

# 无规场量子 Ising 模型的研究\*

马 余 强    李 振 亚

苏州大学物理系, 苏州, 215006

1989 年 11 月 13 日收到

本文通过对近似方法和离散路径积分表示组合, 提出一种超越平均场的方法, 用来研究无规场存在下的量子横向 Ising 模型. 无规场取不同的形式时对系统相图结构的影响作了统一的描述. 无规场取双峰和三峰分布时, 通过数值计算对系统的临界特性包括三临界点和重入现象存在的可能性作了详细的研讨. 理论在配位数  $z \rightarrow \infty$  时退化为平均场结果.

PACC: 7510H; 7510J; 0550

## 一、引 言

近年来, 磁性系统中的无规场 Ising 模型的研究日益受到重视<sup>[1,2]</sup>. 其中讨论的重要问题之一是无规场的分布形式如何影响系统相图的结构. Aharony 的平均场结果<sup>[3]</sup>表明, 当无规场为双峰分布

$$p(h_i) = \frac{1}{2} \delta(h_i - h_0) + \frac{1}{2} \delta(h_i + h_0) \quad (1)$$

时, 系统相图出现三临界点, 在那里发生从二级相变到一级相变的渡越; 当无规场为高斯分布

$$p(h_i) = \frac{1}{\sqrt{2\sigma^2}} \exp(-h_i^2/2\sigma^2) \quad (2)$$

时, 系统三临界点消失. 对于无规场取三峰分布

$$p(h_i) = p\delta(h_i) + \frac{1}{2}(1-p)[\delta(h_i - h_0) + \delta(h_i + h_0)]. \quad (3)$$

平均场结果表明, 在  $0 \leq p \leq 0.25$  时系统的相图出现三临界点<sup>[4,5]</sup>.

近来量子自旋系统的临界性质也是凝聚态物理研究的热点之一. 这是由于在量子自旋系统的哈密顿量中存在自旋算符不可对易性而产生的困难. 最简单的一类量子自旋系统——横场 Ising 模型, 作为描述氢键铁电体(如  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ )的赝自旋模型<sup>[6]</sup>, 已成功地解释了与隧道穿透效应有关的铁电体的有序—无序相变现象<sup>[7,8]</sup>. 用它也可广泛地来研究其它类型的系统, 如单晶场基态的稀土复合物<sup>[9]</sup>, 合作 Jahn-Teller 系统(如  $\text{DyVO}_4$ ) 和横场作用下单轴各向异性磁系统等<sup>[10]</sup>. 这个模型还用到规范场理论<sup>[11]</sup>和介子场理论<sup>[12]</sup>以

\* 国家自然科学基金资助的课题.

及质子玻璃<sup>[13]</sup>. 由于横场  $\Gamma$  的出现导致自旋偏转, 将阻碍自旋的有序而引起临界温度的降低. 在横场接近某一临界值  $\Gamma_c$  时, 相变温度可以降到零, 即长程有序消失. 对于量子横向 Ising 模型虽有各种近似方法如高温级数展开<sup>[14]</sup>和限于处于  $T = 0\text{K}$  时微扰展开方法<sup>[15]</sup>, 但均有局限性. 虽然 Suzuki 利用了 Trotter 乘积表示已证明零温时  $d$  维的量子自旋问题等价于在有限温度下  $(d + 1)$  维的经典(算符对易)问题<sup>[16]</sup>. 但对于有限温度的问题也并没有真正解决.

