

# Kagome 晶格上混合自旋模型的自由费密近似解

唐 坤 发

上海交通大学应用物理系, 凝聚态物理研究所

1988年10月11日收到

本文考虑 Kagome 晶格上的混合自旋模型, 运用 decimation 和对偶变换, 证明它等价于一个八顶角模型. 由八顶角模型的自由费密近似解给出了该模型的自由能及临界条件的近似表达式.

## 一、引 言

统计物理中对称性起着重大作用, 特别是在相变和临界现象中, 对称性和空间维数及自旋自由度一起决定着统计模型的普适类. 我们曾经考察过平方晶格上混合自旋模型的临界行为<sup>[1]</sup>. 尽管其平移对称性有所降低, 实空间重整化群理论的研究表明, 该模型与纯自旋伊辛模型属于同一普适类<sup>[1]</sup>. 但当模型中存在周期性分布的铁磁和反铁磁相互作用时, 严格解结果<sup>[2]</sup>表明, 它可以发生 Baxter 型相变<sup>[3]</sup>, 即一种临界指数随参数连续变化的相变. Kagome 晶格上的混合自旋模型与相应的纯自旋模型具有相同的平移对称性, 只是转动对称性有所降低. 在一个纯虚场  $h = i\pi$  的作用下, 可以证明它等价于一个 Baxter 模型<sup>[3]</sup>, 从而可以严格求解<sup>[4]</sup>.

本文研究无外场时的 Kagome 晶格上的混合自旋模型<sup>[5]</sup>. 通过 decimation 和对偶变换, 将其对应于一个八顶角模型<sup>[6]</sup>, 然后运用自由费密近似得到它的自由能以及临界条件的近似表达式.

## 二、混合自旋模型及其等价的八顶角模型

我们考察 Kagome 晶格上自旋 1/2 和自旋 1 的混合模型. 它的哈密顿量如下:

$$\mathcal{H}(\sigma S) = -J_1 \sum_{ij} \sigma_i S_j - J_2 \sum_{kj} \sigma_k S_j - J_3 \sum_{ik} \sigma_i \sigma_k - G \sum_i S_i^2. \quad (1)$$

这里  $\sigma = \pm 1/2$  以及  $S = 0, \pm 1$ . 开头的三个求和分别沿着三个不同的方向进行. 最后一个只对自旋 1 进行(见图 1). 当  $G \rightarrow \infty$  时, (1) 式成为伊辛模型. 如果把自旋 1 的零态看成空穴, 则 (1) 式还可以认为是一种特殊的格点稀释模型. 尽管自旋 1 的存在, 平移不变性仍保持与纯自旋模型一样, 只是转动对称性有所降低.

(1) 式对应的配分函数可以写成如下形式:

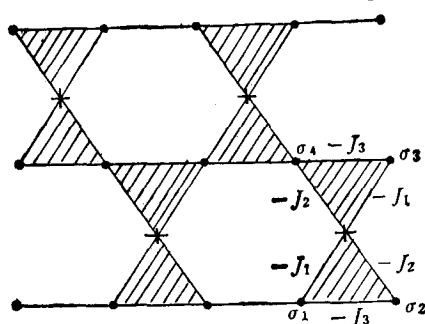


图1 各向异性 Kagome 晶格 ●表示自旋 1/2; +表示自旋 1

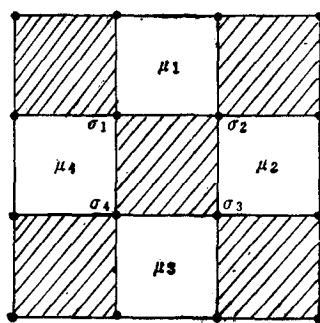


图2 棋盘晶格

$$Z = \sum_{\sigma_i' = \pm 1} \prod_{\text{阴影格子}} B(\sigma_1' \sigma_2' \sigma_3' \sigma_4'). \quad (2)$$

这里

$$B(\sigma_1' \sigma_2' \sigma_3' \sigma_4') = \sum_s \exp(K_1 S(\sigma_1' + \sigma_3') + K_2 S(\sigma_2' + \sigma_4') + G' S^2) \quad (3)$$

是 Boltzmann 权重因子以及

$$K_1 = \frac{1}{2} J_1 / kT, \quad K_2 = \frac{1}{2} J_2 / kT, \quad K_3 = \frac{1}{4} J_3 / kT, \\ G' = G / kT, \quad \sigma_i' = 2\sigma_i = \pm 1. \quad (4)$$

