

$S=1/2$ 海森堡自旋链的另一种求解方法*

林 念 于祖荣

同济大学物理系, 上海 200092

1993年2月12日收到

利用置换群方法处理自由边界条件下 $S=1/2$ 有限格点海森堡自旋链, 得到所有本征能量及本征态, 并在此基础上分析了基态和低激发态的性质.

PACC: 7510J; 0220

一、引 言

近年来, 随着人们对高温超导机理的研究, 低维系统越来越受重视, 描述格点自旋相互作用的海森堡模型就是其中的热点之一, 由于一维海森堡模型, 即海森堡自旋链, 有以下几个特点: 1) 在许多情况下可以得到精确解; 2) 它具有丰富的基态性质, 包括无序相等; 3) 它可以用来检验其他近似方法. 所以它吸引了很多的研究者^[1-8].

按照酉群 $U(N)$ 和置换群 S_N 的互补关系^[9], 对于一维海森堡模型可以运用置换群理论的结果作许多有意义的讨论. 但是我们现在过去的工作中人们只注意了 $SU(2)$ 群方面, 而忽视了 S_N 群的作用, 实际上从置换群理论出发, 能够选取某些基, 使很大的单粒子乘积态空间分解为独立的较小的子空间, 从而使得在这些子空间上对海森堡自旋链哈密顿量的对角化变得简单可行. 这样, 原则上可以算出任意有限格点海森堡自旋链模型在自由边界条件或周期性边界条件下的全部本征能量及相应的本征态. 由于目前人们对反铁磁基态的性质及构成还不很清楚^[10], 所以我们的方法对反铁磁基态的研究可能有意义, 它可能为构造无限格点反铁磁基态等提供一些颇具启发性的信息, 从而有助于彻底解决一维反铁磁海森堡自旋链. 另外, 利用计算得出的本征能量和本征态, 还可以计算许多物理上感兴趣的東西, 如关联函数, 比热和磁化率等.

当 $S=1$ 时, 海森堡自旋链的哈密顿量同样具有置换群对称性, 因此上述方法也可用来处理 $S=1$ 的自旋链, 这对于检验 Haldane 猜测是否正确可能有帮助.

二、理论方法

一维海森堡模型的哈密顿量为

* 国家自然科学基金资助的课题.

$$H = J \sum_{j=1}^{N-1} S_j S_{j+1}. \quad (1)$$

因为 H 与总自旋算符 S^z, S^+, S^- 对易,

$$[H, S^z] = 0, [H, S^+] = 0, [H, S^-] = 0, \quad (2)$$

其中

$$S^z = \sum_{j=1}^N S_j^z, S^+ = \sum_{j=1}^N S_j^+, S^- = \sum_{j=1}^N S_j^-. \quad (3)$$

它们生成 $SU(2)$ 代数, 所以 H 具有 $SU(2)$ 对称性. 另外大家知道 H 还可以用置换群 S_N 的生成元来表示,

$$P_{j,j+1} = \frac{1}{2}(4S_j S_{j+1} + 1), \quad (4)$$

$$H = \frac{J}{4} \sum_{j=1}^{N-1} (2P_{j,j+1} - 1). \quad (5)$$

算符 $P_{j,j+1}$ 表示对格点 j 和 $j+1$ 上的自旋作交换. 就我们所知, 过去的工作仅到此为止, 并没有对用 S_N 群技术求解哈密顿量(1)或(5)式作进一步展开.

按照标准酉群理论^[11,12], 可以选用下列形式的基作为一维海森堡自旋链的基矢量,

1	2	...	...	...
3	4	...	...	...

↑	↑	...	...	...
↓	↓	...	...	...

>
(6)

Young 盘
Weyl 盘

这两个盘形状一样, 都是由 N 个方格构成, 第二行的方格数 n 总是少于或等于第一行的方格数 $N-n$. 称其为 Young 图. 两个盘的不同之处在于 Young 盘的方格中填充从 1 到 N 的数字, 填充规则是每一行中右面方格中填的数字大于左面的, 每一列中下面方格中填的数字大于上面的. 而在 Weyl 盘的方格中填充自旋值 $\uparrow$ 和 $\downarrow$, 规则是方向朝上的一定在朝下的左面或者上面, 处于同一列的自旋方向不能相同. 所以对于一个总格数为 N , 第二行格数为 n 的态, 总自旋 $S = (N-2n)/2$. 按此理论, 一个形状固定的 Young 图的基矢量数目是它的 Young 盘个数乘以 Weyl 盘个数. 由于不同的 Weyl 盘代表不同 S^z 值, 所以从(2)式可以知道 Young 盘相同 Weyl 盘不同的态能量简并. 因此可以在 Weyl 盘固定(通常选 $S^z = S$ 的盘, 即第一行自旋全部朝上, 第二行自旋全部朝下)但 Young 盘不同的一组基上使 H 对角化. 在置换群理论中, 置换群的生成元 $P_{j,j+1}$ 在各种不同的 Young 图表示中的矩阵元是全部已知的. 为简单起见, 用 $Y_r^{[N-n,n]}$ 标记第二行有 n 个方格的 Young 图的第 r 个 Young 盘, 则 $P_{j,j+1}$ 在这种表示中的矩阵元为

