

二维反铁磁 Heisenberg 模型($s=1/2$) 的低能性质研究*

应和平

浙江近代物理中心, 浙江大学物理系, 杭州 310027

U. J. WIESE

Institute for Theoretical Physics, University of Bern, CH-3012 Bern, Switzerland

1992 年 12 月 29 日收到

利用一种有效的 Monte Carlo 簇团迭代方法进行了关于二维反铁磁 Heisenberg 量子模型的数值研究. 比较手征微扰理论的有关解析结果, 在有限温度和有限体积下精确地确定了该系统的重要低能参数: 基态能量密度 $e_0 = -0.6693(1)J/a^2$, 参差磁化强度 $M_s = 0.3076(4)/a^2$, 自旋波速度 $\hbar c = 1.68(1)Ja$ 和自旋块度 (spin stiffness) $\rho_s = 0.185(5)J$. 计算结果与高温超导体非掺杂时 La_2CuO_4 的正常态下的实验结果相符, 并得到一个关于耦合常数 J 的独立测定: $J = 0.133(5)\text{eV} = 1540(60)\text{K}$.

PACC: 7510J; 7470H; 7540M; 0550

1986 年 Bednorz 和 Müller^[1]发现的第一种高温超导体为 $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ ($x \approx 0.15$). 该系统具有二维 Cu-O 平面的层状结构, 其中 Cu 离子位于晶格常数 $a = 3.79 \text{ \AA}$ 的正方格点上. La_2CuO_4 的中子散射实验显示了该材料丰富的磁性质, 正常态下 Cu-O 平面的电子自旋具有强烈的反铁磁相互作用, 而不同层的耦合则相当弱. 实验观察到的长程反铁磁有序性反映了序参数——参差磁化强度 M_s 在低温下不为零. 换言之, 系统存在一个自旋转动对称性从 $O(3)$ 群到 $O(2)$ 群的破缺, 即它的低能激发态为自旋波形式, 其准粒子是磁子 (Magnons)—— $O(3)$ 群的自发对称破缺而致的 Goldstone 玻色子. 后者正是手征微扰理论给出的重要结论^[2].

讨论该系统的磁机制的一种最简单的理论描述就是 $s = \frac{1}{2}$ 反铁磁 Heisenberg 模型 (AFMH), 强耦合极限下 Hubbard 模型的半填充情形. 下面给出其 Hamiltonian 形式:

$$\hat{H} = J \sum_{x, \hat{\mu}} \mathbf{s}_x \cdot \mathbf{s}_{x+\hat{\mu}} \quad J > 0, \quad (1)$$

其中 $x = (x_1, x_2)$ 为二维正方点阵坐标, $\hat{\mu} = 1, 2$ 为两个方向上的单位矢量, $\mathbf{s} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ 为位于 x 点位置上的自旋算符 ($\boldsymbol{\sigma}$ 为 Pauli 矩阵, 求和对所有最近邻耦合链操作. 物理量的量纲由 J ($J > 0$ 对应反铁磁耦合) 和点阵格距 a (对应晶格常数) 给出. 我们研究的重点是该模型能否很好地描述 La_2CuO_4 材料的 Cu-O 平面的物理性质, 尤其是其低能激发态性质及如

* 国家自然科学基金及浙江大学校基金资助的课题.

何定量地与有关实验相比较.

最近, Hasenfratz 和 Niedermayer 用手征微扰的解析方法在二圈图近似下, 系统地研究了二维 ATMH 模型(即非线性 $O(N)$ - σ -模型, $N=3$ 情形)^[3]. 该方法基于模型的 $O(3)$ 对称性考虑, 给出了其丰富的低能磁子动力学性质, 作出了相应的各种预测: 有限温度性质、有限体积效应(包括其 $2+1$ 维的形状因素)、有无外场情形及在温度 $T \rightarrow 0$ 和体积 $V \rightarrow \infty$ 极限情况时各种条件下有关物理量的行为. 该研究改善或修正了在低级近似下的有关结果^[4,5].

本文发展了一种十分有效的 Monte Carlo 模拟方法, 应用于二维 AFMH 模型的低温区域内的数值计算, 并引用文献[3]的有关结果拟合得出了有关的低能参数: 基态能量密度 e_0 、参差磁化强度 M_s 、自旋波速度 \hbar_s 和自旋块度 ρ_s . 这些参数确定了系统的低能激发态——Goldstone 玻色子的动力学性质.

