

自旋 $1/2$ XXZ 量子链的相图*

陈 志 坚¹⁾

(上海交通大学物理系, 上海 200030)

章 豫 梅

(同济大学物理系, 上海 200092)

许 伯 威

(上海交通大学物理系, 上海 200030)

(1994年8月3日收到)

利用自旋 $1/2$ XXZ 量子链与 Sine-Gordon 模型的等价性, 在高斯有效势方法下, 引入大动量截断因子, 分析 Sine-Gordon 模型的相图, 得到 XXZ 量子链的零质量区, 并与精确解进行了比较和讨论.

PACC: 1110; 0370

1 引 言

我们知道, 自旋 $1/2$ XXZ 量子链可精确求解^[1], 条件 $J_x = J_y = 1$, $|J_z| \leq 1$ 对应参数空间中无无能隙区. 由于精确解在数学上比较复杂, 所以人们试用简便的方法^[2-4], 例如可把 XXZ 量子链等价 Sine-Gordon (SG) 模型^[2]. 对于 SG 模型, Coleman^[5] 给出的相变条件为 $\beta^2 = 8\pi$, 对应到 XXZ 模型的参数为 $J_z = 3\pi/10$. 虽然这个结果与精确解 $J_z = 1$ 大致接近, 但是却没有确定当 $|J_z| \leq 1$ 时是否仍是能隙为零质量区. 而按 Coleman 的分析, 当 $\beta^2 > 8\pi$, 即 $J_z < 1$, 且大动量截断趋向无限大时系统的基态失去了稳定性, 因而无法讨论. Luther 和 Peschel^[6] 曾经讨论 XXZ 链的玻色化, 在忽略了大动量散射后得到了一个 Tomonaga 哈密顿量. 并外推到相变点为 $J_z = \pi/2$. 本文中先将 XXZ 量子链系统地玻色化为 SG 模型, 然后用高斯有效势取大动量截断分析其相变特点. 我们发现, 当 $J_z = 3\pi/10$ 时, 重整化质量为零, 当 $0 < J_z < 3\pi/10$ 时, 在能量密度与质量参数平面的相图, 只有零质量是稳定态, 所以仍是重整化零质量区. 这样与精确解比较好地符合, 并且指出此相变是 Kosterlitz-Thouless 相变^[7,8].

2 XXZ 量子链的玻色化

自旋 $1/2$ 的 XXZ 量子链的哈密顿量为

* 国家自然科学基金资助的课题.

1) 现在通讯地址: 中国科学院理论物理研究所, 北京 100080

$$H_{XXZ} = -\frac{1}{2} \sum_j^N (S_j^+ S_{j+1}^- + S_j^- S_{j+1}^+) + J_z \sum_j^N \left(S_j^+ S_j^- - \frac{1}{2} \right) \left(S_{j+1}^- S_{j+1}^+ - \frac{1}{2} \right), \quad (1)$$

其中 N 为总格点数, 并已取 $J_x = J_y = 1$, 利用 Jordan-Wigner 变换

$$S_j^- = \exp \left\{ -i\pi \sum_{n=1}^{j-1} C_n^+ C_n \right\} C_j, \quad (2)$$

$$S_j^+ = C_j^+ \exp \left\{ i\pi \sum_{n=1}^{j-1} C_n^+ C_n \right\}, \quad (3)$$

其中 $C_n^+(C_n)$ 为产生(或湮没)算符。考虑到周期性边界条件和半满带下, 则 XXZ 量子链可等价于一个无自旋的费密场

$$H_{XXZ} = -\frac{1}{2} \sum_j^N (C_j^+ C_{j+1} + C_{j+1}^+ C_j) + J_z \sum_j^N \left(C_j^+ C_j - \frac{1}{2} \right) \left(C_{j+1}^+ C_{j+1} - \frac{1}{2} \right). \quad (4)$$

作傅里叶变换

$$C_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \exp[ikna] C_n, \quad -\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}, \quad (5)$$

$$\rho(k) = \sum_p C_{p+k}^+ C_p, \quad (6)$$

其中 a 为格点常数, 则(4)式可写为

$$\begin{aligned} H_{XXZ} = & -\sum_k C_k^+ C_k \cos(ka) \\ & + \frac{J_z}{N} \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \frac{1}{N} \sum_n e^{i\pi(k_1 - k_2 + k_3 - k_4)n} C_{k_1}^+ C_{k_2} C_{k_3}^+ C_{k_4} [e^{i(k_3 - k_4)a} - 1] \\ & + \text{const.}, \end{aligned} \quad (7)$$

其中利用了等式

$$\frac{1}{2} \sum_j (C_j^+ C_j + C_{j+1}^+ C_{j+1}) = \sum_j (C_j^+ C_j)^2. \quad (8)$$

