

一维 Fibonacci 准周期 Frustrated Ising 模型的热力学特性

童培庆

南京师范大学物理系, 南京 210024

1993 年 1 月 5 日收到

分别给出周期和自由边界条件下求解一维 Fibonacci 准周期 Frustrated Ising 模型的配分函数的方法. 研究它的低温热力学性质, 发现当温度趋于零时, 其热力学函数在参数 $\frac{b}{J} = \frac{2}{2m+1}$ (m 为正整数) 处发生尖锐的变化. 分析了零温时系统在不同参数范围内的基态构形, 对计算的结果进行了解释.

PACC: 0505; 7510

一、引 言

近 20 多年以来, 人们对如自旋玻璃这样的随机磁性系统中的集体协作行为有了很多的了解^[1]. 在 Ising 自旋玻璃系统中, 自旋之间的交换相互作用是随机地取铁磁或反铁磁的. 正是这种铁磁和反铁磁相互作用之间的竞争使得系统不可能存在一种自旋构形同时满足所有的相互作用. Toulouse 曾把它称之为“frustration”^[2]. 自旋玻璃模型中最重要的特征是 frustration 和随机性, 然而随机性使得问题复杂化. 业已证明求解自旋玻璃系统的基态是一个 NP 完备的优化问题^[3]. 而 frustration 作为复杂系统的共性之一, 出现在许多描述复杂系统的模型和行为之中. 为此 Villain^[4]首次建议研究具有 frustration 而没有随机性的系统. Doman 和 Williams^[5]考虑了处在均匀外场中且周期地取铁磁和反铁磁最近邻相互作用的周期 frustrated Ising 模型, 发现存在两个临界参数值 $B/J=1$ 和 2, 在这两点上, 系统的基态构形和零温热力学函数会发生突变. 它能够部分解释一维 Ising 自旋玻璃的特性.

另一方面, 最近围绕着准周期结构的物理特性, 人们做了大量的工作^[6]. 准周期结构介于周期性和随机性结构之间. 它不具有平移不变性但具有自相似性, 是决定性的结构. 因而考察周期系统和随机系统的行为是否在准周期系统中出现以及是否出现新的行为是很自然的. 为此, 本文对一维 Fibonacci 准周期 Frustrated Ising 系统进行研究, 以期对 frustration 的特性及 Ising 自旋玻璃的行为有更进一步的了解.

二、模型及计算方法

考虑在一维规则格点上排列的 Ising 自旋 σ_i ($\sigma_i = \pm 1$), 那么处在均匀外场中, 具有最

近邻交换相互作用的系统的哈密顿量为

$$H = - \sum_i J_i \sigma_i \sigma_{i+1} - B \sum_i \sigma_i, \quad (1)$$

其中 $B > 0$ 是均匀外场, J_i 根据 Fibonacci 准周期规则取 $+J$ 或 $-J$ ($J > 0$), 我们以 P 表示 $J_i = J$, 即铁磁相互作用, N 表示 $J_i = -J$, 即反铁磁相互作用. 由 Fibonacci 准周期规则构成的交换作用序列 $\{J_1 J_2 \dots\}$ 是从 $S_1 = \{P\}$ 出发, 通过一级一级地作置换 $N \rightarrow NP, P \rightarrow N$ 而得到的, 由此得到的第 l 级作用序列 $S_l = \{NPNNPNPN\dots\}$ 中共有 F_l 个交换相互作用 (F_l 是第 l 个 Fibonacci 数, 满足 $F_l = F_{l-1} + F_{l-2}$ 和 $F_1 = F_2 = 1$), 其中有 F_{l-1} 个反铁磁相互作用, F_{l-2} 个铁磁相互作用. 当 l 趋于无穷大时, 则得到完全准周期的交换作用序列, 如图 1 所示.