由(2)式决定了一个棋盘晶格上的伊辛自旋模型(图2)。每一个有阴影的平方格子贡献一个 Boltzmann 权重因子。运用一般的对偶变换,可以将它变成每个平方格子都贡献一个 Boltzmann 权重因子的伊辛模型。这里,我们运用文献[7]的结果。在每一个没有阴影的平方格子上放一个对偶自旋  $\mu_i$ 。在这个对偶空间中配分函数(2)式可重新记为<sup>[7]</sup>

$$Z_N = \sum_{\mu_i = \pm 1} \prod_{\text{所有平方格子}} W(\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4). \quad (5)$$

$$\text{这里 } W(\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4) = \frac{1}{4} \sum_{\sigma_1' \sigma_2' \sigma_3' \sigma_4'} (-1)^{\epsilon_1 \sigma_{13} + \epsilon_2 \sigma_{23} + \epsilon_3 \sigma_{34} + \epsilon_4 \sigma_{41}} \times B(\sigma_1' \sigma_2' \sigma_3' \sigma_4') \quad (6)$$

是对偶晶格上的 Boltzmann 权重因子以及

$$\epsilon_i = \frac{1}{2} (1 + \mu_i), \\ \sigma_{ii} = 1 - \delta_{kr}(\sigma_i \sigma_r). \quad (7)$$

由于  $B(\sigma_1' \sigma_2' \sigma_3' \sigma_4')$  满足自旋反演对称性,由(5)式决定的  $W(\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4)$  也满足同样的对称性,因此可以在 Boltzmann 权重因子  $W$  和八顶角模型的顶角权重因子之间引入一个 2—1 对应。这样就有如下的等价关系:

$$Z_N = Z_{8V}. \quad (8)$$

这里  $Z_{8V}$  是对偶空间中八顶角模型的配分函数,其顶角权重因子为

$$w_i = W_i, \quad i = 1, 2, \dots, 8. \quad (9)$$

这里  $W_i$   $i = 1, 2, \dots, 8$  定义为

$$W_1 = W(++++) , \quad W_2 = W(----) ,$$

$$\begin{aligned} W_1 &= W(--+), & W_4 &= W(+--+), \\ W_5 &= W(---), & W_6 &= W(-+--), \\ W_7 &= W(+---), & W_8 &= W(--+-). \end{aligned} \quad (10)$$

### 三、自由费密近似解

对于一般的八顶角模型,目前还没有严格解.当八个顶角函数满足自由费密条件

$$\Delta = w_1 w_2 + w_3 w_4 - w_5 w_6 - w_7 w_8 = 0 \quad (11)$$

时, Fan 和 Wu<sup>[6]</sup> 求出了严格解,给出了  $Z_{8V}$  的解析表达式.当  $\Delta/w_{\max}^2 \ll 1$  ( $w_{\max} = \max(w_i, i=1, 2, \dots, 8)$ ) 时,他们给出了如下的近似解,即所谓的自由费密近似解:

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_N &= \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \ln [\alpha + 2\beta \cos \theta + 2\gamma \cos \phi \\ &\quad + 2\delta \cos(\theta - \phi) + 2\varepsilon \cos(\theta + \phi)] \end{aligned} \quad (12)$$

以及

$$\begin{aligned} \alpha &= w_1^2 + \bar{w}_2^2 + w_3^2 + w_4^2, \\ \beta &= w_1 w_2 - \bar{w}_2 w_4, \\ \gamma &= w_1 w_4 - \bar{w}_2 w_3, \\ \delta &= w_3 w_4 - w_7 w_8, \\ \varepsilon &= w_1 w_4 - w_5 w_6, \\ \bar{w}_2 &= (w_5 w_6 + w_7 w_8 - w_1 w_4) / w_1. \end{aligned} \quad (13)$$

其临界条件为

$$w_1 = \bar{w}_2 + w_1 + w_4, \text{ 如果 } w_1 > \bar{w}_2, \quad (14a)$$

$$\bar{w}_2 = w_1 + w_1 + w_4, \text{ 如果 } w_1 < \bar{w}_2. \quad (14b)$$

运用(3),(6),(13)及(14)式,并经过一些繁琐但并不复杂的代数运算,不难得到模型(1)的自由能近似解以及临界点条件.这里我们给出临界条件的显式表达式为

$$(x - y - g)(x + y + g(1 + \text{ch} 2K_3)) = g(1 - \text{ch} 2K_1)(1 - \text{ch} 2K_2) \quad (15)$$