下面我们考虑连续近似和低能激发态情形。当 $J_z > 0$ 时, 对于基态 $\sum_j S_j^z = 0$, 相当在“费密面” $\pm k_F = \pm \pi/2a$, 重要的模式是波矢处在 $\pm k_F$ 附近的两支, 分别记以下标 1 和 2, 因而可在 $\pm k_F$ 附近把色散关系展成直线, 则(7)式等号右边第一项为

$$-\sum_k C_k^+ C_k \cos(ka) = a \sum_k k [C_{1,k+k_F}^+ C_{1,k+k_F} - C_{2,k-k_F}^+ C_{2,k-k_F}]. \quad (9)$$

而(7)式等号右边第二项中的非零贡献来自 $(k_3 - k_4)a \approx \pm\pi$, 这显然涉及波矢的两种组合, 即 $k_1 - k_2 + k_3 - k_4 = 0$ 及 $\pm 2\pi/a$ 。这两类贡献之和为

$$\begin{aligned} & J_z \frac{4}{N} \sum_k \rho_1(k) \rho_2(-k) \\ & - J_z \frac{2}{N} \sum_{q_1 - q_2 + q_3 - q_4 = 0} (C_{1,q_1+k_F}^+ C_{2,q_2-k_F} C_{1,q_3+k_F}^+ C_{2,q_4-k_F} + \text{H.c.}) + \text{const.} \end{aligned} \quad (10)$$

将(8)和(9)式代入(7)式, 得

$$H_{XXZ} = a \sum_k k [C_{1,k+k_F}^+ C_{1,k+k_F} - C_{2,k-k_F}^+ C_{2,k-k_F}]$$

$$\begin{aligned}
& + J_z \frac{4}{N} \sum_k \rho_1(k) \rho_2(-k) \\
& - J_z \frac{2}{N} \sum_{q_1, -q_2+q_3-q_4=0} (C_{1,q_1+k_F}^+ C_{2,q_2-k_F} C_{1,q_3+k_F}^+ C_{2,q_4+k_F} + \text{H.c.}) + \text{const.},
\end{aligned} \quad (11)$$

其中 $L = Na$ 。如果忽略了最后一项大动量散射项, 则(11)式成为可对角化的 Tomonaga 模型^[6]。在下述空间坐标变换下

$$\phi^+(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{-ikx} (C_{1,k+k_F}^+, C_{2,k-k_F}^+) = (L^+(x), R^+(x)). \quad (12)$$

(11)式可写为

$$\begin{aligned}
H_{XXZ} = a \int_x [R^+(x) i \partial_x R(x) - L^+(x) i \partial_x L(x)] \\
+ a J_z \int_x J_\mu(x) J_\mu(x) - 2a J_z \int_x [(L^+(x) R(x))^2 \\
+ (R^+(x) L(x))^2],
\end{aligned} \quad (13)$$

其中

$$J_\mu(x) J_\mu(x) = J_0 - J_1 \quad \mu = 0, 1, \quad (14)$$

$$J_0(x) = L^+(x) L(x) + R^+(x) R(x), \quad (15)$$

$$J_1(x) = L^+(x) L(x) - R^+(x) R(x). \quad (16)$$

下面将费密场玻色化, 定义^[9,10]

$$R(x) = \frac{-i}{\sqrt{2\pi a}} \exp \left[-i\sqrt{\pi} \int_{-\infty}^x \Pi(y) dy + i\sqrt{\pi} \phi(x) \right], \quad (17)$$

$$L(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \exp \left[i\sqrt{\pi} \int_{-\infty}^x \Pi(y) dy + i\sqrt{\pi} \phi(x) \right], \quad (18)$$

其中 $\phi(x)$ 为玻色场, $\Pi(x)$ 为 $\phi(x)$ 的正则共轭量。

$$[\phi(x), \Pi(y)] = i\delta_{xy}. \quad (19)$$

我们从(17),(18)式定义的费密算符与玻色算符的关系可证明如下等式:

$$\int_x [R^+(x) \partial_x R(x) - L^+(x) \partial_x L(x)] = \frac{1}{2} \int_x [\Pi^2 + (\partial_x \phi)^2], \quad (20)$$

$$R^+(x) L(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} e^{i2\sqrt{\pi} \phi(x)}, \quad (21)$$

$$J_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \partial_x \phi(x), \quad (22)$$

$$J_1(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \Pi(x). \quad (23)$$

将(20)–(23)式代入(13)式, 得

$$H = \frac{H_{XXZ}}{a}$$

$$- \int_x \left[\frac{1}{2} \left(1 - \frac{2J_z}{\pi} \right) \Pi^2 + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{2J_z}{\pi} \right) (\partial_x \phi(x))^2 - \frac{4J_z}{(2\pi a)^2} \cos(4\sqrt{\pi}\phi) \right], \quad (24)$$

