

Ising 自旋 $S=1$, 具有次近邻相互作用的 面心立方格子的反铁磁体在外场下的 基态能量

王 养 璞

(苏 州 大 学)

1982年7月9日收到

提 要

本文用文献[4]中提出的方法,变 $S=1$ 的 Ising 体系成一个粒子数不守恒的费密体系,严格地求得了具有最近邻及次近邻相互作用的反铁磁 Ising 晶格在任意外场下的基态能量,得到了零温的相图。

一、引 言

具有反铁磁相互作用在任意外场下 Ising 模型的基态问题已有不少作者讨论过, Katsura 和 Narita^[1] 得到了具有最近邻、次近邻及再次近邻相互作用的简单立方晶格的零温相图,用的是比较子格子自旋取向的能量的方法; Kaburagi 和 Kanamori^[2], Kubo 和 Katsura^[3] 得到了一些 Ising 模型的不少零温相图,他们用的是不等式的方法,文献[4]发展了一种变换的方法,使此 Ising 体系变换成一个粒子数不守恒的费密子体系,利用量子多体方法,可以比较方便而严格地求得体系的零温相图. 特别是文献[4]的方法可以处理任意自旋的情况,似乎比“比较能量”的方法严格,比“不等式”的方法方便,同时也不会失去一些复杂的新相. 我们这里用文献[4]的变换,处理一个 $S=1$ 的面心立方结构的反铁磁 Ising 体系,严格地求解它在外场下的基态,得到了一个完整的零温相图。

二、 $S=1$ 的方法介绍

这里简单地引述文献[4]中关于变换成多费密子体系的方法。

三维 Ising 模型的哈密顿函数为

$$H_{\text{Ising}} = 2 \sum_{l_\alpha, l'_\beta}^{n, n} J_1(l_\alpha, l'_\beta) \hat{S}^z(l_\alpha) \hat{S}^z(l'_\beta) + 2 \sum_{l_\alpha, l''_\beta}^{n, n, n} J_2(l_\alpha, l''_\beta) \hat{S}^z(l_\alpha) \hat{S}^z(l''_\beta) - 4h \sum_{l_\alpha \in A} \hat{S}^z(l_\alpha), \quad (1)$$

其中 h 为外磁场强度, J_1, J_2 分别表示近邻和次近邻相互作用常数, n, n 和 n, n, n 分别表示近邻和次近邻. $\hat{S}^z(l)$ 为自旋算符的 z 分量.

将晶格全体记为 Λ , 根据下列原则将它分为几套子格子 $\{\Lambda_\alpha\} \alpha = 1, 2, \dots, n$.

$$\begin{aligned} \Lambda &= \bigcup_{\alpha=1}^n \Lambda_\alpha, \\ \Lambda_\alpha \cap \Lambda_\beta &= \phi \quad \alpha \neq \beta, \\ J(l_\alpha, l_\beta) &\leq 0 \quad \forall l_\alpha, l_\beta \in \Lambda_\alpha \quad (\alpha = 1, 2, \dots, n). \end{aligned} \quad (2)$$

然后对每一子格子实行变换.

因为 $S = 1$, 此时 $\hat{S}^z$ 有三个本征值, 它们分别为 $0, \pm 1$. 对每一自旋 $\hat{S}^z(l)$ 可引入三种类型的费密变换如下:

$$\begin{aligned} \hat{S}^z(l) &\Rightarrow \begin{cases} \hat{S}_1^z(l) = 1 - \hat{n}_1(l) - \hat{n}_2(l), \\ \hat{S}_0^z(l) = \hat{n}_1(l) - \hat{n}_2(l), \\ \hat{S}_{-1}^z(l) = -1 + \hat{n}_1(l) + \hat{n}_2(l), \end{cases} \\ \hat{n}_\alpha(l) &= \hat{a}_\alpha^+(l) \hat{a}_\alpha(l) \quad (\alpha = 1, 2). \end{aligned} \quad (3)$$

这里 $\hat{a}_\alpha^+(l), \hat{a}_\alpha(l)$ 满足下列对易关系:

$$[\hat{a}_\alpha(l), \hat{a}_\beta^+(l')]_+ = \delta_{\alpha\beta} \delta(l, l') \quad (\alpha, \beta = 1, 2). \quad (4)$$

现在每一个 $\hat{S}_\alpha^z(l) (\alpha=0, \pm 1)$ 与两种费密子组成的四个本征态 ($|00\rangle, |10\rangle, |01\rangle, |11\rangle$) 相对应, 以致必须引入一些投影算符, 令

$$\begin{aligned} \hat{P}_1(l) &= 1 - (1 - \hat{n}_1(l)) \hat{n}_2(l), \\ \hat{P}_0(l) &= 1 - \hat{n}_1(l) \hat{n}_2(l), \quad \hat{P}_{-1}(l) = \hat{P}_1(l). \end{aligned} \quad (5)$$

