

具有单轴各向异性场的无规横向伊辛模型 ($S=1$) 的临界行为*

王永强 李振亚

(苏州大学物理系, 苏州 215006)

(1994年3月28日收到)

应用我们提出的对近似和离散路径积分技术相结合的方法, 研究了具有单轴各向异性场的无规横场伊辛模型(自旋 $S=1$) 的临界行为, 并且讨论了单轴各向异性场和横场无规分布对系统相图结构的影响。

PACC: 7510H; 7510J; 0550

1 引 言

对于横向伊辛模型的临界行为, 已有许多作者进行了研究^[1,2], 但都限于恒定横场的情形。关于无规横向伊辛模型的问题, 只是近年来才开始引起重视^[3,4]。有作者用平均场理论研究了横场取三峰分布(如下式所示)

$$p(\Gamma_i) = p\delta(\Gamma_i) + \frac{1-p}{2} [\delta(\Gamma_i - \Gamma_0) + \delta(\Gamma_i + \Gamma_0)] \quad (1)$$

时, 横向伊辛系统的临界行为, 发现相图在 $p=0$ 与 $p \neq 0$ 之间存在不连续性。用对近似方法和离散路径积分技术, 研究了无规横向伊辛模型, 也发现了相图中的这种不连续性。并且, 还研究了横场和纵场都无规分布时对相图结构的影响, 发现在无规横场取三峰分布的同时, 纵场也取双峰分布时, 上述的不连续性会消失, 系统的相图出现三临界点和重入现象^[6]。

一般磁性系统中会存在单轴各向异性场(晶场), 从而导致系统的临界行为具有某些新的特征。有作者用相关有效场方法对具有单轴各向异性的横向伊辛系统(恒定横场)作了研究, 发现各向异性场取负值时, 系统的相图中可以出现三临界点 $(T_c p)^{[7,8]}$; 而当各向异性场取无规分布时将出现重入现象和重入三临界点^[9]。本文目的是研究横向伊辛系统的横场具有无规分布时, 各向异性场对于系统的相图和临界行为的作用和影响。

2 理 论

具有各向异性场的横向伊辛自旋系统(自旋 $S=1$) 的哈密顿量可写为

* 国家自然科学基金资助的课题。

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J S_i^z S_j^z - \sum_i D (S_i^z)^2 - \sum_i \Gamma S_i^z, \quad (2)$$

其中 J 代表最近邻格点之间的自旋-自旋相互作用, D 为各向异性场, Γ 为无规横场, 其分布形式如(1)式所示. (2)式等号右端第一项的求和在最近邻的格点的自旋之间进行.

应用离散路径积分技术^[10,11], 系统 ($S=1$) 的配分函数由下式给出:

$$Q = \sum_{\mathbf{u}_1} \sum_{\mathbf{u}_2} \cdots \sum_{\mathbf{u}_N} \exp \left[\left(\frac{\beta J}{p} \right) \sum_{i,j} \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_j + \frac{\beta D}{p} \sum_i \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_i + \sum_i U_i \right] \quad (3)$$

其中

$$U_i = p a_1 - \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{a}_2 \mathbf{u}_i + a_3 (\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_i + \mathbf{u}_i' \cdot \mathbf{u}_i') - (\hat{\mathbf{a}}_i^2 \mathbf{U}) \cdot \mathbf{a}_4 (\hat{\mathbf{a}}_i^2 \mathbf{U}),$$

$\mathbf{U} = (1, 1, \dots, 1)$ 是具有 p 个分量的常矢量, $\mathbf{u}_i$ 为格点矢量自旋, 具有 p 个分量, 而每一分量 $u_i^{(n)}$ 为三态经典变量 $u_i^{(n)} = 0, \pm 1$.

$$(a)_{i,l} = a_l \delta_{i,l-1}, (a_l)_{p,l} = a_l (l=2,4), \mathbf{u}_i = \hat{\mathbf{u}}_i \mathbf{U},$$