$$1) \text{ 当数字 } j \text{ 和 } j+1 \text{ 在 } Y_r^{[N-n,n]} \text{ 的同一行时,} \\ \langle Y_r^{[N-n,n]} | P_{j,j+1} | Y_r^{[N-n,n]} \rangle = 1; \quad (7a)$$

$$2) \text{ 当数字 } j \text{ 和 } j+1 \text{ 在 } Y_r^{[N-n,n]} \text{ 的同一列时,} \\ \langle Y_r^{[N-n,n]} | P_{j,j+1} | Y_r^{[N-n,n]} \rangle = -1; \quad (7b)$$

$$3) \text{ 当数字 } j \text{ 和 } j+1 \text{ 不在 } Y_r^{[N-n,n]} \text{ 的同一行或同一列时,}$$

对角元

$$\langle Y_r^{[N-n,n]} | P_{j,j+1} | Y_r^{[N-n,n]} \rangle = d_{j,j+1}(r), \quad (8)$$

非对角元

$$\text{若 } |Y_s^{[N-n,n]}\rangle = P_{j,j+1} |Y_r^{[N-n,n]}\rangle, \quad (9)$$

$$\langle Y_s^{[N-n,n]} | P_{j,j+1} | Y_r^{[N-n,n]} \rangle = (1 - d_{j,j+1}^2(r))^{1/2}, \quad (10)$$

$$\text{否则} \quad \langle Y_s^{[N-n,n]} | P_{j,j+1} | Y_r^{[N-n,n]} \rangle = 0, \quad (11)$$

$d_{j,j+1}(r)$ 为 $Y_r^{[N-n,n]}$ 中从数字 j 到 $j+1$ 相距格数的倒数. 例如

$$|Y_1^{[3,1]}\rangle = \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 & & \\ \hline \end{array}, \quad |Y_2^{[3,1]}\rangle = \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 4 \\ \hline 3 & & \\ \hline \end{array}; \quad (12)$$

$$d_{3,4}(1) = -1/3 \quad d_{3,4}(2) = 1/3 \quad (12')$$

4) 不属于以上三种的其他矩阵元都为0.

例如 $N=4$ 的 $[2,2]$ 表示,

$$|Y_1^{[2,2]}\rangle = \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array}, \quad |Y_2^{[2,2]}\rangle = \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3' \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array}, \quad (13)$$

$$P_{1,2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, P_{2,3} = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix}, P_{3,4} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (13')$$

文献[11]对置换群的表示理论有更为详细的阐述.

所以能够以上述方法所选定的态作为基对海森堡自旋链的哈密顿量进行对角化,从而求出它的本征能量和本征态.

这种方法有如下优点,首先可以在很大的程度上简化计算. 因为不同的 Young 图对应于不同的不可约表示,所以它能把维数很高的单粒子乘积态空间约化为许多不相关的维数相对较低的子空间. 其次,这样的态的物理意义十分清楚. 我们可以从 Weyl 盘得知态的总自旋和总自旋的 Z 分量,通过置换群理论可以从 Young 盘出发写出其单粒子乘积态. 因此通过 H 的对角化不但能求出系统的全部能级,而且可以得知本征态的具体形式. 另外,由于(4)式不仅适用于相邻自旋作用,而且可以推广至相距任意晶格的自旋作用,

$$P_{j,j+k} = \frac{1}{2}(4\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+k} + 1). \quad (14)$$

因此本方法还可以处理包含次近邻作用或更远距作用的自旋链问题.