可得(以下用 H_I, H_F 分别表示 $H_{\text{Ising}}, H_{\text{Fermi}}$)

$$E = \text{sp}(e^{-\beta \hat{H}_I} \hat{H}_I) / \text{sp}(e^{-\beta \hat{H}_I}) = \text{sp}(e^{-\beta \hat{H}_F} \hat{H}_F) / \text{sp}(e^{-\beta \hat{H}_F} \hat{P}), \quad (6)$$

其中 $\hat{H}_I$ 如(1)式所示, 而

$$\begin{aligned} \hat{H}_F &= 2 \sum_{l_\alpha, l'_\beta}^{n, n} J_1(l_\alpha, l'_\beta) \hat{S}(\eta, l_\alpha) \hat{S}(\eta, l'_\beta) \hat{P}(\eta, l_\alpha) \hat{P}(\eta, l'_\beta) \\ &\quad + 2 \sum_{l_\alpha, l''_\beta}^{n, n, n} J_2(l_\alpha, l''_\beta) \hat{S}(\eta, l_\alpha) \hat{S}(\eta, l''_\beta) \hat{P}(\eta, l_\alpha) \hat{P}(\eta, l''_\beta) \\ &\quad - 4h \sum_{l_\alpha \in \Lambda} \hat{S}(\eta, l_\alpha) \hat{P}(\eta, l_\alpha), \\ \hat{P} &= \prod_{l_\alpha \in \Lambda} \hat{P}(\eta, l_\alpha). \end{aligned} \quad (7)$$

上式中 $\hat{S}(\eta, l)$ 可取 $\hat{S}_1^z(l), \hat{S}_{-1}^z(l)$ 或 $\hat{S}_0^z(l)$, 而 $\hat{P}(\eta, l)$ 可取 $\hat{P}_1(l), \hat{P}_{-1}(l)$ 或 $\hat{P}_0(l)$.

由方程(3)–(5)式可得

$$\hat{H}_F = 2 \sum_{l_\alpha, l'_\beta}^{n, n} J_1(l_\alpha, l'_\beta) \hat{S}(\eta, l_\alpha) \hat{S}(\eta, l'_\beta)$$

$$\begin{aligned}
& + 2 \sum_{l_\alpha, l'_\beta}^{n, n, n} J_2(l_\alpha, l'_\beta) \hat{S}(\eta, l_\alpha) \hat{S}(\eta, l'_\beta) \\
& - 4h \sum_{l_\alpha \in A} \hat{S}(\eta, l_\alpha).
\end{aligned} \quad (8)$$

当外场满足一定条件时,可证明真空态 $|0\rangle$ 就是 $\hat{H}_F$ 的基态,得下方程:

$$\begin{aligned}
E_g &= \lim_{\beta \rightarrow 0} \text{sp}(e^{-\beta \hat{H}_1} \hat{H}_1) / \text{sp}(e^{-\beta \hat{H}_1}) \\
&= \lim_{\beta \rightarrow \infty} \text{sp}(e^{-\beta \hat{H}_F} \hat{H}_F) / \text{sp}(e^{-\beta \hat{H}_F} \hat{P}) \\
&= \frac{\langle \varphi_1 | \hat{H}_F | \varphi_1 \rangle + \langle \varphi_2 | \hat{H}_F | \varphi_2 \rangle + \cdots + \langle \varphi_l | \hat{H}_F | \varphi_l \rangle}{\langle \varphi_1 | \hat{P} | \varphi_1 \rangle + \langle \varphi_2 | \hat{P} | \varphi_2 \rangle + \cdots + \langle \varphi_l | \hat{P} | \varphi_l \rangle} \\
&= \frac{M \langle 0 | \hat{H}_F | 0 \rangle}{M \langle 0 | \hat{P} | 0 \rangle} = \frac{\langle 0 | \hat{H}_F | 0 \rangle}{\langle 0 | \hat{P} | 0 \rangle} = \langle 0 | H_F | 0 \rangle.
\end{aligned} \quad (9)$$

从(9)式可知,找 $\hat{H}_1$ 的基态问题,恰好变为找 $\hat{H}_F$ 的真空态的问题。

三、 $S=1$ 的零温相图

研究具有次近邻相互作用的三维面心立方的 Ising 模型,可将整个面心立方格子分为八个子格子如图 1 中所示。

$$A = \bigcup_{\alpha=1}^8 A_\alpha$$

近邻和次近邻都是反铁磁体相互作用,其中近邻数为 12 个,次近邻为 6 个。当取所有可能性时,可得许多变换,如下述:

1. 态 A

对于每个子格子变换 $\hat{S}^z(l_\alpha)$ 到相同的算子:

$$\hat{S}(\eta, l_\alpha) = \hat{S}_1^z(l_\alpha) \quad (\alpha = 1, 2, \cdots, 8)$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}_F &= 2J_1 \sum_{l_\alpha, l'_\alpha}^{n, n} \hat{S}_1^z(l_\alpha) \hat{S}_1^z(l'_\alpha) + 2J_2 \sum_{l_\alpha, l'_\alpha}^{n, n, n} \hat{S}_1^z(l_\alpha) \hat{S}_1^z(l'_\alpha) \\
& - 4h \sum_{l_\alpha \in A} \hat{S}_1^z(l_\alpha).
\end{aligned}$$