如果考虑无规场存在下的量子横向 Ising 问题, 那将是一个更有意义和复杂的问题. 量子效应和无序的竞争, 系统的三临界点和重入现象都将受到量子效应的影响. Yokota 等人<sup>[17]</sup>是在推广的平均场近似框架内研究了无规场量子自旋系统, 他们的结果表明, 在双峰无规场分布时, 横场  $\Gamma < (4/5)^{3/2}zJ$  ( $z$  为系统配位数,  $J$  为自旋交换作用)时出现三临界点, 在  $\Gamma$  的一定范围还可出现重入现象; 在高斯分布下将不出现三临界点. 平均场理论由于没有考虑晶格系统的相互作用的局域结构, 导致相图与系统的配位数无关(不同相互作用的模式导致同样的热力学), 其结果显得过于粗略. 近来, 我们提出了一种超越平均场的方法<sup>[18,19]</sup>, 将对近似方法和分离路径积分表示结合起来已成功地应用到量子横向 Sherrington-Kirkpatrick 自旋玻璃模型. 这个方法既考虑了实际晶格系统的局域结构, 又把具有算符不可对易性的量子问题化成相应的经典问题. 这里将这个�方法应用到无规场存在下的量子横向 Ising 系统, 得出与配位数有关的相图. 对于无规场分布的不同形式, 其相图结构可统一地用数学表达式来描述. 对于无规场为双峰分布和三峰分布的情形, 通过数值计算作了详细的研究. 理论在配位数  $z \rightarrow \infty$  时退化为平均场结果.

## 二、模型和方法

量子 Ising 系统的哈密顿量表示为

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \Gamma \sum_i \sigma_i^x - \sum_i h_i \sigma_i^z, \quad (4)$$

式中  $J_{ij}$  代表最近邻格点  $i$  和  $j$  之间的自旋-自旋相互作用;  $\sigma_i^z, \sigma_i^x$  为泡利矩阵;  $\Gamma$  为横场;  $h_i$  为无规场, 其概率分布可由  $p(h_i)$  给出.

对近似方法<sup>[20,21]</sup>, 实际上等价于 Bethe 近似, 是有效哈密顿量方法的一种推广<sup>[22]</sup>. 通过引入单粒子和双粒子集团的有效哈密顿量建立单粒子和双粒子配分函数. 整个系统的自由能可用单粒子和双粒子配分函数来表示, 从而求得其它的热力学量和临界特性. 按照这种方法, 双粒子集团的有效哈密顿量可写为<sup>[21]</sup>

$$\mathcal{H}^{(2)} = -J\sigma_i^z \sigma_j^z - \Gamma(\sigma_i^z + \sigma_j^z) - (h_i + h^{\text{eff}})\sigma_i^z - (h_j + h^{\text{eff}})\sigma_j^z, \quad (5)$$

式中  $h^{\text{eff}}$  为有效场. 相应的配分函数可表示为

$$Z^{(2)} = \text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}^{(2)}). \quad (6)$$

为了获得双粒子配分函数, 将沿用 Stratt 的方法<sup>[23]</sup>, 利用离散路径积分表示把量子哈密顿量表示成相应的经典形式, 使得具有不可对易性的量子两态自旋算符变成一个可对易的  $p$  分量(最后令  $p \rightarrow \infty$ ) 的矢量自旋  $u_i^{(t)}$  ( $t = 1, 2, \dots, p$ ), 而每一分量  $u_i^{(t)}$  为两态经典变量  $u_i^{(t)} = \pm 1$ . 将变换后的哈密顿量分成仅包含单粒子项的参考部分  $\mathcal{H}_0^{(2)}$

和相互作用项  $V$  两项<sup>[24]</sup>

$$\mathcal{H}^{(2)} = \mathcal{H}_0^{(2)} + V, \quad (7)$$

式中

$$-\beta \mathcal{H}_0^{(2)} = \mathbf{u}_i \mathbf{a} \mathbf{u}_i + \mathbf{u}_j \mathbf{a} \mathbf{u}_j + \mathbf{h}_i \mathbf{u}_i + \mathbf{h}_j \mathbf{u}_j + p c, \quad (8)$$

$$a = \frac{1}{2} \ln \coth \left( \frac{\beta \Gamma}{p} \right), \quad c = \frac{1}{2} \ln \left[ \cosh \left( \frac{\beta \Gamma}{p} \right) \sinh \left( \frac{\beta \Gamma}{p} \right) \right],$$

$$(\mathbf{a})_{i,i'} = a \delta_{i,i'-1}, \quad (\mathbf{a})_{p,1} = a, \quad (9)$$

$$\mathbf{h}_i = \frac{\beta(h_i + h^{cf})}{p} \quad (1, 1, \dots, p) \quad (10)$$

和

$$-\beta V = \frac{\beta J}{p} \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_j. \quad (11)$$

