

$S=1/2$ 铁磁理论海森堡模型的 随机量子化处理

陈 仁 王 养 璞

(上海师范大学) (苏州大学)

1988年7月18日收到

对 $S=1/2$ 的海森堡铁磁模型,构造了适当的拉格朗日函数,采用玻色量子化条件,用随机量子化方法计算了它的温度格林函数,得到了和其它方法同样的结果。

一、引 言

在常见的海森堡铁磁理论中,磁化强度 M 比例于 $\langle S_i^z \rangle$. 对 $S=1/2$ 的情况,有 $S_i^z = \frac{1}{2} - S_i^- S_i^+$, 因此磁化问题的研讨归结为计算系综平均 $\langle S_i^- S_i^+ \rangle$, 这可由热力学格林函数来讨论磁化问题^[1]. 随机量子化^[2,3]提供了一种新的计算温度格林函数的方法^[4], 即引入辅助性的高斯型外源,在“辅助时间” t 中研究其随机过程,当 $t \rightarrow \infty$ 时所达到的平衡态,就对应于欧氏时空的场论. 本文作为一种尝试,把它应用于 $S=1/2$ 铁磁理论的海森堡模型中。

二、拉格朗日函数的构造和量子化条件的选择

铁磁理论海森堡模型中的哈密顿量,在只考虑最近邻相互作用的条件下为

$$\mathcal{H} = -g\mu H \sum_i S_i^z - J \sum_{i,a} S_i S_{i+a}. \quad (1)$$

其中 g 为迴磁比, μ 为玻尔磁子, H 为外磁场, $J(>0)$ 为交换作用, S 为电子自旋算子. 当 $S=1/2$ 时,把 S 分成 S^z, S^+, S^- 之后,由上述 $\mathcal{H}$ 得到 S_i^+ 的运动方程为

$$i \frac{\partial S_i^+(t)}{\partial t} = g\mu H S_i^+(t) - 2J \sum_a (S_i^z(t) S_{i+a}^+ - S_{i+a}^z(t) S_i^+(t)), \quad (2)$$

以及与之相似的关于 S_i^- 的运动方程。

随机量子化方法的基础量不是哈密顿量而是拉格朗日函数. 对 $S=1/2$ 的体系,它的实际独立变量只有两个. 我们选择 S^- 和 S^+ , 而且是一对共轭量. 与(1)式哈密顿量相对应的体系的拉格朗日函数为

$$L = \sum_i \frac{i}{2} [(\partial_t S_i^-) S_i^+ - S_i^- (\partial_t S_i^+)] + \sum_i (g\mu H + J)(S_i^- S_i^+)$$

$$-J \sum_{a,i} S_i^- S_{i+a}^+ + J \sum_{i,a} (S_i^- S_{i+a}^+)^2 - J \sum_{i,a} (S_{i+a}^- S_{i+a}^+)(S_i^- S_i^+). \quad (3)$$

用上述拉格朗日函数,代入欧拉-拉格朗日方程,得到关于 S_i^- , S_i^+ 的方程,除一些无关紧要的常数外,与(2)式完全一样,这说明两者是完全等价的。 S_i^- , S_i^+ 虽然是一对共轭变量算子,按照量子化法则,它们应遵从一定的对易关系。但是我们发现,若选择这样一对量去进行量子化时,却是行不通的。因为不同格点上的 S_i^- 和 S_j^+ 自然应该认为最可对易的,但同一格点上的 S_i^- 和 S_i^+ 却遵从

$$[S_i^-, S_i^+]_- = -2S_i^z. \quad (4)$$

因此它既非玻色子,也非费密子。这也说明企图将 S_i^- , S_i^+ 用一个严格的理论来描述是行不通的。由于处理固体问题时,往往总是要采用某些近似,例如上面引用的 $\mathcal{H}$ 和提出的 L 本身就是近似的,因此我们将按照惯例,作为一种近似,把 S_i^- , S_i^+ 当作玻色子算子来处理,(4)式等号右方则用它的系综平均 $\langle S_i^z \rangle$ 来代替,使它变成一个经典数而不再是算子,即用