令 $H \equiv H_F = U_0 + H_2 + H_4$,

由(3)式可得如下方程:

$$U_0 = 4N(6J_1 + 3J_2 - h),$$

$$H_2 = 4(h - 12J_1 - 6J_2) \sum_{l_\alpha (\alpha=1-8)} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha)),$$

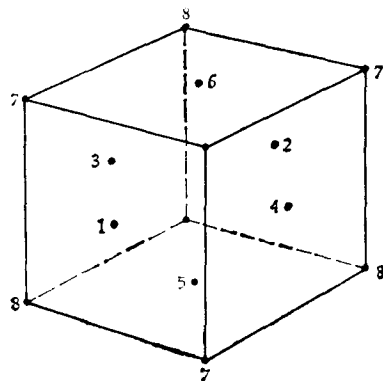


图 1

$$H_1 = 2J_1 \sum_{l_\alpha, l'_\alpha (\alpha=1-8)}^{n, n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l'_\alpha) + n_2(l'_\alpha)) \\ + 2J_2 \sum_{l_\alpha, l''_\alpha (\alpha=1-8)}^{n, n, n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l''_\alpha) + n_2(l''_\alpha)).$$

因为 $J_1 > 0$, $J_2 > 0$, 当 $h > 6(2J_1 + J_2)$ 时, $|0\rangle_A$ 是 H_2 和 H 的基态. 同样根据对称性可知, 全部子格子变换到 $\hat{S}_{-1}^z(l_\alpha)$ ($\alpha = 1-8$) 的基态为 $|0\rangle_A$.

2. 态 B

变换子格子“1”到 $\hat{S}_{-1}^z(l_1)$, 其余子格子变换到 $\hat{S}_1^z(l_\beta)$ ($\beta = 2-8$) 可得如下方程:

$$U_0 = 3N(4J_1 + 2J_2 - h) \\ H_2 = 4(12J_1 + 6J_2 - h) \sum_{l_1}^{n, n} (n_1(l_1) + n_2(l_2)) \\ - 4(12J_1 - 6J_2 - h) \sum_{l_2}^{n, n} (n_1(l_2) + n_2(l_2)) \\ - 4(8J_1 + 6J_2 - h) \sum_{l_\beta (\beta=3-8)}^{n, n} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta)), \\ H_1 = 2J_1 \sum_{l_\beta, l'_\beta (\beta=2-8)}^{n, n} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta))(n_1(l'_\beta) + n_2(l'_\beta)) \\ + 2J_2 \sum_{l_\beta, l''_\beta (\beta=3-8)}^{n, n, n} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta))(n_1(l''_\beta) + n_2(l''_\beta)) \\ - 4J_1 \sum_{l_1, l'_1}^{n, n} (n_1(l_1) + n_2(l_1))(n_1(l'_1) + n_2(l'_1)) \\ - 4J_2 \sum_{l_1, l'_1}^{n, n, n} (n_1(l_1) + n_2(l_1))(n_1(l'_1) + n_2(l'_1)).$$

当 $h < 6(2J_1 + J_2)$, $h > 6(2J_1 - J_2)$, $h > 2(4J_1 + 3J_2)$ 时, $|0\rangle_B$ 为 H_2 的基态, 也可证明 $|0\rangle_B$ 也是 H 的基态. 此态与态 $|0\rangle_A$ 是不同的, 基态 $|0\rangle_A$ 指所有子格子自旋都向上, 基态 $|0\rangle_B$ 指子格子“1”的自旋向下, 其余七个子格子自旋都向上. 根据对称性, 可在子格子 $\alpha=1-8$ 中任取一个子格子自旋向下, 其余子格子自旋都向上作为基态, 应与 $|0\rangle_B$ 有同一能量, 故 $|0\rangle_B$ 为八度简并. 另外, 若取相对称的变换, 使一个子格子变换到 $\hat{S}_{+1}^z(l_1)$, 而其余变换到 $\hat{S}_{-1}^z(l_\alpha)$ ($\alpha = 2-8$), 则可得到基态 $|0\rangle_B$, 也是八度简并的.

3. 态 C₁

变换子格子“1”和“2”到 $\hat{S}_{-1}^z(l_\alpha)$ ($\alpha = 1, 2$), 其余为 $\hat{S}_1^z(l_\beta)$ ($\beta = 3-8$), 可得如下方程:

$$U_0 = 2N(6J_2 - h),$$

$$\begin{aligned}
H_2 &= 4(12J_1 - 6J_2 - h) \sum_{l_\alpha (\alpha=1,2)} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha)) \\
&\quad - 4(4J_1 + 6J_2 - h) \sum_{l_\beta (\beta=3-8)} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta)), \\
H_4 &= 2J_1 \sum_{l_\beta, l'_\beta (\beta=3-8)}^{n,n} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta))(n_1(l'_\beta) + n_2(l'_\beta)) \\
&\quad - 4J_1 \sum_{l_\alpha, l'_\alpha (\alpha=1,2)}^{n,n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l'_\alpha) + n_2(l'_\alpha)) \\
&\quad + 2J_2 \sum_{l_\beta, l''_\beta (\beta=1-8)}^{n,n} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta))(n_1(l''_\beta) + n_2(l''_\beta)).
\end{aligned}$$