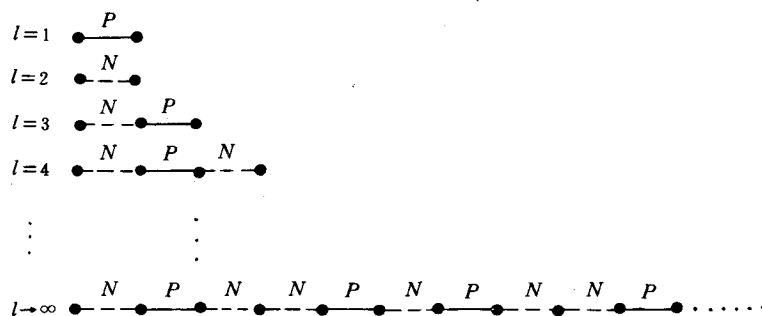


图 1 一维 Fibonacci 准周期结构图

• 表示自旋; N 表示 $J_i = -J$; P 表示 $J_i = J$ ($J > 0$)

对第 l 级结构, 系统(1)式的配分函数

$$Z_l = \text{Tr} \exp(-\beta H) = \sum_{\sigma_i = \pm 1} \exp[\beta J (\sum_i \sigma_i \sigma_{i+1}) + \frac{B}{J} \sum_i \sigma_i] \quad (2)$$

是组合参数 βJ 和 B/J 的函数, 其中 $\beta = 1/T$ 是温度因子 (取 Boltzmann 常数 $k_B = 1$), βJ 反映了系统的温度, B/J 是外场与交换相互作用的强度之比.

下面给出两种边界条件下配分函数 Z_l 和系统平均自由能 f 的计算公式.

1. 周期性边界条件 对第 l 级结构, 系统共有 F_l 个自旋和 F_l 个交换相互作用, 且 $\sigma_{F_l+1} = \sigma_1, J_{F_l+1} = J_1$. 应用转移矩阵方法, Z_l 可写成

$$Z_l = \text{Tr}(QPQ\dots) = \text{Tr} M_l, \quad (3)$$

其中 $M_l = QPQ\dots$ 是 F_l 个矩阵的乘积. 且

$$P = \begin{bmatrix} \exp[\beta J(1 + \frac{B}{J})] & \exp(-\beta J) \\ \exp(-\beta J) & \exp[\beta J(1 - \frac{B}{J})] \end{bmatrix}, \quad (4a)$$

$$Q = \begin{bmatrix} \exp[\beta J(-1 + \frac{B}{J})] & \exp \beta J \\ \exp(\beta J) & \exp[-\beta J(1 + \frac{B}{J})] \end{bmatrix}. \quad (4b)$$

根据准周期构造规则得

$$M_l = M_{l-1} M_{l-2} \quad (5)$$

为了求出 Z_l 之间的递推关系,引入两个行列式为 1 的矩阵 P' 和 Q' : $P' = \frac{1}{A}P$, $Q' = \frac{1}{iA}Q$, 其中 $A = \sqrt{2\sinh(2\beta J)}$. 由 P' 和 Q' 按规则(3)式构造矩阵 $M'_l = Q'P'Q'Q'\dots$, 同样有

$$M'_l = M'_{l-1} M'_{l-2} \quad (6)$$

$$\text{且} \quad Z_l = \text{Tr} M_l = i^{F_{l-1}} \cdot A^{F_l} \text{Tr} M'_l, \quad (7)$$

$$\text{所有的 } M'_l \text{ 的行列式} \quad \det M'_l = 1. \quad (8)$$

根据(6), (8)式,可得^[7]

$$\text{Tr} M'_{l+1} = \text{Tr} M'_l \cdot \text{Tr} M'_{l-1} - \text{Tr} M'_{l-2}.$$