因此, $\hat{\mathbf{a}}_i^2 \mathbf{U} = \{[u_i^{(1)}]^2, [u_i^{(2)}]^2, \dots, [u_i^{(p)}]^2\}$,

$$a_1 = \ln [\cosh(\lambda)], a_2 = \ln [\tanh(\lambda/2)],$$

$$a_3 = \ln \left[\frac{\sqrt{2}}{2} \tanh(\lambda) \right], a_4 = \ln [\tanh(\lambda)],$$

$$\lambda = \beta \Gamma / p.$$

按照上式, 将系统的哈密顿量分成仅包含单粒子项的参考部分 H_0 和相互作用 V 两项^[10]. 相应地, 系统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

$$-\beta F = -\beta F_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (-\beta)^n C_n(V), \quad (4)$$

其中累积展开项 $C_1(V) = \langle V \rangle_0$, $C_2(V) = \langle V^2 \rangle_0 - \langle V \rangle_0^2$, 这里 $\langle \cdots \rangle_0$ 表示对参考部分的正则平均. 为简单起见, 这里仅取一级近似项 $C_1(V)$ ^[10]. 另外,

$$-\beta F_0 = \ln \text{Tr} \exp(-\beta H_0).$$

我们知道, 对近似方法是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的配分函数, 而整个系统的自由能, 则由单粒子和双粒子的配分函数给出.

按照这种方法, 单粒子的有效哈密顿量为

$$H^{(1)} = -D(S_i^z)^2 - \Gamma S_i^z - H^{\text{eff}} S_i^z, \quad (5)$$

其中 H^{eff} 对于单粒子的有效场, 它可以表示成矩阵形式

$$H^{(1)} = - \begin{pmatrix} H^{\text{eff}} + D & \frac{\sqrt{2}}{2} \Gamma & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \Gamma & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \Gamma \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \Gamma & -H^{\text{eff}} + D \end{pmatrix}. \quad (6)$$

为求得单粒子的配分函数 $Z^{(1)}$, 必须先求得 $H^{(1)}$ 的本征值, 它们分别为

$$\lambda_1 = 2\zeta_1 \cos\left(\frac{\theta_1}{3}\right) + \frac{2}{3} D,$$

$$\begin{aligned}\lambda_2 &= 2\zeta_1 \cos\left(\frac{\theta_1}{3} + \frac{2}{3}\pi\right) + \frac{2}{3}D, \\ \lambda_3 &= 2\zeta_1 \cos\left(\frac{\theta_1}{3} + \frac{4}{3}\pi\right) + \frac{2}{3}D,\end{aligned}\quad (7)$$

则单粒子的配分函数为

$$\begin{aligned}Q_1 &= e^{\beta\lambda_1} + e^{\beta\lambda_2} + e^{\beta\lambda_3} \\ &= e^{\frac{2}{3}\beta D + 2\zeta_1 \beta \cos(\theta_1/3)} [1 + 2e^{-3\zeta_1 \cos(\theta_1/3)} \cosh(\sqrt{3}\beta\zeta_1 \sin(\theta_1/3))],\end{aligned}\quad (8)$$

其中 $\zeta_1 = (U_1^2 + V_1^2)^{1/2}$, $\theta_1 = \arctan(V_1/U_1)$,

$$\begin{aligned}U_1 &= \frac{D}{3} (H^{\text{ef}^2} - \Gamma^2/2 - D^2/9), \quad V_1 = \frac{1}{9} R_1, \\ R_1 &= (3D^4 H^{\text{ef}^2} - 6H^{\text{ef}^4} D^2 + 15H^{\text{ef}^2} D^2 \Gamma^2 + 3D^2 \Gamma^4/4 + 3H^{\text{ef}^6} \\ &\quad + 9H^{\text{ef}^4} \Gamma^2 + 9H^{\text{ef}^2} \Gamma^4 + 3\Gamma^6)^{1/2}.\end{aligned}$$

双粒子自旋的有效哈密顿量为

$$H^{(2)} = -JS_i^z S_j^z - D(S_i^z)^2 - D(S_j^z)^2 - \Gamma S_i^z - \Gamma S_j^z - h^{\text{ef}} S_i^z - h^{\text{ef}} S_j^z. \quad (9)$$

