

一维量子 XX-ZZ 模型的量子相变

钟 鸣, 刘小贤

(南京师范大学物理科学与技术学院, 江苏 南京 210097)

[摘要] 讨论了一维量子 XX-ZZ 模型的量子相变类型, 数值研究了协作参量、保真度在相变点附近的行为和李-杨零点的分布情况. 发现系统同时存在一级和二级相变, 对应的保真度行为和李杨零点分布有所区别, 但协作参量只能标识二级相变, 不能显示一级相变.

[关键词] 量子 XX-ZZ 模型, 量子相变, 协作参量, 保真度, 李-杨零点

[中图分类号] O 469 [文献标识码] A [文章编号] 1001-4616(2010) 04-0058-05

Quantum Phase Transitions of One-Dimensional XX-ZZ Model

Zhong Ming, Liu Xiaoxian

(School of Physics and Technology, Nanjing Normal University, Nanjing 210097, China)

Abstract The quantum phase transitions of one-dimensional XX-ZZ model are discussed. The behaviors of concurrence, fidelity near the critical points and the distribution of Lee-Yang zeros are studied numerically. It is found that the behaviors of fidelity and Lee-Yang zeros can distinguish the first order and second order phase transitions. But the concurrence can only characterize the second order phase transition of this model.

Key words quantum XX-ZZ model, quantum phase transition, concurrence, fidelity, Lee-Yang zeros

过渡族金属氧化物 d 壳层的轨道简并是这些材料中出现引人注目的现象的根本原因, 例如铁电性和巨磁阻等都是非常著名的例子. 为了能够更深入地了解现有的这些模型的结构, 我们可以用赝自旋来描述那些分立的自由度, 例如用自旋为 $1/2$ 的赝自旋算符来表示轨道自由度^[1-2]. 其中一个典型的例子就是指南针模型 (compass model). 最近, Brzezicki 等人^[3] 讨论了一维的量子 compass 模型, 得到了一些解析的结果. 而 Eriksson 等人为了更深入地了解该模型的相变行为, 推广得到了量子 XX-ZZ 模型^[4], 并且发现, 一维的 compass 模型的临界点实质上是一个复合的相变点, 既有一级相变, 也有二级相变. 但是上述工作的基本研究方法都是将该模型通过轨道变换映射到横场中的 Ising 模型, 并且需要对基态进行讨论.

与此同时, 量子信息、量子通讯和量子光学中的一些方法和概念, 如量子纠缠^[5-10] 和保真度^[11-13] 等, 近年来被广泛应用到对量子相变的讨论中. 人们发现, 在相变点附近, 这些物理量通常也会表现出相应的奇异行为. 另外, 1952 年李政道和杨振宁提出了配分函数零点相变理论^[14, 15], 把外场或逸度看成复变量, 研究配分函数零点在复平面中的分布, 从而给研究临界现象提供了一种非常重要而有效的方法. 我们正尝试着将此方法应用于量子相变中. 而量子 XX-ZZ 模型的复杂相变行为, 正好为我们提供了验证上述结论和方法的极佳的例子.

在本文中, 我们将采用更为直接和更容易推广的方法来研究一维的 XX-ZZ 模型, 就是把该模型映射到周期为二的 XY 模型. 并且通过计算协作参量、保真度和李-杨零点来研究其相变行为.

1 模型和公式

一维 XX-ZZ 模型哈密顿量的一般形式是

收稿日期: 2010-09-08

基金项目: 江苏省高校自然科学基金基础研究项目 (10KJB140004).

通讯联系人: 钟 鸣, 讲师, 研究方向: 凝聚态理论和统计物理. E-mail: mzhong@njnu.edu.cn

$$H = \sum_{i=1}^{N'} (J_1 \sigma_{2i-1}^z \sigma_{2i}^z + J_2 \sigma_{2i-1}^x \sigma_{2i}^x + L_1 \sigma_{2i}^z \sigma_{2i+1}^z), \quad (1)$$

$\sigma^{x,y,z}$ 是泡利矩阵, J_1, J_2, L_1 是最近邻相互作用, $N = 2N'$ 是组成自旋链的自旋的总数.

