开边界条件下一类新Hubbard模型的精确解*

曹利克[1)] 柯三民[2)] 杨涛[3)] 岳瑞宏[4)]

(西北大学现代物理研究所 西安 710069)

摘要 用坐标Bethe ansatz方法详细研究了开边界条件下一类新Hubbard模型的可积性问题. 得到了系统的能谱、可积边界条件和Bethe ansatz方程.

关键词 Hubbard模型 分数统计 开边界

系统的边界效应是凝聚态物理中一个很重要的问题. 近年来, 各种带边界条件的精确可积系统已成为研究的热点, 以期揭示边界效应对系统的影响[1—4]. 强关联电子系统的研究由于高温超导的发现而受到重视, 而最受关注的模型是已被广泛研究的Hubbard模型. Hubbard模型最初是为了讨论过渡族金属窄d带中的电子关联问题提出的, 它的精确解已由Lieb和Wu于1968年给出[5], 其量子涨落由同一格点的库仑排斥作用引起. 后来发现一维Hubbard模型在远离半充满状态时呈现出Luttinger液体行为[6]; 而二维Hubbard模型可以解释一些高温超导现象[7], 从而引起了人们广泛的研究兴趣, 成为近几年来凝聚态物理中的一个研究热点.

最近Andreas Osterloh提出了一类新的Hubbard模型[8], 其哈密顿量的表述形式与标准Hubbard模型相同, 但粒子的产生算符和消灭算符的交换关系发生了变化, 它相当于系统中粒子的属性发生了变化, 由服从费米统计的费米子变成服从分数统计的任意子. Andreas Osterloh[8] 详细研究了该模型在周期边界条件下的可积性, 给出了系统的能谱和Bethe ansatz方程, 但开边界条件下的精确解至今还未见报道. 本文用坐标Bethe ansatz方法给出了此模型在开边界条件下的精确解, 在此精确解的基础上, 我们还可以研究系统的热力学性质, 如比热、磁化率、边界效应等.

开边界条件下Hubbard模型的Hamilton量可写为

$$\begin{aligned} H = & -t\sum_{i=1}^{L-1}\sum_{\sigma=1}^{2}(f_{i,\sigma}^{+}f_{i+1,\sigma}+\mathrm{h.c.})+ \\ & D\sum_{i=1}^{L-1}n_{i,1}n_{i,2}+\sum_{\sigma=1}^{2}(g_{1\sigma}n_{1\sigma}+g_{L\sigma}n_{L\sigma})\ , \end{aligned} \tag{1}$$

式中$f_{i,\sigma}^{+}(f_{i,\sigma})$是第$i$个格点自旋为$\sigma$ ($\sigma=1$表示自旋向上, $\sigma=2$表示自旋向下) 的粒子的产生(湮没)算符, $n_{i,\sigma}$是粒子数算符 ($n_{i,\sigma}=f_{i,\sigma}^{+}f_{i,\sigma}$), t是近邻粒子跳跃振幅, D是同一格点库仑作用势的强度. $g_{1\sigma}$和$g_{L\sigma}$ ($\sigma=1,2$) 是边界场耦合强度系数.

产生算符和湮没算符满足如下变形关系

$$\begin{aligned} f_{j,\sigma}^{+}f_{k,\sigma'}+q_{j,k}^{\sigma,\sigma'}f_{k,\sigma'}f_{j,\sigma}^{+} &= \delta_{j,k}\delta_{\sigma,\sigma'}\ , \\ f_{j,\sigma}f_{k,\sigma'}+q_{k,j}^{\sigma',\sigma}f_{k,\sigma'}f_{j,\sigma} &= 0\ . \end{aligned} \tag{2}$$