$$[S_i^-, S_i^+]_- = -2\langle S_i^z \rangle \quad (5)$$

作为量子化条件,以图得到一个合理的能够和实验比较的结果。

三、温度格林函数 $\langle S_i^- S_i^+ \rangle$ 的随机量子化计算

按照随机量子化方法,(3)式的欧氏时空作用量为

$$S = -i \int L dt \equiv \int L dx_0. \quad (6)$$

我们是把 S_i^- , S_i^+ 当作玻色子算子来处理的,则“辅助时间” t 中的关于 S_i^- , S_i^+ 的 Langevin 方程为

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_i^-(x_0, t)}{\partial t} &= -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial S_i^+(x_0, t)} + \eta_i^-(x_0, t), \\ \frac{\partial S_j^+(x_0, t)}{\partial t} &= -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial S_j^-(x_0, t)} + \eta_j^+(x_0, t). \end{aligned} \quad (7)$$

其中 η_i^- , η_j^+ 为随机量子化引入的辅助的高斯型白噪声源,满足下列关系式:

$$\begin{aligned} \langle \eta_i^+ \rangle_\eta &= \langle \eta_i^- \rangle_\eta = 0, \\ \langle \eta_i^-(x_0, t_1) \eta_j^+(x_0, t_2) \rangle_\eta &= -4\langle S_i^z \rangle \delta(t_1 - t_2) k_{ij}(x_{01}, x_{02}), \\ \left\langle \prod_{i=1}^n \eta_i^-(x_{0i}, t_i) \prod_{j=1}^n \eta_j^+(x_{0j}, t_j) \right\rangle_\eta &= \sum_{\text{all } i,j} \prod_{i,j=1}^n \langle \eta_i^-(x_{0i}, t_i) \eta_j^+(x_{0j}, t_j) \rangle_\eta. \end{aligned} \quad (8)$$

$\langle \cdots \rangle_\eta$ 表示对 η 的高斯型分布求平均。由于以下我们关心的只是 $S_i^- S_j^+$ 的格林函数。可以令 $k_{ij}(x_{01}, x_{02}) = \delta_{ij} \delta(x_{01} - x_{02})$ 。

需要指出的是,在通常的量子理论中,坐标与其共轭动量的对易(或反对易)式是 1,故随机量子化方法中,扰动源的关联平均值取 2,现在我们是采用(5)式作为量子化条件,故(8)式中的第二式等号右边就出现了 $4\langle S_i^z \rangle$,这是不同于场论中场量已被归一化的地方。

按照 Grimus 和 Nardulli^[4] 关于有限温度下格林函数的随机量子化, 对于玻色子应假定扰动源 $\eta(x_0, t)$ 在 x_0 上具有 $\beta = 1/kT$ 的周期性, 即

$$\eta_i^\pm(x_0 + \beta, t) = \eta_i^\pm(x_0, t). \quad (9)$$

由于 $\eta_i^\pm(x_0, t)$ 在 x_0 变量上的周期性, (7) 式关于 S_i^-, S_j^+ 的 Langevin 方程的解也应有同样的周期性.

$$S_i^\pm(x_0 + \beta, t) = S_i^\pm(x_0, t), \quad (10)$$

把 $S_i^\pm(x_0, t)$ 按 x_0 变量进行傅里叶展开

$$S_i^\pm = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} S_i^\pm(n, t) e^{\pm i\omega_n x_0}. \quad (11)$$

其中

$$\omega_n = \frac{2\pi}{\beta} n. \quad (12)$$

将(3)和(11)式代入(7)式, 得到关于 S_i^-, S_j^+ 的 Langevin 方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_i^-(x_0, t)}{\partial t} &= (-1) \left[\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} -i\omega_n S_i^-(n, t) e^{-i\omega_n x_0} + (g\mu H + J) S_i^-(x_0, t) \right. \\ &\quad - J \sum_a S_{i-a}^-(x_0, t) + 2J \sum_a (S_{i-a}^-(x_0, t) S_i^+(x_0, t)) S_{i-a}^-(x_0, t) \\ &\quad \left. - 2J \sum_a (S_{i+a}^-(x_0, t) S_{i+a}^+(x_0, t)) S_i^-(x_0, t) \right] + \eta_i^-(x_0, t), \\ \frac{\partial S_j^+(x_0, t)}{\partial t} &= (-1) \left[\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} -i\omega_n S_j^+(n, t) e^{+i\omega_n x_0} + (g\mu H + J) S_j^+(x_0, t) \right. \\ &\quad - J \sum_a S_{j+a}^+(x_0, t) + 2J \sum_a (S_j^-(x_0, t) S_{j+a}^+(x_0, t)) S_{j+a}^+(x_0, t) \\ &\quad \left. - 2J \sum_a (S_{j+a}^-(x_0, t) S_{j+a}^+(x_0, t)) S_j^+(x_0, t) \right] + \eta_j^+(x_0, t). \end{aligned} \quad (13)$$

