

面心立方格子上自旋 $S=1$ 的 Ising 反铁磁体的基态研究

徐国良 王养璞

苏州大学物理系, 苏州, 215006

1989年10月6日收到

本文发展了文献[1]中提出的利用费密变换求 Ising 模型基态的方法, 根据由费密变换后, 激发态能量大于零求得相边界, 提出了直接比较各真空态能量来求解各基态的相边界. 采用此方法, 研究了具有近邻对相互作用的最一般的自旋 $S=1$ 的 Ising 反铁磁体模型, 严格地求得它在面心立方格子上的基态能量和零温相图. 同时, 还利用多相点方程, 将参数 k, t 平面分成 60 个小区域, 它们分别对应于各个拓扑不等价的零温相图.

PACC: 7550E; 7510H; 6470

一、引言

近年来, 自旋 $S=1$ 的 Ising 模型的研究十分活跃, 其中基态的简并度和相图的研究是一个重要的方面.

在文献[1]中, 本文作者之一采用费密变换方法, 研究了具有次近邻相互作用的自旋 $S=1$ 的 Ising 反铁磁体在面心立方格子上的基态问题, 严格地求得了它的基态能量, 此方法较简便. 后来不少作者采用此方法成功地求得了许多零温相图, 如简单立方、体心立方、六角密排结构的自旋 $S=1$ 的 Ising 模型^[2], 混合自旋模型^[3]和超晶格反铁磁体^[4]等. 然而, 以前文献偏重于自旋取向的向上和向下, 较少涉及自旋取向为零的状态. 本文研究更为复杂的含 5 个参量的 $S=1$ 的 Ising 反铁磁体的基态问题, 考虑了所有自旋取向为零的状态. 在应用费密变换求基态时, 已经证明多费密子系的真空态就是 Ising 体系的基态^[1]. 其求证过程表明: 对某一真空态而言, 它的激发态就是另一些真空态, 如果使每一激发态的能量大于零, 就得到了该真空态作为基态所要求的相边界. 由此可知, 相边界也可从直接比较各真空态的能量求得. 如本文这种复杂的情况, 此方法使计算大为简化, 从而较易求得完整的零温相图.

二、自旋 $S=1$ 的 Ising 模型

具有近邻对相互作用的自旋 $S=1$ 的反铁磁 Ising 模型的最一般形式的哈密顿量^[5]为

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j - K \sum_{\langle i, j \rangle} S_i^2 S_j^2 - L \sum_{\langle i, j \rangle} (S_i S_j^2 + S_i^2 S_j) \\ + D \sum_i S_i^2 - H \sum_i S_i,$$

式中 $J < 0$, $S_i \in \{-1, 0, 1\}$; 求和 $\sum_{\langle i, j \rangle}$ 表示对近邻求和, \sum_i 表示对所有格点求和; 参数 J, H 与通常的 $S = 1/2$ 的 Ising 模型的相互作用常数和外场相同. 当 $L = 0$ 时, 这个模型就约化为 BEG (Blume-Emery-Griffiths) 模型^[6]. $D < 0$ 有利于 $S_i^2 = 0$ 的态出现, $K < 0$ 有利于近邻自旋满足 $S_i S_j = 0$ 的态出现, $L < 0$ 有利于铁磁序 ($S_i = 1$) 出现. 哈密顿量在变换 ($L \rightarrow -L, H \rightarrow -H, S_i \rightarrow -S_i$) 下是不变的. 在零温时, 实际出现的有序态取决于这 5 个参数的竞争结果和所研究的晶格的对称性.

上述自旋 $S = 1$ 的 Ising 模型的重要特点是, 它可描述点阵气体模型的三态, A, B 两种原子和空位或溶剂原子^[7]. 三态点阵气体的哈密顿量为

$$\mathcal{H} = -\phi_{AA} \sum_{\langle i, j \rangle} c_i^A c_j^A - \phi_{AB} \sum_{\langle i, j \rangle} (c_i^A c_j^B + c_i^B c_j^A) \\ - \phi_{BB} \sum_{\langle i, j \rangle} c_i^B c_j^B - \mu_A \sum_i c_i^A - \mu_B \sum_i c_i^B,$$

式中 c_i^i 表示第 i 个格点上某种 (A 或 B) 原子的局域浓度, 只能取 1 (占据) 或零 (不占据) 两个值. 式中 ϕ_{AA}, ϕ_{BB} 为各种相邻原子对的相互作用常数, μ_A, μ_B 为化学势.

