

# Union Jack 晶格上伊辛模型的 自由费密近似解

王福高 胡嘉楨

上海交通大学应用物理系,凝聚态物理研究所,上海 200030

1992年2月14日收到

运用自由费密近似对 Union Jack 晶格上具有各向异性二体耦合作用及三体相互作用的伊辛模型进行了求解,得到了模型的自由能、自发磁矩和临界点方程。在耦合常数简化为正方晶格上的伊辛模型时,得到了与 Onsager 一致的解。

PACC: 7510H; 0550; 6460

## 一、引 言

随着材料科学的发展,人们发现了越来越多的各向异性材料,这些材料在许多领域得到了广泛的应用。材料的各向异性与其微观结构及组成材料的原子分子之间的相互作用各向异性有着密切的联系。各向异性的伊辛模型虽然比较简单,但通过对这类模型的研究,使我们了解到许多微观的各向异性相互作用如何影响材料宏观物理特性,如材料热学、磁学和光学特性<sup>[1,2]</sup>。

本文推广了 Wu<sup>[3]</sup>的工作,提出了一种更为复杂的层状各向异性的伊辛模型,并引入了多体相互作用。多体相互作用可以改变模型相变的普适类<sup>[4]</sup>,在这里我们引入是较弱的三体相互作用,通过近似,对模型热力学函数进行了求解,得到了模型的平均自由能和自发磁化强度,从而得到了模型发生相变的临界点方程。

## 二、Union Jack 晶格上的伊辛模型与配分函数的计算

Union Jack 晶格有时也称作米字晶格<sup>[5]</sup>, (图案与英国米字旗相似)如图1所示。设整个晶格由  $N$  个格点组成,用  $L$  表示。 $L$  由两个子正方晶格嵌套而成。两个子晶格分别用  $L'$  和  $L''$  表示,其中  $L'$  为用空心点代表格点的子晶格, $L''$  为用实心点代表格点的子晶格。每一格点上对应着一个自旋  $\sigma = \pm 1$ ,各格点自旋之间的相互作用用连线来表示,为了研究其各向异性的二体相互作用,引入8个耦合常数  $\bar{J}_1, \bar{J}_2, \bar{J}_3, \bar{J}_4, \bar{K}_1, \bar{K}_2, \bar{K}_3$  和  $\bar{K}_4$ , 耦合常数统一用  $\bar{C}_r$  表示, $r$  对应与格点自旋之间的耦合方式。引入的耦合常数是层状各向异性的。对于三体相互作用,假设图1中组成最小三角形的三个自旋之间存在三体相互作用,其耦合常数为  $\bar{C}$ 。晶格  $L$  上具有上述耦合常数伊辛模型的哈密顿量可写成下列形式:<sup>[6]</sup>