上式等号两边分别乘 $i^{F_l} A^{F_{l+1}}$, 得

$$Z_{l+1} = Z_l \cdot Z_{l-1} - (-1)^{F_{l-2}} A^{2F_{l-1}} Z_{l-2} \quad (9)$$

和

$$Z_1 = 2\exp(\beta J)\cosh(\beta B),$$

$$Z_2 = 2\exp(-\beta J)\cosh(\beta B), \quad (10)$$

$$Z_3 = 4\cosh^2(\beta B).$$

根据叠代方程(9)和初始条件(10)式,可得任一级系统的配分函数 Z_l . 由此可得每个自旋的平均自由能: $f_l = -\frac{1}{\beta F_l} \ln Z_l$. 当 $l \rightarrow \infty$ 时,得到完全准周期系统的平均自由能

$$f = \lim_{l \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta F_l} \ln Z_l. \quad (11)$$

2. 自由边界条件 对第 l 级结构,系统共有 $N = F_l + 1$ 个自旋和 F_l 个交换相互作用. 此时系统的配分函数可写成^[8]

$$Z_l = \exp\left(\sum_{i=1}^{F_l} A_i\right) [2 \cdot \cosh(\beta B_N)], \quad (12)$$

$$\text{其中} \quad A_i = \frac{1}{2} \ln \{4\cosh[\beta J(\frac{J_i}{J} + \frac{B_i}{J})] \cdot \cosh[\beta J(\frac{J_i}{J} - \frac{B_i}{J})]\} \quad (12a)$$

$$B_{i+1} = B + \frac{1}{2} \ln \left\{ \frac{\cosh[\beta J(\frac{J_i}{J} + \frac{B_i}{J})]}{\cosh[\beta J(\frac{J_i}{J} - \frac{B_i}{J})]} \right\} \quad (12b)$$

及 $B_1 = B$.

同样当 $l \rightarrow \infty$ 时就可得到完全准周期系统的每个自旋的平均自由能为

$$f = -\lim_{l \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta(F_l + 1)} \sum_{i=1}^{F_l} A_i. \quad (13)$$

通过自由能,系统每个自旋的平均能量 E , 平均熵 S , 平均比热 c_v 和平均磁矩 M 可分别由下列式子求得:

$$E = -\frac{\partial(\beta f)}{\partial \beta}, \quad S = \beta^2 \frac{\partial f}{\partial \beta}, \quad c_v = \beta^2 \frac{\partial^2(\beta f)}{\partial \beta^2}, \quad M = -\frac{\partial f}{\partial B}. \quad (14)$$

三、计算结果及分析讨论

分别用(11)和(13)式计算了两种边界条件下每个自旋的平均自由能以及各热力学函

数. 发现当 l 较大时, 两者的结果是一致的. 这时因为当系统中的自旋数目趋于无穷时, 边界所引起的影响可以忽略.

图 2(a)至(d)是利用(13),(14)式对 $l=21, F_l=10\ 946$ 计算的在 4 个不同温度 $\beta J=1, 5, 10, 20$ 下, 系统每个自旋的平均能量、熵、磁矩和比热随参数 B/J 的变化曲线. 从图 2 中可以看到, 当温度较高时(βJ 较小时), E, S, M 和 c_v 的曲线变化很平稳. 但当温度降低时(βJ 增大时), 能量曲线在 $B/J=2, 2/3, 2/5, \dots$ 处出现拐点, 而 S, M 和 c_v 的曲线在相应的参数值变化越来越剧烈. 可以看到, 当温度趋于零时, 热力学函数 S, M 和 c_v 将出现不连续性. 这同周期 Frustrated Ising 模型及一维 Ising 自旋玻璃模型的结果相类似. 零温下周期 Frustrated Ising 模型的热力学函数在 $B/J=2$ 和 1 处出现奇异性. 而对自旋玻璃, 出现不连续的参数是 $B/J=2/n$ (n 是自然数). 这是由于这几种模型之间的相似性所造成的.