下面我们引用文献[3]给出的在有限温度 T 和有限体积 $V=L \times L$ (取周期性边界条件)下关于内能密度 e 、参差磁化率 x_s 和均匀磁化率 x 的结果:

$$e(T, L) = e_0 - \frac{T}{3L^2} \left\{ 1 + l \frac{d}{dl} \beta_0(l) - \frac{\hbar c}{\rho_s L l} \left[\beta_1(l) - l \frac{d}{dl} \beta_1(l) \right] + \dots \right\}, \quad (2)$$

$$x_s(T, L) = \frac{M_s^2 L^2}{3T} \left\{ 1 + 2 \frac{\hbar c}{\rho_s L l} \beta_1(l) + \left(\frac{\hbar c}{\rho_s L l} \right)^2 [\beta_1^2(l) + 3\beta_2(l)] + \dots \right\}, \quad (3)$$

$$x(T, L) = \frac{2\rho_s}{3(\hbar c)^2} \left\{ 1 + \frac{\hbar c}{3\rho_s L l} \tilde{\beta}_1(l) + \frac{1}{3} \left(\frac{\hbar c}{\rho_s L l} \right)^2 \left[\beta_2(l) - \frac{1}{3} \tilde{\beta}_1^2(l) - 6\phi(l) \right] + \dots \right\}, \quad (4)$$

其中参数 $l^3 = \frac{\hbar c}{LT}$, $\beta_p(l)$, $\tilde{\beta}_p(l)$ 和 $\phi(l)$ 为 l 的解析函数, 详细表达式见文献[2, 3]. 以下诸公式的适用范围为低温 ($T \ll 2\pi\rho_s$) 和足够大体积 ($\frac{\hbar c}{L} \ll 2\pi\rho_s$), 且 $l \lesssim O(1)$. 待定参数为 $\{e_0, M_s, \hbar_s, \rho_s\}$, 我们的 Monte Carlo 模拟将直接给出 $e(T, L)$, $x_s(T, L)$ 和 $x(T, L)$ 的值, 并用于确定以上诸待定参数.

数值计算的第一步是作从 d 维量子自旋系统到 $d+1$ 维准经典系统的变换. 参照关于一维 AFMH 有关研究工作^[6], 首先分解(1)式中的 \hat{H} 为 4 个子集, $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3 + \hat{H}_4$ (图 1(a)), 其中

$$\begin{aligned} H_1 &= J \sum_{x=(2m, n)} \mathbf{s}_x \cdot \mathbf{s}_{x+1}, & H_2 &= J \sum_{x=(m, 2n)} \mathbf{s}_x \cdot \mathbf{s}_{x+2}, \\ H_3 &= J \sum_{x=(2m+1, n)} \mathbf{s}_x \cdot \mathbf{s}_{x+1}, & H_4 &= J \sum_{x=(m, 2n+1)} \mathbf{s}_x \cdot \mathbf{s}_{x+2}, \end{aligned} \quad (5)$$

使得每个子集 H_i 中的各项可对易. 利用 Suzuki-Trotter 公式(见文献[6]及所引文献), 配分函数为

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \{ \exp(-\beta \hat{H}) \} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Tr} \{ \exp(-\epsilon \hat{H}_1) \exp(-\epsilon \hat{H}_2) \exp(-\epsilon \hat{H}_3) \exp(-\epsilon \hat{H}_4) \}^N, \end{aligned} \quad (6)$$

式中 $\epsilon = \beta/N$ 为欧氏时间方向上的格距 ($\beta = 1/T$), 然后在每一个因子 $\exp(-\epsilon \hat{H}_i)$ 中插入 $\{\sigma^3\}$ 的本征态 $\{|+1\rangle$ 和 $\{|-1\rangle\}$, 并计算相应的跃迁矩阵元, 从而完成从二维量子自旋系统至三维经典自旋系统的变换(图 1(b))