$q_{k,j}^{\sigma';\sigma}$为变形参数, 它依赖于坐标和自旋. 为了保证标准对易关系式

$$\begin{aligned} [n_{i,\sigma},n_{j,\sigma'}] &= 0\ , \\ [n_{i,\sigma},f_{j,\sigma'}^{+}] &= \delta_{i,j}\delta_{\sigma,\sigma'}f_{j,\sigma'}^{+}\ , \\ [n_{i,\sigma},f_{j,\sigma'}] &= -\delta_{i,j}\delta_{\sigma,\sigma'}f_{j,\sigma'}\ , \end{aligned} \tag{3}$$

2006 – 03 – 07 收稿
* 国家自然科学基金(90403019)资助
1) E-mail: ksmingre@163.com
2) E-mail: ljqclk@nwu.edu.cn
3) E-mail: yangt@nwu.edu.cn
4) E-mail: rhyue@nwu.edu.cn

30 — 33

成立及粒子满足S_N群的non-Abelian表示, 需变形参数满足如下关系

$$\begin{aligned} q_{k,j}^{\sigma',\sigma} &= (q_{k,j}^{\sigma',\sigma})^{-1} = (q_{k,j}^{\sigma',\sigma})^{+} , \\ \left[f_{i,\sigma}^{+}, q_{j,k}^{\sigma,\sigma'}\right] &= \left[f_{i,\sigma}^{+}, q_{j,k}^{\sigma,\sigma'}\right] = 0 , \end{aligned} \tag{4}$$

利用标准的坐标Bethe ansatz方法, 当系统有N个粒子, 且M个自旋向下时, Hamilton量公式(1)的本征态可设为

$$|\Psi_N\rangle = \sum_{\pi \in S_N} \sum_{j_1 \cdots j_N} \Psi(\boldsymbol{j}_I|\pi) F^{+}(\boldsymbol{j}_I|\pi) \, |0\rangle \, . \tag{5}$$

为了简化表示, 采用如下标记

$$\boldsymbol{j}_\gamma \doteq (j_{\gamma(1)}, \cdots, j_{\gamma(N)}) \, ,$$

$$F^{+}(\boldsymbol{j}_\gamma|\pi) \doteq f^{+}_{j_{\gamma(1)},\sigma_{\pi(1)}} \cdots f^{+}_{j_{\gamma(N)},\sigma_{\pi(N)}} \, ,$$

式中j_n表示粒子的位置. $\gamma \in S_N$, I是S_N中的恒等置换.

由于Fock态只与粒子的坐标和自旋有关, 与粒子产生的顺序无关, 对于任意γ', $\gamma \in S_N$粒子置换要求满足如下等式

$$\Psi(\boldsymbol{j}_\gamma|\gamma \circ \pi) F^{+}(\boldsymbol{j}_\gamma|\gamma \circ \pi) \equiv \Psi(\boldsymbol{j}_{\gamma'}|\gamma' \circ \pi) F^{+}(\boldsymbol{j}_{\gamma'}|\gamma' \circ \pi) \, , \tag{6}$$

上式同时确定了波函数的交换对称性. 由于任一置换可写成相邻数码对换之积, $\chi_l \doteq l \leftrightarrow (l+1)$, $\gamma \doteq \chi_n \circ \cdots \chi_2 \circ \chi_1$, 得到不同区间波函数应满足如下关系

$$\Psi(\boldsymbol{j}_\gamma|\gamma \circ \pi) = \prod_{l=1}^{n} \left[-q^{s'(l),s(l)}_{x'(l),x(l)}\right] \Psi(\boldsymbol{j}_I|\pi) \, , \tag{7}$$

其中

$$\begin{aligned} x(l) &= j_{\gamma_l \circ \pi(l)}, \quad s(l) = \sigma_{\gamma_l \circ \pi(l)} \, , \\ x'(l) &= j_{\gamma_l \circ \pi(l+1)}, \quad s'(l) = \sigma_{\gamma_l \circ \pi(l+1)} \, . \end{aligned}$$

由方程(7)可知, 只要已知$\Psi(\boldsymbol{j}_I|\pi)$就可获得其他区域的波函数. 考虑一个特定的区域($1 \leqslant j_1 \leqslant \cdots \leqslant j_N \leqslant L$), 此时波函数试探解可设为

$$\Psi(\boldsymbol{j}|\pi) = \sum_{\pi' \in S_N} A(\pi'|\pi) \exp\left[\mathrm{i} \sum_{m=1}^{N} j_m P_{\pi'(m)}\right], \tag{8}$$

其中π'表示N个互不相等的波数$p_{\pi'(m)}$的一个置换, 这里$p_{\pi'(m)}$既可取正值也可取负值.

