

用共形不变性和 Lanczos 方法研究具有次近邻相互作用的一维量子链*

张海燕 许伯威

上海交通大学应用物理系, 上海 200030

1993年5月3日收到

用 Lanczos 方法计算出具有次近邻相互作用的一维量子链的基态和低激发态的能量, 求出了模型的反常标度和归一化常数, 并建立该模型的共形场理论.

PACC: 0550; 0220

共形场论指出, 由共形对称性可以对二维经典或一维量子统计模型的临界行为进行完善的描述^[1,2]. 模型所属的普适类由中心荷 c 确定, 对于 $0 < c < 1$ 的情形, 么正性决定了 c 只能取一系列分立的值^[3].

$$c = 1 - \frac{6}{(m+2)(m+3)} \quad m = 1, 2, \dots \quad (1)$$

这类模型的共形场量数目是有限个, 其对应的反常标度 χ 也是一些分立的数值, 由 Kac 公式给出^[4].

在处理具有一定周期边界条件有限长度的量子链的临界行为中, 共形场论提供了一种有效的方法^[5-8].

在这种方法中, 模型中共形场量的反常标度 χ 与能量关系为^[9,10]

$$\frac{E_0}{N} = e_0 - \frac{c\pi\xi}{6N^2} + O\left(\frac{1}{N^3}\right), \quad (2)$$

$$\Delta E = E(n, \bar{n}) - E_0 = \frac{2\pi\xi(\chi_a + n + \bar{n})}{N} + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \quad n = \bar{n} = 0, 1, \dots, \quad (3)$$

其中 E 是激发态能量, $n, \bar{n}$ 是与激发态有关的量子数, 由激发态能量之差决定, c 是模型所属的普适类的中心荷, N 是量子链的长度, ξ 是归一化常数, 是依赖所给定模型的参量, 由模型的共形对称性所决定, 通常由数值计算给出.

在研究量子链的临界行为时, 最常用的方法之一是把有限格点系统的哈密顿量 H 对角化, 对角化一般通过 Lanczos 方法^[11]来实现. 用有限尺寸标度可以求得模型取有限尺度时的临界指数. 因为共形对称性把反常标度和哈密顿量的本征值联系起来, 所以我们只要通过数值计算求出该模型的能量, 即可得到反常标度值, 然后, 通过外推得到 N 趋于

* 国家教育委员会科学研究基金资助的课题.

∞ 的极限。本文中研究具有推广的次近邻相互作用的一维量子链的临界行为,并建立其共形场论。我们在文献[12]证明了此模型属于 Ising 普适类,中心荷 $c = 1/2$ 。本文进一步求出模型的反常标度值,并且计算精度也提高了。

具有次近邻相互作用的一维量子链的哈密顿量为^[12]

$$H = g \sum_n \sigma_n^x - \sum_n \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x - \lambda \sum_n \left(\frac{1+\beta}{2} \sigma_n^x \sigma_{n+2}^x + \frac{1-\beta}{2} \sigma_n^y \sigma_{n+2}^y \right), \quad (4)$$

式中 σ_n^x 和 σ_n^y 是格点 n 的 Pauli 矩阵。

我们用 Lanczos 方法计算出能级差 $\Delta E(n = \bar{n} = 0)$ 和基态能量 E_0 , 这样即可求得 χ 和 ξ 的数值。同样地,通过 $n = \bar{n} \neq 0$ 时的 ΔE 可以计算

$$\Lambda_a(n, \bar{n}) = \frac{N \cdot [E(n, \bar{n}) - E_0]}{2\pi\xi}. \quad (5)$$