当 $h < 6(2J_1 - J_2)$, $h > 2(2J_1 + 3J_2)$ 时, $|0\rangle_{c_1}$ 是 H_2 的基态, 但要作为 H 的基态还必须考虑它的激发态, 要使激发态的能量大于零才行. 这里特别重要的是考虑 C_1 态中子格子“2”和“3”处于激发态时, 便有

$$n_1(l_2) = 1, n_2(l_2) = 1; \quad n_1(l_3) = 1, n_2(l_3) = 1$$

这就相当于变 C_1 态为 C_2 态. 结果有激发能为

$$2N'[4(12J_1 - 6J_2 - h) - 4(4J_1 + 6J_2 - h)] - 4N'(4J_1 \times 2) > 0.$$

上式中最后一项来自 H_4 中第二项的贡献, 式中 N' 为总数 N 的八分之一. 上式可化为

$$16J_1 - 48J_2 > 0 \quad \text{或} \quad J_2 < \frac{1}{3} J_1.$$

所以 C_1 相的边界为 1) $h < 12J_1 - 6J_2$, 2) $h > 4J_1 + 6J_2$, 3) $J_2 < \frac{1}{3} J_1$. 由于激发态能量也大于零, $|0\rangle_{c_1}$ 不仅是 H_2 的基态, 也是 H 的基态.

由对称性可知, $|0\rangle_{c_1}$ 为四度简并. 同样 $|0\rangle_{c_2}$ 也是四度简并的.

4. 态 C_2

变换子格子“1”和“3”到 $\hat{S}_{-1}^z(l_\alpha)$ ($\alpha = 1, 3$), 其余为 $\hat{S}_1^z(l_\beta)$ ($\beta = 2, 4-8$) 可得如下方程:

$$\begin{aligned}
U_0 &= N(5J_1 - 2h), \\
H_2 &= 4(8J_1 + 6J_2 - h) \sum_{l_\alpha (\alpha=1,3)} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha)) \\
&\quad - 4(8J_1 - 6J_2 - h) \sum_{l_\alpha (\alpha=2,4)} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha)) \\
&\quad - 4(4J_1 + 6J_2 - h) \sum_{l_\beta (\beta=5-8)} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta)), \\
H_4 &= 2J_1 \sum_{l_\alpha, l'_\alpha (\alpha=1,3), l'_\alpha}^{n,n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l'_\alpha) + n_2(l'_\alpha))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 2J_1 \sum_{l_\beta, l'_\beta (\beta=2, 4-8)}^{n, n} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta))(n_1(l'_\beta) + n_2(l'_\beta)) \\
& - 4J_1 \sum_{l_\alpha (\alpha=1, 3), l'_\beta (\beta=2, 4-8)}^{n, n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l'_\beta) + n_2(l'_\beta)) \\
& + 2J_2 \sum_{l_\beta, l''_\beta (\beta=5-8)}^{n, n, n} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta))(n_1(l''_\beta) + n_2(l''_\beta)) \\
& - 2J_2 \sum_{l_\alpha, l''_\alpha (\alpha=1-4)}^{n, n, n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l''_\alpha) + n_2(l''_\alpha)).
\end{aligned}$$

当 $h < 2(4J_1 + 3J_2)$, $h > 2(2J_1 + 3J_2)$, $h > 2(4J_1 - 3J_2)$ 时, $|0\rangle_{c_1}$ 为 H_2 的基态. 考虑激发“2”和“3”子格子时 (相当于 C_1 相). 要求激发能大于零, 与 C_1 态处同样的讨论可得

$$2N'[4(8J_1 + 6J_2 - h) - 4(8J_1 - 6J_2 - h)] - 4J \times 4N' \times 2 > 0$$

$$\text{即} \quad 48J_2 - 16J_1 > 0 \Rightarrow J_2 > \frac{1}{3}J_1.$$

于是 C_2 相的边界应为 1) $h < 8J_1 + 6J_2$, 2) $h > 4J_1 + 6J_2$, 3) $J_2 > \frac{1}{3}J_1$. 此时 $|0\rangle_{c_1}$ 为 H 的基态. 由对称性可知, $|0\rangle_{c_1}$ 有二十四度简并. $|0\rangle_{c_1}$ 也有二十四度简并.