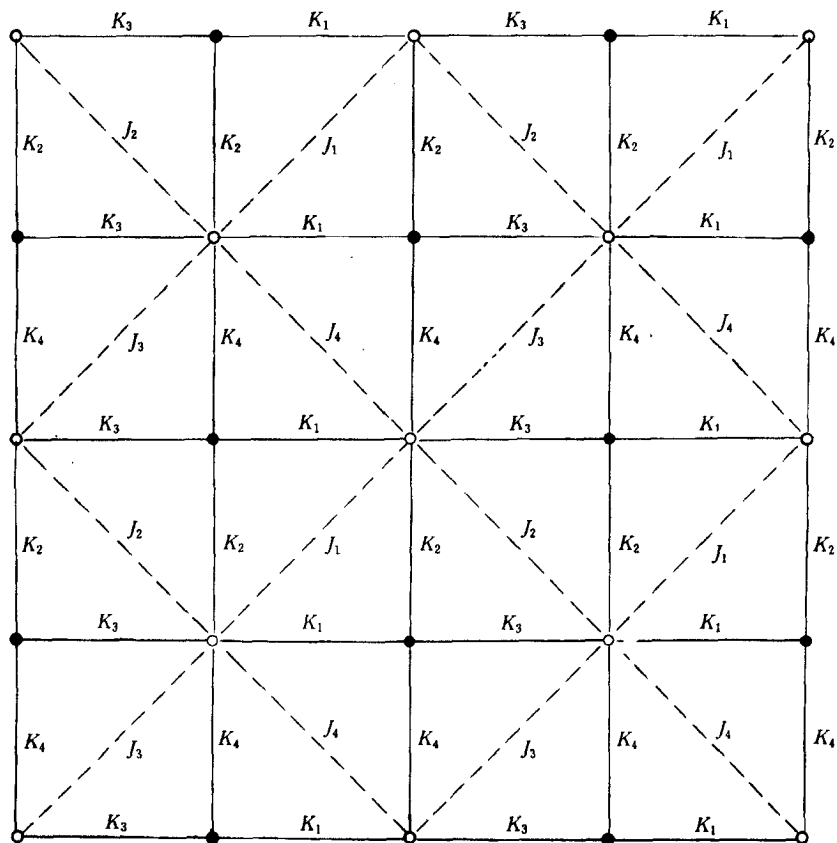


图1

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} \bar{C}_r \sigma_i \sigma_j + \sum_{\langle ijk \rangle} \bar{G}(\sigma_i \sigma_j \sigma_k), \quad (1)$$

其中  $\sigma = \pm 1$ ,  $\langle ij \rangle$  表示对图中所有自旋对求和;  $\langle ijk \rangle$  表示对图1中组成三角的自旋组求和. 这样得到  $L$  晶格上伊辛模型的配分函数为

$$Z = \sum_{\sigma} \exp \left( \sum_{\langle ij \rangle} \bar{C}_r \sigma_i \sigma_j + \sum_{\langle ijk \rangle} \bar{G}(\sigma_i \sigma_j \sigma_k) \right),$$

$$C_r = -\bar{C}_r / k_B T, G = -\bar{G} / k_B T, \quad (2)$$

其中  $\sigma$  表示对所有格点求和. 如果对  $L'$  上的所有格点自旋  $\sigma''$  求和, 则配分函数可写成下列形式:

$$Z = \sum_{\sigma' \langle ijkl \rangle} \prod W(\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k, \sigma_l), \quad (3)$$

$\langle ijkl \rangle$  表示对  $L$  晶格上图2所示的位形求积, 求积遍及整个子晶格  $L''$ , 而  $\sigma'$  表示对  $L'$  上的所有

$N/2$  个格点自旋求和.  $W(\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k, \sigma_l)$  为玻耳兹曼因子, 由于  $J_1, J_2, J_3$  和  $J_4$  的耦合作用被相邻的两个位形所共有, 所以在  $W$  中的耦合常数只贡献二分之一. (3) 式给出了配分函数

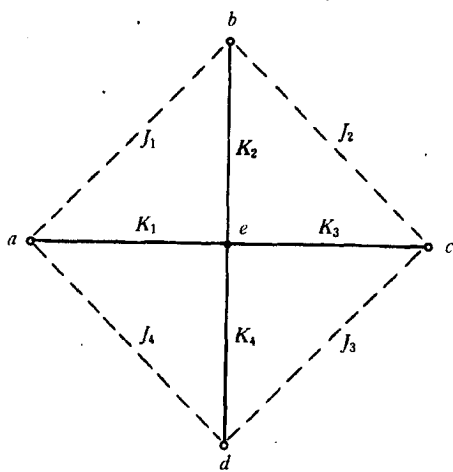


图2

以后原则上可计算模型的其它热力学函数. 但是这只是理论上可行, 实际上极其繁琐复杂. 因此通常并不采用这种硬算的方法. 在这里运用 Union Jack 晶格上伊辛模型与自由费密模型的等价性来计算模型的热力学量<sup>[7]</sup>. 为了讨论模型等价性, 首先讨论玻耳兹曼因子性质及形式. 图2所示位形的玻耳兹曼因子可写成下列形式:

