

一维各向异性扩展 Hubbard 链的量子相图

吴岭莉*, 孙欣*, 丁汉芹†

新疆大学物理科学与技术学院, 新疆 乌鲁木齐

收稿日期: 2026年3月31日; 录用日期: 2026年5月13日; 发布日期: 2026年5月22日

摘要

我们研究了一维各向异性扩展 Hubbard 模型, 其中最近邻库仑作用 V 和海森堡交换作用 J 与自旋有关。通过玻色化和重整化群分析, 我们获得了基态相图。在半满下, 基态是绝缘体, 依赖自旋的库仑排斥作用导致 BSDW 相, 反铁磁交换作用增强 BOW 相但同时减弱 CDW 相。当时 $J > 4V$ 时, BSDW 和 CDW 二相消失。各向异性的相互作用对基态相图产生重要的影响。

关键词

一维, 各向异性扩展 Hubbard 模型, 依赖自旋的相互作用, 弱耦合, 相图

Quantum Phase Diagram of the One-Dimensional Anisotropic Extended Hubbard Chain

Lingli Wu*, Xin Sun*, Hanqin Ding†

School of Physical Science and Technology, Xinjiang University, Urumqi Xinjiang

Received: March 31, 2026; accepted: May 13, 2026; published: May 22, 2026

* 共同第一作者。

† 通讯作者。

Abstract

We study a one-dimensional (1D) anisotropic extended Hubbard model, where the nearest-neighbor Coulomb interaction (V) and Heisenberg exchange interaction (J) are spin-dependent. The application of bosonization and renormalization analysis leads to the quantum phase diagram. At half filling, the ground state is dominated in several insulating phases. The spin-dependent Coulomb repulsion interaction leads to a bond-spin-density-wave (BSDW) phase. The antiferromagnetic exchange enhances the bond-charge-density-wave (BCDW) phase while weakens the charge-density-wave (CDW) phase. When $J > 4V$, the BSDW and CDW phases disappear. The anisotropic interactions have an important effect on the structure of phase diagrams of 1D electron systems.

Keywords

One Dimension, Anisotropic Extended Hubbard Model, Spin-Dependent Interaction, Weak Coupling, Phase Diagram

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

在低维物理中, 一维电子体系受到广泛研究。与二、三维体系相比, 一维问题相对容易求解, 特定情况下还能获得精确解 [1]。而且, 一维问题的一些结论为分析高维问题提供一定的指导作用, 如通过 Cu-O 链的性质能够探索铜氧化物平面的超导机理 [2]。另外, 很多准一维材料的性质, 如有机导体 [3]、Bechgaard 盐 [4]、共轭高分子 [5]、钪链化合物 [6]等可以用一维理论模型进行描述。随着实验进展, 人们能通过一定的技术制备出一维材料, 如量子线 [7]、碳纳米管 [8]等。超冷原子和分子费米气已允许人们对光晶格中多体相互作用进行调控 [9,10], 这一实现促进了一维关联电子体系的研究。一维体系因电子运动空间受制, 电子关联效应非常显著。Hubbard 模型及其扩展模型常被用来描述关联电子的物理行为 [11], 其中深受广泛研究的是包含在位作用(U)和最近邻库仑作用(V)的扩展 Hubbard 模型, 常称之为标准扩展 Hubbard 模型(SEH 模型)。除了在准一维结构材料方面的应用, 很多兴趣致力于对一维 SEH 模型在半满下的基态相图的

讨论。所有的研究都肯定了电荷密度波(CDW)和自旋密度波(SDW)的存在, 前者出现在 $U < 2V$ 的区域, 而后者出现在 $U > 2V$ 的区域。尽管如此, 模型的相图结构还是存在一些分歧。这主要来源于 Nakamura 的首次报道 [12], 他通过数值研究发现, 在弱耦合和中间耦合区域, 一个称为键序电荷密度波(BCDW)的新相出现在 $U \simeq 2V$ 附近, 夹在 CDW 和 SDW 之间, 但在某一三相点终止。在早期工作中 [13–16], 这个二聚化的相并不存在。因此, 这个论断引起了人们浓厚的兴趣, 随后很多理论和数值研究证实了 BCDW 相的存在 [17–24]。但有少数研究持不同的观点, 例如, Jeckelmann 认为 BCDW 相虽然存在, 但只出现在 CDW-SDW 边界的有限段区域上 [25], 而 Zhang [26]和 Deng [27]等人的研究声称 BCDW 相根本不存在。虽然绝大多数研究承认 BCDW 相的存在, 但这个相存在的物理机制的研究很少, 而且给出的方案也不同。因此, 对一维扩展 Hubbard 模型的基态相图的进一步研究是非常必要的。

众所周知, 一维 SHE 模型具有自旋 SU(2) 对称性, 即最近邻电子密度-密度作用 V 不依赖自旋, 基态中的自旋密度波的三分量(SDW^x, SDW^y, SDW^z)是简并的。另一方面, 一个相反情况会出现: 如果电子相互作用 V 与自旋相关, 一维 $t-U-V$ 体系的基态性质是否会发生变化? 从物理上来说, 材料结构的各向异性和自旋-轨道耦合(SOC)以及其他因素 [11, 28, 29], 都有可能造成相互作用与电子自旋有一定的联系。除此之外, SEH 模型只考虑电荷相互作用, 没有考虑自旋相互作用(Heisenberg 作用 J)。实际上, 在有些材料中, 电荷库仑作用和自旋交换作用可以同时存在, 从理论角度, 情况更是如此。通过与 V 作用的竞争, J 作用也会发挥重要作用。尤其对磁性关联电子体系来说, 无论是 SEH 模型, 还是 $t-U-J$ 模型 [30–32], 对相互作用电子的描述都是不够全面的, $t-U-V-J$ 模型才是更合适的候选者。