5. 态 D_1

变换子格子“1”, “2”, “3”到 $\hat{S}_1^z(l_\alpha)$ ($\alpha = 1, 2, 3$), 其余变换为 $\hat{S}_1^z(l_\beta)$ ($\beta = 4-8$) 可得如下方程:

$$\begin{aligned}
U_0 &= N(6J_2 - h + 4J_1), \\
H_2 &= 4(8J_1 - 6J_2 - h) \sum_{l_\alpha (\alpha=1, 2)}^{n, n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha)) \\
& - 4(h - 4J_1 - 6J_2) \sum_{l_3} (n_1(l_3) + n_2(l_3)) \\
& - 4(4J_1 - 6J_2 - h) \sum_{l_4} (n_1(l_4) + n_2(l_4)) \\
& - 4(6J_2 - h) \sum_{l_\beta (\beta=5-8)} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta)), \\
H_4 &= 4J_1 \sum_{l_\alpha (\alpha=1, 2), l_3}^{n, n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l_3) + n_2(l_3)) \\
& - 4J_1 \sum_{l_\alpha (\alpha=1, 2), l'_\beta (\beta=4-8)}^{n, n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l'_\beta) + n_2(l'_\beta))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 2J_1 \sum_{l_\beta, l'_\beta (\beta=4-8)}^{n, n} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta))(n_1(l'_\beta) + n_2(l'_\beta)) \\
& + 2J_2 \sum_{l_\alpha, l'_\alpha (\alpha=1, 2, 5-8)}^{n, n, n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l'_\alpha) + n_2(l'_\alpha)) \\
& - 2J_2 \sum_{l_\alpha, l'_\alpha (\alpha=3, 4)}^{n, n, n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l'_\alpha) + n_2(l'_\alpha)).
\end{aligned}$$

当 $h < 8J_1 - 6J_2$, $h < 4J_1 + 6J_2$, $h > 4J_1 - 6J_2$, $h > 6J_2$ 时, $|0\rangle_{D_1}$ 为 H_2 的基态, 考虑到激发“2”, “5”子格子时, 与上面类似的讨论可得

$$J_2 < \frac{1}{3} J_1.$$

故 D_1 相的边界为 1) $h < 4J_1 + 6J_2$, 2) $h > 4J_1 - 6J_2$, 3) $J_2 < \frac{1}{3} J_1$. 此时 $|0\rangle_{D_1}$ 为 H 的基态. 此态 $|0\rangle_D$ 与 $|0\rangle_B$ 各有二十四度简并.

6. 态 D_2

变换子格子“1”, “3”, “5”为 $\hat{S}_{-1}(l_\alpha)$ ($\alpha = 1, 3, 5$), 其余为 $\hat{S}_1^z(l_\beta)$ ($\beta = 2, 4, 6-8$) 可得如下方程:

$$\begin{aligned}
U_0 &= -N(6J_2 + h), \\
H_2 &= 4(4J_1 + 6J_2 - h) \sum_{l_\alpha (\alpha=1, 3, 5)} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha)) \\
&\quad - 4(4J_1 - 6J_2 - h) \sum_{l_\beta (\beta=2, 4, 6)} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta)) \\
&\quad - 4(6J_2 - h) \sum_{l_\beta (\beta=7, 8)} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta)), \\
H_4 &= 2J_1 \sum_{l_\alpha, l'_\alpha (\alpha=1, 3, 5)}^{n, n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l'_\alpha) + n_2(l'_\alpha)) \\
&\quad - 2J_1 \sum_{l_\alpha (\alpha=1, 3, 5)}^{n, n} \sum_{l'_\beta (\beta=2, 4, 6-8)} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l'_\beta) + n_2(l'_\beta)) \\
&\quad - 2J_1 \sum_{l_\beta (\beta=2, 4, 6)}^{n, n} \sum_{l'_\alpha (\alpha=1, 3, 5)} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta))(n_1(l'_\alpha) + n_2(l'_\alpha)) \\
&\quad + 2J_1 \sum_{l_\beta (\beta=2, 4, 6)}^{n, n} \sum_{l'_\alpha (\alpha=2, 4, 6-8)} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta))(n_1(l'_\alpha) + n_2(l'_\alpha))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - 2J_1 \sum_{\substack{l_\beta (\beta=7,8) \\ l'_\alpha (\alpha=1,3,5)}}^{n,n} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta))(n_1(l'_\alpha) + n_2(l'_\alpha)) \\
& + 2J_1 \sum_{\substack{l_\beta (\beta=7,8) \\ l'_\alpha (\alpha=2,4,6)}}^{n,n} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta))(n_1(l'_\alpha) + n_2(l'_\alpha)) \\
& + 2J_2 \sum_{l_\beta, l''_\beta (\beta=7,8)}^{n,n,n} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta))(n_1(l''_\beta) + n_2(l''_\beta)) \\
& - 2J_2 \sum_{l_\alpha, l''_\alpha (\alpha=1-6)}^{n,n,n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l''_\alpha) + n_2(l''_\alpha)).
\end{aligned}$$

当 $h < 4J_1 + 6J_2$, $h > 4J_1 - 6J_2$, $h > 6J_2$ 时, $|0\rangle_{D_1}$ 为 H_2 的基态. 但考虑到 H_4 的作用时, 可激发“2”, “5”子格子, 相当于 D_1 相. 讨论可得

$$J_2 > \frac{1}{3} J_1.$$

故 D_2 相的边界为 1) $h < 4J_1 + 6J_2$, 2) $h > 6J_2$, 3) $J_2 > \frac{1}{3} J_1$, 此时 $|0\rangle_{D_2}$ 为 H 的基态. 态 $|0\rangle_{D_1}$ 与态 $|0\rangle_{D_2}$ 各有三十二度简并.