三、结 果

1) Young 图只有一行的情形($n=0$),此时(6)式变为

$$\left| \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1 & 2 & \cdots & N \\ \hline \end{array} \right. \left. \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \uparrow & \uparrow & \cdots & \uparrow \\ \hline \end{array} \right\rangle \quad (15)$$

$$S=N, S^z=N, N-1, \dots, 1-N, -N$$

置换群 S_N 的所有生成元在这种表示中都为1. 所以由(5)式得到能量,

$${}^0E(N,0) = (N-1)J/4. \quad (16)$$

当 $J < 0$ 时, $E(N,0)$ 就是铁磁链基态的能量.

2) 当第二行只有一个方格时, 即 $n=1$, 此时表示的维数为 $N-1$, 其基矢可表示为

$$\varphi_{K-1} = \left| \begin{array}{cccc} 1 & 2 & \dots & N \\ K & & & \end{array} \right| \begin{array}{cccc} \uparrow & \uparrow & \dots & \uparrow \\ \downarrow & & & \end{array} \rangle \quad (17)$$

$K=2, 3, \dots, N-1, N$

对角化后得到 $N-1$ 个本征能量. 我们的结果形式与 Bethe-Ansatz 的完全一致^[6,13] (在文献[6]中令 $\Delta=1, P=P'=0$; 在文献[13]中令 $q \rightarrow 1$). 见图1, 可以表示为

$${}^1E(N,K) = J \cos\left(\frac{K\pi}{N}\right) + J(N-5)/4 \quad K=1, 2, \dots, N-1. \quad (18)$$

但是这里的量子数 K 与文献[13]中的 K 有不同的物理含义, 我们的 K 只是用来标记不同的 Young 盘. 在 $J < 0$ 时, 这些能量就是铁磁系统的低激发态能量, 其中 ${}^1E(N, K=1)$ 就是最低激发态能量. 另外还能给出相应的本征态, 而这在 Bethe-Ansatz 方法中是很难做到的. 下面写出几个不同 N 的最低激发态的波函数 $|N, n, K\rangle$,

$$N=4 \quad |4, 1, 1\rangle = 0.2706\varphi_1 + 0.5981\varphi_2 + 0.7543\varphi_3, \quad (19a)$$

$$N=5 \quad |5, 1, 1\rangle = 0.1625\varphi_1 + 0.3973\varphi_2 + 0.6029\varphi_3 + 0.6725\varphi_4, \quad (19b)$$

$$N=10 \quad |10, 1, 1\rangle = 0.0306\varphi_1 + 0.0848\varphi_2 + 0.1580\varphi_3 + 0.2414\varphi_4 + 0.3248\varphi_5, \\ + 0.3977\varphi_6 + 0.4503\varphi_7 + 0.4747\varphi_8 + 0.4656\varphi_9, \quad (19c)$$

3) 反铁磁链 ($J^* > 0$)

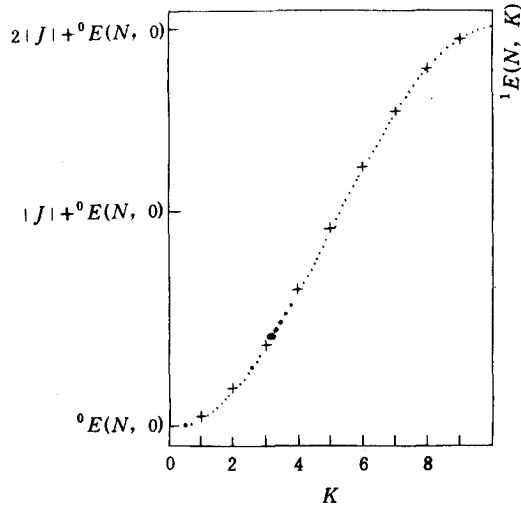
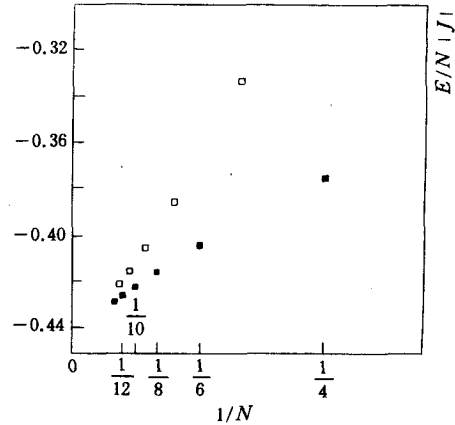
我们计算了格点数从1到12的全部本征能量, 发现当格点数为奇数时, 基态属于第一行比第二行多一个格的表示(20a)式, 即总自旋为 $1/2$ 的态; 当格点数为偶数时, 基态属于上下两行格数相同的表示(20b)式, 即总自旋为0的态, 是单重态. 其能量值见表1和图2.

