

一维点阵局域势中玻色系统的相图^{*}

石云龙¹⁾²⁾ 章豫梅²⁾ 陈 鸿²⁾ 吴 翔²⁾

1) (雁北师范学院物理系, 大同 037000)

2) (同济大学物理系, 上海 200092)

(1998 年 1 月 20 日收到; 1998 年 4 月 23 日收到修改稿)

利用高斯波泛函方法, 研究了处于一维点阵局域势 $\cos[\beta\phi(nR)]$ 中的玻色系统基态的相变行为. 研究表明, 一维点阵局域势系统的稳定性取决于参量 $\gamma = \beta^2/4\pi$ 和重整化质量 μ . 在不同的参量区域, μ 有不同的多值性, 从而在参量空间中划出相区. $\gamma = \gamma_1$ 时, 相界随杂质浓度 c 而定, c 趋于零时, 与单杂质模型的结论相符, γ_2 相界与连续模型的结论相符.

PACC: 7210; 7155

1 引 言

一维量子 sine-Gordon 系统的相变问题引起了人们的兴趣. 已有的工作表明, 当重整化质量趋于零时, 系统经历由强关联至弱关联的相变, 相界为 $\beta^2 = 8\pi^{[1-3]}$ (在相应的一维电子系统中, β 表示电子-电子相互作用). 由于一些材料中通常存在杂质或缺陷, 一维空间不再是均匀的. 众所周知, 一维费密模型可以映射为一维玻色模型, 在一定条件下杂质作用也可简化为局域势, 即局域 sine-Gordon 模型. 对于单杂质模型, 也存在相应的重整化局域“质量”, 当它趋于零时, 系统的低能行为同样由局域强关联转变为弱关联, 但相界为 $\beta^2 = 4\pi^{[4,5]}$. 随杂质 (或缺陷) 浓度增加, 局域 sine-Gordon 系统又可过渡到连续的量子 sine-Gordon 系统. 杂质浓度的大小, 直接影响到系统势散射的作用以及它们的相干性. 我们认为, 对于多杂质模型, 同样存在一个重整化质量 μ , μ 的值划分相区. 可以预料, 多杂质模型的相变内容将更为丰富. 因此, 研究多杂质模型的相图, 将有助于更为深刻地理解它的物理内涵.

本文采用高斯波泛函方法研究一维点阵局域势玻色系统的基态行为, 求出了重整化局域质量方程, 进而利用质量方程在参量空间划定了随杂质浓度稠稀而变的相图, 并指出了点阵杂质模型与两种极限模型相变之间的关系.

2 模型与变分基态

考虑具有点阵杂质势的一维玻色模型, 其哈密顿量为

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 19574040) 及山西省自然科学基金 (批准号: 971008)、山西省教育委员会青年学科带头人基金资助的课题.

$$H = \frac{1}{2} \int [\Pi^2(x) + (\nabla \phi(x))^2] dx + \frac{\alpha}{\beta^2} \int V(x) [1 - \cos(\beta \phi(x))] dx, \quad (1)$$

其中

$$V(x) = \sum_{n=0, \pm 1, \dots} \delta(x - nR), \quad (2)$$

R 为两近邻杂质势之间的距离, α 为周期散射势垒的强度, 参量 β 为电子系统的标度, 源于电子-电子相互作用. 该模型与一维 **Kondo** 格点模型^[6]和轨道 **Kondo** 阵列模型^[7]有密切联系.