做 Jordan-Wigner 变换:

$$\sigma_n^z = \prod_{i=1}^{n-1} (1 - 2c_i^\dagger c_i) (c_n^\dagger + c_n), \quad \sigma_n^x = \frac{1}{i} \prod_{i=1}^{n-1} (\bar{c}_i - c_i) (1 - 2c_i^\dagger c_i), \quad \sigma_n^y = 2c_n^\dagger c_n - 1 \quad (2)$$

变换后, 哈密顿量的二次型为:

$$H = \sum_{i,j=1}^N \left[\bar{c}_i A_{ij} c_j + \frac{1}{2} (\bar{c}_i B_{ij} \bar{c}_j + h.c.) \right], \quad (3)$$

这里 $A_{2i-1, 2i} = A_{2i, 2i-1} = J_1 + J_2$, $A_{2i, 2i+1} = A_{2i+1, 2i} = 1$, $B_{2i-1, 2i} = -B_{2i, 2i-1} = J_1 - J_2$, $B_{2i, 2i+1} = -B_{2i+1, 2i} = L_1$. 哈密顿量 (3) 可以通过 Bogoliubov 变换

$$\eta_k = \sum_i (u_{ki} c_i + v_{ki} \bar{c}_i), \quad \bar{\eta}_k = \sum_i (u_{ki}^* c_i^\dagger + v_{ki}^* \bar{c}_i^\dagger), \quad (4)$$

实现对角化 $\left[k = \frac{2m\pi}{N}, \text{取周期性边界条件时 } m = -\frac{N}{4}, -\frac{N-1}{4}, \dots, 0, \dots, \frac{N-1}{4} \right]$:

$$H = \sum_k \left[\Lambda_{k_1} \left(\bar{\eta}_{k_1} \eta_{k_1} - \frac{1}{2} \right) + \Lambda_{k_2} \left(\bar{\eta}_{k_2} \eta_{k_2} - \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (5)$$

其激发谱

$$\Lambda_{k_1} = 2 \sqrt{1 + J_2^2 + 2J_2 \cos 2k}, \quad \Lambda_{k_2} = 2 |J_1|. \quad (6)$$

若第一激发态和基态之间的能隙 $\Delta = 2 \min \{ \Lambda_k \} = 0$ 模型就有相变存在.

2 结果与讨论

模型的基态能量

$$E_0 = -\frac{1}{2} \sum_k (\Lambda_{k_1} + \Lambda_{k_2}) = -\frac{N |J_1|}{2} - \frac{N}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{1 + J_2^2 + 2J_2 \cos 2k} dk \quad (7)$$

能够产生相变的有两种情况: (a) $\Lambda_{k_1} = 0$ 对应 $J_2 = 1$ 和 $k = \pm \frac{\pi}{2}$; 或者 $J_2 = -1$ 和 $k = 0, \pi$; (b) $\Lambda_{k_2} = 0$ 对应 $J_1 = 0$ 不过需要指出的是, 不同条件对应的相变情况是不同的. 不难发现, 如果满足条件 (b), 系统的基态是高度简并的, 简并度为 $2^{N/2}$.

