{l+1}\right)}{1-\left(\frac{2}{l+1}\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{l+1}\right)}, \tag{20a'}$$

$$\left(\frac{u}{t}\right)_{\frac{n_s+1}{2}}^* = 0. \tag{20b'}$$

因此运用这种重整化群方法，可以研究带边和带心的行为，对 $k=n_s$，可以求得 t，u 的 Recursion 关系

$$t_{n_s}^{(n+1)} = \left(\frac{2}{l+1}\right) t_{n_s}^{(n)} \sin^2\left(\frac{\pi}{l+1}\right), \tag{21a}$$

$$u_{n_s}^{(n+1)} = u^{(n)} + 2Dt^{(n)}\cos\left(\frac{\pi}{l+1}\right). \tag{21b}$$

由动力学临界分量 z 的定义 (18) 式，可知在带边

$$z_{n_s}^{(D)} = -\ln\left[\left(\frac{2}{l+1}\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{l+1}\right)\right]\Big/\ln l. \tag{22}$$

如果元胞取得很大，即令 $l\to\infty$ 时，则 $z_{n_s}^{(D)}\to 3$. 在 $k=1$ 时，可以求得 $z_1^{(D)}$ 有相同的值.

现在考察相关函数 $g^{(D)}(r)$ 的行为，仍取 $g^{(D)}(r)\sim r^{-\eta^{(D)}}$，对于带边 $k=n_s$ ($k=1$ 有同样的行为)的情况，可以求得变换前后的 Fermi 算符之间的关系为

$$c_{p_1,\cdots,p_D}^{(n)} = \xi_{p_1,\cdots,p_D} c^{(n+1)}, \tag{23}$$

$$\xi_{p_1,\cdots,p_D} = \left(\frac{2}{l+1}\right)^{D/2}\sin\left(\frac{p_1\pi}{l+1}\right)\cdots\sin\left(\frac{p_D\pi}{l+1}\right). \tag{24}$$

这里每个 $p_i(i=1,\cdots,D)$ 取 1 到 l 间的正整数值，为消除元胞的边界效应，应对 $\xi_{p_1,\cdots,p_D}$ 在元胞尺寸内平均，有

$$\xi = \frac{1}{l^D}\left(\frac{2}{l+1}\right)^{D/2}\cot^2\left[\frac{\pi}{2(l+1)}\right], \tag{25}$$

故可求得临界分量

$$\eta_{n_s}^{(D)} = -D\ln\left\{\frac{2}{l^2(l+1)}\cot^2\left[\frac{\pi}{2(l+1)}\right]\right\}\Big/\ln l. \tag{26}$$

当 $l\to\infty$ 时，$\eta_{n_s}^{(D)}\to D$，这与精确解 $g^{(D)}\sim r^{-D}$ 一致. 对带心，用同样的方法可以求得 ($l\to\infty$)

$$z_0^{(D)}\to 1,\ \eta_0^{(D)}\to D. \tag{27}$$

比较不同维数的临界分量，可以发现在所有维，有相同的动力学临界分量，即 z 与维数无关，而相关函数的临界分量与维数相同，这正是 Supercubic 点阵结构的特征.

四、结 语

以上运用关于 Fermi 系统的零温实空间重整化群方法解析地讨论了任意带满的紧束缚哈密顿量的性质，这种哈密顿量已在能带理论中精确求解，本文的目的不是要发现新的结果，而是试图通过与已有精确结果的对比，检验这种方法的有效程度，以期推广到更复杂的情况，特别是相变和临界现象的研究中去．值得指出的是，在研究有互作用的 Fermi 系统，例如目前令人感兴趣的 Hubbard 模型的金属绝缘体转变时，由于重整化群方法的非微扰特征，它能较好地描述系统的临界行为，而通常的平均场技术则不能给出正确的临界分量[12]．特别是在研究的系统存在维数，相互作用和温度及无序的相互影响时，重整化群方法更显出其独特之处[13-16]．我们指望能够改进这种方法，以使其局限性更小，更能适合一般应用．

[1] T. Niemeijer and J. M. Van Leeuwen, in Phase Transition and Critical Phenomena, edited by C. Domb and M. S. Green, (1976), Vol. 6.
[2] A. L. Stella and F. Toigo, *Phys. Rev.*, **B**, **17**(1978), 2343.
[3] R. Jullien and P. Pfeuty, *Phys. Rev.*, **B19**(1979), 4646.
[4] R. C. Brower, F. Kuttner, M. Nauenberg and K. Subbarao, *Phys. Rev. Lett.*, **38**(1977), 1231.
[5] P. Pfeuty, R. Jullien and K. Penson, unpublished. (1980).
[6] J. Hirsch, *Phys. Rev.*, **B22**(1980), 5259.
[7] C. Dasgupta and P. Pfeuty, *J. Phys. C*, **14**(1981), 717.
[8] M. Ma, *Phys. Rev.*, **B26**(1982), 5097.
[9] G. R. Bhat, V. A. Singh and K. Subbarao, *J. Phys. C*, **17**(1984), 5569.
[10] A. Chakarbarti, R. K. Moitra and P. Ray, *Phys. Lett.*, **A120**(1987), 479.
[11] P. Pfeuty, R. Jullien and K. A. Penson, in Real-Space Renormalization, edited by T. W. Burkhardt and J. M. Van Leeuwen, (1982).
[12] G. Spronken, R. Jullien and M. Avignon, *Phys. Rev.*, **B24**(1981), 5356.
[13] G. R. Bhat and V. A. Singh, *J. Phys. C*, **18**(1985), 5731.
[14] K. Subbarao and V. A. Singh, *Phys. Rev.*, **B26**(1982), 3788.
[15] A. L. Kholodenko, *J. Phys. C*, **19**(1986), 6541.
[16] Jiang Qi and Tao Rui-bao, to be published.

REAL-SPACE RENORMALIZATION STUDY OF TIGHT-BINDING HAMILTONIAN WITH ARBITRARY BAND FILLING

JIANG QI TAO RUI-BAO
Department of Physics, Fudan University, Shanghai

(Received 24 December 1988)

ABSTRACT

In this paper, the spinless Fermi systems with arbitrary band filling have been studied by using the real-space renormalization group methods. For one dimensional case, we obtained the ground state energies, the correlation functions and the relative critical exponents of the systems. The results were compared with those of isotropic $s=1/2$ X-Y model. We also discussed qualitatively the correlation functions and the related critical exponents for the cases of $D>1$.