将试探解代入薛定谔方程, 可得到一系列方程, 经过仔细分析这些方程发现, 要使此模型主体部分可积, 除(12)式中的两体散射矩阵满足Yang-Baxter方程外, 依赖于坐标和自旋的变形参数须满足如下关系[8]:

$$q_{j,k}^{\sigma,\sigma'} = \begin{cases} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\psi(\sigma+\sigma')} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\tilde{\varphi}\cdot(\sigma-\sigma')} , & j > k, \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi\cdot(\sigma-\sigma')} , & j = k, \\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\psi(\sigma+\sigma')} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\tilde{\varphi}\cdot(\sigma-\sigma')} , & j < k, \end{cases} \tag{9}$$

且$\varphi - \tilde{\varphi} \pm \psi(0) = 0$, mod 2π. 当$\varphi = \tilde{\varphi} = 0$, $\psi \equiv 0$时任意子退化为费米子; 当$\varphi = \tilde{\varphi} = 0$, $\psi(\pm 1) \equiv \pi$时系统对应于硬核玻色系统. 同时得到波函数振幅应满足如下关系

$$\begin{aligned} & A_{\sigma_{\pi(1)},\cdots,\sigma_{\pi(N)}}(p_{\pi'(1)}, \cdots, p_{\pi'(N)}) = \\ & U_{\sigma_{\pi(1)}}(p_{\pi'(1)}) A_{\sigma_{\pi(1)},\cdots,\sigma_{\pi(N)}}(-p_{\pi'(1)}, \cdots, p_{\pi'(N)}) \, , \end{aligned} \tag{10}$$

$$\begin{aligned} & A_{\sigma_{\pi(1)},\cdots,\sigma_{\pi(N)}}(p_{\pi'(1)}, \cdots, p_{\pi'(N)}) = \\ & V_{\sigma_{\pi(N)}}(-p_{\pi'(N)}) A_{\sigma_{\pi(1)},\cdots,\sigma_{\pi(N)}}(p_{\pi'(1)}, \cdots, -p_{\pi'(N)}) \, , \end{aligned} \tag{11}$$

$$\begin{aligned} & A_{\sigma_{\pi(1)},\cdots,\sigma_{\pi(m)},\sigma_{\pi(m+1)},\cdots,\sigma_{\pi(N)}} \times \\ & (p_{\pi'(1)}, \cdots, p_{\pi'(m)}, p_{\pi'(m+1)}, \cdots, p_{\pi'(N)}) = \\ & S^{\sigma'_{\pi(m+1)}\sigma'_{\pi(m)}}_{\sigma_{\pi(m)}\sigma_{\pi(m+1)}}(p_{\pi'(m)} - p_{\pi'(m+1)}) \times \\ & A_{\sigma_{\pi(1)},\cdots,\sigma'_{\pi(m+1)},\sigma'_{\pi(m)},\cdots\sigma_{\pi(N)}} \times \\ & (p_{\pi'(1)}, \cdots, p_{\pi'(m+1)}, p_{\pi'(m)}, \cdots, p_{\pi'(N)}), \end{aligned} \tag{12}$$

及能量本征值

$$E = -2 \sum_{k=1}^{N} \cos(p_k) \, , \tag{13}$$

其中S为两体散射矩阵

$$S(\lambda, \lambda'; m) = \frac{\mathrm{i}\,(\lambda' - \lambda) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\Phi\cdot(\tau-\tau')} \boldsymbol{P}_{m,m+1} - \dfrac{D}{2t} \boldsymbol{I}}{\mathrm{i}\,(\lambda' - \lambda) - \dfrac{D}{2t}} \, , \tag{14}$$