通过类似的方法可求得双粒子的配分函数为

$$Q_{11} = e^{\frac{2}{3}\beta D + 2\zeta_{11} \beta \cos(\theta_{11}/3)} [1 + 2e^{-3\zeta_{11} \cos(\theta_{11}/3)} \cosh(\sqrt{3}\beta\zeta_{11} \sin(\theta_{11}/3))], \quad (10)$$

其中 $\zeta_{11} = (U_{11}^2 + V_{11}^2)^{1/2}$, $\theta_{11} = \arctan(V_{11}/U_{11})$,

$$\begin{aligned}U_{11} &= \frac{D}{3} (h^{\text{ef}^2} - \Gamma^2/2 - D^2/9), \quad V_{11} = \frac{1}{9} R_{11}, \\ R_{11} &= (3D^4 h^{\text{ef}^2} - 6h^{\text{ef}^4} D^2 + 15h^{\text{ef}^2} D^2 \Gamma^2 + 3D^2 \Gamma^4/4 + 3h^{\text{ef}^6} \\ &\quad + 9h^{\text{ef}^4} \Gamma^2 + 9h^{\text{ef}^2} \Gamma^4 + 3\Gamma^6)^{1/2},\end{aligned}\quad (11)$$

其中 $h^{\text{ef}} = \frac{Z}{Z-1} H^{\text{ef}}$ 为双粒子集团的有效场。

根据对近似方法^[12], 系统的自由能的参考部分 F_0 为

$$-\beta F_0 = \frac{1}{2} NZ \ln Q_{11} - N(Z-1) \ln Q_1, \quad (12)$$

系统的总自由能 F 为

$$-\beta F = -\beta F_0 + \frac{JNZ}{\beta} \left(\frac{\partial \ln Q_1}{\partial h^{\text{ef}}} \right)^2. \quad (13)$$

将自由能 F 按 h^{ef} 展开至二阶项, 令其前系数为零, 即可得到系统的二级相变线方程为

$$\begin{aligned}& \frac{f}{g} \left\{ \frac{2}{3} \cos\left(\frac{2}{3}\theta + \phi - 2\pi/3\right) - \frac{2e^{-t}}{1 + 2e^{-t} \cosh(l)} \left[\cosh(l) \right. \right. \\ & \quad \times \cos\left(\frac{2}{3}\theta + \phi - 2\pi/3\right) + \frac{\sqrt{3}}{3} \sinh(l) \sin\left(\frac{2}{3}\theta + \phi - 2\pi/3\right) \left. \right] \left. \right\} \\ & = \frac{\Gamma^2}{2(Z-1)J},\end{aligned}\quad (14)$$

其中

$$f = \sqrt{\left(\frac{\partial U_1}{\partial h^{\text{ef}}}\right)^2 + \left(\frac{\partial V_1}{\partial h^{\text{ef}}}\right)^2} \Big|_{h^{\text{ef}}=0} = \frac{2}{3} \sqrt{\Gamma^4 D^2 + \frac{(D^4 + 5D^2 \Gamma^2 + 3\Gamma^4)^2}{3D^2 + 12\Gamma^2}},$$

$$\begin{aligned}
g &= \sqrt[3]{U_1^2 + V_1^2} \Big|_{h^{\text{ef}}=0} = \zeta^2 \\
&= \frac{1}{9} \sqrt[3]{D^2 \left(\frac{9}{2} \Gamma^2 + D^2 \right)^2 + \frac{3}{4} D^2 \Gamma^4 + 3 \Gamma^3}, \\
\theta &= \arctan \left[\frac{3(3D^2\Gamma^4 + 12\Gamma^3)^{1/2}}{D(9\Gamma^2 + 2D^2)} \right], \\
k &= 3\beta\zeta \cos(\theta/3), \quad l = \sqrt{3} \beta\zeta \sin \left(\frac{\theta}{3} \right), \\
\phi &= \arctan \left[\frac{\frac{\partial V_1}{\partial h^{\text{ef}}} \Big|_{h^{\text{ef}}=0}}{\frac{\partial U_1}{\partial h^{\text{ef}}} \Big|_{h^{\text{ef}}=0}} \right].
\end{aligned} \tag{15}$$