在一维关联电子体系中, 电荷与自旋相互作用的各向异性主要源于晶格对称性破缺与轨道自由度的强关联效应。以准一维链状结构(如 $K_{0.3}MoO_3$ 或有机电荷转移盐 TTF-TCNQ)为例 [33, 34], 其低对称性晶格(如正交或单斜晶系)导致过渡金属(如 Mo)的 d 轨道或有机分子轨道发生非均匀劈裂: 沿链方向(一维轴向)的轨道重叠较强, 形成离域化电子态, 而垂直于链方向的轨道重叠较弱, 电子局域化程度更高。这种轨道各向异性直接调制了在位库仑相互作用的强度(导致轴向电子间排斥作用较弱), 易形成电荷密度波(CDW)或电荷有序态; 而垂直方向因电子局域化增强, 自旋自由度主导, 通过超交换作用(如 $Mo-O-Mo$ 路径)产生反铁磁或铁磁耦合。此外, 重元素(如 Mo 的 $4d$ 轨道或稀土元素的 f 轨道)的强 SOC 会进一步诱导自旋极化方向与晶格轴向的锁定, 例如在 Mo_4O_{11} 链中, SOC 使自旋磁矩倾向于沿链方向排列, 而垂直方向的自旋涨落被抑制, 从而形成显著的电荷-自旋各向异性。这种由晶格结构、轨道劈裂与 SOC 协同作用的机制, 是一维关联体系中各向异性电磁响应(如非线性输运、场致相变)的核心物理根源。

在这篇文章中, 我们考虑 U(1) 各向异性的扩展 Hubbard 链, 相应的哈密顿量定义为

$$H = H_1 + H_2 + H_3, \quad (1)$$

$$H_1 = -t \sum_{j,\sigma} (c_{j+1,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + h.c.) + U \sum_j n_{j,\uparrow} n_{j,\downarrow}, \quad (2)$$

$$H_2 = V_1 \sum_{j,\bar{\sigma}=-\sigma} n_{j,\sigma} n_{j+1,\bar{\sigma}} + V_2 \sum_{j,\sigma} n_{j,\sigma} n_{j+1,\sigma}, \quad (3)$$

$$H_3 = \sum_j [J_1 (S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y) + J_2 S_j^z S_{j+1}^z], \quad (4)$$

其中,

$$n_{j,\sigma} = c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}, \quad S_j^\mu = \frac{1}{2} c_{j,\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma\sigma'}^\mu c_{j,\sigma'}. \quad (5)$$

在以上表达式中, σ^μ 是第 $\mu(=x,y,z)$ 个泡利矩阵, $V_1(V_2) = V(1 \pm \delta)$, $J_1(J_2) = J(1 \pm \delta)$ 。此处, 为了简化计算同时又不影响物理本质, 我们用同一个参数 δ 来刻画 V 和 J 的各向异性。 H_1 表示 Hubbard 模型。 H_2 描述依赖自旋的最近邻密度-密度相互作用, 其中 V_1 和 V_2 分别表示电子自旋相反和相同的二体排斥作用:

$$V_1 = \langle j, j+1 | v_{\sigma,\bar{\sigma}} | j, j+1 \rangle, \quad V_2 = \langle j, j+1 | v_{\sigma,\sigma} | j, j+1 \rangle \quad (6)$$

v 是库仑势。 H_3 项表示各向异性的自旋交换作用($\delta = 0$ 对应各向同性)。通过控制 δ 的符号, 模型可以分为易轴异性($\delta < 0$)和易面异性($\delta > 0$)。

在某些极限情况下, 哈密顿量(1)能得到几个著名的模型。 $H_3 = 0$ 且 $\delta = 0$ 的情况对应着 SEH 模型。 $H_2 = 0$ 且 $\delta = 0$ 的情况对应 t - U - J 模型。 Japaridze 等人 [35]和 Dziurzik 等人 [36]研究了扩展 t - U - J 模型($\delta \neq 0$)。相比之下, 我们研究的模型描述更加丰富的凝聚态多体物理。这篇文章的主要目的是研究有所争议的 BCDW 的演化和各向异性作用对一般扩展 Hubbard 模型基态相图的影响。我们只考虑弱耦合区域, 所有的排斥作用满足条件 $U, V, J < t$, 玻色化和重整化群分析能够有效运用。不失一般性, 我们假设 $|\delta| \leq 1$ 。结果将展示, 在半满下体系是个绝缘体。在易轴异性占主导时, 基态是有自旋激发能隙的密度波, 但在易面异性占主导时, 存在自旋-能隙相变。依赖自旋的相互作用导致键序自旋密度波 BSDW 相的存在, 这是一般扩展 Hubbard 模型所没有的性质。反铁磁交换提高 BCDW 相, 但同时减弱 CDW 相。进一步研究指出, 当 $J > 4V$, BSDW 和 CDW 二个相消失。

2. 低能场理论分析

一维电子体系中的低能激发是费米点附近的粒子-空穴对激发, 我们只需保留费米波矢 k_F 的电子算符的傅里叶模式。在坐标表象下, 这等价于变换 $c_{j,\sigma} \rightarrow e^{-ik_F x} \psi_{-,\sigma}(x) + e^{ik_F x} \psi_{+,\sigma}(x)$ 。这样操作把格点模型转变为连续场模型

$$H = iv_F \int dx \sum_{\sigma} (\psi_{-,\sigma}^\dagger \partial_x \psi_{-,\sigma} - \psi_{+,\sigma}^\dagger \partial_x \psi_{+,\sigma}) + \frac{m}{2} \int dx \sum_{\sigma} (\psi_{+,\sigma}^\dagger \psi_{-,\sigma} - \psi_{-,\sigma}^\dagger \psi_{+,\sigma}), \quad (7)$$

这是有质量的相对论狄拉克费米子的哈密顿量, 其中“光速” $v_F = 2t \sin k_F$ 。质量 m 表示可能产生的能隙项, 在自由跃迁时消失(对应无质量的狄拉克费米子情况)。