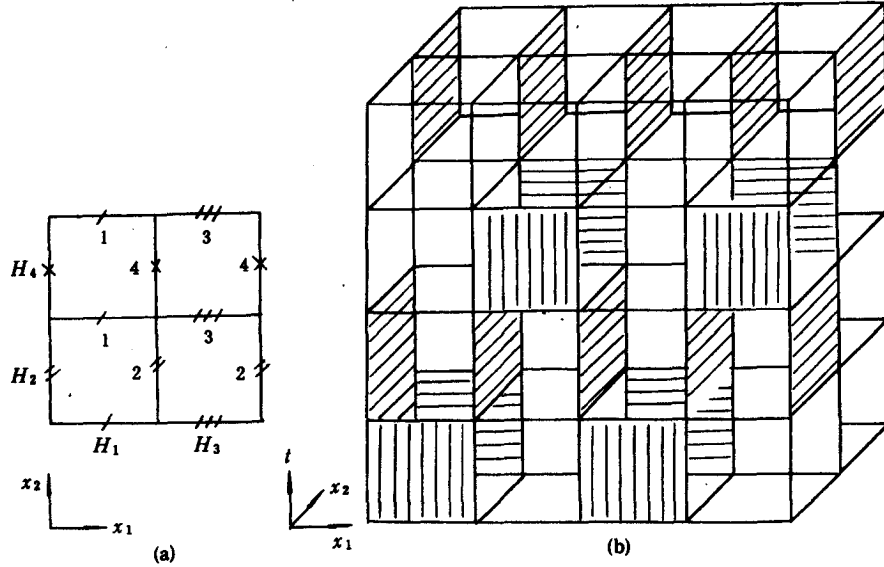


图 1

(a) 为 H 的 4 个子集, 每个子集内的各项可对易. 经 x_1 和 x_2 两个方向的平移得到整个点阵上的分解表示; (b) 为三维经典自旋系统. 每个格点上存在一个 Ising 自旋变量 $s(x, t) = \pm 1$, 划线元格表示 4-自旋耦合

$$Z = \prod_{(x,t), s(x,t) = \pm 1} \exp(-S) \tag{7}$$

$$\begin{aligned}
 S = & \sum_{x=(2m,n)} \sum_{t=4p} S[s(x,t), s(x+\hat{1},t), s(x,t+1), s(x+\hat{1},t+1)] \\
 & + \sum_{x=(m,2n)} \sum_{t=4p+1} S[s(x,t), s(x+\hat{2},t), s(x,t+1), s(x+\hat{2},t+1)] \\
 & + \sum_{x=(2m+1,n)} \sum_{t=4p+2} S[s(x,t), s(x+\hat{1},t), s(x,t+1), s(x+\hat{1},t+1)] \\
 & + \sum_{x=(m,2n+1)} \sum_{t=4p+3} S[s(x,t), s(x+\hat{2},t), s(x,t+1), s(x+\hat{2},t+1)] \tag{8}
 \end{aligned}$$

其中三维 Ising 自旋变量 $s(x, t) = \pm 1$ (t 标出欧氏时间方向上的格点位置, $t=1, 2, \dots, 4N$) 定义在 $L \times L \times 4N$ 构成的立方点阵上. $\{s(x, t)\}$ 的相互作用为元格形式的 4-自旋耦合, 见图 1(b) 中的欧氏时间方向上的划线元格

$$\begin{aligned}
 \langle s_1, s_2 | \exp(-\frac{1}{4} \in \sigma_x \cdot \sigma_{x+\hat{\mu}}) | s_3, s_4 \rangle \\
 = \exp\{S[s_1(x,t), s_2(x+\hat{\mu},t), s_3(x,t+1), s_4(x+\hat{\mu},t+1)]\}, \tag{9}
 \end{aligned}$$

它们的取值为

$$S[1, 1, 1, 1] = S[-1, -1, -1, -1] = \epsilon J/4, \tag{10a}$$

$$\begin{aligned}
 S[1, -1, 1, -1] = S[-1, 1, -1, 1] \\
 = \epsilon J/4 - \log\{[\exp(\epsilon J) + 1]/2\}, \tag{10b}
 \end{aligned}$$

$$S[1, -1, -1, 1] = S[-1, 1, 1, -1]$$

$$= \epsilon J/4 - \log\{[\exp(\epsilon J) - 1]/2\}. \quad (10c)$$

其余组态的 S 值为无穷大($\exp(-s)=0$). 这就造成了所谓的“禁态”问题,增加了 Monte Carlo 数值模拟的困难;迭代取样时需考虑若干约束条件,使迭代效率变低. 在关于一维 AFMH 的研究中^[7],通过引入“块自旋”而解除了这些约束,避免了禁态问题,消除了临界慢化现象,节省计算机时且结果误差小. 对于目前的二维系统,我们则发现由于存在阻错效应,块自旋方案的计算结果不够满意.