三、面心立方格子上的零温相图

在研究面心立方格子上的近邻相互作用的自旋 $S = 1$ 的 Ising 模型时, 可以把整个晶格分成 4 套子格, 近邻数为 12, 如图 1 所示. 其中原胞中的 4 个格点自旋可取 $\pm 1, 0$, 分别用 A, B, O 表示其状态, 这样 $(AAAA)$ 就表示每套子格子的格点自旋都取 +1 的态. 由不同的自旋组合, 可以得到 15 个态.

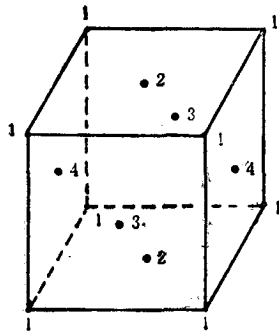


图 1 面心立方格子及其子格子

利用费密变换方法, 容易得到各态的真空态能量. 通过比较真空态能量, 求得与参数空间某一区域对应的各个基态, 各基态的能量和简并度, 见表 1. 由于该模型有 5 个参数, 相界较复杂, 而且随参数变化而变化, 故要把参数空间划分成若干区域来讨论. 用 $|J|$ 约化各参数, 则 $j = -1, 5$ 个参数就约化成 4 个参数 k, l, d, h . 在 h, d 平面

作出零温相图, 每一相图都对应一组参数 (k, l) . 和三角格子^[8]讨论相似, 把参数 k, l 平面分成 4 个大区域, 见表 2. 对每一大区域进行细分, 又可分为 60 个区域, 它们对应于拓扑不等价的反铁磁体的零温相图, 如图 2 所示.

如何将大区域细分呢? 下面提出利用多相点方程来进行. 先将 k, l 平面上大区域 I, II, IV 中各取一点, 由相边界作出 3 个零温相图, 如图 3 (a)–(c) 所示. 通过这些相图的分析, 发现对图 3 (b), 态 $(AAAA), (BAAA), (AABB), (ABBB)$ 之间的相界线可上、下移动. 当态 $(AAAA), (BAAA), (000B), (0000)$ 交于一点时 (见图 4

表 1 态的简并度与基态能量

态	简并度	每一格点的基态能量
(AAAA)	1	$-6(J + K + 2L) + (D - H)$
(BBBB)	1	$-6(J + K - 2L) + (D + H)$
(0000)	1	0
(BAAA)	4	$-6(K + L) + \left(D - \frac{H}{2}\right)$
(ABBB)	4	$-6(K - L) + \left(D + \frac{H}{2}\right)$
(0AAA)	4	$-3(J + K + 2L) + \frac{3}{4}(D - H)$
(0BBB)	4	$-3(J + K - 2L) + \frac{3}{4}(D + H)$
(000A)	4	$\frac{1}{4}(D - H)$
(000B)	4	$\frac{1}{4}(D + H)$
(AABB)	6	$2(J - 3K) + D$
(00AA)	6	$-(J + K + 2L) + \frac{1}{2}(D - H)$
(00BB)	6	$-(J + K + 2L) + \frac{1}{2}(D + H)$
(0BAA)	12	$(J - 3K - 2L) + \frac{1}{4}(3D - H)$
(0ABB)	12	$(J - 3K + 2L) + \frac{1}{4}(3D + H)$
(00AB)	12	$(J - K) + \frac{1}{2}D$

表 2 参数 k, l 平面的 4 大区域

区域	Ising 条件	点阵气体条件
I	$-k - j < 2l < k + j$	$\phi_{AA} > 0$ 和 $\phi_{BB} > 0$
II	$2l > -k - j$ 和 $2l > k + j$	$\phi_{AA} > 0$ 和 $\phi_{BB} < 0$
III	$2l < -k - j$ 和 $2l < k + j$	$\phi_{AA} < 0$ 和 $\phi_{BB} > 0$
IV	$k + j < 2l < -k - j$	$\phi_{AA} < 0$ 和 $\phi_{BB} < 0$