分析一维电子体系物理行为的一种有效工具是玻色化方法 [37]。利用这种手段, 费米场的手征分量能够通过电荷场(c)和自旋场(s)的玻色场算符 ϕ_ν 和 θ_ν 表示($\nu = c, s$):

$$\psi_{p,\sigma}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{i/\sqrt{2} \cdot [p(\phi_c + \sigma\phi_s) - (\theta_c + \sigma\theta_s)]}. \quad (8)$$

α 表示紫外截断。在下指标中, $p = -, +$ 分别表示费米场的左、右支, $\sigma = \downarrow, \uparrow$ 。依据这样的次序, 指数因子中的 p 和 σ 分别对应符号 “-” 和 “+”。这样, 哈密顿量可以重新写成:

$$H = H_c + H_s, \quad (9)$$

$$H_c = \frac{v_c}{2\pi} \int dx [\beta_c^{-1} (\nabla \phi_c)^2 + \beta_c (\nabla \theta_c)^2] + \frac{g_{3\perp}}{2(\pi\alpha)^2} \int dx \cos(\sqrt{8}\phi_c), \quad (10)$$

$$H_s = \frac{v_s}{2\pi} \int dx [\beta_s^{-1} (\nabla \phi_s)^2 + \beta_s (\nabla \theta_s)^2] + \frac{g_{1\perp}}{2(\pi\alpha)^2} \int dx \cos(\sqrt{8}\phi_s), \quad (11)$$

其中, v_c 和 v_s 分别表示集体电荷激发速度与集体自旋激发速度。 $g_{3\perp}$ 项表示倒逆散射过程, 在不考虑高阶修正情况下, 这个过程只发生在半满情况下 [38, 39]。 $g_{1\perp}$ 表示后向散射, 该过程与电子填充浓度无关。高斯耦合常数定义为: $\beta_c = 1 + g_c/2$, $\beta_s = 1 + g_s/2$ 。在一阶近似下, 微观耦合常数由下列表达式给出(简要推导过程见附录)

$$g_c = -\left(\frac{J}{2} - 2V\right)\delta - U - \frac{3}{2}J - 6V, \quad (12)$$

$$g_s = \left(\frac{5}{2}J + 6V\right)\delta + U - \frac{J}{2} - 2V, \quad (13)$$

$$g_{3\perp} = -\left(\frac{J}{2} - 2V\right)\delta - U - \frac{3}{2}J + 2V, \quad (14)$$

$$g_{1\perp} = -\left(\frac{3}{2}J + 2V\right)\delta + U - \frac{J}{2} - 2V. \quad (15)$$

在得到以上公式中, 我们忽略了电荷-自旋耦合项 H_{cs} 的贡献, 因为在弱耦合区域和重整化意义下, g_{cs} 耦合常数是强无关算符 [35, 36, 40–43]。这是因为重整化群方法表明, 弱耦合下电荷和自旋模式的相互作用参数会随能标降低而流动。若初始耦合较弱, 重整化流动可能使系数进一步减小(甚至趋于零)。当然, 在强耦合或高能标下, 电荷-自旋耦合可能主导物理行为, 此时必须考虑其影响。

在电荷-自旋分离假设下, 模型的低能物理由耦合常数(12)-(15)的标度行为来决定。在标度变换下: $\alpha \rightarrow e^{dl}\alpha$ (l 是标度长度), 无量纲的跑动耦合常数的一环重整化群方程表示为 [35]

$$\frac{dG_{3\perp}(l)}{dl} = -2G_c(l)G_{3\perp}(l), \quad \frac{dG_c(l)}{dl} = -2G_{3\perp}^2(l), \quad (16)$$

$$\frac{dG_{1\perp}(l)}{dl} = -2G_s(l)G_{1\perp}(l), \quad \frac{dG_s(l)}{dl} = -2G_{1\perp}^2(l), \quad (17)$$

其中, $G_i = g_i/4\pi t$ 。以上标度方程导致如图 1 所示的重整化群流向图。

依据流向图, $G_{3\perp}(l)$ 和 $G_{1\perp}(l)$ 的相关性很容易分析。一方面, 电荷激发与耦合 G_c 和 $G_{3\perp}$ 有关: (i) 当 $g_c \geq |g_{3\perp}|$ 时, $G_{3\perp}$ 是无关算符, 体系处于弱耦合区域(WCR)。随着标度变大, $G_{3\perp} \rightarrow 0$ 。 ϕ_c 是涨落场, 电荷激发无能隙。(ii) 当 $g_c < |g_{3\perp}|$ 时, $G_{3\perp}$ 是相关算符, 体系处于强耦合区域(SCR)。随着标度 l 变大, $G_{3\perp}$ 流向二个强耦合不动点, $G_{3\perp}^* = \pm\infty$ 。根据裸耦合 $g_{3\perp} > 0$ 还是 $g_{3\perp} < 0$, 相场的平均值锁在 $\langle \phi_c \rangle = \pi/\sqrt{8}$ 或 0, 以最小化体系能量。在这种情况下, 电荷激发存在能隙。另一方面, 自旋激发与耦合 G_s 和 $G_{1\perp}$ 有关: (i) 当 $g_s \geq |g_{1\perp}|$ 时, $G_{1\perp}$ 是无关算符, 体系处于弱耦

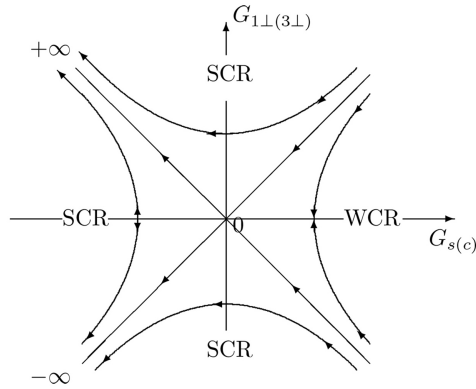


Figure 1. The renormalization-group flow diagram. The arrows denote the direction of flows with increasing length scale. “SCR” and “WCR” represent the weak- and strong-coupling regions in the RG sense