相应的自由能可表示为参考系统的自由能  $F_0$  和对参考系统的累积项

$$\begin{aligned} -\beta F^{(2)} &= \ln \text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}^{(2)}) = -\beta F_0^{(2)} \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (-\beta)^n C_n(V), \end{aligned} \quad (12)$$

式中

$$-\beta F_0 = \ln \text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}_0^{(2)}) \quad (13)$$

和累积  $C_n(V)$

$$C_1(V) = \langle V \rangle_0, \quad C_2(V) = \langle V^2 \rangle_0 - \langle V \rangle_0^2, \dots, \quad (14)$$

式中  $\langle \dots \rangle_0$  表示对参考部分的平均。从表面形式上看, 似乎方程 (12) 也是一种发展的高温级数展开。但是实际上在应用路径积分时, 累积项本身通过系统的哈密顿量对温度的依赖已与温度相关。因此方程 (12) 看作不断的高阶涨落展开更为恰当。累积项与温度的关联正是在整个温区内获得好的计算结果的前提<sup>[23]</sup>。取一阶累积后的配分函数的最后形式为<sup>[18,19,24]</sup>

$$\begin{aligned} \ln Z^{(2)} &= \ln \text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}_0^{(2)}) + (-\beta) \langle V \rangle_0 \\ &= \ln 2 \cdot \cosh \{ \beta [(h_i + h^{cf})^2 + \Gamma^2]^{\frac{1}{2}} \} + \ln 2 \cdot \cosh \{ \beta [(h_j + h^{cf})^2 + \Gamma^2]^{\frac{1}{2}} \} \\ &\quad + \beta J \frac{\tanh \{ \beta [(h_i + h^{cf})^2 + \Gamma^2]^{\frac{1}{2}} \}}{[(h_i + h^{cf})^2 + \Gamma^2]^{1/2}} (h_i + h^{cf}) \\ &\quad \cdot \frac{\tanh \{ \beta [(h_j + h^{cf})^2 + \Gamma^2]^{\frac{1}{2}} \}}{[(h_j + h^{cf})^2 + \Gamma^2]^{1/2}} (h_j + h^{cf}). \end{aligned} \quad (15)$$

单粒子的有效哈密顿量可表示为

$$\mathcal{H}^{(1)} = -\Gamma \sigma_i^z - (h_i + H^{cf}) \sigma_i^x, \quad (16)$$

式中  $H^{cf}$  为单粒子有效场, 与有效场  $h^{cf}$  的关系<sup>[21]</sup>可通过

$$H^{cf} = \frac{z}{z-1} h^{cf} \quad (17)$$

建立。相应的单粒子配分函数为

$$Z^{(1)} = \text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}^{(1)}) = 2 \cosh \left\{ \beta \left[ \left( h_i + \frac{z}{z-1} h^{cf} \right)^2 + \Gamma^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right\}. \quad (18)$$

系统自由能  $F(h^{ef})$  可由如下形式给出<sup>[25]</sup>:

$$-\beta \langle F(h^{ef}) \rangle / N = \langle \ln Z^{(1)} \rangle_h + \frac{z}{2} (\langle \ln Z^{(2)} \rangle_h - 2 \langle \ln Z^{(1)} \rangle_h), \quad (19)$$

式中  $\langle \dots \rangle_h$  表示对分布  $p(h_i)$  的平均. 联立 (15), (18) 和 (19) 式并将自由能  $F(h^{ef})$  对  $h^{ef}$  进行泰勒展开, 二级相变线方程可令展开项  $(h^{ef})^2$  前的系数为零得到

$$\int p(h_i) dh_i \left[ \frac{G^2}{(G^2 + H_i^2)^{3/2}} \tanh \frac{(G^2 + H_i^2)^{1/2}}{T} + \frac{H_i^2}{T(H_i^2 + G^2)} \operatorname{sech}^2 \frac{(G^2 + H_i^2)^{1/2}}{T} \right] = \frac{z}{z-1}, \quad (20)$$