或重新标度为

$$H = \omega_0 \int_x \frac{1}{2} \tilde{\Pi}^2(x) + \frac{1}{2} (\partial_x \tilde{\phi}(x))^2 - \frac{\alpha}{\beta^2} \cos \beta \tilde{\phi}(x), \quad (25)$$

其中

$$\tilde{\phi}(x) = \left(\frac{\pi + 2J_z}{\pi - 2J_z} \right)^{\frac{1}{2}} \phi(x), \quad (26)$$

$$\tilde{\Pi}(x) = \left(\frac{\pi - 2J_z}{\pi + 2J_z} \right)^{\frac{1}{2}} \Pi(x), \quad (27)$$

$$\beta^2 = 16\pi \left(\frac{\pi - 2J_z}{\pi + 2J_z} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (28)$$

$$\alpha = \frac{1}{a^2} \frac{16J_z}{\pi + 2J_z}, \quad (29)$$

$$\omega_0 = \sqrt{1 - \left(\frac{2J_z}{\pi} \right)^2}. \quad (30)$$

从(28)和(29)式得 α 与 β^2 的关系

$$\alpha a^2 = 4 \left[1 - \left(\frac{\beta^2}{16\pi} \right)^2 \right]. \quad (31)$$

从(28)至(30)式得 XXZ 量子链等价到只有一个参数的 SG 模型, 即 J_z 的取值范围有一定限制, $|J_z| \leq \pi/2$. 下面将在这个取值范围内分析 SG 模型的相变并与 XXZ 量子链的精确解比较.

3 相 图

利用高斯有效势方法在取大动量截断下求(25)式的近似基态, 即取^[11]

$$\phi = \Phi + \int \frac{dp}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{2\omega_p(m)}} [A_m(p)e^{-ipx} + A_m^\dagger(p)e^{ipx}], \quad (32)$$

其中 $\omega_p(m) = (p^2 + m^2)^{1/2}$, 得到了基态的能量密度为^[12,13,8]

$$m \langle 0 | H | 0 \rangle_m = E(m^2, \Phi) = \omega_0 \left[\frac{1}{2} D - \frac{1}{4} m^2 G - \frac{\alpha}{\beta^2} Z(m^2, \Phi) \cos \beta \Phi \right], \quad (33)$$

其中

$$D = \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \frac{dp}{2\pi} (p^2 + m^2)^{\frac{1}{2}}, \quad (34)$$

$$G = \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \frac{dp}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{p^2 + m^2}}, \quad (35)$$

$$Z(m^2, \Phi) = \exp \left[-\frac{\beta^2}{4} G \right], \quad (36)$$

其中 m^2, Φ 为变分参量, $\Lambda = 1/a$ 为大动量截断, $|0\rangle_m$ 为高斯近似基态, 其满足 $A_m(p)|0\rangle_m = 0$. 在极值 $\Phi = 0$ 条件下, 定义重整化质量参数 ξ 以取代 m^2 , $m^2 = \alpha\xi$, 则有

$$E(\xi) = E(m^2, \Phi = 0) = \frac{1}{4\pi a^2} \sqrt{1 + \alpha\xi a^2} - \frac{\alpha}{\beta^2} Z(\xi), \quad (37)$$

$$Z(\xi) = \exp \left[-\frac{\beta^2}{4\pi} \ln \left(\frac{1 + \sqrt{1 + \alpha\xi a^2}}{\sqrt{\alpha\xi a^2}} \right) \right]. \quad (38)$$

由极值条件 $\partial E / \partial \xi = 0$, 得

$$\xi = Z(\xi), \quad (39)$$

或

$$\alpha\Lambda^{-1} = 4Z^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} (Z^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} - Z)^{-1}, \quad (40)$$

其中 $\gamma = \beta^2/8\pi$. 再由稳定条件 $\partial^2 E / \partial \xi^2 > 0$, 得稳定解的边界条件

$$\xi = \frac{1}{\alpha a^2} (\gamma^2 - 1). \quad (41)$$

将(41)式代入(40)式, 得

$$\alpha a^2 = \frac{(\gamma + 1)^{\gamma+1}}{(\gamma - 1)^{\gamma-1}}. \quad (42)$$