为了深入讨论相变的具体类型, 我们可以计算基态平均能量 $e_0 = E_0/N$ 的导数:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial e_0}{\partial J_1} \right|_{J_2} &= -\frac{\text{sign}\{J_1\}}{2}, \\ \left. \frac{\partial e_0}{\partial J_2} \right|_{J_1} &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{J_2 + \cos 2k}{\sqrt{1 + J_2^2 + 2J_2 \cos 2k}} dk, \\ \left. \frac{\partial^2 e_0}{\partial J_2^2} \right|_{J_1} &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin^2 2k}{(1 + J_2^2 + 2J_2 \cos 2k)^{3/2}} dk. \end{aligned} \quad (8)$$

显然, 在 $J_1 = 0$ 这一点, 基态能量的一阶导数是不连续的, 对应着一级相变; 而在 $J_2 = 1$ 这一点, 基态能量的二阶导数是发散的, 对应着二级相变. 特别的, 点 $(J_1, J_2) = (0, 1)$ 是一个复合相变点. 图 1 就是该模型的相图, 两条临界线把 $J_1 - J_2$ 平面分成了 4 个区域, 通过 $J_1 = 0$ 这条线时, 系统经历一级相变; 通过 $J_2 = 1$ 这条线时, 系统经历二级相变. 下面, 我们将沿着 3 条路径, 对系统的相变进行深入地讨论, 它们分别是: (a) $J_2 = 2(1 - J_1)$, (b) $J_2 = 1 - J_1$, (c) $J_2 = 1/2(1 - J_1)$. 3 条路径的起点都是 $(J_1, J_2) = (1, 0)$.

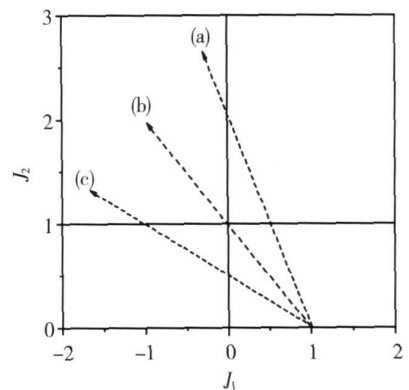


图 1 一维 XX-ZZ 模型的相图, 横轴为 J_1 , 纵轴为 J_2 ,

箭头代表我们要研究的 3 条路径: (a) $J_2 = 2(1 - J_1)$;

(b) $J_2 = 1 - J_1$; (c) $J_2 = (1/2)(1 - J_1)$

Fig.1 The phase diagram of one dimensional XX-ZZ model. (a) $J_2 = 2(1 - J_1)$; (b) $J_2 = 1 - J_1$; (c) $J_2 = (1/2)(1 - J_1)$

2.1 协作参量

协作参量通常描述在自旋链中任意一对自旋 m 和 n 之间的纠缠, 其定义为

$$C_{mn} = \max\{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\},$$

(9)

$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \lambda_4$ 是算符

$$\mathbf{R}_{mn} = \rho_{mn}(\sigma^y \otimes \sigma^y) \rho_{mn}^*(\sigma^y \otimes \sigma^y),$$

(10)

本征值的平方根. ρ_{mn} 是自旋 m 和 n 的约化密度矩阵,

$$\rho_{mn} = \frac{1}{4} \sum_{\alpha, \beta=0}^3 p_{\alpha\beta} \sigma_m^\alpha \otimes \sigma_n^\beta,$$

(11)

其中, 关联函数

$$p_{\alpha\beta} = \langle \sigma_m^\alpha \sigma_n^\beta \rangle.$$

(12)

$\sigma^1, \sigma^2, \sigma^3$ 分别对应泡利矩阵 $\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z$, σ^0 是 2×2 的单位矩阵. 协作参量的取值在 0 到 1 之间, $C_{mn} = 0$ 对应无纠缠的状态, $C_{mn} = 1$ 则对应完全纠缠的态.