众所周知, Lanczos 方法用于计算格点数为 N 且每个格点具有 n 个状态的有限格点系统的哈密顿量的基态和低激发态能量本征值特别有效。具有次近邻相互作用的量子链每个格点上有自旋向上和向下两种状态。状态由二进制数表示。例如,‘1’代表自旋向上,‘0’代表自旋向下。研究的状态具有平移不变性,这样状态数也就大大减少了。所以,我们不必研究 2^N 个状态,而只需要研究它们的线性组合。举例来说,如果我们考虑的初始状态是 N 个格点都是‘1’的构形,由于哈密顿量每次只翻转偶数个自旋,那么计算之后产生的态是一些具有偶数个‘0’的态的线性组合。另外要说明,如果某一种初始构形能产生的状态数目是 M ,那么 Lanczos 迭代过程将在 $M-1$ 步之后自动终止,而且最后一个 Lanczos 态是 M 个平移不变的状态的线性组合。计算中我们取 $N = 6-14$,对应于 14 个格点的 M 值是 586。另外,我们使用了单精度。计算过程中发现, N 是偶数时,模型的基态可由 N 个格点自旋都向上的态出发而得到,第一激发态可由一个格点自旋向下,其余 $N-1$ 个都向上的态出发而得到。 N 是奇数时情况正好相反。

我们编程序时取了两个近似。第一,舍去了系数小于 10^{-6} 的态。由于用的是单精度,所以这个近似对结果没有影响。第二,把 Lanczos 迭代截断在 $M = 33$ 处。事实上,经过 30 次左右的迭代,最低本征值已精确到机器精度,所以,计算误差只来源于有限尺度效应。

计算了 $\beta = 0.02, 0.06, 0.10, 0.20, 0.50$ 时的能量,对每个 β 取 $\lambda = 0.02, 0.06, 0.10$ 。结果表明模型具有相变,相变条件是

$$g = 1 + \lambda + \beta\lambda f, \quad (6)$$

其中 f 随 β 和 λ 缓慢变化,即对于给定的 β 和 λ ,存在一个确定的 f 值,只有在 g 满足(6)式的情况下, $N \cdot \Delta E$ 才会在 N 趋于 ∞ 时趋于一个定值。当 β 和 λ 改变时,模型仍有相变,而对应的 g 值也改变。对于我们在计算中取的 β 和 λ 值, f 的范围在 1—0.7。表 1 至表 5 给出不同 β, λ 值时的 g 和 $N \cdot \Delta E$ 值。 N 趋于 ∞ 时的 $\Delta E \cdot N$ 值可由外推得到。由(3)式知

$$\Delta E \cdot N = 2\pi\xi\chi + \frac{B}{N} + O\left(\frac{1}{N^2}\right). \quad (7)$$

对于有限长度的链,可写为

表 1 $\beta = 0.02, \lambda = 0.02, g = 1.0204$

N	$\Delta E_1 \cdot N$	$\Delta E_2 \cdot N$	$\Delta E_3 \cdot N$	$\Delta E_4 \cdot N$
6	1.6029	12.5985	25.9123	34.4996
7	1.6012	12.6474	26.2384	35.5268
8	1.6000	12.6794	26.4534	36.1961
9	1.5990	12.7015	26.6020	36.6548
10	1.5983	12.7173	26.7089	36.9819
11	1.5976	12.7292	26.7881	37.2233
12	1.5970	12.7382	26.8484	37.4064
13	1.5967	12.7452	26.8954	37.5486
14	1.5963	12.7506	26.9326	37.6611
∞	1.5913	12.7839	27.1432	38.2956

表 2 $\beta = 0.06, \lambda = 0.10, g = 1.1060$

N	$\Delta E_1 \cdot N$	$\Delta E_2 \cdot N$	$\Delta E_3 \cdot N$	$\Delta E_4 \cdot N$
6	1.7140	13.3598	27.3562	36.8449
7	1.7171	13.4548	27.8103	38.0875
8	1.7185	13.5186	28.1215	38.8795
9	1.7197	13.5634	28.3419	39.4109
10	1.7207	13.5958	28.5030	39.7828
11	1.7216	13.6202	28.6238	40.0522
12	1.7222	13.6389	28.7164	40.2530
13	1.7228	13.6536	28.7889	40.4065
14	1.7237	13.6654	28.8471	40.5265
∞	1.7304	13.7381	29.1481	41.0436

$$\Delta E \cdot N = A + \frac{B}{N} + \frac{C}{N^2} + \frac{D}{N^3}, \quad (8)$$