式中引入了无量纲参数

$$G = \frac{\Gamma}{zJ}, \quad T = \frac{1}{z\beta J}, \quad H_i = h_i/zJ \quad \text{和} \quad H = h_0/zJ \quad (\text{无规场为 } \delta \text{ 峰分布}); \quad (21)$$

$$H = \sigma/zJ \quad (\text{无规场为高斯分布}).$$

在  $H_i = 0$  的情形(量子横向 Ising 系统), 相变温度可令方程 (20) 中的  $H_i$  为零得到

$$\frac{1}{G} \tanh \left( \frac{G}{T} \right) = \frac{z}{z-1}. \quad (22)$$

(22) 式得到了零温下的临界横场为  $G_c = (z-1)/z$ , 与级数解结果较为一致<sup>[14,24,26]</sup>.

在  $G = 0$  的情形(无规场 Ising 模型), 其二级相变线方程可令方程 (20) 中的  $G \rightarrow 0$  得到

$$\int p(h_i) dh_i \frac{1}{T} \operatorname{sech}^2 \left( \frac{H_i}{T} \right) = \frac{z}{z-1}. \quad (23)$$

展开方程 (19) 到  $h^{ef}$  的四阶, 并令  $(h^{ef})^4$  前系数为零,

$$\int p(h_i) dh_i \left[ 1 - \tanh^2 \left( \frac{H_i}{T} \right) \right] \left[ 1 - 3 \tanh^2 \left( \frac{H_i}{T} \right) \right] = 0. \quad (24)$$

(23), (24) 式联立可决定系统的三临界点位置.

为了研究量子系统的三临界点存在的可能性, 考虑温度为零的情形. 展开方程 (19) 到  $h^{ef}$  的四阶, 并令  $(h^{ef})^2$  和  $(h^{ef})^4$  前的系数为零, 得到

$$\int p(h_i) dh_i \frac{G_0^2}{(G_0^2 + H_i^2)^{3/2}} = \frac{z}{z-1}, \quad (25)$$

$$\int p(h_i) dh_i \frac{G_0^2 - 4H_i^2}{(G_0^2 + H_i^2)^{7/2}} = 0. \quad (26)$$

结果表明在横场  $G < G_0$  时系统相图出现三临界点, 在  $G > G_0$  时三临界点消失.

下面通过数值计算, 对无规场为三峰分布时作了详细的结果讨论. 在  $p \rightarrow 0$  时, 得到了双峰分布的结果.

### 三、数值计算结果

三峰分布的横向 Ising 模型的二级相变线方程可由 (2), (20) 式得到

$$p \frac{1}{G} \tanh\left(\frac{G}{T}\right) + (1-p) \left[ \frac{G^2}{(G^2 + H^2)^{3/2}} \tanh\left(\frac{G^2 + H^2}{T}\right)^{\frac{1}{2}} + \frac{H^2}{T(G^2 + H^2)} \operatorname{sech}^2\left(\frac{G^2 + H^2}{T}\right)^{\frac{1}{2}} \right] = \frac{z}{z-1}. \quad (27)$$

相应地,(25),(26)式变为

$$p \frac{1}{G_0} + (1-p) \frac{G_0^2}{(G_0^2 + H^2)^{3/2}} = \frac{z}{z-1}, \quad (28)$$

$$p \frac{1}{G_0} + (1-p) \frac{G_0^2 - 4H^2}{(G_0^2 + H^2)^{3/2}} = 0. \quad (29)$$

图 1 给出三峰分布下横场  $G_0$  与  $p$  的关系。在  $0 \leq p < 0.22$  时三临界点存在的范围为  $G < G_0$ ; 在  $0.22 \leq p \leq 1$  时三临界点消失。

通过数值求解 (27) 式, 可以求得

$$T = T(G, z, p, H)$$

的二阶相变线方程。在  $G, z, p$  取不同值时, 图 2, 图 3 和图 4 分别给出相变温度随着外场  $H(=h_0/zJ)$  的变化关系 (为了清楚起见, 这里仅取  $z=6, 12$  和  $\infty$  的情形)。图 2 与图 3, 图 4 比较可以看出, 无规场 Ising 模