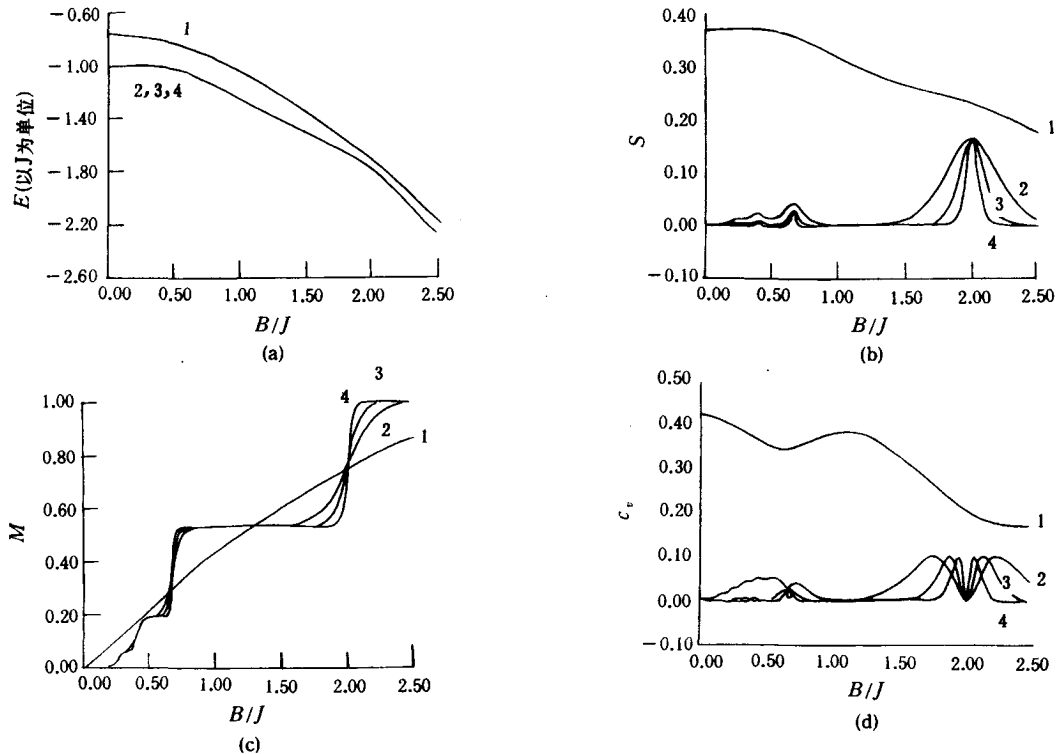


图 2 不同温度下, 系统热力学函数随参数 B/J 的变化曲线. 曲线 1, 2, 3, 4 代表 $\beta J=1, 5, 10, 20$; (a) 中平均内能 E ; (b) 中平均熵 S ; (c) 中平均磁矩 M ; (d) 中平均比热 c_v .

为了解造成这种奇异性的原因, 下面对准周期系统在不同的参数范围内的基态构形进行分析.

1. $B/J > 2$ 此时外场强度要比交换相互作用强度强得多, 因而基态时系统的所有自旋都沿着外场方向, 所有铁磁相互作用都得到满足. 而反铁磁相互作用不能满足, 基态是非简并的, 所以 $E = -B - \lim_{l \rightarrow \infty} (\frac{F_{l-2}}{F_l} - \frac{F_{l-1}}{F_l})J = -B - (1 - 2\sigma)J$, 其中 $\sigma = \frac{1}{2}(\sqrt{5} - 1)$. $S = 0, M = 1$, 与图 2 中 $\beta J = 20$ 的计算值一致.

2. $B/J=2$ 此时如图 3(a),(b)所示的两种自旋构形具有相同的能量,亦即与周围近邻都是反铁磁交换作用的自旋,在近邻两自旋沿着外场方向时,可以取顺着或逆着外场两个方向,因而基态是简并的.记 N_l 是在第 l 级结构中上述自旋的数目,则当 $l \geq 5$ 时,有

$$N_l = \begin{cases} F_{l-3} & l \text{ 是奇数,} \\ F_{l-3} - 1 & l \text{ 是偶数,} \end{cases}$$

且 $\lim_{l \rightarrow \infty} \frac{N_l}{F_l} = 2\sigma - 1 = 0.236$, 所以 $E = -(3 - 2\sigma)J$, $S = \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{N_l}{F_l} \times \ln 2 = 0.164$, $M = 1 - \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{N_l}{F_l} = 0.764$. 此值同图 2 中 $\beta J = 20$ 的计算值相一致.