(a)), 有方程组(4 相点方程)

$$h - d = -6(j + k + 2l), \quad h = -12(j + l),$$

$$h + d = 0, \quad h - d = -8(k + l).$$

可得解 $l = (k + 3)/2$, 为 2 个拓扑不等价相图所对应区域的分界线。找出所有可能的

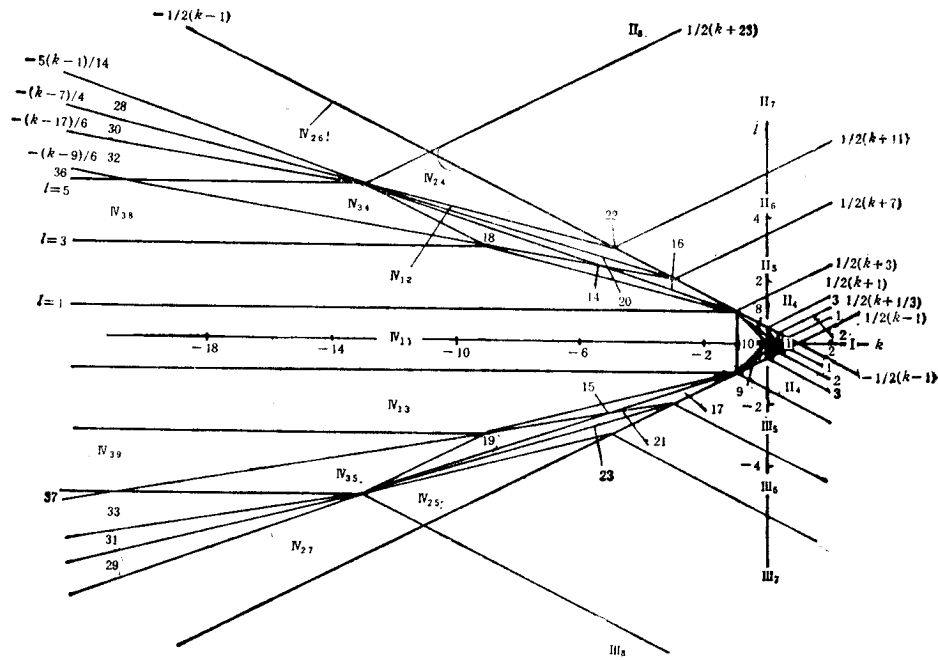


图 2 k, l 平面中对应于拓扑不等价相图的 60 个小区域

多相点方程, 在区域 II 中得到 7 条分界线, 故区域 II 可细分成 8 个小区域, 如图 2 所示. 区域 III 与区域 II 是对称的, 有一样多的小区域. 区域 IV 的划分要复杂得多, 但方法一样. 通过研究其相图 (图 3 (c)), 发现中间态 (0BAA), (0ABB), (00AB) 可以朝 3 个方向, 即分别向态 (AAAA), (BBBB), (0000) 移动, 而且可以消失. 故由 4 相交于一点, 可得若干条分界线. 由某基态逐渐缩小成一点或一条线, 又可得到若干条分界线. 例如由态 (0BAA) 缩小成一条线 (见图 4 (b)), 即下列方程组

$$\begin{cases} 3h - d = -(28l + 12k + 40l), \\ 3h - d = 8(l - k - 2l) \end{cases}$$

有解, 得一分界线 $l = -(k - 9)/6$. 这样, 区域 IV 就可细分成 43 个小区域, 如图 2 所示, 与区域 IV 中的分界线大都是线段而不是射线, 这是由于相图复杂所致. 显然, 区域 I 不能再细分. 这样, k, l 平面就可细分成 60 个小区域, 如图 2 所示. 对应于各个区域的参数范围可画出 60 种拓扑不等价的零温相图. 图 3 所给出的为其中的 3 个零温相图, 有的图很复杂, 含 15 个态, 如图 3 (c); 最简单的也有 6 个态 (图 3 (a)). 另一个特点是, 对于反铁磁体, 不论参数取何值, 态 (AAAA) 都必须经过 3 个中间态 (BAAA), (AABB), (ABBB) 才能转化为态 (BBBB). 从相图可以看出, 面心立方格子要比三角点阵^[5]的情况复杂, 基态由 10 个变为 15 个, 参数平面由 25 个区域变成 60 个区域^[5].