其中$\lambda \doteq \sin p_{\pi'(m)}$, $\lambda' \doteq \sin p_{\pi'(m+1)}$, $\tau \doteq \sigma_{\pi(m)}$, $\tau' \doteq \sigma_{\pi(m+1)}$, $U_\sigma(p)$和$V_\sigma(p)$分别为左边界和右边界反射矩阵

$$\begin{aligned} U_\sigma(p) &= \frac{g_{1\sigma} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p} + t}{g_{1\sigma} \mathrm{e}^{+\mathrm{i}p} + t} \, , \\ V_\sigma(p) &= \frac{(g_{L\sigma} \mathrm{e}^{+\mathrm{i}p} + t) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p(L+1)}}{(g_{L\sigma} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p} + t) \mathrm{e}^{+\mathrm{i}p(L+1)}} \, . \end{aligned} \tag{15}$$

由关系式(10), (11)及(12)可得

$$\begin{aligned} & A_{\sigma_{\pi(1)}\cdots\sigma_{\pi(N)}}(p_{\pi'(1)}, \cdots, p_{\pi'(N)}) = \\ & \Big\{ U(p_{\pi'(1)}) \hat{X}_{12} \hat{X}_{13} \cdots \hat{X}_{1N} V(p_{\pi'(1)}) \times \\ & X_{N1} \cdots X_{21} \Big\}^{\sigma_{\gamma(1)}\cdots\sigma_{\gamma(N)}}_{\sigma_{\pi(1)}\cdots\sigma_{\pi(N)}} \times \\ & A_{\sigma_{\gamma(1)}\cdots\sigma_{\gamma(N)}}(p_{\pi'(1)}, \cdots, p_{\pi'(N)}) \, , \end{aligned} \tag{16}$$

式中$\boldsymbol{X}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{S}$,

$$\boldsymbol{X}_{ij}=\frac{\mathrm{i}(\sin p_{\pi'(j)}-\sin p_{\pi'(i)})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Phi\cdot(\sigma_{\pi(i)}-\sigma_{\pi(j)})}\boldsymbol{I}-\frac{D}{2t}\boldsymbol{P}_{\sigma_{\pi(i)}\sigma_{\pi(j)}}}{\mathrm{i}(\sin p_{\pi'(j)}-\sin p_{\pi'(i)})-\frac{D}{2t}},$$

$$\hat{\boldsymbol{X}}_{ij}=\frac{\mathrm{i}(\sin p_{\pi'(j)}+\sin p_{\pi'(i)})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Phi\cdot(\sigma_{\pi(i)}-\sigma_{\pi(j)})}\boldsymbol{I}-\frac{D}{2t}\boldsymbol{P}_{\sigma_{\pi(i)}\sigma_{\pi(j)}}}{\mathrm{i}(\sin p_{\pi'(j)}+\sin p_{\pi'(i)})-\frac{D}{2t}}, \tag{17}$$

$$U(p_{\pi'(1)})=\mathrm{diag}(U_1,U_2),\quad V(p_{\pi'(1)})=\mathrm{diag}(V_1,V_2). \tag{18}$$

现在来对角化方程(16)式, 如果方程对各个p的任意取值都可对角化, 则系统可被精确求解. 不难发现(16)式类似开边界条件下各向异性XXZ模型的转移矩阵[9].