图 3 单个自旋集团的两种可能构形 箭头表示自旋方向;箭头朝上表示自旋沿着外场方向($\sigma=1$)

3. $2/3 < \beta/J < 2$ 此时以铁磁交换相互作用相连的两自旋都沿着外场方向,而 2 中所述的自旋则逆着外场方向(如图 3(b)所示),基态是非简并的,所以 $E = -(1 - 2 \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{N_l}{F_l})B - \lim_{l \rightarrow \infty} (\frac{F_{l-2}}{F_l} + 2 \frac{N_l}{F_l} - \frac{F_{l-1} - 2N_l}{F_l})J = -(3 - 4\sigma)B - 3(2\sigma - 1)J$, $S = 0$, $M = 1 - 2 \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{N_l}{F_l} = 0.528$, 同样与计算值一致.

4. $B/J = 2/3$ 基态时存在如图 4 所示的包含 5 个自旋的集团,整个自旋集团的两种状态(如图 4(a),(b)所示)具有相同的能量.记 $N_l^{(2)}$ 是第 l 级结构中这种自旋集团的数目,当 $l \geq 7$ 时,有

$$N_l^{(2)} = \begin{cases} F_{l-6} & l \text{ 是奇数} \\ F_{l-6} + 1 & l \text{ 是偶数,} \end{cases}$$

且 $\lim_{l \rightarrow \infty} \frac{N_l^{(2)}}{F_l} = 0.059$, 所以 $E = -\frac{2}{3}(3 - 4\sigma)J - 3(2\sigma - 1)J = -1.06J$, $S = 0.059 \times \ln 2 = 0.041$, $M = 0.528 - 3 \cdot \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{N_l^{(2)}}{F_l} = 0.351$.

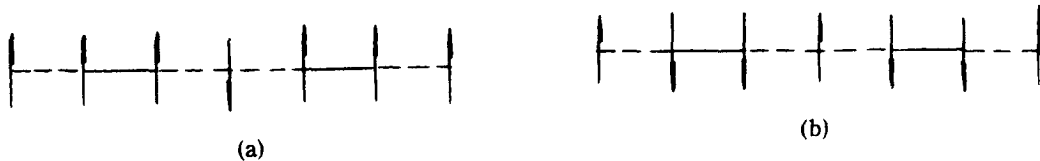


图 4 5 个自旋集团的两种可能构形 箭头说明同图 3

5. $2/5 < B/J < 2/3$ 同样此时 4 中所述的自旋集团在基态时取图 4(b)状态,状态是非简并的,所以 $E = -(3 - 4\sigma - 6 \cdot \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{N_l^{(2)}}{F_l})B - [3(2\sigma - 1) + 4 \cdot \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{N_l^{(2)}}{F_l}]J = -0.174B - 0.944J$, $S = 0$, $M = 0.528 - 6 \cdot \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{N_l^{(2)}}{F_l} = 0.174$.

6. $B/J = 2/5$ 基态时存在如图 5 所示的包含 21 个自旋的集团具有能量简并的两种状态,如图 5(a),(b)所示.此种集团在第 l 级结构中的数目是,当 $l \geq 10$ 时,有

$$N_l^{(3)} = \begin{cases} F_{l-9} & l \text{ 是奇数,} \\ F_{l-9} - 1 & l \text{ 是偶数,} \end{cases}$$

$$\text{且 } \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{N_l^{(3)}}{F_l} = 0.013, \text{ 所以, } E = -1.014J, S = 0.013 \times \ln 2 = 0.009, M = 0.174 - 5 \\ \times \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{N_l^{(3)}}{F_l} = 0.109.$$

当 $B/J > 2/5$ 时, 可进行类似的讨论, 但必须考虑更大的自旋集团.