最近, Evertz, Lana 和 Marcu 提出了一种应用于二维 6-顶角格点模型的簇团迭代方法(loop-cluster algorithm)^[8],并认为它可以推广到关于量子自旋系统的 Monte Carlo 模拟. 该方法首先在点阵上构造一个闭合的圈,圈上的自旋就构成了一个簇团,然后集体翻转圈上的自旋. 该方法不存在阻错问题,但可能有所谓的组态冻结困难,即某些元格上有“分枝”现象,使得生成的圈充满在整个点阵上的大部分格点上. 由于分枝处元格的组态实际没有改变,故称冻结. 我们发展了该方法应用于二维 AFMH 系统,并验证冻结现象没有出现在相应的三维经典自旋系统中(而二维量子铁磁 Heisenberg 模型对应的三维经典系统则存在冻结困难). 这一点是我们的研究成功的基本和重要的因素.

我们的计算方法的详细描述和在整个温度区域上的模拟结果将另文给出,这里仅介绍其基本思路. 首先随机确定一个格点 (x, t) 作为圈的起始点. 该点自旋 $s(x, t)$ 与两个相互作用元格有关,其一在该时刻 t 之前,其二在该时刻 t 之后. 当 $s(x, t)=1$, 考虑该时刻后相互作用元格,即圈生成方向朝 t 增加方向,当 $s(x, t)=-1$, 则考虑该时刻前相互作用元格. 从(10)式可知,每个相互作用元格共有 6 种允许组态,可分成如下三类:

$$\text{I} \quad C_1 = [1, 1, 1, 1], \quad C_1' = [-1, -1, -1, -1]; \quad (11a)$$

$$\text{II} \quad C_2 = [1, -1, 1, -1], \quad C_2' = [-1, 1, -1, 1]; \quad (11b)$$

$$\text{III} \quad C_3 = [1, -1, -1, 1], \quad C_3' = [-1, 1, 1, -1]. \quad (11c)$$

相应的组态分布几率(约去共同因子 $\exp(-\epsilon J/4)$)为

$$\text{I} \quad p(C_1) = p(C_1') = 1; \quad (12a)$$

$$\text{II} \quad p(C_2) = p(C_2') = \frac{1}{2}[\exp(\epsilon J) + 1]; \quad (12b)$$

$$\text{III} \quad p(C_3) = p(C_3') = \frac{1}{2}[\exp(\epsilon J) - 1]. \quad (12c)$$

对于三类允许组态,我们确定如下的方案来联接与该自旋相关的相互作用元格的其余三个自旋的某一个自旋,并作为该圈的下一个生成点.

I 态 新生成点为 $s(x, t)$ 的欧氏时间方向上的最近邻 $s(x, t+1)$ (当 $s(x, t)=1$) 或 $s(x, t-1)$ (当 $s(x, t)=-1$).

$$p(C_i)W(C_i \rightarrow C_j) = p(C_j)W(C_j \rightarrow C_i), \quad (14)$$

其中 $p(C_i)$ 由 (12) 式给出, $W(C_i \rightarrow C_j)$ 为跃迁几率, 由以上方案决定, 新组态 C_j 为圈上该自旋的原先组态 C_i 作一个翻转而得到.

以新生成点为起点, 考虑该点自旋值确定下一个 (t 增加式 t 减少方向) 相互作用元格, 然后重复上述方案以至生成一个闭合圈, 最后集体翻转圈上的所有自旋 $\{s'(x, t) = -s(x, t), (x, t) \in \text{Loop}\}$ 而完成一次迭代. 由于每个格点至多通过一次而无分枝现象, 这一方法可行. 数值计算的正确性也验证了这一方法的有效性.

簇团迭代方法的另一个优点是能够减少组态的随机涨落效应, 改善模拟计算的精度和节省机时^[9]. 我们在计算 e , χ_s 和 χ 物理量时都采用了这一技术 (improved estimators). 例如, 对于均匀磁化率, 有

$$\chi = \frac{\beta}{4N} \langle M_c^2 / |c| \rangle, \quad (15)$$

其中 $4N$ 为欧氏时间方向上的总格点数, $M_c = \frac{1}{2} \sum_{(x,t) \in C} s(x, t)$ 为圈上自旋贡献的磁化强度, 而 $C = \sum_{(x,t) \in C} 1$ 为圈周长, $\langle \dots \rangle$ 为 Monte Carlo 平均.