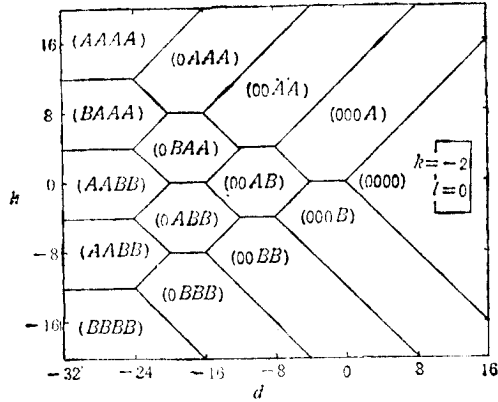
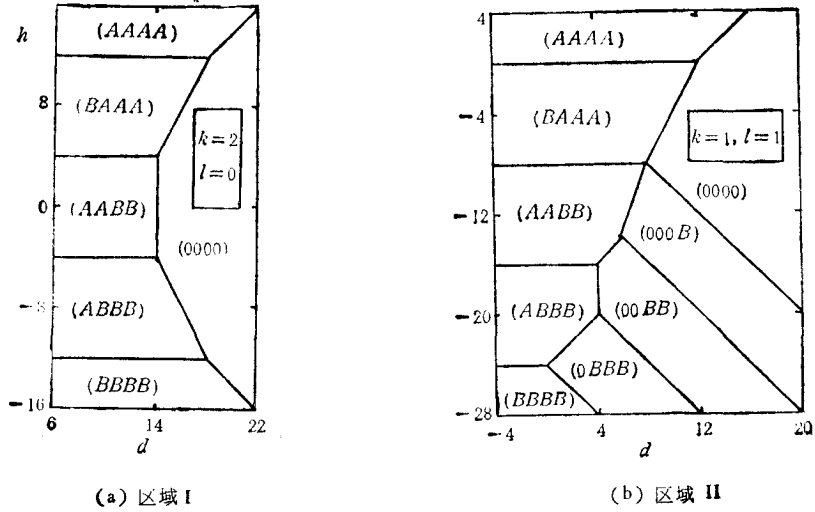


图 3 不同区域中的典型相图



图 4 不同区域中的局部相图

附 录

可以证明,由费密变换后,激发态能量大于零求得相边界和比较各真空态能量来求得各基态的相边界,这两者是等价的.

根据费密变换方法,把 Ising 体系变成粒子数不守恒的费密体系,令 $H_F = U_0 + H_1 + H_2$, 对于态 $(AAAA)$, 得到 $\langle n_{1i}(l_0) \rangle \equiv n_{1i}(l_0) + n_{2i}(l_0)$

$$\begin{aligned}
 U_0 &= N[-6(J + K + 2L) + (D - H)], \\
 H_2 &= [12(J + K - 2L) - (D - H)] \sum_{l_\alpha} n_{12}(l_\alpha) \\
 &\quad + 2[-12(J + L) + D] \sum_{l_\alpha} n_1(l_\alpha) n_2(l_\alpha), \\
 H_4 &= -J \sum_{l_\alpha, l_\beta}^{n_\alpha, n_\beta} n_{12}(l_\alpha) n_{12}(l_\beta) \\
 &\quad - K \sum_{l_\alpha, l_\beta}^{n_\alpha, n_\beta} [2n_{12}(l_\alpha) - n_{12}^2(l_\alpha)][2n_{12}(l_\beta) - n_{12}^2(l_\beta)] \\
 &\quad - L \sum_{l_\alpha, l_\beta}^{n_\alpha, n_\beta} \{[2n_{12}(l_\alpha) - n_{12}^2(l_\alpha)]n_{12}(l_\beta) \\
 &\quad + n_{12}(l_\alpha)[2n_{12}(l_\beta) - n_{12}^2(l_\beta)]\}.
 \end{aligned}$$