当 β 值较小时, (1) 式中的余弦项可展开至只含 $\phi(x)$ 的二次项. 在一般情况, 我们只讨论该系统的基态和低激发态, 则相应的哈密顿量可近似地用可解模型

$$H_M = \frac{1}{2} \int \{ \Pi^2(x) + [\nabla \phi(x)]^2 + \mu V(x) [\phi(x)]^2 \} dx \quad (3)$$

描述. 这里 μ 可视为重整化质量, 本文将通过变分来确定它. 可解模型哈密顿量(3)式与物理的哈密顿量(1)式有相同的空间分布. 变分法的宗旨是用(3)式的最佳基态来模拟(1)式的基态, 这与对通常的 **sine-Gordon** 模型^[3]和局域 **sine-Gordon** 模型^[5]的做法相似. 在文献中常称这种近似方法为自洽简谐振子近似. 若将场算符 $\phi(x)$ 和动量算符 $\Pi(x)$ 分别用玻色算符 $b_k, b_k^\dagger$ 表出:

$$\phi(x) = \sum_k \frac{1}{\sqrt{2\epsilon_k}} \psi_k(x) (b_k + b_k^\dagger), \quad (4)$$

$$\Pi(x) = -i \sum_k \sqrt{\frac{\epsilon_k}{2}} \psi_k(x) (b_k - b_k^\dagger), \quad (5)$$

则可将 H_M 对角化为

$$H_M = \sum_k \epsilon_k \left(b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2} \right). \quad (6)$$

这里本征函数组 $\{\psi_k(x)\}$ 和本征值 $\{\epsilon_k\}$ 需由本征方程

$$-\frac{d^2}{dx^2} \psi_k(x) + \mu V(x) \psi_k(x) = \epsilon_k^2 \psi_k(x) \quad (7)$$

确定.

利用杂质的周期性, 根据 Bloch 定理

$$\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x) = e^{ikx} u_k(x + nR), \quad (8)$$

可求出方程(7)的解为

$$|\psi_k(0)|^2 = \frac{1}{NR} \frac{\sin \epsilon_k R}{\sin \epsilon_k R - \frac{\mu}{2\epsilon_k R} \cos \epsilon_k R + \frac{\mu}{2\epsilon_k^2 R} \sin \epsilon_k R}, \quad (9)$$

其中 ϵ_k 满足^[8]

$$\cos kR = \cos \epsilon_k R + \frac{\mu}{2\epsilon_k} \sin \epsilon_k R. \quad (10)$$

相应地, 可解模型 H_M 的基态亦可从方程

$$b_k |\Phi_0(\mu)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \int dx \psi_k(x) \left[\sqrt{\epsilon_k} \phi(x) + i \frac{1}{\sqrt{\epsilon_k}} \Pi(x) \right] |\Phi_0(\mu)\rangle$$

$$= 0 \quad (\text{对于所有的 } k) \quad (11)$$

求得. 其解为一高斯波泛函

$$|\Phi_0(\mu)\rangle = \mathcal{N}^{1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \iint dx dx' \phi(x) K^{-1}(x, x') \phi(x') \right\}, \quad (12)$$

其中的核

$$K(x, x') = \sum_k \frac{1}{\epsilon_k} \phi_k(x) \phi_k(x') \quad (13)$$

满足

$$\int K(x, y) K^{-1}(y, x') dy = \delta(x - x'). \quad (14)$$

若取(12)式为试探基态波函数, 可利用高斯波泛函的性质求出哈密顿量(1)式的能量期待值

$$\begin{aligned} E(\mu) &= \langle \Phi_0(\mu) | H | \Phi_0(\mu) \rangle \\ &= \langle \Phi_0(\mu) | H_M | \Phi_0(\mu) \rangle + \langle \Phi_0(\mu) | H - H_M | \Phi_0(\mu) \rangle \\ &= E_0(\mu) - \frac{1}{4} \mu N K - \frac{\alpha}{\beta^2} N \exp \left(-\frac{1}{4} \beta^2 K \right), \end{aligned} \quad (15)$$

其中 $E_0(\mu)$ 为 H_M 的零点能, N 为整个系统空间 L 中的点阵杂质数, 变分参量 μ 由

$$\frac{d}{d\mu} E(\mu) = 0 \quad (16)$$

和关系式

$$\frac{d}{d\mu} E_0(\mu) = \langle \Phi_0(\mu) | \frac{d}{d\mu} H_M | \Phi_0(\mu) \rangle = \frac{1}{4} N K$$