即使不管 $\eta_i^\pm$, 上述方程也是关于 S_i^-, S_j^+ 的无限序列的、相互耦合的非线性方程组, 无法精确求解. 我们只能作些合理的近似把它们化成线性方程, 才可解出. 现作近似如下:

- (1) 由于平移不变性, $S_{i-a}^- S_i^+ = S_i^- S_{i+a}^+$, 而 $\sum_a S_{i+a}^\pm \approx z S_i^\pm$, z 为配位数.
- (2) 凡遇到三个算子连乘时, 按所取量子化条件的近似作法, 取

$$\begin{aligned} \sum_a (S_{i+a}^- S_{i+a}^+) &\approx z \langle S_i^- S_i^+ \rangle, \\ \sum_a (S_i^- S_{i+a}^+) &\approx \langle S_i^- S_i^+ \rangle \sum_a \sum_k \frac{1}{N} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}} \end{aligned}$$

应用上述近似, (13) 式等号右方第二至第五项可化为 $E(\mathbf{k}) S_i^\pm(x_0, t)$, 其中

$$\begin{aligned} E(\mathbf{k}) &= g\mu H + J(1 - z) + \left[2J \sum_a \sum_k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}} \frac{1}{N} - 2zJ \right] \langle S_i^- S_i^+ \rangle \\ &\approx g\mu H + J(1 - z) + 2[J(\mathbf{k}) - J(0)] \langle S_i^- S_i^+ \rangle. \end{aligned} \quad (14)$$

其中

$$J(0) = zJ, \quad J(\mathbf{k}) = J \sum_{\mathbf{a}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}}. \quad (15)$$

把上式代入(13)式,则其傅里叶分量的 Langevin 方程为

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_i^-(\mathbf{k}, n, t)}{\partial t} &= (i\omega_n - E(\mathbf{k}))S_i^-(\mathbf{k}, n, t) + \eta_i^-(\mathbf{k}, n, t), \\ \frac{\partial S_j^+(\mathbf{k}', m, t)}{\partial t} &= (i\omega_m - E(\mathbf{k}'))S_j^+(\mathbf{k}', m, t) + \eta_j^+(\mathbf{k}', m, t). \end{aligned} \quad (16)$$

上述 Langevin 方程的具有 $S_i^-(\mathbf{k}, n, 0) = 0$ 的解的推迟 Green 函数为

$$g(t) = \theta(t) \exp(i\omega_n - E(\mathbf{k}))t. \quad (17)$$

而 $S_i^-(\mathbf{k}, n, t)$ 的解分别为

$$\begin{aligned} S_i^-(\mathbf{k}, n, t_2) &= \int_0^{t_2} \exp\{(i\omega_n - E(\mathbf{k}))(t_2 - \tau_2)\} \eta_i^-(\mathbf{k}, n, \tau_2) d\tau_2, \\ S_j^+(\mathbf{k}', m, t_1) &= \int_0^{t_1} \exp\{(i\omega_m - E(\mathbf{k}'))(t_1 - \tau_1)\} \eta_j^+(\mathbf{k}', m, \tau_1) d\tau_1. \end{aligned} \quad (18)$$