在横场取无规分布时, 需要考虑对无规分布的横场进行平均, 因而系统的二级相变线方程应为

$$\begin{aligned}
(1-p) \frac{f}{g} \left\{ \frac{2}{3} \cos \left(\frac{2}{3} \theta + \phi - 2\pi/3 \right) - \frac{2e^{-k}}{1 + 2e^{-k} \cosh(l)} \right. \\
\left. \times \left[\cosh(l) \cos \left(\frac{2}{3} \theta + \phi - 2\pi/3 \right) + \frac{\sqrt{3}}{3} \sinh(l) \sin \left(\frac{2}{3} \theta + \phi - 2\pi/3 \right) \right] \right\} \\
= \frac{\Gamma^2(1-p)}{2(Z-1)J} + p \frac{2\sqrt{3} D}{1 + 2e^{-\beta D/3}}.
\end{aligned} \tag{16}$$

无规分布的横场, 在达到一定数值时也可导致相变温度为零, 相应的横场平均值称为临界横场 Γ_c , 定义一个约化临界横场 $G_c = \Gamma_c/ZJ$, 它与各向异性场 D 的关系为

$$\begin{aligned}
(1-p) \left[\frac{4(A^3 + 10A^2G_c^2 + 34AG_c^3 + 42A^2G_c^4 + 9G_c^5)^{1/2}}{(A^2 + 3G_c^2)(3A^2 + 12G_c^2)^{1/2}} \right. \\
\left. \times \cos \left(\varphi_c + \frac{2\theta_c}{3} - \frac{2\pi}{3} \right) - \frac{ZG_c^2}{2(Z-1)} \right] + 2pA = 0,
\end{aligned} \tag{17}$$

其中

$$\begin{aligned}
\varphi_c &= \arctan \left[\frac{A^4 + 5A^2G_c^2 + 3G_c^4}{AG_c^2(3A^2 + 12G_c^2)^{1/2}} \right], \\
\theta_c &= \arctan \left[\frac{G_c^2(3A^2 + 12G_c^2)^{1/2}}{A \left(3G_c^2 + \frac{2A^2}{3} \right)} \right], \quad A = D/ZJ.
\end{aligned}$$

3 结果与讨论

上一节应用对近似方法和离散路径积分技术, 得到了具有单轴各向异性场的无规横场伊辛系统的自由能, 进而得到了系统的二级相变线方程和临界横场方程。在没有单轴各向异性场 ($D = 0$), 横场取双峰分布 ($p = 0$, 等价于均匀横场^[13]) 时, 临界横场 ($T_c = 0$ 时) 为

$$\Gamma_c = 2(Z-1)J.$$

这与级数展开的结果符合得很好, 与文献[1]的结果一致。

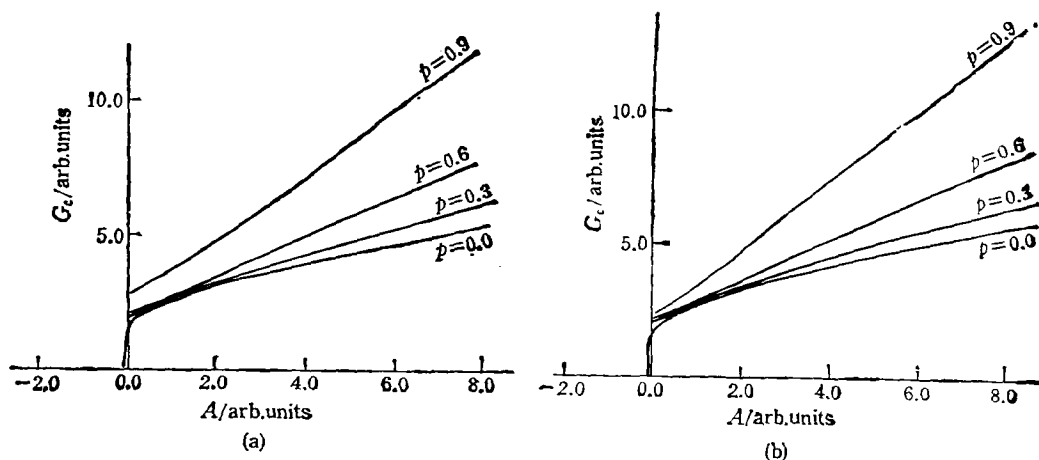


图1 单轴各向异性场的无规横向伊辛模型 ($S=1$) 的临界横场 G_c 随各向异性场 A 的变化曲线
 $p=0, 0.3, 0.6, 0.9, 0.99$ (a) $Z=6$ (b) $Z=12$