以及修改项数量级

$$\frac{\Delta}{w_1^2} = \frac{(1 - \text{ch} 2K_1)(1 - \text{ch} 2K_2)g}{2(x + y + g(1 + \text{ch} 2K_3))^2}, \quad (16)$$

这里

$$\begin{aligned} x &= \prod_{i=1}^3 \text{ch} 2K_i + \prod_{i=1}^3 \text{sh} 2K_i, \\ y &= \sum_{i=1}^3 \text{ch} 2K_i, \\ g &= e^{-\sigma}. \end{aligned} \quad (17)$$

其自由能由(12)和(13)式给出,其中  $w_i$  由(9),(10),(6)和(3)式确定.下面讨论几种特例.

(1)  $g \rightarrow 0$ ,  $\frac{\Delta}{w_1^2} \rightarrow 0$ , 方程 (15) 成为 Kagome 晶格上各向异性伊辛模型的临界点

条件的严格表达式<sup>[9]</sup>, 当  $K_1 = K_2 = K_3 = K$  时, 我们有

$$e^{4K} = 3 + 2\sqrt{3}. \quad (18)$$

(2)  $g \neq 0$ ,  $K_3 = 0$ , 方程 (15) 成为一个如图 3 (a) 所示的 decorated 模型的临界点方程. 在这个模型中每一个自旋 1 有四个最近邻. 每两个自旋 1 之间镶一个自旋 1/2.

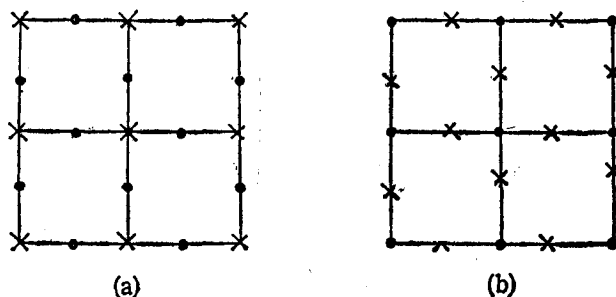


图 3 decorated 晶格 ●表示自旋 1/2; ×表示自旋 1

(3)  $g \neq 0$ ,  $K_1 = 0$  (或  $K_2 = 0$ ), 这时模型 (1) 成为如图 3 (b) 所示的 decorated 模型. 与第 (2) 种情况不同的是, 每一个自旋 1/2 有四个最近邻. 每两个自旋 1/2 之间镶一个自旋 1. 由于此时  $\Delta/w_1^2 = 0$ , 由 (15) 式给出的临界条件是严格的.

## 四、小 结

经过 decimation 和对偶变换, 我们将 Kagome 晶格上的混合自旋模型等价于一个八顶角模型, 然后运用八顶角模型的自由费密近似解求出了 Kagome 晶格上混合自旋模型的自由能以及临界条件. 在  $g = 0$  及  $K_1 = 0$  或  $K_2 = 0$  的情况下, 我们的结果分别给出了 Kagome 晶格上伊辛模型的严格解和如图 3 (b) 所示的 decorated 模型的严格解.

- [1] 唐坤发、胡嘉楨, 物理学报, **35**(1986), 1048.
- [2] K.-F. Tang, 已投 *Phys. Rev. B*.
- [3] R. J. Baxter, *Ann. Phys. (N. Y.)*, **70**(1972), 1.
- [4] K.-F. Tang, *J. Phys. C*, 待发表.
- [5] J. Yao, K.-F. Tang and J.-Z. Hu, 已投 *J. Phys. A*.
- [6] F. Y. Wu, *Phys. Rev.*, **B4**(1971), 2312; *ibid.*, 3989.
- [7] F. Y. Wu, *J. Stat. Phys.*, **44**(1986), 455.
- [8] C. Fan and F. Y. Wu, *Phys. Rev.*, **179**(1967), 560.
- [9] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academy Press, London 1982).

## THE FREE-FERMION APPROXIMATE SOLUTION FOR KAGOME-LATTICE MIXED-SPIN MODEL

TANG KUN-FA

*Department of Applied Physics, Institute of Condensed Matter Physics, Shanghai Jiaotong University*

(Received 11 October 1988)

### ABSTRACT

In this paper, we consider a Kagome-lattice mixed-spin model and show that it is equivalent to an eight-vertex model via decimation and duality transformation. According to the free-fermion approximate solution of the eight-vertex model, the approximate expressions are given for the free energy and critical condition of the model.