定义算符

$$t(p)=\mathrm{Tr}_0\boldsymbol{K}_0^{+}(p)\boldsymbol{L}_{01}(-p,p_{\pi'(1)})\boldsymbol{L}_{02}(-p,p_{\pi'(2)})\cdots \boldsymbol{L}_{0N}(-p,p_{\pi'(N)})\boldsymbol{K}_0^{-}(p)\boldsymbol{L}_{N0}(p_{\pi'(N)},p)\cdots\boldsymbol{L}_{10}(p_{\pi'(1)},p), \tag{19}$$

式中

$$\boldsymbol{L}_{0m}(p,p_{\pi'(m)})=\frac{\mathrm{i}(\sin p_{\pi'(m)}-\sin p)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Phi\cdot(\sigma_{\pi(0)}-\sigma_{\pi(m)})}\boldsymbol{I}-\frac{D}{2t}\boldsymbol{P}_{0m}}{\mathrm{i}(\sin p_{\pi'(m)}-\sin p)-\frac{D}{2t}},$$

$$\boldsymbol{K}_0^{+}(p)=\frac{\mathrm{i}\frac{D}{2t}+2\sin p}{\left(\mathrm{i}\frac{D}{2t}+\sin p\right)4\sin p}\mathrm{diag}\left(-\mathrm{i}\frac{D}{2t}U_2+\left(\mathrm{i}\frac{D}{2t}+2\sin p\right)U_1,-\mathrm{i}\frac{D}{2t}U_1+\left(\mathrm{i}\frac{D}{2t}+2\sin p\right)U_2\right),$$

$$\boldsymbol{K}_0^{-}(p)=\mathrm{diag}(V_1(p),V_2(p)).$$

利用算符$t(p)$, 方程(16)变为

$$t(p_{\pi'(1)})A(p_{\pi'(1)},\cdots,p_{\pi'(N)})=A(p_{\pi'(1)},\cdots,p_{\pi'(N)}). \tag{20}$$

此时Hamiton量(1)的对角化问题转化为对角化$t(p_{\pi'(1)})$. 利用Yang-Baxter方程及XXZ模型的反射方程[9], 不难证明含有不同谱参数的转移矩阵$t(p)$彼此相互对易, 从而模型是可积的. 利用XXZ模型反射方程的对角解

$$\boldsymbol{K}^{-}(p)=\mathrm{diag}(\zeta_-+\sin p,\zeta_--\sin p), \tag{21}$$

$$\boldsymbol{K}^{+}(p)=\mathrm{diag}\left(\zeta_+-\mathrm{i}\frac{D}{2t}-\sin p,\zeta_++\mathrm{i}\frac{D}{2t}+\sin p\right). \tag{22}$$

我们发现只有当$U_\sigma(p)$和$V_\sigma(p)$满足下列关系式

$$\frac{U_1(p)}{U_2(p)}=\frac{\zeta_+-\sin p}{\zeta_++\sin p},\quad \frac{V_1(p)}{V_2(p)}=\frac{\zeta_-+\sin p}{\zeta_--\sin p}, \tag{23}$$

时转移矩阵$t(p)$相互对易, 其中ζ_+和ζ_-是自由参数. 对比(15)和(23)发现$g_{1\sigma}$和$g_{L\sigma}$满足下列约束关系时系统可积.

$$\zeta_-=\begin{cases}\infty & \text{for}\quad g_{L2}=g_{L1},\\ \dfrac{t^2-g_{L1}^2}{2\mathrm{i}tg_{L1}} & \text{for}\quad g_{L2}=-g_{L1},\end{cases}\qquad \zeta_+=\begin{cases}\infty & \text{for}\quad g_{11}=g_{12},\\ \dfrac{t^2+g_{11}^2}{2\mathrm{i}tg_{11}} & \text{for}\quad g_{11}=-g_{12}.\end{cases} \tag{24}$$