求得

$$\mu = \alpha \exp \left(-\frac{1}{4} \beta^2 K \right), \quad (17)$$

其中出现的 K 可表为

$$\begin{aligned} K &= K(nR, nR) = K(0, 0) \\ &= \frac{1}{L} \sum_k \frac{1}{\epsilon_k \left(1 - \frac{\mu}{2\epsilon_k} \cot \epsilon_k R + \frac{\mu}{2\epsilon_k^2 R} \right)} \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\Lambda \frac{dk}{\epsilon \left(1 - \frac{\mu}{2\epsilon} \cot \epsilon R + \frac{\mu}{2\epsilon^2 R} \right)}, \end{aligned} \quad (18)$$

其中 Λ 为大动量截止. 利用(10)式, 将(18)式的积分区域由 K 空间转变到 ϵ 空间, 可得

$$K = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{d\epsilon}{\sqrt{\frac{1}{4} \mu^2 + \mu \epsilon \cot \epsilon R - \epsilon^2}}. \quad (19)$$

令 $z = -i\epsilon R$, 得

$$K = \frac{1}{\pi} \int_0^{\Lambda R} \frac{dz}{\sqrt{z^2 + (\mu R) z \coth z + \frac{1}{4}(\mu R)^2}}. \quad (20)$$

相应地,质量方程(17)变为

$$\mu = \alpha \exp \left\{ -\frac{\beta^2}{4\pi} \int_0^{\Lambda R} \frac{dz}{\sqrt{z^2 + (\mu R) z \coth z + \frac{1}{4}(\mu R)^2}} \right\}. \quad (21)$$

3 质量方程与相图

重整化质量 μ 值的大小,直接取决于杂质势散射强度 α ,参量 γ 和杂质浓度 $c = (\Lambda R)^{-1}$ 的大小.在参量空间中的相图亦由稳定基态的重整化质量确定.

事实上,系统基态的稳定性应由(15)式在满足(16)式条件下的能量极小给出,亦即

$$\frac{d^2 E}{d\mu^2} = -\frac{1}{4} N \left(1 + \frac{1}{4} \mu \beta^2 \frac{dK}{d\mu} \right) \frac{dK}{d\mu} \geq 0. \quad (22)$$

临界条件给出

$$1 + \frac{1}{4} \mu \beta^2 \frac{dK}{d\mu} = 0. \quad (23)$$

由质量方程(21)通过数值计算,图1给出 $c=0.001$ 时,在能量极值条件下具有不同 μ 值的 $\alpha/\Lambda\gamma (= \beta^2/4\pi)$ 等质量曲线族.再由(21)式和临界条件(23)式通过数值计算,给出该空间的相界.由图1可以看出,在 $\alpha/\Lambda\gamma$ 空间上不同的区域内,等质量曲线具有不同的交叠性,相应于满足系统能量极值条件的 μ 值的非唯一性.而相界的确定也可由临界条件(23)式的近似解析结果直接给出.

事实上,在(21)式中注意到

$$z \coth z \cong \begin{cases} 1 & z \leq 1, \\ z & z \geq 1, \end{cases} \quad (24)$$

K 的表达式可由(20)式近似表达为

$$K = \frac{1}{\pi} \ln \frac{\Lambda R + \frac{1}{2} \mu R}{\sqrt{\mu R + \frac{1}{4}(\mu R)^2}} + O(1). \quad (25)$$

相应临界条件(23)式变为

$$\frac{1}{8} \left(\frac{\mu}{\Lambda} \right)^2 + \left[\frac{1}{4} + \frac{c}{2} - \frac{\gamma}{4}(1-c) \right] \frac{\mu}{\Lambda} + \left(1 - \frac{\gamma}{2} \right) c = 0. \quad (26)$$

显然,由(26)式可以直接看出, γ 值可分为三个区域(另一区域只给出 $\mu < 0$ 的值,故舍去),其中相应的两个相界分别为

$$\gamma_1 = 1 + \frac{c(1-3c) + 2(1-2c)\sqrt{c}}{(1-c)^2}, \quad \gamma_2 = 2. \quad (27)$$