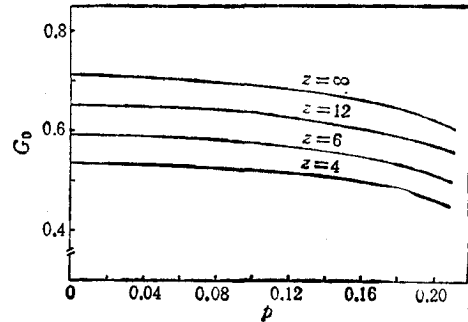
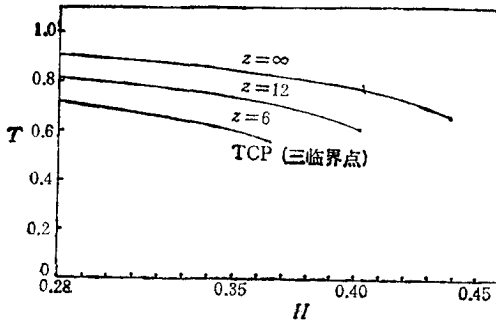
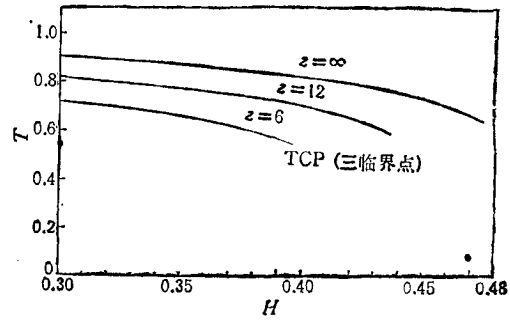


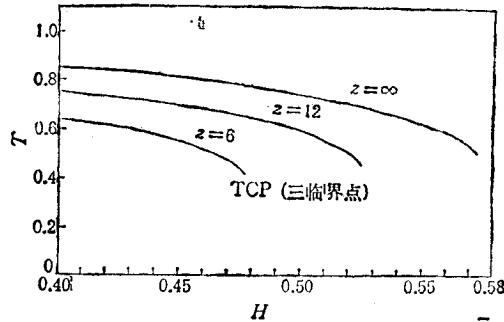
图 1 横场  $G_0$  与参数  $p$  的关系



(a)  $p=0$  (二元分布),  $z=6, 12$  和  $\infty$  (平均场结果<sup>[17]</sup>)

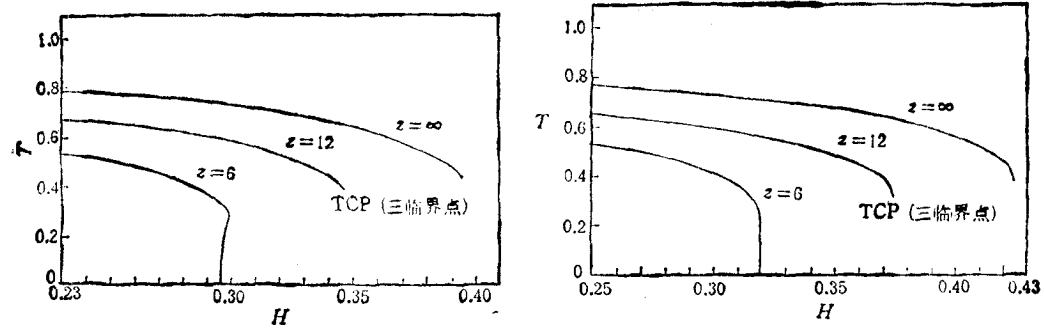


(b)  $p=0.1, z=6, 12, \infty$  (平均场结果<sup>[17]</sup>)



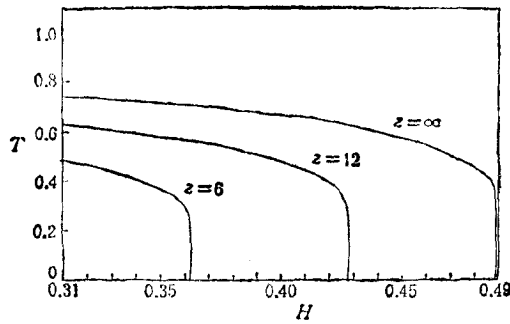
(c)  $p=0.25, z=6, 12$  和  $\infty$  (平均场结果<sup>[17]</sup>)