由标准的Bethe ansaz方法, 经过一系列计算, 可得如下Bethe ansatz方程

$$\prod_{k=1}^{N}\frac{\left(\nu_m+\sin p_k+\mathrm{i}\frac{D}{4t}\right)\left(\nu_m-\sin p_k+\mathrm{i}\frac{D}{4t}\right)}{\left(\nu_m+\sin p_k-\mathrm{i}\frac{D}{4t}\right)\left(\nu_m-\sin p_k-\mathrm{i}\frac{D}{4t}\right)}=\frac{\left(\zeta_++\nu_m+\mathrm{i}\frac{D}{4t}\right)\left(\zeta_--\nu_m-\mathrm{i}\frac{D}{4t}\right)}{\left(\zeta_+-\nu_m+\mathrm{i}\frac{D}{4t}\right)\left(\zeta_-+\nu_m-\mathrm{i}\frac{D}{4t}\right)}\times\prod_{n\neq m}^{M}\frac{\left(\nu_m-\nu_n+\mathrm{i}\frac{D}{4t}\right)\left(\nu_m+\nu_n+\mathrm{i}\frac{D}{4t}\right)}{\left(\nu_m-\nu_n-\mathrm{i}\frac{D}{4t}\right)\left(\nu_m+\nu_n-\mathrm{i}\frac{D}{4t}\right)}. \tag{25}$$

由条件$t(p_{\pi'(1)})=1$, 还可获得新模型的另一个Bethe ansatz方程

$$\frac{(g_{11}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p_k}+t)(g_{L1}+t\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p_k})}{(g_{11}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_k}+t)(g_{L1}+t\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_k})}\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}p_kL}=\sum_{m=1}^{M}\frac{\left(\sin p_k+\nu_m+\mathrm{i}\frac{D}{4t}\right)\left(\sin p_k-\nu_m+\mathrm{i}\frac{D}{4t}\right)}{\left(\sin p_k+\nu_m-\mathrm{i}\frac{D}{4t}\right)\left(\sin p_k-\nu_m-\mathrm{i}\frac{D}{4t}\right)}. \tag{26}$$

至此, 完成了Hamilton量(1)的对角化, 其本征值为$E=-2\sum\limits_{k=1}^{N}\cos(p_k)$. 参数$\{p_k\}$由两组超越方程(25), (26)决定.

本文用坐标Bethe ansatz方法详细研究了粒子服从分数统计时, 开边界Hubbard模型的可积性. 得到了系统的能谱和Bethe ansatz方程及和可积性条件相容的4种可积边界场. 利用上述结果和热力学Bethe ansatz方法, 可进一步研究此模型的热力学性质, 比如比热、磁化率、自由能、表面自由能等.

参考文献(References)

1 Kane C L, Fisher M P A. Phys. Rev. Lett., 1992, **68**: 1220
2 Affleck I, Ludwig A W W. Phys. Rev. Lett., 1992, **68**: 1046
3 Affleck I, Ludwig A W W. Phys. Rev.,1993, **B48**: 7297
4 Essler F H L. J. Phys. A: Math. Gen., 1996, **29**: 6183
5 Lieb E H, WU F Y. Phys. Rev. Lett., 1968, **20**: 1445—1448
6 Voit J. Rep. Prog. Phys., 1995, **58**: 977
7 Anderson P W. The Theory of Superconductivity in the High T_{C} Cuprates. Princeton: Princeton University Press, 1997
8 Osterloh A, Amico L, Eckern U. J. Phys. A: Math Gen., 2000, **33**: L87-L91
9 Sklyanin E K. J. Phys. A: Math Gen., 1988, **21**: 2375—2389

Exact Solution of a New Class of Hubbard-Type Models with Open Boundary Conditions*

CAO Li-Ke[1)]　KE San-Min[2)]　YANG Tao[3)]　YUE Rui-Hong[4)]

(Institute of Modern Physics, Northwest University, Xi'an 710069, China)

Abstract　A new class of Hubbard-type models with open boundary conditions in one dimension is studied in the framework of coordinate Bethe ansatz method. The energy spectrum, integrable boundary conditions and the corresponding Bethe ansatz equations are derived.

Key words　Hubbard model, fractional statistics, open boundary

Received 7 March 2006

* Supported by NSFC (90403019)

1) E-mail: ksmingre@163.com
2) E-mail: ljqclk@nwu.edu.cn
3) E-mail: yangt@nwu.edu.cn
4) E-mail: rhyue@nwu.edu.cn