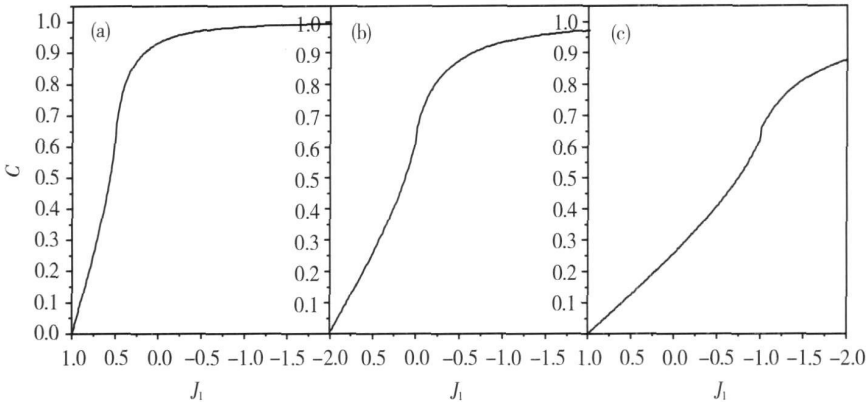


图 2 一维 XX-ZZ 模型的协作参量 C 随参数 J_1 的变化曲线:(a) $J_2 = 2(1-J_1)$;(b) $J_2 = 1-J_1$;(c) $J_2 = (1/2)(1-J_1)$

图 2 和图 3 分别给出了协作参量及其一阶导数随参数 J_1 的变化曲线. 描述两自旋纠缠性质的协作参量并没有标识出在 $J_1 = 0$ 点处的一级相变. 即使在复合相变点 $(J_1, J_2) = (0, 1)$, 协作参量依旧是连续的, 仅仅是其导数有随 N 发散的趋势, 也就是说它只是反映了该点处有二级相变的产生.

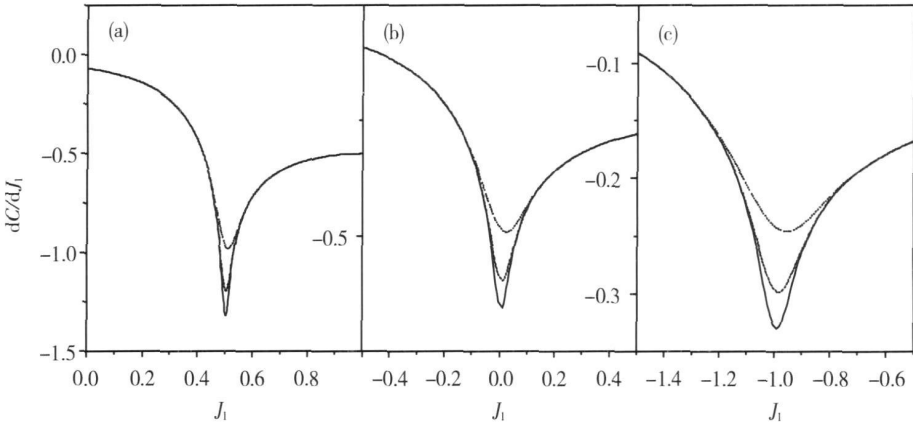


图 3 一维 XX-ZZ 模型的协作参量的导数 $\partial C/\partial J_1$ 随参数 J_1 的变化曲线. 点线、虚线和实线分别对应 $N=100, 200, 300$.

Fig.3 The derivative of the concurrence $\partial C/\partial J_1$ of one dimensional XX-ZZ model as a function of J_1 . The dotted dashed and solid lines correspond to $N=100, 200, 300$ respectively. (a) $J_2 = 2(1-J_1)$;(b) $J_2 = 1-J_1$;(c) $J_2 = (1/2)(1-J_1)$

2.2 保真度

基态保真度定义为

$$F(\lambda, \delta) = |\langle \Psi_0(\lambda) | \Psi_0(\lambda + \delta) \rangle|,$$

(13)

这里, λ 表示系统的某个参数, δ 是参数的差别.

图 4 是该模型的基态保真度的数值结果. 在图上我们可以清楚地看到, 在 $J_1 = 0$ 这点, 基态保真度急剧下降到 0 这正是一级相变的一个典型特征^[13]. 而相形之下, 对应二级相变点处, 保真度的变化就小得多.