图 2 在横场  $G=0$  (无规场 Ising 模型) 时给定  $z, p$  值相变温度  $T$  随外场  $H$  的变化



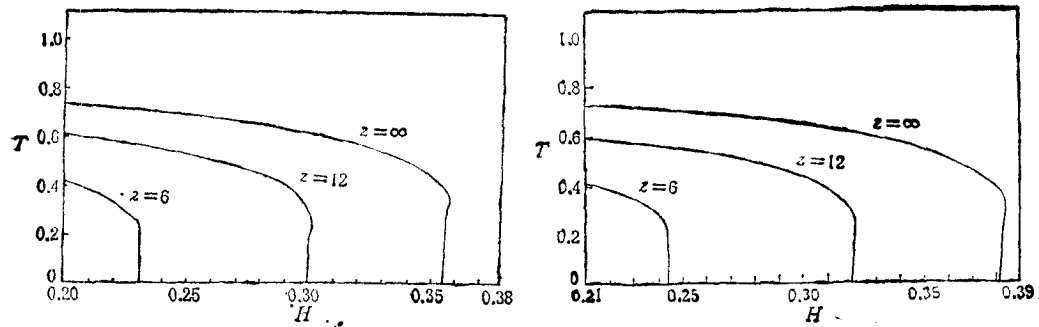
(a)  $p = 0$  (二元分布),  $z = 6, 12$  和  $\infty$  (平均场结果<sup>[17]</sup>)

(b)  $p = 0.1, z = 6, 12$  和  $\infty$  (平均场结果)



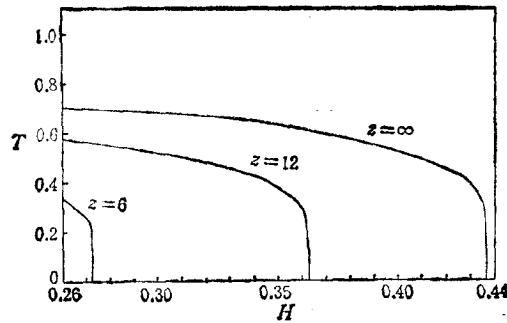
(c)  $p = 0.25, z = 6, 12$  和  $\infty$  (平均场结果)

图 3 在横场  $G = 0.6$  时给定  $z, p$  值相变温度  $T$  随外场  $H$  的变化



(a)  $p = 0$  (二元分布),  $z = 6, 12$  和  $\infty$  (平均场结果<sup>[17]</sup>)

(b)  $p = 0.1, z = 6, 12$  和  $\infty$  (平均场结果)



(c)  $p = 0.25, z = 6, 12$  和  $\infty$  (平均场结果)

图 4 在横场  $G = 0.72$  时给定  $z, p$  值相变温度  $T$  随外场  $H$  的变化

型在加入横场后,其三临界点将会受到抑制。这是由于量子起伏会导致相变温度降低,因而也降低三临界点位置。当横场大到一定值时,三临界点将会消失。另一方面,随着温度的降低,在横场的合适范围内,会发现二次连续相变,即在给定外场 $H$ 值,有两个相变温度与之对应,表现为重入现象。这是由于量子效应与无规场相互竞争引起的结果。当温度开始降低时,系统发生无序—有序相变,这时量子效应将起着决定作用,相应地无规场显得不很重要;随着温度进一步降低,无规场将显得更加重要,有可能发生重入到无序相。从上述诸图中还可看出,随着 $p$ 的增大,重入现象越来越不显著,直至消失。这是因为随着无规场的不断稀疏,无规程度显得越来越不重要,致使难以发生重入到无序相。这表明随着无规场的 $\delta$ 峰数增加,三临界点、重入现象将不断受到抑制,可预计对于高斯分布(可看成许多个 $\delta$ 峰所组成),其相图的三临界点、重入现象消失将成为可能。对此,另文中将作详细的计算和分析。