A, B, C, D 由最小二乘法拟合得到, A 就对应于 N 趋于 ∞ 的 $2\pi\xi\chi$ 值, 在表 1 至表 5 中最后一列给出. 图 1 是 $\beta = 0.06, \lambda = 0.06$ 时 $\Delta E_1 \cdot N$ 的一次拟合曲线. 为了显示清楚, 我们把 y 轴坐标取为 $(\Delta E_1 \cdot N - A)$. 图 2 是 $\beta = 0.20, \lambda = 0.10$ 时 $\Delta E_2 \cdot N$ 的三次拟合曲线. 数值计算结果表明拟合精度为 $10^{-4} - 10^{-6}$. 同时, ξ 可由两个不同长度 N_1 和 N_2 的量子链的基态能量求出. 由(2)式和 $c = 1/2$, 得

$$\xi = \frac{12N_1N_2(N_1E_2 - N_2E_1)}{\pi(N_2^2 - N_1^2)}, \quad (9)$$

取 $N_2 = N_1 + 1$, 则

表 3 $\beta = 0.10, \lambda = 0.02, g = 1.0220$

N	$\Delta E_1 \cdot N$	$\Delta E_2 \cdot N$	$\Delta E_3 \cdot N$	$\Delta E_4 \cdot N$
6	1.6110	12.6311	25.9699	34.5434
7	1.6097	12.6813	26.3012	35.5787
8	1.6089	12.7141	26.5203	36.2562
9	1.6085	12.7367	26.6723	36.7222
10	1.6082	12.7530	26.7819	37.0557
11	1.6081	12.7652	26.8634	37.3023
12	1.6081	12.7744	26.9257	37.4898
13	1.6081	12.7816	26.9744	37.6355
14	1.6082	12.7872	27.0129	37.7511
∞	1.6056	12.8226	27.2426	38.4123

表 4 $\beta = 0.20, \lambda = 0.10, g = 1.1060$

N	$\Delta E_1 \cdot N$	$\Delta E_2 \cdot N$	$\Delta E_3 \cdot N$	$\Delta E_4 \cdot N$
6	1.7455	13.6053	27.7443	37.1246
7	1.7461	13.7110	28.2366	38.4339
8	1.7461	13.7820	28.5776	39.294
9	1.7457	13.8319	28.8212	39.8869
10	1.7452	13.8681	29.0000	40.3116
11	1.7444	13.8952	29.1347	40.6253
12	1.7438	13.9160	29.2384	40.8635
13	1.7430	13.9324	29.3196	41.0482
14	1.7424	13.9454	29.3845	41.1943
∞	1.7410	14.0235	29.7187	41.9728

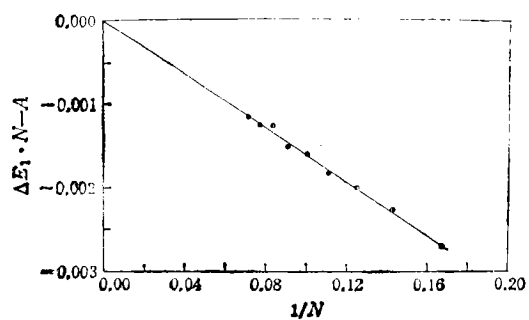


图 1

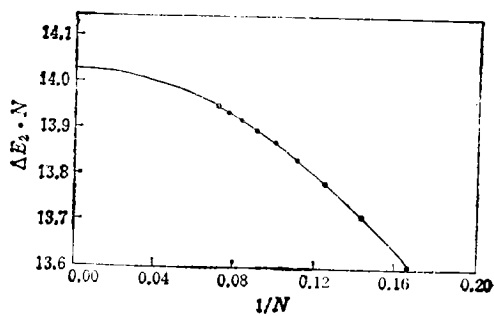


图 2

表 5 $\beta = 0.50, \lambda = 0.06, g = 1.0810$

N	$\Delta E_1 \cdot N$	$\Delta E_2 \cdot N$	$\Delta E_3 \cdot N$	$\Delta E_4 \cdot N$
6	1.7361	13.4726	27.4342	36.2502
7	1.7349	13.5650	27.9026	37.5188
8	1.7339	13.6266	28.2265	38.3850
9	1.7333	13.6696	28.4583	39.0015
10	1.7328	13.7008	28.6291	39.4547
11	1.7326	13.7242	28.7584	39.7971
12	1.7324	13.7420	28.8584	40.0616
13	1.7321	13.7561	28.9371	40.2701
14	1.7311	13.7673	29.0004	40.4371
∞	1.7282	13.8376	29.3770	41.4964