$$\begin{aligned} W(a, b, c, d) &= \sum_{\sigma} \exp((abJ_1 + bcJ_2 + cdJ_3 + daJ_4)/2 + e(aK_1 + bK_2 + cK_3 + \\ &\quad dK_4) + e(ab + bc + cd + da)G) \\ &= 2\exp((abJ_1 + bcJ_2 + cdJ_3 + daJ_4)/2) \times \cosh(aK_1 + bK_2 + cK_3 + \\ &\quad dK_4) + (ab + bc + cd + da)G, \end{aligned}$$

$$J_1 = -\bar{J}_1/k_B T, K_1 = -\bar{K}_1/k_B T. \quad (4)$$

由于考虑的  $G$  较小,  $W$  近似具有下列性质:

$$W(a, b, c, d) = W(-a, -b, -c, -d). \quad (5)$$

这样玻耳兹曼因子由16个降到了8个, 8个不同的玻耳兹曼因子有如下形式:

$$\begin{aligned} W_1 &= W(+, +, +, +) = 2\exp((J_1 + J_2 + J_3 + J_4)/2) \times \cosh(K_1 + K_2 + K_3 + K_4 + 4G), \\ W_2 &= W(+, -, +, -) = 2\exp(-(J_1 + J_2 + J_3 + J_4)/2) \times \cosh(K_1 - K_2 + K_3 - K_4 - 4G), \\ W_3 &= W(+, -, -, +) = 2\exp((-J_1 + J_2 - J_3 + J_4)/2) \times \cosh(K_1 - K_2 - K_3 + K_4), \\ W_4 &= W(+, +, -, -) = 2\exp((J_1 - J_2 + J_3 - J_4)/2) \times \cosh(K_1 + K_2 - K_3 - K_4), \\ W_5 &= W(+, -, +, +) = 2\exp((-J_1 - J_2 + J_3 + J_4)/2) \times \cosh(K_1 - K_2 + K_3 + K_4), \\ W_6 &= W(+, +, +, -) = 2\exp((J_1 + J_2 - J_3 - J_4)/2) \times \cosh(K_1 + K_2 + K_3 - K_4), \\ W_7 &= W(+, +, -, +) = 2\exp((J_1 - J_2 - J_3 + J_4)/2) \times \cosh(K_1 + K_2 - K_3 + K_4), \\ W_8 &= W(-, +, +, +) = 2\exp((-J_1 + J_2 + J_3 - J_4)/2) \times \cosh(-K_1 + K_2 + K_3 + K_4). \end{aligned} \quad (6)$$

### 三、Union Jack 晶格上伊辛模型的自由费密近似解

为了计算模型的热力学函数, 考虑  $L'$  上的对偶晶格(dual lattices)  $Ld'$ , 在  $Ld'$  上每个格点有8种可能的不同位形. 如果相邻的两个自旋是异号的, 用一条实线来表示其边界; 若相邻的两个自旋是同号的, 用虚线来表示其边界. 如图3所示, 8个线安排位形分别对应于8个玻耳兹曼因子, 这样问题就转化为  $Ld'$  上的8顶角模型. 图3中每种顶角线安排对应与两套自旋组合. 由于考虑的模型各向异性比较复杂, 另外还考虑了三体相互作用, 玻耳兹曼因子并不简单地严格满足费密条件. 因此, 对其中的  $W_2$  进行修正<sup>[8]</sup>

$$\bar{W}_2 = (W_5 W_6 + W_7 W_8 - W_3 W_4) / W_1 = W_2 - \Delta / W_1, \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \Delta &= W_1 W_2 + W_3 W_4 - W_5 W_6 - W_7 W_8 \\ &= 2\cosh(2K_2 + 2K_4 + 8G) - 2\cosh(2K_2 + 2K_4), \end{aligned} \quad (8)$$

$G \ll K$  时, 满足修正条件  $\Delta / W_1^2 \ll 1$ .