#### 四、结 论

至此,将对近似方法和处理量子自旋系统的离散路径表示方法结合起来,得到了一个超越平均场的新方法,用它研讨了无规场存在的量子横向 Ising 系统。目前日益引起理论和实验工作者兴趣的无规场 Ising 模型,多数的研究都忽视了量子起伏效应的影响,而这点在许多情况下是不容忽略的。本文中提出的这个方法可以对无规场取不同分布形式的量子 Ising 系统进行统一的数学描述,并且详细分析了无规场取双峰及三峰分布时的临界特性,得到了与系统内部结构(配位数取不同值)有关的相图。这些在平均场的框架内是难以做到的,是更符合实际的情形。这个方法可以对无规场取其它分布形式及不同内部结构的系统的临界行为进行研究。本文的研究可能促进无规场 Ising 系统及量子自旋系统的理论和实验研究工作。

- [1] Y. Imry, *J. Stat. Phys.*, **34**(1984), 841.
- [2] G. Grinstein, *J. Appl. Phys.*, **55**(1984), 2371.
- [3] A. Aharony, *Phys. Rev.*, **B18**(1978), 3318.
- [4] D. C. Mattis, *Phys. Rev. Lett.*, **55**(1985), 3009.
- [5] R. M. Sebastianes and V. K. Saxena, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 2058.
- [6] P. G. de Gennes, *Solid State Commun.*, **1**(1963), 132.
- [7] G. A. Samara, *Phys. Rev. Lett.*, **27**(1971), 103.
- [8] R. Blinc and B. Zeks, *Adv. Phys.*, **21**(1972), 693.
- [9] R. J. Elliott and A. P. Young, *Ferroelectrics*, **7**(1974), 23.
- [10] Y. L. Wang and B. Cooper, *Phys. Rev.*, **172**(1968), 537.
- [11] E. Fradkin and L. Susskind, *Phys. Rev.*, **D17**(1978), 2637.
- [12] D. Amati, M. le Bellac, G. Marchesini and M. Ciafaloni, *Nucl. Phys.*, **B112**(1976), 107.
- [13] V. Dobrosavljevic and R. M. Stratt, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 8484.
- [14] R. J. Elliott and C. Wood, *J. Phys. C*, **4**(1971), 2359.
- [15] P. Pfeuty and R. J. Elliott, *J. Phys. C*, **4**(1971), 2370.
- [16] M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.*, **56**(1976), 1484.
- [17] T. Yokota and Y. Sugiyama, *Phys. Rev.*, **B37**(1988), 5657.
- [18] Y. Q. Ma (马余强) and Z. Y. Li (李振亚), *J. Phys.: Condens. Matter*, to be published.
- [19] Y. Q. Ma (马余强) and Z. Y. Li (李振亚), *Phys. Lett. A*, in press.
- [20] T. Oguchi and F. Takana, *Phys. Lett.*, **A88**(1982), 247.

- [21] T. Yokota, *J. Phys. C*, **21**(1988), 5987.  
[22] T. Oguchi and I. Ono, *J. Phys. Soc. Japan*, **21**(1966), 2178.  
[23] R. M. Stratt, *J. Chem. Phys.*, **80**(1986), 2315.  
[24] Z. Y. Li (李振亚) and Q. Jiang (蒋青), *Phys. Lett.*, **A138**(1989), 247.  
[25] T. Morita, *Physica*, **98A**(1979), 566.  
[26] J. Oitmaa and M. Plischke, *Physica*, **86—88B**(1977), 577.

## STUDY OF A QUANTUM TRANSVERSE ISING MODEL WITH RANDOM FIELDS

MA YU-QIANG LI ZHEN-YA

*Department of Physics, Suzhou University, Suzhou, 215006*

(Received 13 November 1989)

### ABSTRACT

In this paper, we propose a new method, which combines the pair approximation with the discretized path-integral representation, to study the quantum transverse Ising model with random-field. Full phase diagrams are obtained for various random-field distributions. When applied random fields are trimodal (and bimodal), the critical properties including the possibility of the existence of the tricritical points and reentrance phenomena are numerically analyzed in detail. In the limit  $z \rightarrow \infty$ , the extended mean-field result is recovered.

**PACC:** 7510H; 7510J; 0550