图 1 中实线 1 对应 $Z = 0$, 代表一连续相变. 重整化质量从非零的相区 I 连续地减少到质量为零($Z = 0$)的边界而进入无质量相区 II. 实线 2 对应(42)式, 即(40)式中的 Z 取不同值时在 $\alpha a^2 - \gamma$ 平面上的曲线族的包络线, 其代表不连续的一级相变. 实线 3 是由 XXZ 模型的 $\alpha a^2 - \beta^2$ 的关系式(31)决定. 由此可见 XXZ 模型的相变是连续的. 从对(37)式的 $E(\xi) - \xi$ 的分析, 得到如下结论^[7]: 在 I 区内只有 ξ 为有限值的态是稳定态. 在 II 区内只有 $\xi = 0$ 的态是稳定态, 这一点可由 $E(\xi)$ 对 ξ 的一次微商求得

$$\frac{\partial E}{\partial \xi} = \lim_{\xi \rightarrow 0} \frac{\alpha}{8\pi} [1 - (\alpha\xi)^{\gamma-1} \alpha(4a^{-2})^{-\gamma}]. \quad (43)$$

当 $\beta^2 > 8\pi$ 和 $\xi \rightarrow 0$, E 具有极小值, 由此得到在区间 $8\pi \leq \beta^2 \leq 16\pi$, 对应 XXZ 量子链的参数为 $0 \leq J_z \leq 3\pi/10$ 是重整化零质量区, 所以我们的结论与精确解一致. 同时我们认为经过实线 1 的相变是 KT 型^[8].

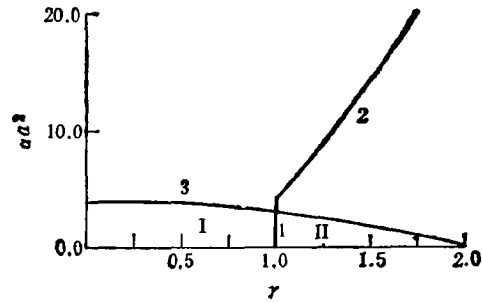


图 1 SG 模型以及 XXZ 链的相图

4 结 论

我们把 XXZ 量子链完整映射到一个一维 SG 模型。并用高斯有效势方法讨论了其基态。置 $J_x = J_y = 1$, 当 J_z 减小到 $3\pi/10 \simeq 1$ 时, XXZ 链的基态经历了一维空间所特有的 KT 相变, 即在整个 $0 \leq J_z \leq 3\pi/10$ 区间里, 零质量的基态是稳定的, 因而有共形不变性。而按场论的方法取无限大的动量截断, 则 β^2 达到 8π 时基态能量趋向负无限大, 无法继续分析。保留有限大的大动量截断, 正体现了格点模型的离散性。虽则在玻色化过程中, 引入了色散关系的线性化, 因而对大动量散射强度可能有影响, 高斯有效势的结果与严格解的结果仍是很接近的。

- [1] R. J. Baxter, *Exactly Solved Model in Statistical Mechanics* (Academy Press, 1982).
- [2] E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Systems* (Addison Wesley, 1991), p. 84.
- [3] M. P. M. den Nijs, *Phys. Rev.*, **B23**(1981), 6111.
- [4] J. D. Johnson, S. Krinsky and B. M. McCoy, *Phys. Rev.*, **A8**(1973), 2526.
- [5] S. Coleman, *Phys. Rev.*, **D11**(1975), 2088.
- [6] A. Luther and I. Peschel, *Phys. Rev.*, **B12**(1975), 3908.
- [7] M. Kosterlitz and D. J. Thouless, *J. Phys. C*, **6**(1973), 1181.
- [8] Z. J. Chen, Y. M. Zhang and B. W. Xu, *Phys. Rev.*, **B49**(1994), 12525.
- [9] Z. J. Chen, Y. M. Zhang and B. W. Xu, *Commun. Theor. Phys.*, accepted.
- [10] S. Takada and S. Misawa, *Prog. Theor. Phys.*, **66**(1981), 101.
- [11] P. M. Stevenon, *Phys. Rev.*, **D30**(1984), 1712; *ibid.*, **D32**(1985), 1389.
- [12] B. W. Xu and Y. M. Zhang, *J. Phys. A*, **25**(1992), L1039.
- [13] Y. M. Zhang, M. L. Zhou and B. W. Xu, *Phys. Rev.*, **B47**(1993), 808.

PHASE DIGRAM OF SPIN 1/2 XXZ CHAIN

CHEN ZHI-JIAN

(Department of Physics, Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200030)

ZHANG YU-MEI

(Department of Physics, Tongji University, Shanghai 200092)

Xu Bo-wei

(Department of Physics, Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200030)

(Received 3 August 1994)

ABSTRACT

By mapping the spin 1/2 XXZ quantum chain to sine-Gordon model, we have analyzed the phase diagram of sine-Gordon model using the method of gaussian wave functional and taking the large momentum cutoff. We have obtained the massless region which agrees with the exact solution quite well.

PACC: 1110; 0370