7. 态 E_1

变换子格子 1—4 到 $\hat{S}_{-1}(l_\alpha)(\alpha = 1-4)$, 其余为 $\hat{S}_1^+(l_\beta)(\beta = 5-8)$, 可得如下方程:

$$\begin{aligned}
U_0 &= 4N(3J_2 - 2J_1), \\
H_2 &= 4(4J_1 - 6J_2 - h) \sum_{l_\alpha (\alpha=1-4)} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha)) \\
& \quad + 4(4J_1 - 6J_2 + h) \sum_{l_\beta (\beta=5-8)} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta)) \\
H_4 &= 2J_1 \sum_{l_\alpha, l'_\alpha (\alpha=1-4)}^{n,n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l'_\alpha) + n_2(l'_\alpha)) \\
& \quad + 2J_1 \sum_{l_\beta, l'_\beta (\beta=5-8)}^{n,n} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta))(n_1(l'_\beta) + n_2(l'_\beta)) \\
& \quad - 4J_1 \sum_{\substack{l_\alpha (\alpha=1-4) \\ l'_\beta (\beta=5-8)}}^{n,n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l'_\beta) + n_2(l'_\beta)) \\
& \quad + 2J_2 \sum_{l_\alpha, l''_\alpha (\alpha=1-8)}^{n,n,n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l''_\alpha) + n_2(l''_\alpha)).
\end{aligned}$$

当 $h < 4J_1 - 6J_2$, $h > 6J_2 - 4J_1$ 时, $|0\rangle_{E_1}$ 为 H_2 的基态. 考虑到激发“4”, “5”子格

子时, 讨论可得

$$J_2 < \frac{1}{3} J_1.$$

故 E_1 相边界为 1) $h < 4J_1 - 6J_2$, 2) $h > 6J_2 - 4J_1$, 3) $J_2 < \frac{1}{3} J_1$. 此时 $|0\rangle_{E_1}$ 为 H 的基态. 此基态共有六度简并.

8. 态 E_2

变换子格子 “1”, “2”, “3”, “5” 到 $\hat{S}_1(l_\alpha)$ ($\alpha = 1, 2, 3, 5$), 其余变换到 $\hat{S}_1(l_\beta)$ ($\beta = 4, 6, 7, 8$) 可得如下方程:

$$\begin{aligned} U_0 &= -4NJ_1, \\ H_2 &= 4(4J_1 - 6J_2 - h) \sum_{l_\alpha (\alpha=1,2)} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha)) \\ &\quad + 4(6J_2 - h) \sum_{l_\alpha (\alpha=3,5)} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha)) \\ &\quad + 4(6J_2 + h) \sum_{l_\beta (\beta=4,6)} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta)) \\ &\quad + 4(4J_1 - 6J_2 + h) \sum_{l_\beta (\beta=7,8)} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta)), \\ H_4 &= 2J_1 \sum_{l_\alpha, l'_\alpha (\alpha=1,2,3,5)}^{n,n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l'_\alpha) + n_2(l'_\alpha)) \\ &\quad + 2J_1 \sum_{l_\beta, l'_\beta (\beta=4,6,7,8)}^{n,n} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta))(n_1(l'_\beta) + n_2(l'_\beta)) \\ &\quad - 2J_1 \sum_{l_\alpha (\alpha=1,2,3,5)}^{n,n} \sum_{l'_\beta (\beta=4,6,7,8)}^{n,n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l'_\beta) + n_2(l'_\beta)) \\ &\quad - 2J_1 \sum_{l_\alpha (\alpha=4,6)}^{n,n} \sum_{l'_\beta (\beta=1,2,3,5)}^{n,n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l'_\beta) + n_2(l'_\beta)) \\ &\quad - 2J_1 \sum_{l_\beta (\beta=7,8)}^{n,n} \sum_{l'_\alpha (\alpha=1,2,3,5)}^{n,n} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta))(n_1(l'_\alpha) + n_2(l'_\alpha)) \\ &\quad + 2J_2 \sum_{l_\alpha, l''_\alpha (\alpha=1,2,7,8)}^{n,n,n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l''_\alpha) + n_2(l''_\alpha)) \\ &\quad - 2J_2 \sum_{l_\alpha, l''_\alpha (\alpha=3-6)}^{n,n,n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l''_\alpha) + n_2(l''_\alpha)). \end{aligned}$$

当 $h < 4J_1 - 6J_2$, $h < 6J_2$, $h > 6J_2 - 4J_1$, $h > 6J_2$ 时, $|0\rangle_{E_2}$ 为 H_2 的基态, 但此态可证明不是 H 的基态. 证明如下:

第一步: 激发“4”, “5”子格子, 变态 E_2 为态 E_1 , 此时激发能为

$$2N'[4(6J_2 - h) + 4(6J_2 + h)] - 4N' \times 4J_1 \times 2 > 0$$

即
$$J_2 > \frac{1}{3} J_1.$$

故 E_2 相的边界似乎应为 1) $h < 4J_1 - 6J_2$, 2) $h > 6J_2 - 4J_1$, 3) $J_2 > \frac{1}{3} J_1$. 但考虑到