用  $\bar{W}_2$  代替  $W_2$ ,

$$\bar{W}_2 = 2\exp(-(J_1 + J_2 + J_3 + J_4)/2) \times \cosh(K_1 - K_2 + K_3 - K_4 - 4G)$$

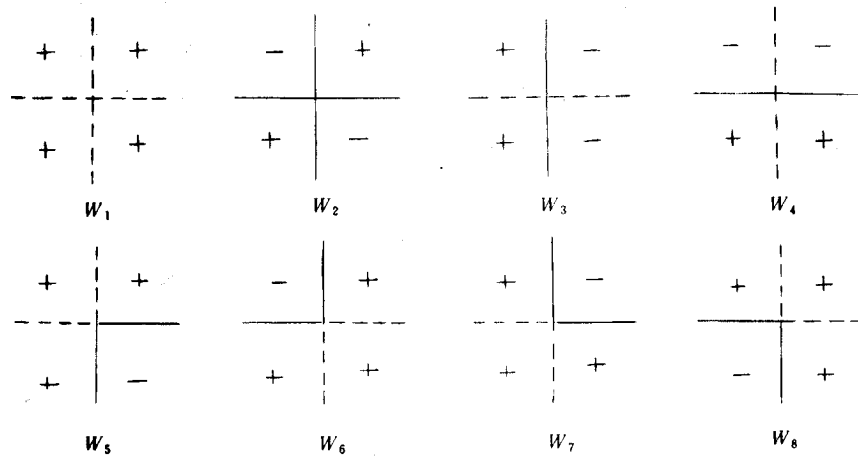


图3

$$-\frac{2\cosh(2K_2 + 2K_4 + 8G) - 2\cosh(2K_2 + 2K_4)}{2\exp((J_1 + J_2 + J_3 + J_4)/2) \times \cosh(K_1 + K_2 + K_3 + K_4 + 4G)}, \quad (9)$$

则  $W_1, \bar{W}_2, W_3, W_4, W_5, W_6, W_7$  和  $W_8$  满足自由费密条件<sup>[8]</sup>

$$W_1 \bar{W}_2 + W_3 W_4 = W_5 W_6 + W_7 W_8. \quad (10)$$

满足自由费密条件的8顶角模型称为自由费密模型<sup>[9]</sup>, 其配分函数为

$$Z_F = Z/2, \quad (11)$$

其中1/2因子是考虑了图2中的两种自旋安排对应于图3中的一种边界线安排。根据上述讨论可以发现 Union Jack 晶格上各向异性具有三体相互作用的伊辛模型与对偶晶格  $Ld^1$  上的自由费密模型等价。这样只需计算等价的自由费密模型, 就可以得到需要求解模型的热力学函数。根据 Fan 和 Wu 的工作,  $Z$  自由费密模型单格点的平均自由能<sup>[9]</sup>

$$F = \lim_{N \rightarrow \infty} (\ln(Z)/N) = \frac{1}{16\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta d\Phi \ln(2A + 2B\cos\theta + 2C\cos\Phi + 2D\cos(\theta - \Phi) + 2E\cos(\theta + \Phi)), \quad (12)$$

其中  $A = \frac{1}{2}(W_1^2 + \bar{W}_2^2 + W_3^2 + W_4^2)$ ,  $B = W_1 W_3 - \bar{W}_2 W_4$ ,  $C = W_1 W_4 - \bar{W}_2 W_3$ ,  $D = W_3 W_4 - W_7 W_8$ ,  $E = W_3 W_4 - W_5 W_6$ .

在计算中考虑了  $Ld^1$  只有  $N/2$  个格点。同样可以计算费密模型的自发磁矩<sup>[10]</sup>, 具体表达式如下:

$$\Omega^{-2} \leq 1 \text{ 时, } M = (1 - \Omega^{-2})^{1/3};$$

$$\Omega^{-2} \geq 1 \text{ 时, } M = 0;$$

$$\Omega^2 = 1 - (-W_1 + \bar{W}_2 + W_3 + W_4)(W_1 - \bar{W}_2 + W_3 + W_4)(W_1 + \bar{W}_2 - W_3 + W_4) \times (W_1 + \bar{W}_2 + W_3 - W_4). \quad (13)$$

临界点对应于  $M=0$  的点。由(13)式可以得到临界点方程

$$W_1 + \bar{W}_2 + W_3 + W_4 = 2\max(W_1, \bar{W}_2, W_3, W_4), \quad (14)$$

即在给定耦合作用的条件下,模型的临界温度  $T_c$  由上式决定.