表 6 $\beta = 0.02$

λ	$\xi_{9,10}$	$\xi_{10,11}$	$\xi_{11,12}$	$\xi_{12,13}$	$\xi_{13,14}$	ξ
0.02	2.05	2.04	2.04	2.04	2.04	2.04
0.06	2.11	2.11	2.10	2.11	2.10	2.11
0.10	2.17	2.17	2.17	2.17	2.17	2.17

表 7 $\beta = 0.06$

λ	$\xi_{9,10}$	$\xi_{10,11}$	$\xi_{11,12}$	$\xi_{12,13}$	$\xi_{13,14}$	ξ
0.02	2.05	2.05	2.05	2.04	2.05	2.05
0.06	2.12	2.11	2.12	2.11	2.12	2.12
0.10	2.18	2.19	2.18	2.19	2.18	2.18

表 8 $\beta = 0.10$

λ	$\xi_{9,10}$	$\xi_{10,11}$	$\xi_{11,12}$	$\xi_{12,13}$	$\xi_{13,14}$	ξ
0.02	2.05	2.05	2.05	2.05	2.05	2.05
0.06	2.12	2.12	2.13	2.12	2.12	2.12
0.10	2.20	2.20	2.20	2.20	2.20	2.20

表 9 $\beta = 0.20$

λ	$\xi_{9,10}$	$\xi_{10,11}$	$\xi_{11,12}$	$\xi_{12,13}$	$\xi_{13,14}$	ξ
0.02	2.06	2.06	2.05	2.05	2.06	2.06
0.06	2.14	2.14	2.16	2.15	2.15	2.15
0.10	2.23	2.22	2.24	2.24	2.22	2.23

表 10 $\beta = 0.50$

λ	$\xi_{9,10}$	$\xi_{10,11}$	$\xi_{11,12}$	$\xi_{12,13}$	$\xi_{13,14}$	ξ
0.02	2.09	2.07	2.08	2.09	2.05	2.08
0.06	2.22	2.21	2.21	2.23	2.21	2.21
0.10	2.34	2.35	2.33	2.36	2.32	2.34

表 11 β, λ 和 g 取不同值时, χ 和 A 的外推值

β	λ	g	χ_1	χ_2	A_1	A_2
0.02	0.02	1.0204	0.124	0.997	2.12	2.99
	0.06	1.0612	0.124	0.997	2.11	2.98
	0.10	1.1020	0.124	1.00	2.12	2.99
0.06	0.02	1.0212	0.124	0.994	2.11	2.98
	0.06	1.0636	0.125	0.996	2.11	2.98
	0.10	1.1060	0.126	1.00	2.13	3.00
0.10	0.02	1.0220	0.125	0.996	2.12	2.98
	0.06	1.0654	0.126	1.00	2.12	2.99
	0.10	1.1080	0.125	1.00	2.12	2.99
0.20	0.02	1.0240	0.125	0.994	2.11	2.98
	0.06	1.0696	0.125	0.996	2.12	2.98
	0.10	1.1140	0.124	1.00	2.12	3.00
0.50	0.02	1.0280	0.125	0.994	2.11	2.98
	0.06	1.0810	0.124	0.997	2.12	2.99
	0.10	1.1350	0.126	0.998	2.12	3.00

$$\xi = \frac{12N_1(N_1 + 1)[N_1E_2 - (N_1 + 1)E_1]}{\pi(2N_1 + 1)}. \quad (10)$$