$$\begin{array}{|c|c|c|c|c|c|} \hline & & \dots & \dots & \dots & \\ \hline & & \dots & \dots & \dots & \\ \hline \end{array} \quad (20a)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|c|c|c|} \hline & & \dots & \dots & \dots & \\ \hline & & \dots & \dots & \dots & \\ \hline \end{array} \quad (20b)$$

表1 反铁磁链基态能量值 E/NJ

N	偶数链	N	奇数链
2	-0.3750	3	-0.3333
4	-0.4040	5	-0.3856
6	-0.4156	7	-0.4052
8	-0.4219	9	-0.4151
10	-0.4258	11	-0.4211
12	-0.4285		

图1 铁磁链低激发态能量($N=10$) “+”表示计算结果图2 反铁磁链基态能量实心方框表示偶数链；
空心方框表示奇数链；以 $(1/N)$ 为横坐标

从图2可以看出,当 N 趋向无穷大时,基态的每个格点平均能量趋向一个定值,约为 -0.44 ,这个结论与其他人得到的结果^[14]非常相近.大家知道,在固体物理中原先人们把 Néel 态作为反铁磁基态的近似,后来 Anderson^[15]证明这种近似是不正确的.图3给出我们计算的 Néel 态在基态波函数中所占的权重.可以看出 Néel 态的权重随 N 的增大作指数衰减,同样其他单粒子乘积态所占的比重也随 N 的增大而趋向于零.这就说明当 N 无穷大时,Néel 态及其他单粒子乘积态在基态中所占的比重都很小,当 N 较大时,Néel 态以及任何其他单粒子乘积态均不能作为基态的近似形式.

下面给出当 $N=6$ 时基态的具体形式:

$$|GS\rangle = -0.9221\varphi_1 - 0.2593(\varphi_2 + \varphi_3) + 0.1222\varphi_4 + 0.0187\varphi_5, \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \varphi_1 = & \begin{vmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 2 & 4 & 6 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow \end{vmatrix} \\ \varphi_2 = & \begin{vmatrix} 1 & 2 & 5 \\ 3 & 4 & 6 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow \end{vmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \varphi_3 &= \left| \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 3 & 4 \\ \hline 2 & 5 & 6 \\ \hline \end{array} \right. \begin{array}{|c|c|c|} \hline \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \hline \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ \hline \end{array} \rangle \\
 \varphi_4 &= \left| \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 4 \\ \hline 3 & 5 & 6 \\ \hline \end{array} \right. \begin{array}{|c|c|c|} \hline \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \hline \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ \hline \end{array} \rangle \\
 \varphi_5 &= \left| \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 & 5 & 6 \\ \hline \end{array} \right. \begin{array}{|c|c|c|} \hline \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \hline \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ \hline \end{array} \rangle
 \end{aligned}$$

从(21)式可以看出基态中 φ_1 所占的权重量大,但这个态并不是 Néel 态,而是 Anderson^[16] 提出的共振价键态(RVB). 对于 $N=4, 8, 10, 12$ 我们的计算结果也有类似性质,见图3. Anderson 认为 RVB 态比 Néel 态更接近反铁磁基态,这与我们的计算结果一致.

为了清楚地显示出基态与 Néel 态及其他单粒子乘积态之间的关系,用单粒子乘积态形式表示基态(21)式,

$$\begin{aligned}
 |GS\rangle &= \\
 &-0.009(\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow - \downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow) + 0.061(\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow - \downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow) \\
 &-0.132(\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow - \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow - \downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow + \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow) \\
 &+0.080(\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow - \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow) \\
 &-0.308(\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow - \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow) \\
 &-0.238(\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow) + 0.449(\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow),
 \end{aligned} \tag{22}$$

其中最后两项为 Néel 态,可见基态与 Néel 态是完全不同的.

最后要指出,当 N 为奇数时,反铁磁链的最低激发态仍然是 $S=1/2$ 的态,同基态属于同一种 Young 图表示. 但当 N 为偶数时,最低激发态是 $S=1$ 的态,是一个三重态,而基态是单重态,因此最低激发态与基态属于不同的 Young 图表示. 我们计算了基态与最低激发态之间的能量差 ΔE 见表2和图4.