$S_i^-(x_0)$, $S_i^+(x_0)$ 的温度格林函数的傅里叶分量为

$$\begin{aligned} \langle\langle S_i^-(\mathbf{k}, n) S_i^+(\mathbf{k}, n) \rangle\rangle &= \lim_{t_1=t_2 \rightarrow \infty} \langle S_i^-(\mathbf{k}, n, t_2) S_i^+(\mathbf{k}, n, t_1) \rangle_n \\ &= \lim_{t_1=t_2 \rightarrow \infty} \int_0^{t_1} d\tau_1 \int_0^{t_2} d\tau_2 \exp\{(i\omega_n - E(\mathbf{k}))[(t_1 + t_2) - (\tau_1 + \tau_2)]\} \\ &\quad \cdot \langle \eta_i^-(\mathbf{k}, n, \tau_2) \eta_i^+(\mathbf{k}, n, \tau_1) \rangle_n \\ &= \lim_{t_1=t_2 \rightarrow \infty} \int_0^{t_1} d\tau_1 \int_0^{t_2} d\tau_2 \exp\{(i\omega_n - E(\mathbf{k}))[(t_1 + t_2) - (\tau_1 + \tau_2)]\} \\ &\quad \cdot (-1) 4 \langle S_i^+ \rangle \delta(\tau_1 - \tau_2) \\ &= \lim_{t_1=t_2 \rightarrow \infty} \frac{2 \langle S_i^+ \rangle}{i\omega_n - E(\mathbf{k})} [\exp\{[i\omega_n - E(\mathbf{k})](t_1 - t_2)\} \\ &\quad - \exp\{[i\omega_n - E(\mathbf{k})](t_1 + t_2)\}] \\ &= \frac{2 \langle S_i^+ \rangle}{i\omega_n - E(\mathbf{k})}. \end{aligned} \quad (19)$$

其中 $E(\mathbf{k})$ 由(14)式确定. 最后得到

$$\langle\langle S_i^- S_i^+ \rangle\rangle = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{2 \langle S_i^+ \rangle}{i\omega_n - E(\mathbf{k})} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{2 \langle S_i^+ \rangle}{e^{BE(\mathbf{k})} - 1}. \quad (20)$$

这就是我们求得的温度格林函数 $\langle\langle S_i^- S_i^+ \rangle\rangle$.

在一定的近似条件下,可将上述温度格林函数等同于它的系综平均值^[5],即

$$\langle S_i^- S_i^+ \rangle \simeq \langle\langle S_i^- S_i^+ \rangle\rangle, \quad (21)$$

于是由 $\langle S_i^+ \rangle = \frac{1}{2} - \langle S_i^- S_i^+ \rangle$, 立即可得

$$\langle S_i^+ \rangle = \left[2 \left(1 + 2\Phi \left(\frac{1}{2} \right) \right) \right]^{-1}. \quad (22)$$

其中

$$\phi\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{N} \sum_k (e^{BE(\mathbf{k})} - 1)^{-1}.$$

这个结果就与用格林函数的运动方程方法得到的结果完全一致。同样求得磁化强度 M 与温度 T 和外磁场 H 的关系,关于这一问题的进一步讨论参见文献[1]。

四、讨 论

1. 对某一系统,若能较方便地给出拉格朗日函数,用随机量子化方法来计算格林函数,则较其它方法更为简捷,不失为一个良好的方法。

2. 为求得温度格林函数,在 Langevin 方程中,采用最低阶截断近似来处理,这反映在量子化条件的选择上。这样做可能粗糙些,但所得结果已经与格林函数的运动方程方法解得的一致。如能用图解展开非线性方程,可能结果还会好些。

3. 本文将随机量子化方法用于处理海森堡铁磁体,同样也可将它处理海森堡反铁磁体和其它铁磁模型。

- [1] Н. Н. Боголюбов и С. В. Тябликов, *ДАН СССР*, **126**(1959), 53.
- [2] G. Parisi and Y. S. Wu, *Sci. Sinica*, **24**(1981), 483.
- [3] P. H. Damgaard and H. Hüffel, *Phys. Report*, **152**(1987), 229.
- [4] W. Grimus and G. Nardulli, *Nuovo Cimento*, **91A**(1986), 384.
- [5] G. Rickayzen, *Green's functions and condensed matter*, London (1980), p. 325.

THE $S=1/2$ FERROMAGNETIC THEORY HEISENBERG MODEL TREATED BY STOCHASTIC QUANTIZATION

CHEN REN

(Shanghai Normal University)

WANG YANG-PU

(Suzhou University)

ABSTRACT

For the Heisenberg model in the $S=1/2$ ferromagnetic theory, We constructed the proper Lagrangian function and chose the Boson quantum condition. The temperature Green's functions are computed by the stochastic quantization method, they are in agreement with those obtained by using the other methods.