可以看出,这里第一个相界随杂质浓度 c 而定.当 $c \rightarrow 0$ 时(严格的单杂质模型), $\gamma \rightarrow 1$, 与

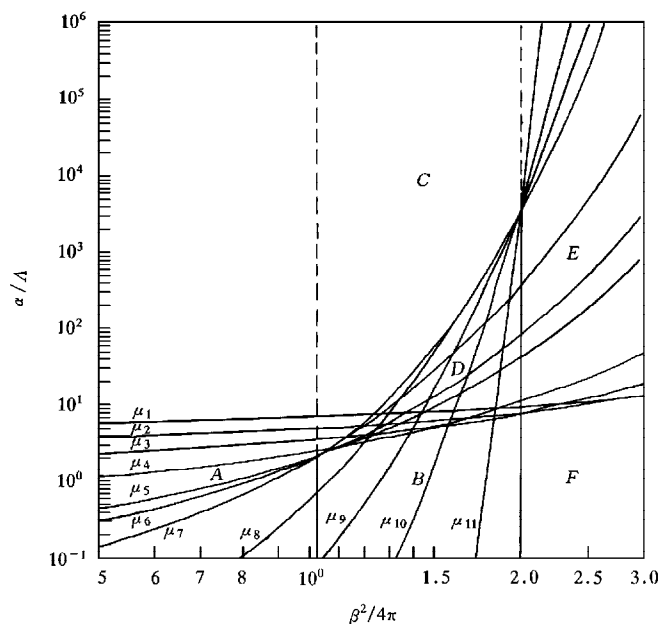


图1 $c=0.001$ 时等质量曲线相图 第一、二条竖直线分别相应于 $\gamma = \gamma_1, \gamma_2$, $\mu_1/\Delta=5, \mu_2/\Delta=3, \mu_3/\Delta=1.5, \mu_4/\Delta=0.6, \mu_5/\Delta=0.1, \mu_6/\Delta=0.05, \mu_7/\Delta=0.01, \mu_8/\Delta=10^{-4}, \mu_9/\Delta=10^{-6}, \mu_{10}/\Delta=10^{-10}, \mu_{11}/\Delta=10^{-30}$

过去的结论相一致^[4]. γ_2 与一维连续杂质链重整化质量 μ 消失的二级相变点相一致^[3].

1) 当 $\gamma < \gamma_1$ 时

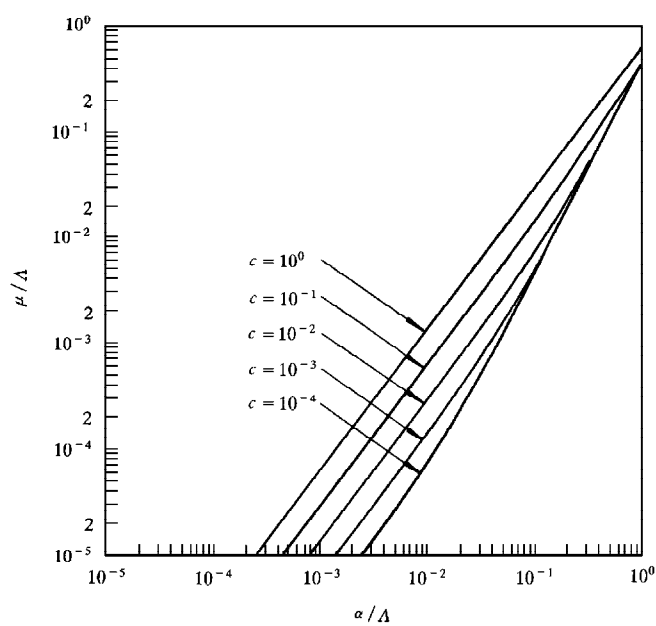
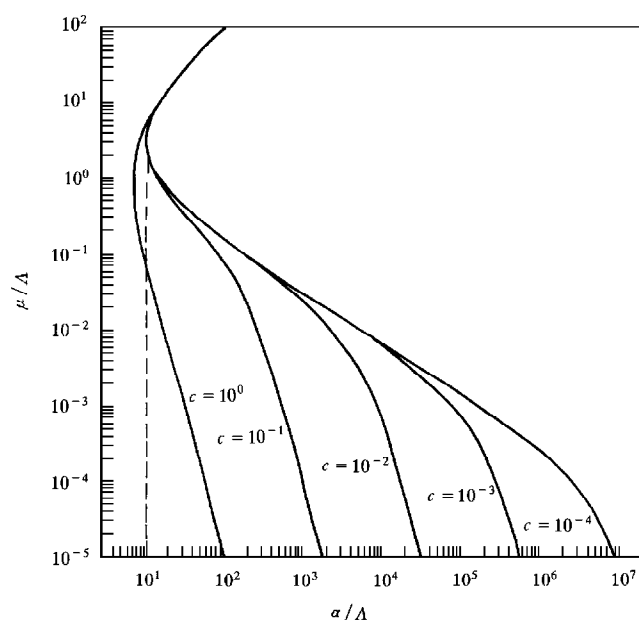
在 α/Δ 的全区间, μ 只有单值解相应于基态能量极小值. 该区域与单杂质模型局域质量非零区域相对应. 由(21)式通过数值计算, 给出 $\gamma=0.5$ 时的 μ/Δ - α/Δ 等密度曲线族图(图2)充分说明了这一点.