• 是 $\beta = 0.06$, $\lambda = 0.06$ 时, 计算出的 $\Delta E_1 \cdot N$ 作为 $1/N$ 的函数的数据点; 实线是对这些数据点的最小二乘法拟合(一次拟合)曲线。为了显示清楚, 我们把 y 轴坐标取为 $(\Delta E_1 \cdot N - A)$, 其中 $A = 1.6635$, $B = -0.01609$

• 是 $\beta = 0.20$, $\lambda = 0.10$ 时, 计算出的 $\Delta E_2 \cdot N$ 作为 $1/N$ 的函数的数据点; 实线是对这些数据点的最小二乘法拟合(三次拟合)曲线, 其中 $A = 14.0228$, $B = 0.21157$, $C = -19.5168$, $D = 19.3083$

表 6 至表 10 给出由不同 N 和 $(N + 1)$ 对应的基态能量求得的 ξ 值。这里要指出一点, (10)式中两个很接近的大数相减后, 只剩下三位有效数字。而因为表中不同 N 值对应的 ξ 几乎相等, 所以我们取其平均值, 可以认为这就是外推值。并据此来计算 χ_0 和 A_0 的值, 这些数值列在表 11 中。

现在讨论计算结果。从共形场理论知道, χ_1, χ_2 应分别为 $1/8$ 和 1 。显然我们得到的数值与此相符, 最大的误差是 0.8% 。这是由 ξ 的误差而来的, 即由有限尺度效应产生的。另外, 在 0.8% 的误差之内, 有

$$A_1 = \chi_1 + 1 + 1, \quad (11)$$

$$A_2 = \chi_2 + 1 + 1. \quad (12)$$

这个结果和共形场论的预言相符, 即对于标度 χ , 有一组态其相应的能隙收敛于 $\chi + \bar{n} (n = \bar{n} = 0, 1, 2, \dots)^{[2]}$ 。

这样, 我们用数值计算得到了具有次近邻相互作用的一维量子链的反常标度, 并建立了此模型的共形场论。它属于 Ising 普适类, 反常标度是 $\Delta = 0, 1/16$ 和 $1/2$, 这是和模型的临界指数相联系的。

- [1] A. A. Belavin, A. M. Polyakov and A. B. Zamolodchikov, *Nucl. Phys.*, **B241** (1984), 333.
- [2] J. Cardy, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 11(1987).
- [3] D. Friedan, Z. Qiu and S. Shenker, *Phys. Rev. Lett.*, **52**(1984), 1575.
- [4] V. G. Kac, *Lecture Notes in Phys.*, **94**(1979), 441.
- [5] G. V. Gehlen, V. Rittenberg and H. Ruegg, *J. Phys. A*, **19**(1985) 107.
- [6] F. Woynarovich, *Phys. Rev. Lett.*, **59**(1987), 259.
- [7] C. J. Hamer, G. R. W. Quispel and M. T. Batchelor, *J. Phys. A*, **20**(1987), 5677.
- [8] F. C. Alcaraz, M. N. Barber and M. T. Batchelor, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 771.
- [9] J. Cardy, *Nucl. Phys.*, **B270** (1986), 186.
- [10] F. C. Alcaraz and M. N. Barber, *J. Phys. A*, **20**(1987), 179.
- [11] H. H. Roomany, H. W. Wyld and L. E. Holloway, *Phys. Rev.*, **D21**(1980), 1557.
- [12] H. Y. Zhang and B. W. Xu, *Commun. Theor. Phys.*, **18**(1992), 1.

INVESTIGATION OF ONE-DIMENSIONAL NNN INTERACTION QUANTUM CHAIN BY CONFORMAL INVARIANCE AND THE LANCZOS METHOD

ZHANG HAI-YAN XU BO-WEI

Department of Physics, Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200030

(Received 3 May 1993)

ABSTRACT

The energies of the ground state and the lowest-excited states of the one-dimensional NNN interaction quantum chain are calculated by using Lanczos method. The anomalous dimensions and normalizing constant are given from conformal field theory.

PACC: 0550; 0220