Monte Carlo 模拟在低温段 $\beta J = 5, 10, 15$ 三点上进行, 点阵 $L \times L \times 4N$ 的大小分别为 $L = 6, 8, \dots, 20$ 值和 $4N = 256, 512, 768$ (保持 $\epsilon J = 5/64 < 0.1$, 使得量子算符的非对易性产生的误差小于统计误差). Monte Carlo 迭代总数为 110000 次, 其中初始的 10000 次使系统达到热平衡状态 (实际的弛豫时间小于 2000 次迭代). 表 1(a)–(c) 给出了关于 e (T, L), χ_s (T, L) 和 χ (T, L) 的模拟计算结果. 我们还在两组粗化点阵上 (L 不改变, $4N$ 值减少使得 $\beta J/N$ 分别为 $5/32$ 和 $5/48$) 作了相应的模拟计算, 从而得到外推至 $\epsilon \rightarrow 0$ 的连续极限下的物理量结果^[10].

最后, 我们用所有外推至 $\epsilon \rightarrow 0$ 时的结果 (共三个温度点, 三组分别关于 e , χ_s 和 χ 的 72 个数据), 用最小二乘法标准拟合方法, 以 (2)–(4) 式拟合确定其中的待定常数 e_0 , M_s , $\hbar c$ 和 ρ_s . 最好拟合给出如下计算结果:

$$\begin{aligned} e_0 &= -0.6693(1)J/a^2, & M_s &= 0.3076/a^2, \\ \hbar c &= 1.68(1)Ja, & \rho_s &= 0.185(5)J, \end{aligned} \quad (16)$$

每自由度方差为 1.4. 据我们所知, 这些结果迄今为止在有限湿度和有限体积下, 通过数值模拟计算得到的关于零温度和 $V \rightarrow \infty$ 时的最精确的结果之一.

表 1 不同 $L \times L$ 点阵上的 e , χ_s 和 χ 计算结果
(a) $\beta J = 5, 4N = 256$; (b) $\beta J = 10, 4N = 512$; (c) $\beta J = 15, 4N = 768$

L/a	ea^2/J	$\chi_s a^2 J$	$\chi a^2 J$
6	-0.678(1)	9.67(3)	0.0482(3)
8	-0.678(1)	9.67(3)	0.0482(3)
10	-0.678(1)	9.67(3)	0.0482(3)
15	-0.678(1)	9.67(3)	0.0482(3)

L/a	ea^2/J	$\chi_s a^2 J$	$\chi a^2 J$
6	-0.679(1)	14.64(5)	0.0268(3)
8	-0.675(1)	27.5(1)	0.0406(3)
10	-0.673(1)	42.9(2)	0.0442(3)
12	-0.673(1)	60.6(2)	0.0460(3)
14	-0.670(1)	81.2(3)	0.0469(3)
16	-0.673(1)	103.1(4)	0.0476(3)
18	-0.672(1)	129.0(4)	0.0480(3)
20	-0.672(1)	156.2(5)	0.0477(3)

(b)

L/a	ea^2/J	$\chi_s a^2 J$	$\chi a^2 J$
6	-0.681(1)	16.71(6)	0.0111(3)
8	-0.675(1)	34.8(1)	0.0287(3)
10	-0.674(1)	57.9(2)	0.0385(3)
12	-0.674(1)	83.8(2)	0.0420(3)
14	-0.672(1)	113.6(4)	0.0439(3)
16	-0.671(1)	148.0(5)	0.0451(3)
18	-0.670(1)	187.0(6)	0.0457(3)
20	-0.671(1)	227.6(8)	0.0457(3)

(c)