2) 当 $\gamma > 2$ 时

对应每一杂质浓度 c , 存在一临界值 α^* , 当 $\alpha > \alpha^*$ 时, μ 有双值解相应基态能量极值(如图1中E区域所示). 可以证明, 其中较大的 μ 值相应于系统稳定态, 而较小的 μ 值相应不稳定态, $\mu=0$ 也对应稳定态. 当 $\alpha < \alpha^*$ 时, μ 只有零解对应系统稳定态(如图1中F区域所示). 由(21)式通过数值计算给出的 $\gamma=2.5$ 时的等密度曲线族图(图3)可直观地看出这一点. 其中由临界值 α^* 确定的图1中E—F区域相界可由(21)和(23)式联立给出. 显然, 该相变过程为一级相变, 即在边界上 μ 不连续地变为零. 而B—F区域相界相应于二级相变, 亦即在 $\gamma=2$ 边界上 μ 值连续变至零.

3) 当 $\gamma_1 < \gamma < \gamma_2$ 时

对应每一杂质浓度 c , 存在两个临界值 α_1^*, α_2^* . 当 $\alpha < \alpha_1^*$ 时, μ 只有一个解相应于基态能量极值, 该区域对应连续模型重整化质量非零区域. 因此, 这里对应稠杂质浓度行为, 相应于图1中B区域; 当 $\alpha > \alpha_2^*$ 时, μ 亦只有唯一非零解, 相应地, 该区域对应稀杂质浓度行为, 相应于图1中C区域; 当 $\alpha_1^* < \alpha < \alpha_2^*$ 时, 每一 α 值对应三个不同的 μ 值相应于

图2 $\gamma=0.5$ 时等密度曲线相图图3 $\gamma=2.5$ 时等密度曲线相图 虚线相应于 $\alpha = \alpha^*$

基态能量极值,如图1中D区域所示,其中 μ 值较大的解与较小的解分别对应系统的稳定态或亚稳态,而中间值对应不稳定态,由(21)式通过数值计算给出的 $\gamma=1.5$ 时的

μ/Λ - α/Λ 等密度曲线族图(图 4)亦可直观地说明这一点. 同理, 由(21)和(23)式联立给出 α_1^* , α_2^* 值, 同时给出图 1 中 C—D, B—D 区域相界.