#### 四、结 语

综上所述,考虑了 Union Jack 晶格上具有各向异性二体耦合作用及三体相互作用的伊辛模型与正方子晶格  $Ld^1$  上的自由费密模型等价,从而得到了格点的平均自由能和自发磁矩,并计算了模型的临界点.必须指出本文所考虑的模型内涵极其丰富,许多模型是本文所考虑的模型特例,下面列举三种:

##### 特例1

$J_1 = J_2 = J_3 = J_4, K_1 = K_2 = K_3 = K_4, G = 0$  时,这相当于 Vaks 等人<sup>[5]</sup>最初引入 Union Jack 晶格时考虑的情况,即 Union Jack 晶格上只有各向同性耦合作用的伊辛模型。

##### 特例2

$J_1 = J_2 = J_3 = J_4 = 0$  或者  $K_1 = K_2 = K_3 = K_4 = 0$ , 并没有三体相互作用时,对应于正方晶格上的伊辛模型.如果模型是各向同性的,只需将上述条件代入(6),(7)和(14)式即可以得到临界点  $e^{-2J_c} = \sqrt{2} - 1$  或  $e^{-2K_c} = \sqrt{2} - 1$ , 这与正方晶格上伊辛模型 Onsager 的解  $e^{-2J_c} = 0.4142$  一致<sup>[11]</sup>.

##### 特例3

$J_1 = J_3 = J, J_2 = J_4 = J', G = 0$  时,这与 Wu 考虑的情况一致<sup>[3]</sup>.

最后必须指出,Union Jack 晶格上伊辛模型不仅与自由费密模型等价<sup>[8]</sup>,而且与相应的正方晶格上的伊辛模型等价,其配分函数由4个配分函数的乘积组成<sup>[12]</sup>.

- [1] X. N. Wu and F. Y. Wu, *J. Stat. Phys.*, **50**(1987),41.
- [2] K. Y. Lin and S. K. Ma, *J. Stat. Phys.*, **51**(1988),481.
- [3] F. Y. Wu and K. Y. Lin, *J. Phys. A* **20**(1987),5735.
- [4] 王福高等,物理学报**38**(1989),1196.
- [5] V. G. Vaks, A. I. Larkin and Yu. N. Ovchinnikov, *Sov. Phys-JEPT*, **22**(1965),820.
- [6] R. J. Baxter, *Proc. Roy. Soc.*, **A404**(1986),1.
- [7] 唐坤发等,物理学报,**38**(1989),1191.
- [8] C. Fan and F. Y. Wu, *Phys. Rev.*, **179**(1969),560.
- [9] C. Fan and F. Y. Wu, *Phys. Rev.*, **B2**(1970),723.
- [10] R. J. Baxter, *Exact Solved Models in Statistical Mechanics* (Academy Press, London,1982).
- [11] L. Onsager, *Phys. Rev.*, **65**(1944),117.
- [12] V. V. Bazhanov and Yu. G. Stroganov, *Teor. Mat. Fiz.*, **63**(1985b),291;417.

## FREE-FERMION APPROXIMATE SOLUTION OF THE ISING MODEL ON UNION JACK LATTICE

WANG FU-GAO      HU JIA-ZHEN

*Department of Applied Physics, Institute of Condensed Matter Physics,  
Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200030*

(Received 14 February 1992)

### ABSTRACT

In this paper, the Ising model with two-body anisotropic interactions and three-body interactions on union Jack lattice is solved by free-fermion approximation. We have obtained its free energy, spontaneous magnetisation and the equation of critical points. When the interaction coefficients are simplified as in a square lattice Ising model, the same solution as Onsager's is obtained.

**PACC:** 7510H;0550;6460