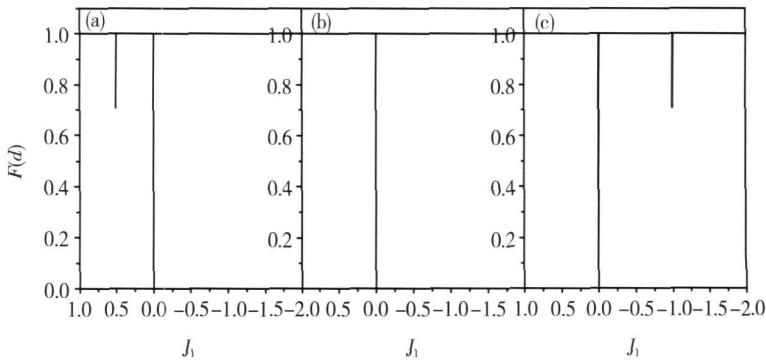


图 4 一维 XX-ZZ 模型的基态保真度 F 随参数 J_1 的变化曲线. (a) $J_2 = 2(1-J_1)$; (b) $J_2 = 1-J_1$; (c) $J_2 = (1/2)(1-J_1)$

Fig.4 The ground state fidelity F of one dimensional XX-ZZ model as a function of J_1 . (a) $J_2 = 2(1-J_1)$; (b) $J_2 = 1-J_1$; (c) $J_2 = (1/2)(1-J_1)$

2.3 李 - 杨零点

从上面的种种结果, 我们可以看到一维 XX-ZZ 模型的相变行为非常丰富, 是目前所知少数几个既有二级相变, 又有一级相变的模型之一. 下面我们将尝试研究该模型对应的李 - 杨零点的分布情况.

取变量 $z = e^{-\beta\epsilon}$, 则配分函数 $Z_N(\beta) = \text{Tr} \exp(-\beta H)$ 可以写成 z 的幂级数

$$Z_N(z) = \sum_{n=0}^M g(n) z^n = \kappa \prod_{n=1}^M \left(1 - \frac{z}{z_n} \right), \quad (14)$$

这里, κ 是一个常数, 而显然 z_n 就是配分函数的 M 个零点. 由于所有的 $g(n)$ 都是正的, 因此零点一般都在复平面内. 所谓李 - 杨零点亦即配分函数在参数复平面内的零点分布.

在零温条件下, 如果以 $J_2 = a + ib$ 为复参数, 则满足 $Z_N = 0$ 的解只有 $a^2 + b^2 = 1$ 也就是一个单位圆, 其与实轴的交点即对应着相变点, 如果限制 $J_2 \geq 0$ 那么 $J_2 = 1$ 倘若以 J_1 为复参数, 并且取 $J_2 = k(1 - J_1)$, 则对应的李 - 杨零点分布为以 $(1, 0)$ 点为圆心, $1/k$ 为半径的一组同心圆. 图 5 即为李 - 杨零点在 J_1 的复平面内的分布, 其与实轴的交点清楚地表明了临界点的位置. 需要再次说明的是, 图中的原点始终都是一个零点. 虽然, 我们不能由李 - 杨理论, 根据零点分布趋势与实轴的交点来判断相变的类型, 但至少, 在这个模型中, 一级相变和二级相变所对应的零点分布还是有很大不同.

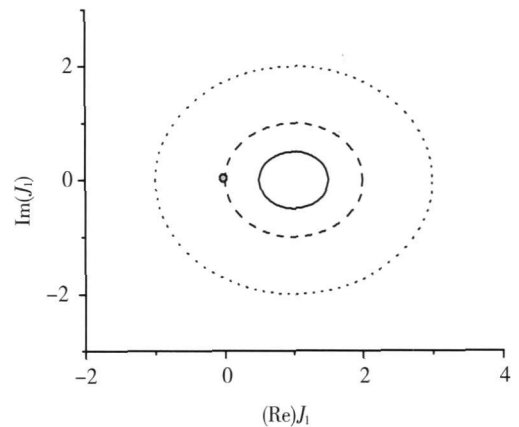


图 5 李 - 杨零点在 J_1 的复平面内的分布. 实线、虚线和点线分别对应 (a) $J_2 = 2(1-J_1)$; (b) $J_2 = 1-J_1$; (c) $J_2 = (1/2)(1-J_1)$