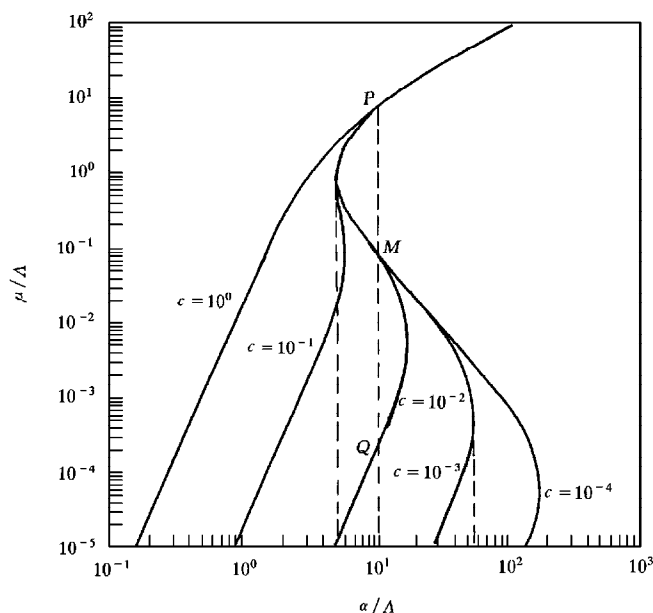


图 4 $\gamma=1.5$ 时等密度曲线相图 第一至第三条虚线分别相应于 $\alpha = \alpha_1^*$, α_0 , α_2^*

图 1 D 区域内的三个 μ 值, 究竟哪一个值相应于稳定态, 可在图 4 中采用等面积法来判定. 以 $c=0.01$ 曲线为例, 当 $\alpha > \alpha_0$ 时, μ 值较大的解对应系统稳定态, 相应 μ 值较小的解对应亚稳态, 模型显示稀薄杂质行为; 当 $\alpha < \alpha_0$ 时, μ 值较小的解对应系统稳定态, 相应 μ 值较大的解对应亚稳态, 模型显示稠密杂质行为. 如若系统由稀薄杂质区域随 α 的减小变化, 则必经 P 点通过 PMQ 混合区跳到 Q 点的稠密杂质状区域. 类似于气液相变, 整个过程两相共存, 为一级相变. P, Q 两点的具体位置可经 PMQ 直线与 PMQ 曲线所围的两块面积相等来确定.

事实上, 在 $\frac{d}{d\mu}E(\mu) = 0$ 条件下, 由方程(15)可得

$$\frac{\partial}{\partial \ln \alpha} E(\mu) = -\frac{N}{\beta^2} \mu. \quad (28)$$

若使 P, Q 两点共存, 均满足系统稳定, 则需要有 $E_P = E_Q$, 即有

$$\int_{E_P}^{E_Q} \mu d \ln \alpha = 0. \quad (29)$$

从而说明由 μ/Λ , α/Λ 经 P, Q 两点所围的两块面积相等, 给出 P, Q 两点的具体位置.

4 结 论

本文采用高斯波泛函方法讨论了一维点阵局域势中的玻色系统的相变问题. 研究表

明,点阵杂质系统的基态和低激发态取决于 α/Λ - γ 空间中的重整化质量 μ . 当 $\gamma < \gamma_1$ 时, μ 值只有单值解相应于系统基态能量极值,且为极小. 当 $\gamma > 2$ 时,在 $\alpha > \alpha^*$ 区间, μ 值有双值解相应于基态能量极值,其中较大的 μ 值相应于系统稳定态;当 $\alpha < \alpha^*$ 时, μ 只有取零值系统方可稳定. 而临界值 α^* 曲线为一级相变曲线. 当 $\gamma_1 < \gamma < 2$ 时,在 $\alpha < \alpha_1^*$ 区域, μ 只有单值解;当 $\alpha > \alpha_2^*$ 时, μ 亦只有唯一非零解相应稳定基态;当 $\alpha_1^* < \alpha < \alpha_2^*$ 时,系统有稳定、亚稳和不稳定三种状态. 在一定条件下,类似于气液相变,可达到两相共存,出现一级相变. 它们的具体位置由 α/Λ - α/Λ 空间的等面积法则判定.