图 1. 重整化群流向图。箭头表示随着标度增加重整化流的方向，“SCR”和“WCR”分别表示重整化意义下弱耦合和强耦合区域

合区域，体系对应不动点 $G_{1\perp}^* = 0$ 。自旋场 ϕ_s 是涨落场，自旋激发无能隙。(ii) 当 $g_s < |g_{1\perp}|$ 时， $G_{1\perp}$ 是相关算符，体系处于强耦合区域， $G_{1\perp}$ 流向强耦合不动点， $G_{3\perp}^* = \pm\infty$ 。根据裸耦合 $g_{1\perp}$ 是正还是负， $\langle\phi_s\rangle = \pi/\sqrt{8}$ 或 0，自旋激发存在能隙。

3. 基态相图

Table 1. Order parameters, vacuum expectation values of locked phase fields and the corresponding bosonized expressions. “*” indicates the fluctuating field

表 1. 序参量，被锁相场的真空期望值和相应序参量的玻色化形式，“*”表示涨落场

序参量	$(\langle\phi_c\rangle, \langle\phi_s\rangle)$	玻色化形式
\mathcal{O}_{CDW}	$(\pi/\sqrt{8}, 0)$	$\sin \sqrt{2}\phi_c \cos \sqrt{2}\phi_s$
\mathcal{O}_{SDWz}	$(0, \pi/\sqrt{8})$	$\cos \sqrt{2}\phi_c \sin \sqrt{2}\phi_s$
$\mathcal{O}_{SDW\pm}$	$(0, *)$	$\cos \sqrt{2}\phi_c \exp \pm i\sqrt{2}\theta_s$
\mathcal{O}_{BCDW}	$(0, 0)$	$\cos \sqrt{2}\phi_c \cos \sqrt{2}\phi_s$
\mathcal{O}_{BSDWz}	$(\pi/\sqrt{8}, \pi/\sqrt{8})$	$\sin \sqrt{2}\phi_c \sin \sqrt{2}\phi_s$
$\mathcal{O}_{BSDW\pm}$	$(\pi/\sqrt{8}, *)$	$\sin \sqrt{2}\phi_c \exp \pm i\sqrt{2}\theta_s$

为了获得体系的基态相图，我们有必要引入一套序参量(见表 1)，分别定义为 $\mathcal{O}_{SDW\mu} = e^{i2k_F x} S_j^\mu$ ， $\mathcal{O}_{CDW} = e^{i2k_F x} n_j$ ， $\mathcal{O}_{BSDW\mu} = e^{i2k_F x} \bar{S}_j^\mu$ ， $\mathcal{O}_{BCDW} = e^{i2k_F x} \bar{n}_j$ 。其中，

$$\bar{n}_{j,\sigma} = (c_{j,\sigma}^\dagger c_{j+1,\sigma} + h.c.), \quad \bar{S}_j^\mu = \frac{1}{2}(c_{j,\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma\sigma'}^\mu c_{j+1,\sigma'} + h.c.). \quad (18)$$

根据重整化群理论，我们可以分析倒逆散射和后向散射过程的相关性。首先，由于 $g_c - g_{3\perp} = -8V < 0$ ，所以 $G_{3\perp}$ 是相关的，在重整化下会流向强耦合区域。这表明电荷激发总是有能隙的，

不会发生电荷-能隙相变。但是, 如果 $V > J/4$, 体系存在着高斯相变, 相变发生在

$$\delta_G = \frac{2U - 4V + 3J}{4V - J}. \quad (19)$$

在 $\delta_G = 0$ 的情况下, 我们有

$$U_c^* = 2V - \frac{3}{2}J. \quad (20)$$

相对于电荷激发, 自旋激发会有些不同。模型可以表现为无能隙的自旋激发, 对应条件:

$$0 \leq \delta \leq \frac{2U - 4V - J}{4V + 3J}, \quad (21)$$

或者,

$$\delta \geq \max\left\{\frac{J + 4V - 2U}{4V + J}; \frac{2U - 4V - J}{4V + 3J}\right\}. \quad (22)$$

相反情况对应着有能隙的自旋激发。因此, 自旋能隙相变线有二支: 一支对应

$$\delta = 0 \quad (U \geq U_s), \quad (23)$$

其中, $U_s = 2V + J/2$; 另一支对应

$$U = \frac{J + 4V}{2}(1 - \delta) \quad (\delta \geq 0). \quad (24)$$

在耦合常数(14)和(15)中, 我们取 $U = 0$, 就会得到

$$\delta_c^* = \frac{3J - 4V}{4V - J}, \quad \delta_s^* = -\frac{4V + J}{4V + 3J}. \quad (25)$$

考虑到 $V, J > 0$, 故 $-1 < \delta_s^* < 0$ 总是满足的。但 δ_c^* 的值可以有多种选择:

- (1) 当 $V > 3J/4$ 时, $\delta_s^* < \delta_c^* < 0$;
- (2) 当 $J/4 < V < 3J/4$ 时, $\delta_c^* > 0$; 当 $V < J/4$ 时, $\delta_c^* < \delta_s^* < 0$ 。