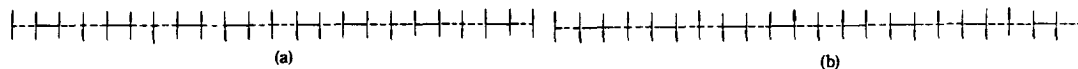


图 5 21 个自旋集团的两种可能构形 箭头说明同图 3

从以上分析的值可以看到它们与图 2 中 βJ 很大时的计算结果相一致.

从图 2 和以上的分析可以看到, 当温度很高时, 热运动能量远大于自旋集团反转所造成的能量差, 因而系统中自旋间相互作用的细节不重要, 热力学函数随 B/J 的变化较平稳. 但当温度较低时, 特别是零温时, 系统的热力学函数将由其自旋构形所决定. 上述分析的各参数区域的基态情况同计算值的趋势一致. 低温下, 在不同的临界参数值, 对应的热激发由相应的自旋集团的反转所决定, 而其它类型的自旋集团的反转几乎是不可能的, 这造成 c_v 在这些参数值的急剧变化. 这点同周期 Frustrated Ising 链及一维 Ising 自旋玻璃相类似, 但由于结构上的不同, 自旋集团的形式则不同. 例如, 对周期情况, 只有两个临界值 $B/J = 2$ 和 1, 它分别来源于只含一个和两个自旋的自集团. 对自旋玻璃, 临界值 $B/J = 2/n$ (n 是自然数) 对临界值 $2/n$ 起作用的自旋集团包含 n 个以上铁磁相互作用相连的自旋. 这与我们上面讨论的自旋集团不同.

四、结 论

通过前面的计算及对不同参数范围内基态构形的分析, 我们发现当参数 B/J 发生变化时, 系统的基态构形在某些值发生突变, 这是造成一维准周期 Frustrated Ising 系统在零温时热力学函数发生突变的原因. 而且在相变点处起主要作用的自旋集团同系统的具体结构有关.

总之, 虽然我们讨论的一维准周期 Frustrated Ising 系统比较简单, 但它在零温处表现出丰富的特性. 这些特性同 Ising 自旋玻璃模型的特性相类似. 我们期望对准周期 Frustrated 系统的研究能加深对自旋玻璃特性的了解.

- [1] K. Binder and A. P. Young, *Rev. Mod. Phys.*, **58**(1986), 801.
- [2] G. Toulouse, *Commun. Phys.*, **2**(1977), 115.
- [3] F. Barahoms, *J. Phys. A*, **15**(1982), 3241.
- [4] J. Villain, *J. Phys. C*, **10**(1977), 1717.
- [5] B. G. S. Doman and J. K. Williams, *J. Phys. C*, **15**(1982), 1693.
- [6] P. J. Steinharat and S. Ostlund (eds), *The Physics of Quasicrystals*, World Scientific Publish, Singapore (1987).

- [7] M. Kohmoto, L. P. Kadanoff and C. Tang, *Phys. Rev. Lett.*, **50**(1983),1870.
[8] P. Rajun, *Physica*, **91A**(1978),549.

A STUDY ON THE THERMODYNAMICAL PROPERTIES OF ONE-DIMENSIONAL FIBONACCI QUASIPERIODIC FRUSTRATED ISING MODEL

TONG PEI-QING

Department of Physics, Nanjing Normal University Nanjing 210024

(Received 5 January 1993)

ABSTRACT

The calculated formula for partition function of one-Dimensional Fibonacci quasiperiodic frustrated Ising system with free and periodic boundary conditions are given in this paper. Its thermodynamical properties at low temperatures are studied. It is found that when the temperature tends to zero, the thermodynamical quantities as the functions of B/J show discontinuities at $B/J=2/(2m+1)$ (m interger). The ground state configuration of system in various parameter regions are described and the results of calculation are discussed.

PACC: 0505; 7510