另外,由(27)式可以看出, $\gamma = \gamma_1$ 相界依赖于杂质浓度 c , 且 $c \rightarrow 0$ 时, $\gamma_1 \rightarrow 1$, 与单杂质 sine-Gordon 模型的相界相一致. $\gamma_2 = 2$ 相界与连续 sine-Gordon 模型的相界相一致, 且 $\alpha < \alpha^*$ 时, 二级相变出现在 $\gamma = 2$ 处. 因此图 1 左上方为杂质稀薄系统稳定区域, 右下方为杂质稠密系统稳定区域.

综上所述,可见基态能量在参量平面的不同区域里有不同的解析形式,当参量变化时,能量在相界上的变化是不连续或不光滑的,也即系统经历了 0 K 下的量子相变. 关联函数(即能量的导数)在相界上的变化是不连续的. 因此,模型的低能行为可分为三个相. 一是凝聚相,它相当于重整化质量为零情形(类似于二维库仑气体低温下所凝聚的偶极矩相^[2]. 如所周知,有限温度的二维库仑气体与 0 K 的 sine-Gordon 模型间存在一一对应^[2].),它在区域 F 上是唯一稳定组态. 其次,在 $\mu \neq 0$ 的区域里,还存在两个不同的 μ 值共存的区域 D,即一个一级相变区域,因此还可以定义两个相. 二是类气相,它类似于单杂质模型的行为,在区域 C 是唯一稳定组态. 三是类液相,它相当于连续 sine-Gordon 模型,在区域 B 是唯一稳定组态. 在区域 E 中凝聚-气相共存. 而区域 D 中气-液相共存,两相可经过区域 A 而连续变化,因而气-液相界的左端是临界点,右端是气、液、凝聚三相共存的三相点.

模型(1)脱胎于 Kondo 格点模型^[6]和轨道 Kondo 阵列模型^[7]. 亦即当纵向交换能量取特殊值 $J_{\parallel} = \pi v_F$ 时,系统的自旋密度波就由(1)式的哈密顿量描述. 因而,对此模型的研究有助于对 Kondo 格点模型低温行为的理解.

- [1] S. Coleman, *Phys. Rev.*, **D11**(1975), 2088.
- [2] P. Minnhagen, *Rev. Mod. Phys.*, **59**(1987), 1001.
- [3] Bowei Xu, Yumei Zhang, *J. Phys.*, **A25**(1992), L1039.
- [4] C. L. Kane, M. P. A. Fisher, *Phys. Rev.*, **B46**(1992), 15233.
- [5] Bowei Xu, Yumei Zhang, *J. Phys.*, **A29**(1996), 7349.
- [6] O. Zachar, S. A. Kivelson, V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.*, **77**(1996), 1342.
- [7] V. J. Emery, S. A. Kivelson, *Phys. Rev. Lett.*, **71**(1993), 3701.
- [8] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (Wiley, New York, 1986).

PHASE DIAGRAM OF ONE-DIMENSIONAL BOSONS IN AN ARRAY OF LOCAL POTENTIALS*

SHI YUN-LONG¹⁾²⁾ ZHANG YU-MEI²⁾ CHEN HONG²⁾ WU XIANG²⁾

1) (*Department of Physics, Yanbei Normal Institute, Datong 200092*)

2) (*Department of Physics, Tongji University, Shanghai 200092*)

(Received 20 January 1998; revised manuscript received 23 April 1998)

ABSTRACT

The Gaussian wave functional method is applied to a boson system with an array of local potentials $\cos[\beta\phi(nR)]$ to study the phase transition of its ground state. The stable ground state is determined by the parameter $\gamma = \beta^2/4\pi$ and the renormalized mass μ . In different regions, μ can have different multiplicity, the phase diagram is thus depicted. The phase boundary $\gamma = \gamma_1$ depends on the concentration c ; for $c \rightarrow 0$, it coincides with that of the single impurity model, while for $\gamma = 2$ it coincides with the conclusion of the continuous model.

PACC: 7210; 7155

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 19574040) and by the Natural Science Foundation of Shanxi Province (Grant No. 971008), the Foundation for Young Leaders of Disciplines in Science from Education Commission of Shanxi Province, China.