3.1. $V > 3J/4$

我们先考虑 $\delta_s^* < \delta_c^* < 0$ 的情况。 δ - U 平面被四条相变线划分为五个不同的相区, 如图 2 所示。

区域 **A**、**B**、**C** 表示有自旋激发能隙部分, $(\langle \phi_c \rangle, \langle \phi_s \rangle)$ 分别锁在 $(0, \pi/\sqrt{8})$, $(0, 0)$, $(\pi/\sqrt{8}, 0)$ 。序参量 \mathcal{O}_{SDWz} , \mathcal{O}_{BCDW} 和 \mathcal{O}_{CDW} 在对应的区域分别取最大值, 因此, 区域 **A** 是径向自旋密度波相, 对应伊辛型的反铁磁奈尔序。区域 **B** 是具有二聚化的键位电荷密度波 BCDW 相, 这正是 SEH 模型中所争议的相。区域 **C** 是电荷密度波 CDW 相, 以交替双占据与空占据为特征。由于离散对称性的存在, 这三个相都表现为准长程序。

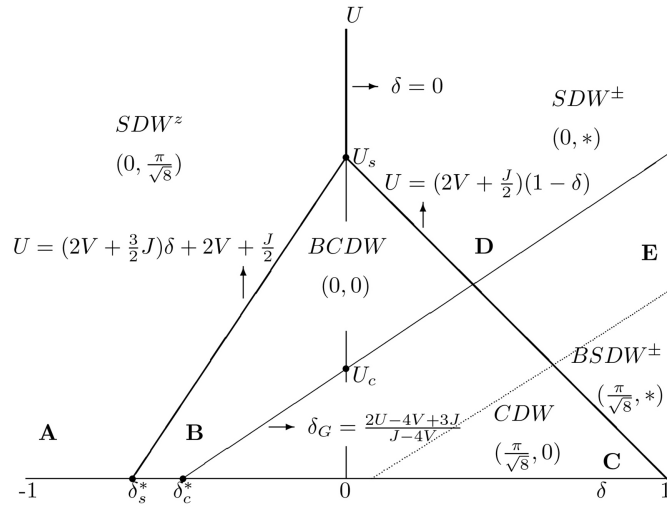


Figure 2. Phase diagram of the 1D anisotropic extended Hubbard model as functions of δ and U at half filling and at weak coupling. The two parallel lines denote the Gaussian transition: The solid and dot-dashed lines represent the case for $V > 3J/4$ and $J/4 < V < 3J/4$, respectively. For $V < J/4$, the Gaussian transition disappears

图 2. 作为 δ 和 U 的函数，一维半满各向异性扩展 Hubbard 模型的弱耦合相图。两条平行线表示高斯相变线：实线和点虚线分别表示 $V > 3J/4$ 和 $J/4 < V < 3J/4$ 的情况。 $V < J/4$ 时，高斯相变消失

区域 **D** 和 **E** 是自旋激发无能隙的相，以易面关联为特征。相场 ϕ_s 不能锁定在一个固定值，不动点 $\beta_c^* = 0$, $\beta_s^* > 1$ 。尽管如此，这二个区域也有不同之处。在区域 **D**，电荷场锁定在 $\langle \phi_c \rangle = 0$ ，序参量 \mathcal{O}_{SDW^\pm} , \mathcal{O}_{SDW^z} 和 \mathcal{O}_{BCDW} 可以取相同的最大值，但是它们的关联函数表现为不同的衰减行为，

$$\mathcal{R}_{SDW^\pm}(x) = x^{-1/\beta_s^*}, \quad \mathcal{R}_{SDW^z}(x) = \mathcal{R}_{BCDW}(x) = x^{-\beta_s^*}. \quad (26)$$

很明显， $\beta_s^* > 1$, \mathcal{R}_{SDW^\pm} 抑制 \mathcal{R}_{SDW^z} 和 \mathcal{R}_{BCDW} 。因此，这部分对应横向自旋密度波关联，被称之为 Mott 绝缘体。在区域 **E**，相场 ϕ_c 锁在 $\langle \phi_c \rangle = \pi/\sqrt{8}$ ，而自旋场 ϕ_s 不能锁定，序参量 \mathcal{O}_{BSDW^\pm} , \mathcal{O}_{BSDW^z} 和 \mathcal{O}_{CDW} 能同时取相同的最大值。与讨论区域 **D** 相似，我们比较它们的关联函数，

$$\mathcal{R}_{BSDW^\pm}(x) = x^{-1/\beta_s^*}, \quad \mathcal{R}_{BSDW^z} = \mathcal{R}_{CDW}(x) = x^{-\beta_s^*}. \quad (27)$$

这意味着区域 **E** 是横向键位自旋密度波 $BSDW^\pm$ ，抑制全能隙的径向键位自旋密度波 $BSDW^z$ 和电荷密度波 CDW 。 $BSDW^\pm$ 相在 SEH 模型中是不存在的，其原因可以用依赖自旋的相互作用来解释。像自旋密度波一样，自旋各向异性也能产生非临界的 $BSDW$ 行为。这与各向同性情况不同，那里的自旋径向和横向是简并的 [43]。另一方面， $BSDW$ 相也能在一维玻色体系中形成 [44]，由于与 Haldane 假设的整数自旋链中的能隙相似 [45]， $BSDW^\pm$ 相又称之为 Haldane 绝缘体。

另外，我们容易发现，在图 2 中沿着 U -轴，相图包含三个部分： SDW 、 $BCDW$ 、 CDW ，这恰好对应一维各向同性的 t - U - V - J 模型的基态相图 [46]。

3.2. $J/4 < V < 3J/4$

在这种情形下, 高斯相变线从 $\delta_c^* < 0$ 移动到 $\delta_c^* > 0$, 在相图 2 对应着点虚线的位置。除了 BCDW 和 SDW^\pm 相区增加, CDW 和 $BSDW^\pm$ 相区减弱外, 相图与 $V > 3J/4$ 情况相同。

3.3. $V < J/4$

随着 V 的减小, CDW 和 $BSDW^\pm$ 的相区越来越小。当 $V < J/4$ 时, 就会有 $U_c^* < 0$ 和 $x_c^* < -1$ 。此时, 体系中没有高斯相变的发生, CDW 与 $BSDW^\pm$ 相在基态中消失。这种情况下, 基态相图仅由三部分组成: SDW^z 、BCDW 和 SDW^\pm 。