Fig.5 The distribution of Lee-Yang zeros in the complex field of J_1 . The solid dashed and dotted lines correspond to (a) $J_2 = 2(1-J_1)$; (b) $J_2 = 1-J_1$; (c) $J_2 = (1/2)(1-J_1)$

3 结语

我们通过把一维的 XX-ZZ 模型映射成为周期为二的 XY 模型, 讨论了其相变行为. 该模型在一定的参数条件下会出现一级或者二级相变, 其中 $(J_1, J_2) = (0, 1)$ 这个点是一个复合相变点. 另外, 基态保真度和李 - 杨零点的分布情况和系统的相变类型和位置都对对应得很好. 但是, 在这个模型中, 协作参量只能标识二级相变, 而不能显示一级相变.

致谢: 感谢童培庆教授对本文的悉心指导.

[参考文献]

- [1] Kugel K, Khomskii D. The Jahn-Teller effect and magnetism: transition metal compounds[J]. Sov Phys Usp 1982, 25 (4): 231-256
- [2] Kugel K, Khomskii D. Orbital and magnetic structure of two-dimensional ferromagnets with Jahn-Teller ions[J]. Sov Phys JETP, 1973, 37(7): 725-728
- [3] Brzezicki W, Dziarmaga J, Oles A M. Quantum phase transition in the one-dimensional compass model[J]. Phys Rev B, 2007, 75(13): 134415
- [4] Eriksson E, Johannesson H. Multicriticality and entanglement in the one-dimensional quantum compass model[J]. Phys Rev B, 2009, 79(22): 224424
- [5] Amico L, Fazio R, Osterloh A, et al. Entanglement in many-body systems[J]. Rev Mod Phys, 2008, 80(2): 517-576
- [6] Osterloh A, Amico L, Falci G, et al. Scaling of entanglement close to a quantum phase transition[J]. Nature, 2002, 416 608-610
- [7] Osborne T, Nielsen M. Entanglement in a simple quantum phase transition[J]. Phys Rev A, 2002, 66(3): 032110
- [8] Bose I, Chattopadhyay E. Macroscopic entanglement jumps in model spin systems[J]. Phys Rev A, 2002, 66(6): 062320
- [9] Vidal J, Mosseri R, Dukelsky J. Entanglement in a first-order quantum phase transition[J]. Phys Rev A, 2004, 69(5): 054101
- [10] Wu L, Sarandy M S, Lidar D A. Quantum phase transitions and bipartite entanglement[J]. Phys Rev Lett, 2004, 93 (25): 250404
- [11] Zanardi P, Paunkovic N. Ground state overlap and quantum phase transitions[J]. Phys Rev E, 2006, 74(3): 031123
- [12] Buonsante P, Vezzani A. Ground-state fidelity and bipartite entanglement in the Bose-Hubbard model[J]. Phys Rev Lett, 2007, 98(11): 110601
- [13] Chen S, Wang L, Hao Y, et al. Intrinsic relation between ground-state fidelity and the characterization of a quantum phase transition[J]. Phys Rev A, 2008, 77(3): 032111
- [14] Yang C, Lee T. Statistical theory of equations of state and phase transitions (I). Theory of condensation[J]. Phys Rev, 1952, 87(3): 404-409
- [15] Lee T, Yang C. Statistical theory of equations of state and phase transitions (II). Lattice gas and Ising model[J]. Phys Rev, 1952, 87(3): 410-419

[责任编辑: 顾晓天]