第二步: 激发“2”, “7”子格子, 变 E_2 态为 E_3 态(子格子“1”, “3”, “5”, “7”自旋向下, 其余自旋向上的态), 此时激发能为

$$2N'[4(4J_1 - 6J_2 - h) + 4(4J_1 - 6J_2 + h)] - 4N' \times 4J_1 \times 2 > 0$$

即
$$J_2 < \frac{1}{3} J_1.$$

由以上二步可见, $J_2 > \frac{1}{3} J_1$ 与 $J_2 < \frac{1}{3} J_1$ 相矛盾, 所以态 E_2 不能作为基态存在.

9. 态 E_3

变换子格子“1”, “3”, “5”, “7”到 $\hat{S}_i^z(l_\alpha)$ ($\alpha = 1, 3, 5, 7$), 其余变换为 $\hat{S}_i^z(l_\beta)$ ($\beta = 2, 4, 6, 8$), 可得如下方程:

$$U_0 = -12NJ_2,$$

$$H_2 = 4(6J_2 - h) \sum_{l_\alpha (\alpha=1,3,5,7)} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha)) \\ + 4(6J_2 + h) \sum_{l_\beta (\beta=2,4,6,8)} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta)),$$

$$H_4 = 2J_1 \sum_{l_\alpha, l'_\alpha (\alpha=1,3,5,7)}^{n,n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l'_\alpha) + n_2(l'_\alpha)) \\ - 4J_1 \sum_{l_\alpha (\alpha=1,3,5,7)}^{n,n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l'_\beta) + n_2(l'_\beta)) \\ + 2J_1 \sum_{l_\beta, l'_\beta (\beta=2,4,6,8)}^{n,n} (n_1(l_\beta) + n_2(l_\beta))(n_1(l'_\beta) + n_2(l'_\beta)) \\ - 2J_2 \sum_{l_\alpha, l''_\alpha (\alpha=1-8)}^{n,n,n} (n_1(l_\alpha) + n_2(l_\alpha))(n_1(l''_\alpha) + n_2(l''_\alpha)).$$

当 $h < 6J_2$, $h > -6J_2$ 时, $|0\rangle_{E_3}$ 为 H_2 的基态. 考虑到激发子格子“2”, “7”时, 讨论可得

$$J_2 > \frac{1}{3} J_1.$$

故 E_3 相的边界为 1) $h < 6J_2$, 2) $h > -6J_2$, 3) $J_2 > \frac{1}{3}J_1$. 此时 $|0\rangle_{E_3}$ 为 H 的基态, 此态有十六度简并.

除以上讨论外, 尚可考虑许多边界相, 本文仅举一例讨论如下:

10. 态 M (边界相)

变换子格子“1”到 $\hat{S}_1^z(l_1)$, 其余变换为 $\hat{S}_\alpha^z(l_\alpha)$ ($\alpha = 2-8$), 可得如下方程:

$$U_0 = \frac{1}{2}Nh,$$

$$H_2 = -4h \sum_{l_1} (n_1(l_1) + n_2(l_1)) + 4(6J_2 + h) \sum_{l_2} (n_2(l_2) - n_1(l_2)) \\ + 4(2J_1 + h) \sum_{l_\beta (\beta=3-8)} (n_2(l_\beta) - n_1(l_\beta)),$$

$$H_4 = 4J_1 \sum_{l_1, l_\beta (\beta=3-8)}^{n, n} (n_1(l_1) + n_2(l_1))(n_1(l'_\beta) - n_2(l'_\beta)) \\ + 4J_1 \sum_{l_2, l'_\beta (\beta=3-8)}^{n, n} (n_1(l_2) - n_2(l_2))(n_1(l'_\beta) - n_2(l'_\beta)) \\ + 2J_1 \sum_{l_\beta, l'_\beta (\beta=3-8)}^{n, n} (n_1(l_\beta) - n_2(l_\beta))(n_1(l'_\beta) - n_2(l'_\beta))$$