4. 总结与讨论

通过解析方法我们研究了一维各向异性的扩展 Hubbard 模型, 其中最近邻电荷作用和自旋交换作用都与电子自旋有关, 这种各向异性相互作用在实验中早已被观察到 [47, 48]。在弱耦合区域我们利用阿贝尔玻色化和重整化群分析方法获得了模型的基态相图。在半满下, 倒逆过程总是相关的, 基态是绝缘体。 $V > J/4$ 时, 高斯相变和自旋能隙相变把相图分为 SDW 、 CDW 、 BOW 、 $BSDW$ 四个区域。 $V < J/4$ 时, 高斯相变不存在, CDW 和 $BSDW$ 二相也随之消失。我们的研究支持了 BCDW 相的存在, 并且该相与反铁磁交换有关。这与 Jeckelmann [25], Sandvik [20] 和 Ding [46] 等人的研究一致。不同的是, Nakamura 认为关联跃迁产生这个 BCDW 相 [12]。另外, 依赖自旋的电荷排斥作用 V 产生 $BSDW$ 相。其中, SDW^z 与 BCDW、BCDW 与 CDW 、 SDW^\pm 与 $BSDW^\pm$ 间的高斯相变是连续相变, 但 SDW^\pm 与 SDW^z 、BCDW 与 SDW^\pm 、 CDW 与 $BSDW^\pm$ 之间的相变属于 K-T 类型。研究结果揭示了各向异性的扩展 Hubbard 模型与一般(各向同性)扩展 Hubbard 模型是不同的, 各向异性的相互作用对体系的相结构有着重要的影响。

最后, 我们讨论一下基于弱耦合和一阶 RG 的局限性以及工作展望。本研究基于弱耦合极限和一阶重整化群方法, 其局限性在于无法全面描述强耦合区域的复杂物理。在强耦合条件下, 电荷与自旋自由度可能通过高阶虚过程形成束缚态(如自旋激子或双荷子), 导致 $BSDW$ 相被超导、轨道序或拓扑序等竞争相取代; 此外, 一阶 RG 近似可能低估量子涨落对相边界的影响, 需结合数值方法(如 DMRG 或 QMC)验证理论预测。实验上, $BSDW$ 相的验证需聚焦其独特的电荷-自旋联合序: 非弹性中子散射 (INS) 可通过探测自旋激发的各向异性色散关系(如链内/链间磁振子耦合强度差异)揭示其自旋结构; 角分辨光电子能谱 (ARPES) 可观测沿链方向打开的电荷间隙与垂直方向保留的金属性费米面共存的特征; X 射线衍射 (XRD) 或共振 X 射线散射 (RXS) 则能直接探测电荷密度波与自旋密度波的嵌套调制波矢。此外, 扫描隧道显微镜 (STM) 的准粒子干涉成像技术有望通过电子波函数的各向异性干涉图样, 为 $BSDW$ 相的存在提供直接证据。这些实验手段的协同应用将推动低维强关联电子体系的研究迈向新阶段。

致 谢

本项工作受到新疆维吾尔自治区自然科学基金资助(2024D01C49)。

参考文献

- [1] Lieb, E.H. and Wu, F.Y. (1968) Absence of Mott Transition in an Exact Solution of the Short-Range, One-Band Model in One Dimension. *Physical Review Letters*, **20**, 1445-1448. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.20.1445>
- [2] Anderson, P.W. (1987) The Resonating Valence Bond State in La_2CuO_4 and Superconductivity. *Science*, **235**, 1196-1198. <https://doi.org/10.1126/science.235.4793.1196>
- [3] Ishiguro, T. and Yamaji, K. (1990) Organic Superconductors. Springer-Verlag.
- [4] Jérôme, D. (1991) The Physics of Organic Superconductors. *Science*, **252**, 1509-1514. <https://doi.org/10.1126/science.252.5012.1509>
- [5] Weiss, H.G. (1992) Conjugated Conducting Polymers. Springer-Verlag.
- [6] Matsuzaki, H., Iwata, M., Miyamoto, T., Terashige, T., Iwano, K., Takaishi, S., *et al.* (2014) Excitation-Photon-Energy Selectivity of Photoconversions in Halogen-Bridged Pd-Chain Compounds: Mott Insulator to Metal or Charge-Density-Wave State. *Physical Review Letters*, **113**, Article 096403. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.113.096403>
- [7] Deshpande, V.V., Bockrath, M., Glazman, L.I. and Yacoby, A. (2010) Electron Liquids and Solids in One Dimension. *Nature*, **464**, 209-216. <https://doi.org/10.1038/nature08918>
- [8] Ishii, H., Kataura, H., Shiozawa, H., Yoshioka, H., Otsubo, H., Takayama, Y., *et al.* (2003) Direct Observation of Tomonaga-Luttinger-Liquid State in Carbon Nanotubes at Low Temperatures. *Nature*, **426**, 540-544. <https://doi.org/10.1038/nature02074>
- [9] Lu, M., Burdick, N.Q. and Lev, B.L. (2012) Quantum Degenerate Dipolar Fermi Gas. *Physical Review Letters*, **108**, Article 215301. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.108.215301>
- [10] Chotia, A., Neyenhuis, B., Moses, S.A., Yan, B., Covey, J.P., Foss-Feig, M., *et al.* (2012) Long-Lived Dipolar Molecules and Feshbach Molecules in a 3D Optical Lattice. *Physical Review Letters*, **108**, Article 080405. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.108.080405>
- [11] Emery, V.J. (1979) Theory of the One-Dimensional Electron Gas. In: de Vreese, J.T., Ed, *Highly Conducting One-Dimensional Solids*, Plenum, 247-304.
- [12] Nakamura, M. (2000) Tricritical Behavior in the Extended Hubbard Chains. *Physical Review B*, **61**, 16377-16392. <https://doi.org/10.1103/physrevb.61.16377>
- [13] Sólyom, J. (1979) The Fermi Gas Model of One-Dimensional Conductors. *Advances in Physics*, **28**, 201-303. <https://doi.org/10.1080/00018737900101375>
- [14] Hirsch, J.E. (1984) Charge-Density-Wave to Spin-Density-Wave Transition in the Extended Hubbard Model. *Physical Review Letters*, **53**, 2327-2330. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.53.2327>
- [15] Cannon, J.W. and Fradkin, E. (1990) Phase Diagram of the Extended Hubbard Model in One Spatial Dimension. *Physical Review B*, **41**, 9435-9443. <https://doi.org/10.1103/physrevb.41.9435>