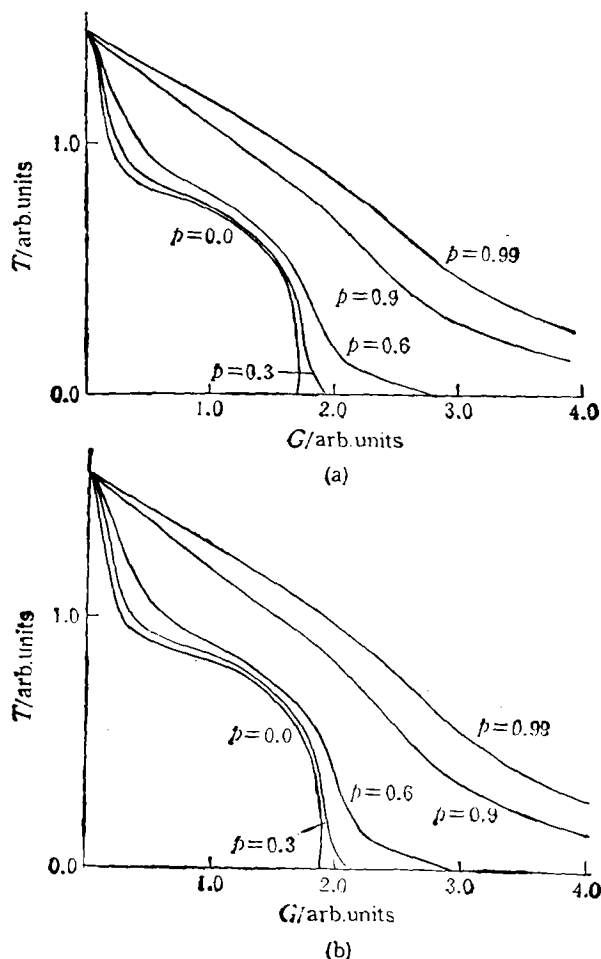


图2 单轴各向异性场 A 的无规横向伊辛模型 ($S=1$) 的 T - G 相图 $A=0.1; p=0, 0.3, 0.6, 0.9, 0.99$
 (a) $Z=6$ (b) $Z=12$

通过数值计算,给出了约化临界横场 G_c 。在横场取无规分布时随约化各向异性场 A 的变化曲线(图1),它与横场取均匀分布时的情形有所不同^[13],表现在: 1) 对于各向异性场 $A < 0$, 仅仅在 $p = 0$ 即横场取双峰分布时,而且仅在 $|A|$ 较接近零的一个很小范围内存在临界横场,并且变化很剧烈;在 $p \neq 0$ 时,横场取三峰分布,负的晶场不出现临界横场,这是与恒定横场有很大区别的地方,表现了量子效应与稀疏无序分布作用相互竞争的结果。2) 对于 $A > 0$ 的情形,临界横场随 A 值的增加而增大,并近乎呈线性增长,而在恒定横场的情形,临界横场随各向异性场的变化却是很缓慢的。

还给出相变温度 ($T = (\beta ZJ)^{-1}$) 与横场 ($G = \Gamma/ZJ$) 的关系的相图(见图2和图3),从图2和图3可以发现这种相图的特征: 1) 对于 $A > 0$, 在 G 趋近于零的一个很小范围内, T_c 随 G 的增加而急剧下降,尔后再逐渐趋于零,临界横场随 p 的增加而增大,并且最后 ($p \rightarrow 1$) 趋于无穷而消失。2) 对于 $A < 0$, 在 G 很小的范围内, T 随 G 增加而略有上升尔后又逐渐趋于零,更为特别的是 $p > 0$ 后就不存在临界横场,而出现重入现象和三临界点。3) 配位数 Z 增加时,相应地 T_c 和 G_c 都增大。