比较已有的有关理论结果, 零温度下 Monte Carlo 模拟给出的基态能量密度为 $-0.6892(1)J/a^2$ ^[11], 自旋级数展开计算得到 $M_s=0.307(1)$ 和 $\rho_s=0.18(1)J$ ^[12]. 有关的实验数据为: 非弹性中子散射实验得出的自旋波速度 $\hbar c=0.85(3)\text{eV}\text{\AA}$ ^[13]; Raman 散射实验测定得出 $J=0.128(6)\text{eV}=1480(70)\text{K}$ ^[14], 代入 LaCuO_4 的晶格常数 $a=3.79\text{\AA}$, 得到 $\hbar c=1.75(9)Ja$. 这些亦与我们的模拟结果符合得很好. 最后, 利用我们拟合所得的 $\hbar c$ 值, 代入已知的晶格常数 a , 一个独立的关于耦合常数 J 的最新结果为

$$J = 0.133(5)\text{eV} = 1540(60)\text{K}. \quad (17)$$

从而给出如下结论: 我们的数值结果与手征微扰理论的一致性, 并通过比较有关实验数据和结果, 证实了二维 AFMH 具有长程反铁磁有序及其低能动力学由磁子 (Goldstone 玻色子) 决定的物理机制. 其二, 我们发展的新方法 “loop-cluster algorithm” 能够在低温下有效地进行 Monte Carlo 迭代取样和应用 improved estimators 技术, 这是获得如此精确模拟计算结果的一个重要条件. 该方法已发展应用于二维格占费密子系统^[15], 并有希望发展应用于重要的有关 Hubbard 模型的研究. 后者是探索高温超导物理机制的重要研究方向之一.

感谢 R. hasenfratz 和 F. Niedermayer 教授提供了有关最新解析结果及开展的多次有益的讨论; 作者应和平感谢包玉刚奖学金的资助. 本文的计算工作在 Bern 大学的 VAZ-6420 计算机上完成.

- [1] J. G. Bednorz and K. A. Müller, *Z. Phys.*, **B64**(1986),189.
 [2] P. Hasenfratz and F. Niedermayer, *Phys. Lett.*, **B245**(1990),529;**B268**(1991),231.
 [3] P. Hasenfratz and F. Niedermayer, Bern preprint (1992), BUTP-92/46.
 [4] H. Nenberger and T. Ziman, *Phys. Rev.*, **B39**(1989),2608.
 [5] D. S. Fisher, *Phys. Rev.*, **B39**(1989),11783.
 [6] U. J. Wiese and H. P. Ying, *Phys. Lett.*, **A168**(1992),143; H. P. Ying, Talk given at the Intern. Conf. on Lattice Field Theory, Sept. 15-19, (1992), Amsterdam, the Netherlands.
 [7] 应和平、U. J. Wiese, *物理学报*,**42**(1993),665.
 [8] H. G. Evertz, G. Lana and M. Marcu, Tallahassee preprint (1992), FSU-SCRI-92-164.
 [9] U. Wolff, *Nucl. Phys.*, **B334**(1990),581.
 [10] M. Suzuki, *Phys Lett.*, **A113**(1985),299.
 [11] T. Barnes, *Int. J. Mod. Phys.*, **C2**(1991),659.
 [12] W. H. Zheng, J. Oitmaa and C. J. Hamer, *Phys. Rev.*, **B43**(1991),8321.
 [13] G. Aeppli *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **62**(1989),2052.
 [14] R. R. P Singh *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **62**(1989),2736.
 [15] U. J. Wiese, Bern Preprint (1992), BUTP-92/45.

A NUMERICAL STUDY FOR LOW ENERGY PARAMETERS OF THE TWO-DIMENSIONAL HEISENBERG ANTIFERROMAGNET

YING HE-PING

Zhejiang Institute of Modern Physics, Department of Physics, Zhejiang University, Hangzhou 310027

U. J. WIESE

Institute for Theoretical Physics, University of Bern CH-3012 Bern, Switzerland

(Received 29 December 1992)

ABSTRACT

A Monte Carlo simulation study for the two-dimensional antiferromagnetic $s=1/2$ quantum Heisenberg model is performed using an efficient cluster algorithm developed by present authors. Comparing the finite temperature and finite size effects of various quantities with recent results from the chiral perturbation theory we determine the low energy parameters of the system very precisely. We find that $e_0 = -0.6693(1)J/a^2$ for the ground state energy density, $M_s = 0.3076(4)/a_2$ for the staggered magnetization, $\hbar c = 1.68(1)Ja$ for the spin-wave velocity and $\rho_s = 0.185(5)J$ for the spin stiffness. Our results agree with the experimental data for the undoped precursor insulators of La_2CuO_4 .

PACC: 7510J; 7470H; 7540M; 0550