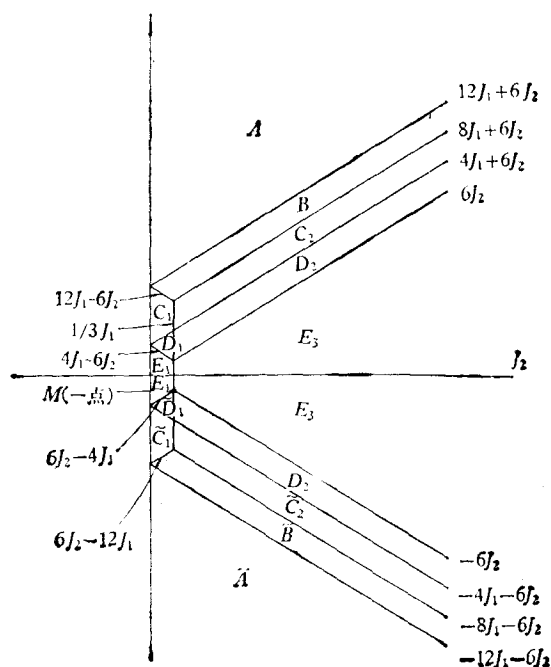


图 2

表1 $S=1$

相	外 场	简并度	基 态 能	局 域 基 态
A	$h > 6(2J_1 + J_2)$	1	$4N(6J_1 + 3J_2 - h)$	++++ ++++
B	$h < 6(2J_1 + J_2)$	8	$3N(4J_1 + 2J_2 - h)$	-++++ +--+ ++++,++++,
	$h > 6(2J_1 - J_2)$			+--+ +--+ ++++,++++,
	$h > 2(4J_1 + 3J_2)$			++++ +--+ ++++,+-+,,
				++++ +--+ ++++,++++-
C_1	$h < 12J_1 - 6J_2$	4	$2N(6J_2 - h)$	--++ +-+- ++++,++++,
	$h > 4J_1 + 6J_2$			++++ +--+ --++,-+--
	$(J_2 < \frac{1}{3}J_1)$			
C_2	$h < 8J_1 + 6J_2$	24	$N(5J_1 - 2h)$	-+-+ -+-+ ++++,++++,
	$h > 4J_1 + 6J_2$			
	$(J_2 > \frac{1}{3}J_1)$			
D_1	$h > 4J_1 - 6J_2$	24	$N(4J_1 + 6J_2 - h)$	---- -+-+ ++++,++++,
	$h < 4J_1 + 6J_2$			
	$(J_2 < \frac{1}{3}J_1)$			
D_2	$h < 4J_1 + 6J_2$	32	$-N(6J_2 + h)$	-+-+ -+-+ ++++,+-+,,
	$h > 6J_2$			-+-+ -+-+ ++++,++++-
				
	$(J_2 > \frac{1}{3}J_1)$			
E_1	$h < 4J_1 - 6J_2$	6	$4N(3J_2 - 2J_1)$	---- -+-+ ++++,-+-+,,
	$h > 6J_2 - 4J_1$			--++ +-+- ++++,-+-+,,
	$(J_2 < \frac{1}{3}J_1)$			
E_3	$h < 6J_2$	16	$-12NJ_2$	-+-+ -+-+ -+-+,-+-+,,
	$h > -6J_2$			-+-+ +--+,,
	$(J_2 > \frac{1}{3}J_1)$			
M	$h = -6J_2$	∞	$\frac{1}{2}Nh$	
边界相	$h = -2J_1$			
(点)				

由表1可作零温相图,见图2.

$$\begin{aligned}
& + 2J_2 \sum_{l_1, l_2}^{n, n, n} (n_1(l_1) + n_2(l_1))(n_1(l_2) - n_2(l_2)) \\
& + 2J_2 \sum_{l_\beta, l'_\beta}^{n, n, n} (n_1(l_\beta) - n_2(l_\beta))(n_1(l'_\beta) - n_2(l'_\beta)).
\end{aligned}$$

当 $h = -6J_2$, $h = -2J_1$ 时, 所有下列态 $|f\rangle$ 是 $\hat{H}_F$ 的基态.

$\nu|f\rangle \in \kappa$, $\kappa = \{|f\rangle; \nu a_\alpha(l_1)|f\rangle = |0\rangle, \alpha = 1, 2, \nu l_1 \in \Lambda_1\}$. 在这种情况下,

$$\hat{P} = \prod_{l_\beta \in \Lambda_\beta, \beta=2-8, l_1 \in \Lambda_1} \hat{P}_\beta(l_\beta) \prod \hat{P}_1(l_1),$$

且有

$$\langle f | \hat{P} | f \rangle = 1, \nu |f\rangle \in \kappa.$$

所以 $\nu|f\rangle \in \kappa$ 也都是 $\hat{H}_1$ 的基态.

参 考 文 献

- [1] S. Katsura and A. Narita, *Prog. Theor. Phys.*, **50**(1973), 1426.
- [2] M. Kaburagi and J. Kanamori, *Prog. Theor. Phys.*, **54**(1975), 30.
- [3] T. Kubo and S. Katsura, *Prog. Theor. Phys.*, **56**(1976), 435.
- [4] 陶瑞宝访问 Argonne National Lab. (U. S. A.) 的一个报告(1980年9月).

THE GROUND STATE ENERGY OF ISING SPIN $S=1$ MODEL OF A FCC LATTICE ANTIFERROMAGNETICS WITH NEXT NEAREST NEIGHBORS INTERACTION IN A MAGNETIC FIELD

WANG YANG-PO

(Department of Physics, Suzhou University)

ABSTRACT

As an extension of the method presented in reference [4], this paper concerns with the transformation from Ising spin $S=1$ systems to a Fermion system in which the total number of particles is not a constant. We obtained rigorously the ground state energy of the antiferromagnetics of Ising $S=1$ fcc lattice with nearest neighbors and next nearest neighbors interaction in an arbitrary magnetic field, and also the phase equilibrium diagram at $T=0K$.