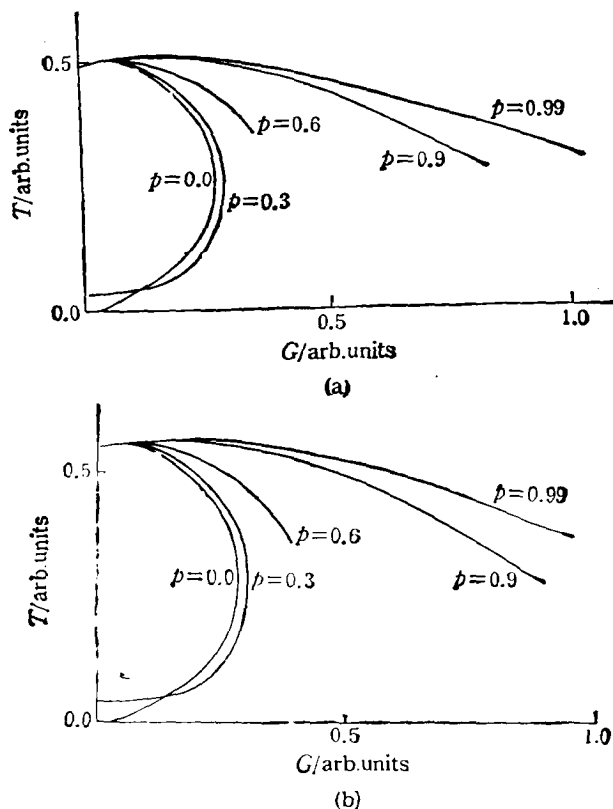


图3 单轴各向异性场的无规横场伊辛模型 ($S=1$) 的 T - G 相图 $A = -0.01$, 其余参数同图2

我们还可注意到随着 A 的减小, 临界温度 T_c 和临界横场 G_c 都急剧减小。当 A 小于某一负值时, T_c 和 G_c 都减小为零, 这时就不可能再出现二级相变。

对于 G 在趋于零的一个很小范围内发生的奇异现象, 反映了高自旋系统中各向异性

场与无规横场共同作用的特征。

至此,我们研究了各向异性场对无规横向伊辛系统的临界行为的影响,得到了一些新的有趣的结果。反映了无序与量子起伏效应之间互相竞争对相图的作用。

- [1] Z. Y. Li and Q. Jiang, *Phys. Lett.*, **A138**(1989), 247.
- [2] H. Rohrer, *Phys. Rev. Lett.*, **34**(1975), 1638.
- [3] V. K. Saxena, *Phys. Lett.*, **A90**(1982), 71.
- [4] T. F. Cassol, W. Figueiredo and J. A. Plascak, *Phys. Lett.*, **A160**(1991), 518.
- [5] T. Yokata, *Phys. Lett.*, **A171**(1992), 134.
- [6] Y. Q. Wang and Z. Y. Li, *J. Phys.: Condense Matter* (in the Press).
- [7] M. Blume, V. J. Emery and R. B. Griffiths, *Phys. Rev.*, **A4**(1971), 1071.
- [8] O. F. De Alcantara Bonfim, *Physica*, **A130**(1985), 367.
- [9] T. Kaneyoshi, *Phys. Stat. Solid. (b)*, **170**(1992), 313.
- [10] 马余强,李振亚,物理学报, **39**(1990), 1480.
- [11] S. T. Dai, Q. Jiang and Z. Y. Li, *Phys. Rev.*, **B42**(1990), 2597.
- [12] T. Morita, *Physica*, **A93**(1979), 566.
- [13] X. L. Zhang, Q. Jiang and Z. Y. Li, *Phys. Lett.*, **A185**(1994), 221.

CRITICAL BEHAVIOR OF RANDOM TRANSVERSE ISING MODEL WITH UNIAXIAL ANISOTROPY FIELD

WANG YONG-QIANG LI ZHEN-YA

(Department of Physics, Suzhou University, Suzhou 215006)

(Received 28 March 1994)

ABSTRACT

We use the method combining pair approximation and the discretized path-integral representation to study the critical behavior of the random transverse Ising model ($S=1$) with uniaxial anisotropy field. The influences of the uniaxial anisotropy field and random transverse field on the phase structure of the system are discussed.

PACC: 7510H; 7510J; 0550