下面考虑由态 (AAAA) 到其它 14 种真空态的激发, 由激发能 $H_2 + H_4 > 0$, 可得各相界

- 1) 激发到态 (BAAA) ($n_{12}(l_1) = 2, n_{12}(l_\beta) = 0, \beta = 2-4$)
相界 $h > -12(j + l)$;
- 2) 激发到态 (0AAA) ($n_{12}(l_1) = 1, n_{12}(l_\beta) = 0, \beta = 2-4$)
相界 $h - d > -12(j + k + 2l)$;
- 3) 激发到态 (AABB) ($n_{12}(l_\beta) = 2, \beta = 3, 4$)
相界 $h > -4(2j + 3l)$;
- 4) 激发到态 (00AA) ($n_{12}(l_\alpha) = 1, \alpha = 1, 2$)
相界 $h - d > -10(j + k + 2l)$;
- 5) 激发到态 (0BAA) ($n_{12}(l_1) = 1, n_{12}(l_2) = 2$)
相界 $3h - d > -4(7j + 3k + 10l)$;
- 6) 激发到态 (ABBB) ($n_{12}(l_\beta) = 2, \beta = 2-4$)
相界 $h > -4(j + 3l)$;
- 7) 激发到态 (0ABB) ($n_{12}(l_1) = 1, n_{12}(l_\beta) = 2, \beta = 3, 4$)
相界 $5h - d > -4(7j + 3k + 14l)$;
- 8) 激发到态 (00AB) ($n_{12}(l_\alpha) = 1, \alpha = 1, 2, n_{12}(l_4) = 2$)
相界 $2h - d > -2(7j + 5k + 12l)$;
- 9) 激发到态 (000A) ($n_{12}(l_\alpha) = 1, \alpha = 1-3$)
相界 $h - d > 0$;
- 10) 激发到态 (BBBB) ($n_{12}(l_\alpha) = 2, \alpha = 1-4$)
相界 $h > -12l$;
- 11) 激发到态 (0BBB) ($n_{12}(l_1) = 1, n_{12}(l_\beta) = 2, \beta = 2-4$)
相界 $7h - d > -12(j + k + 6l)$;
- 12) 激发到态 (00BB) ($n_{12}(l_\alpha) = 1, \alpha = 1, 2, n_{12}(l_\beta) = 2, \beta = 3, 4$)
相界 $3h - d > -2(5j + 5k + 14l)$;
- 13) 激发到态 (000B) ($n_{12}(l_\alpha) = 1, \alpha = 1-3, n_{12}(l_4) = 2$)
相界 $5h - 3d > 31j + 8k + 40l$;
- 14) 激发到态 (0000) ($n_{12}(l_\alpha) = 1, \alpha = 1-4$)
相界 $h - d > -6(j + k + 2l)$,

其中到态 (00AA), (000A), (AABB), (ABBB) 的激发是不可能的.

同样, 根据表 1 中各真空态的能量, 由于态 (AAAA) 的能量小于其它各真空态的能量, 也能得出以上结果.

- [1] 王养璞, 物理学报, **32**(1983), 875.
[2] 王养璞、王庆蔚, 苏州大学学报(自然版), **3**(1987), 61;
王选章, 哈尔滨师范学报(自然版), (2)(1985), 32;
王养璞、徐国良, 苏州大学学报(自然版), **5**(1989), 256;
[3] 王选章, 物理学报, **37**(1988), 1707.
[4] 钟健、杨瑞青、熊诗杰, 低温物理学报, **9**(1987), 17;
王选章、赵晏, 低温物理学报, **11**(1989), 23.
[5] J. B. Collins, P. A. Rikvold, E. T. Gawlinski, *Phys. Rev.*, **B38**(1988), 6741.
[6] M. Blume, V. J. Emery and R. B. Griffiths, *Phys. Rev.*, **A4**(1971), 1071.

GROUND STATE STUDY OF SPIN $S=1$ ISING ANTIFERROMAGNETIC MODEL ON FACE-CENTRED CUBIC LATTICE

XU GUO-LIANG WANG YANG-PU

Department of Physics, Suzhou University, Suzhou, 215006

(Received 6 October 1989)

ABSTRACT

This paper develops the method presented in reference (1) where the Fermion transformation is used to obtain the ground state of the Ising model. According to that after the Fermion transformation, the phase boundary can be obtain using the condition that energy of excited state is greater than zero, we propose that phase boundary can be obtain by directly comparing the energy of the vacuum state. Using this method, we study the most general spin $S=1$ Ising antiferromagnetic model with nearest neighbor interaction, and obtain rigorously the ground state energy and the 0K phase diagram of the model on fcc lattice. Meanwhile, using equation of many phase point, we divide the plane of parameter k, l into 56 regions, which correspond to topologically distinct 0K phase diagrams.

PACC: 7550E; 7510H; 6470