- [16] Voit, J. (1992) Phase Diagram and Correlation Functions of the Half-Filled Extended Hubbard Model in One Dimension. *Physical Review B*, **45**, 4027-4042.
<https://doi.org/10.1103/physrevb.45.4027>
- [17] Tsuchiizu, M. and Furusaki, A. (2002) Phase Diagram of the One-Dimensional Extended Hubbard Model at Half Filling. *Physical Review Letters*, **88**, Article 056402.
<https://doi.org/10.1103/physrevlett.88.056402>
- [18] Sengupta, P., Sandvik, A.W. and Campbell, D.K. (2002) Bond-Order-Wave Phase and Quantum Phase Transitions in the One-Dimensional Extended Hubbard Model. *Physical Review B*, **65**, Article 155113. <https://doi.org/10.1103/physrevb.65.155113>
- [19] Zhang, Y.Z. (2004) Dimerization in a Half-Filled One-Dimensional Extended Hubbard Model. *Physical Review Letters*, **92**, Article 246404. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.92.246404>
- [20] Sandvik, A.W., Balents, L. and Campbell, D.K. (2004) Ground State Phases of the Half-Filled One-Dimensional Extended Hubbard Model. *Physical Review Letters*, **92**, Article 236401.
<https://doi.org/10.1103/physrevlett.92.236401>
- [21] Tam, K., Tsai, S. and Campbell, D.K. (2006) Functional Renormalization Group Analysis of the Half-Filled One-Dimensional Extended Hubbard Model. *Physical Review Letters*, **96**, Article 036408. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.96.036408>
- [22] Ejima, S. and Nishimoto, S. (2007) Phase Diagram of the One-Dimensional Half-Filled Extended Hubbard Model. *Physical Review Letters*, **99**, Article 216403.
<https://doi.org/10.1103/physrevlett.99.216403>
- [23] Mund, C., Legeza, Ö. and Noack, R.M. (2009) Quantum Information Analysis of the Phase Diagram of the Half-Filled Extended Hubbard Model. *Physical Review B*, **79**, Article 245130.
<https://doi.org/10.1103/physrevb.79.245130>
- [24] Li, Y. and Yuan, Z. (2016) Direct Evidence of the BOW and TS States in the Half-Filled One-Dimensional Extended Hubbard Model. *Physics Letters A*, **380**, 272-276.
<https://doi.org/10.1016/j.physleta.2015.09.034>
- [25] Jeckelmann, E. (2002) Ground-State Phase Diagram of a Half-Filled One-Dimensional Extended Hubbard Model. *Physical Review Letters*, **89**, Article 236401.
<https://doi.org/10.1103/physrevlett.89.236401>
- [26] Zhang, G.P. (2003) Accurate Ground-State Phase Diagram of the One-Dimensional Extended Hubbard Model at Half Filling. *Physical Review B*, **68**, Article 153101.
<https://doi.org/10.1103/physrevb.68.153101>
- [27] Deng, S., Gu, S. and Lin, H. (2006) Block-Block Entanglement and Quantum Phase Transitions in the One-Dimensional Extended Hubbard Model. *Physical Review B*, **74**, Article 045103.
<https://doi.org/10.1103/physrevb.74.045103>
- [28] Barisic, S. and Brazovskii, S.A. (1981) In: Devreese, J.T., Ed., *Recent Developments in Condensed Matter Physics*, Plenum.