表2 基态与最低激发态之间的能量差值 $\Delta E/NJ$

N	偶数链	N	奇数链
2	0.5000	3	0.3333
4	0.3295	5	0.1441
6	0.1639	7	0.0796
8	0.0982	9	0.0503
10	0.0655	11	0.0347

从图4看到当 N 趋向无穷大时, ΔE 趋近于零. 所以可以推测在无限格点反铁磁系统中基态与最低激发态之间没有能隙.

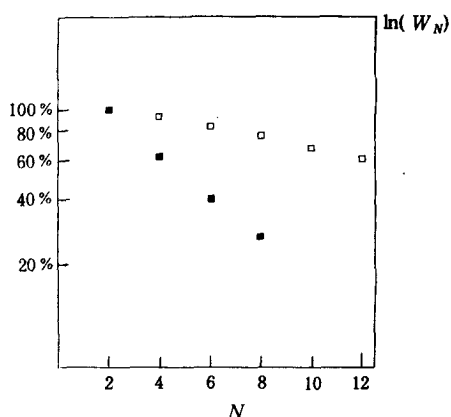


图3 Néel 态和 RVB 态在基态中的权重 实心方框表示 Néel 态;空心方框表示 RVB 态;纵坐标是权重的自然对数

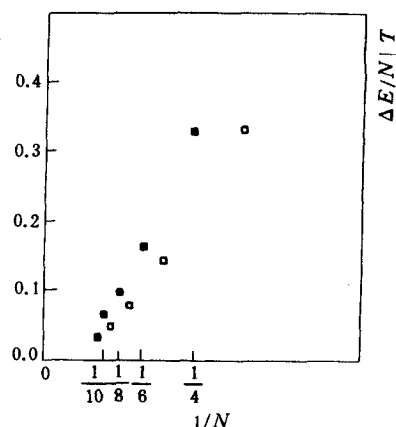


图4 基态与最低激发态的能隙 实心方框表示偶数链;空心方框表示奇数链;以 $(1/N)$ 为横坐标

四、结 论

从上面的计算结果可以得出下述结论:

- 1) 反铁磁基态不能用 Néel 态作为近似,它的形式很复杂. 共振价键态是基态的一个较好的近似. 基态的格点平均能量趋近 -0.44 .
- 2) 链长为偶数的反铁磁链的基态是单重态,而最低激发态是三重态,而链长为奇数的反铁磁链的基态和最低激发态都是双重态. 当链长趋向无穷时,基态与激发态之间没有能隙.

感谢与羊亚平先生,章豫梅教授,陈鸿教授,冯卫国教授,吴翔教授所作的有益讨论.

- [1] H. Bethe, *Z. Physik*, **71**(1931), 205.
- [2] C. N. Yang and C. P. Yang, *Journ. Mat. Phys.*, **10**(1969), 1115.
- [3] A. Luther and I. Peshel, *Phys. Rev.*, **B12**(1975), 3908.
- [4] F. D. M. Haldane, *Phys. Lett.*, **93A**(1983), 464; *Phys. Rev. Lett.*, **50**(1983), 1153.
- [5] I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.*, **54**(1985), 966.
- [6] Alcaraz, *J. Phys. A*, **20**(1987), 6397.
- [7] Levy, *Phys. Rev. Lett.*, **64**(1990), 499.
- [8] R. Botet and R. Jullien, *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 613.
- [9] M. Moshinsky and C. Quesue, *J. Math. Phys.*, **11**(1970), 1631.
- [10] 李正中, 固体理论(北京, 高等教育出版社, 1985), 95页.
- [11] 韩其智、孙洪洲, 群论(北京, 北京大学出版社, 1987).
- [12] 陈金全, 群表示论的新途径(上海, 上海科学技术出版社, 1984).
- [13] 马中骥、侯伯元、侯伯宇, 高能物理与核物理, **15**(1991), 812.
- [14] L. Hulthen, *Ark. Met. Astron. Fysik*, **26A**, Na. (1938), 11.
- [15] P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **86**(1952), 694.

[16] P. W. Anderson, *Mat. Res. Bull.*, **8**(1973), 153.

A NEW METHOD TO SOLVE THE $S=1/2$ HEISENBERG SPIN CHAIN

LIN NIAN YU ZU-RONG

Department of Physics, Tongji University, Shanghai 200092

(Received 12 February 1993)

ABSTRACT

We present a new approach which is completely based on the permutation group theory to solve the eigenvalue problem of the $S=1/2$ Heisenberg finite-chain with free-ends boundary. All of the eigenvalues and the corresponding eigenstates are obtained. The properties of the ground state and the low-lying excited states of the antiferromagnetic chain are examined.

PACC: 7510J; 0220