- [29] Giamarchi, T. and Schulz, H.J. (1986) Spin-Anisotropic Electron-Electron Interactions in One-Dimensional Metals. *Physical Review B*, **33**, 2066-2069. <https://doi.org/10.1103/physrevb.33.2066>
- [30] Daul, S., Scalapino, D.J. and White, S.R. (2000) Pairing Correlations on t - U - J Ladders. *Physical Review Letters*, **84**, 4188-4191. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.84.4188>
- [31] Gimm, T., Yoon, J. and Choi, H. (2001) Bond-Order Driven Metallic Stripes in the t - U - J Model. *Physica C: Superconductivity and its Applications*, **364**, 209-212. [https://doi.org/10.1016/s0921-4534\(01\)00747-x](https://doi.org/10.1016/s0921-4534(01)00747-x)
- [32] Dai, J., Feng, X., Xiang, T. and Yu, Y. (2004) Gapped Spin-Liquid States in a One-Dimensional Hubbard Model with Antiferromagnetic Exchange Interaction. *Physical Review B*, **70**, Article 064518. <https://doi.org/10.1103/physrevb.70.064518>
- [33] Ogawa, N., Shiraga, A., Kondo, R., Kagoshima, S. and Miyano, K. (2001) Photocontrol of Dynamic Phase Transition in the Charge-Density Wave Material $K_{0.3}MoO_3$. *Physical Review Letters*, **87**, Article 256401. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.87.256401>
- [34] Ferraris, J., Cowan, D.O., Walatka, V. and Perlstein, J.H. (1973) Electron Transfer in a New Highly Conducting Donor-Acceptor Complex. *Journal of the American Chemical Society*, **95**, 948-949. <https://doi.org/10.1021/ja00784a066>
- [35] Japaridze, G.I. and Müller-Hartmann, E. (2000) Triplet Superconductivity in a One-Dimensional Ferromagnetic t - J Model. *Physical Review B*, **61**, 9019-9027. <https://doi.org/10.1103/physrevb.61.9019>
- [36] Dziurzik, C., Japaridze, G.I., Schadschneider, A., Titvinidze, I. and Zittartz, J. (2006) Triplet Superconductivity in a 1D Itinerant Electron System with Transverse Spin Anisotropy. *The European Physical Journal B*, **51**, 41-51. <https://doi.org/10.1140/epjb/e2006-00193-x>
- [37] Miranda, E. (2003) Introduction to Bosonization. *Brazilian Journal of Physics*, **33**, 3-35. <https://doi.org/10.1590/s0103-97332003000100002>
- [38] Yoshioka, H., Tsuchiizu, M. and Suzumura, Y. (2000) Correlation Effects in a One-Dimensional Quarter-Filled Electron System with Repulsive Interactions. *Journal of the Physical Society of Japan*, **69**, 651-654. <https://doi.org/10.1143/jpsj.69.651>
- [39] Sano, K. and Ōno, Y. (2004) Critical Behavior near the Metal-Insulator Transition in the One-Dimensional Extended Hubbard Model at Quarter Filling. *Physical Review B*, **70**, Article 155102. <https://doi.org/10.1103/physrevb.70.155102>
- [40] Schulz, H.J. (1990) Correlation Exponents and the Metal-Insulator Transition in the One-Dimensional Hubbard Model. *Physical Review Letters*, **64**, 2831-2834. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.64.2831>
- [41] Aligia, A.A. and Arrachea, L. (1999) Triplet Superconductivity in Quasi-One-Dimensional Systems. *Physical Review B*, **60**, 15332-15338. <https://doi.org/10.1103/physrevb.60.15332>

-
- [42] Ding, H. and Zhang, J. (2015) Influence of the Modulated Hopping on the One-Dimensional Interacting Electron System. *Physics Letters A*, **379**, 2374-2378.
<https://doi.org/10.1016/j.physleta.2015.05.026>
- [43] Dolcini, F. and Montorsi, A. (2013) Quantum Phases of One-Dimensional Hubbard Models with Three- and Four-Body Couplings. *Physical Review B*, **88**, Article 115115.
<https://doi.org/10.1103/physrevb.88.115115>
- [44] Lee, Y., Lee, Y. and Yang, M. (2007) Low-Energy Effective Theory for One-Dimensional Lattice Bosons near Integer Filling. *Physical Review B*, **76**, Article 075117.
<https://doi.org/10.1103/physrevb.76.075117>
- [45] Haldane, F.D.M. (1983) Nonlinear Field Theory of Large-Spin Heisenberg Antiferromagnets: Semiclassically Quantized Solitons of the One-Dimensional Easy-Axis Néel State. *Physical Review Letters*, **50**, 1153-1156. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.50.1153>
- [46] Ding, H. and Zhang, J. (2016) Investigation of the Ground State of the Anisotropic Extended Hubbard Chain at Weak Coupling. *Physics Letters A*, **380**, 3292-3296.
<https://doi.org/10.1016/j.physleta.2016.07.061>
- [47] Jérôme, D. and Schulz, H.J. (1982) Organic Conductors and Superconductors. *Advances in Physics*, **31**, 299-490. <https://doi.org/10.1080/00018738200101398>
- [48] Maeno, Y., Hashimoto, H., Yoshida, K., Nishizaki, S., Fujita, T., Bednorz, J.G., *et al.* (1994) Superconductivity in a Layered Perovskite without Copper. *Nature*, **372**, 532-534.
<https://doi.org/10.1038/372532a0>

附录

这里利用参考文献 [41]给出的公式可直接推导出式(12)-(15)的耦合常数。在半满下, $k_F = \pi/2$ (文中晶格常数已假设 $a = 1$), $V_{\parallel}^{eff} = V_2 = V(1 - \delta)$, $J_z = J_2 = J(1 - \delta)$, $V_{\perp}^{eff} = V_1 = V(1 + \delta)$, $J_{\perp} = J_1 = J(1 + \delta)$ 。代入获得:

$$g_{1\parallel} = -2V_2 - \frac{J_2}{2} = -(2V + \frac{J}{2})(1 - \delta) \quad (28)$$

$$g_{2\parallel} = g_{4\parallel} = 2V_2 + \frac{J_2}{2} = (2V + \frac{J}{2})(1 - \delta) \quad (29)$$

$$g_{3\parallel} = 0, \quad (30)$$

$$g_{1\perp} = U - 2V_1 - J_1 + \frac{J_2}{2} = U - \frac{J}{2} - 2V - (\frac{3}{2}J + 2V)\delta, \quad (31)$$

$$g_{2\perp} = U + 2V_1 + J_1 - \frac{J_2}{2} = U - \frac{J}{2} + 2V + (2V - \frac{3J}{2})\delta, \quad (32)$$

$$g_{3\perp} = -U + 2V_1 - J_1 - \frac{J_2}{2} = -U - \frac{3}{2}J + 2V - (\frac{J}{2} - 2V)\delta, \quad (33)$$

$$g_{4\perp} = U + 2V_1 - J_1 - \frac{J_2}{2} = U - \frac{3}{2}J + 2V + (2V - \frac{J}{2})\delta. \quad (34)$$

另外, $g_c = g_{1\parallel} - g_{1\parallel} - g_{2\perp}$, $g_s = g_{1\parallel} - g_{1\parallel} + g_{2\perp}$, 代入则有

$$g_c = -U - \frac{3}{2}J - 6V - (\frac{J}{2} - 2V)\delta, \quad (35)$$

$$g_s = U - \frac{J}{2} - 2V(\frac{5}{2}J + 6V)\delta. \quad (36)$$