

# 镶嵌正方晶格上 Gauss 模型的相图\*

孙春峰†

(孝感学院物理与电子信息工程学院, 孝感 432000)

(2011 年 6 月 7 日收到; 2011 年 11 月 2 日收到修改稿)

利用等效变换和自旋重标相结合的方法, 研究了镶嵌正方晶格上的 Gauss 模型. 研究发现, 该系统可以变换为正方晶格上具有最近邻和次近邻相互作用的 Gauss 系统, 由此严格求得了镶嵌正方晶格上 Gauss 模型的临界温度, 得到了该系统的精确相图.

**关键词:** 镶嵌正方晶格, Gauss 模型, 等效变换, 相图

**PACS:** 68.35.Rh, 75.10.Hk

## 1 引言

从理论上研究相变的晶格系统大体可分为两类. 一类是具有迭代对称(扩展对称)的分形晶格, 另一类是具有平移对称结构的晶格. 采用近代相变理论的方法<sup>[1-4]</sup>, 对分形晶格上离散自旋模型(如 Ising 模型, Potts 模型, Heisenberg 模型)和连续自旋模型(如 Gauss 模型,  $S^4$  模型)的相变进行了广泛的研究, 获得了较多的结果<sup>[5-15]</sup>. 对平移对称晶格上自旋模型的相变研究, 典型而有影响的是 1944 年对正方晶格上不含外磁场的二维 Ising 模型在计及最近邻相互作用情况下给出的 Onsager 解<sup>[16]</sup>. 此后, 人们又严格求解了其他格子(如准一维链及三角、六角格子等)上的自旋系统<sup>[17,18]</sup>. Lackova 和 Horiguchi<sup>[19]</sup> 在正方晶格上考虑 3 自旋和 5 自旋 Ising 相互作用, 得出在某些情况下相当于八顶角模型的结论. Wang 和 Kong<sup>[20]</sup> 严格求解了  $d$  维 ( $d = 1, 2, 3$ ) 超立方晶格和二维三角晶格上具有长程作用的 Gauss 模型, 得到了长程相互作用对系统临界温度的影响与其衰减快慢有关的结论.

近年来, 对镶嵌晶格的研究受到人们重视. 在这类晶格中, 镶嵌正方晶格<sup>[21]</sup> 是一种平移对称晶格. 该晶格能反映出自然界更广泛、更一般的特征, 更接近具有平移对称晶格的实际, 能够较好地模拟

实际晶格系统的复杂相互作用, 反映出实际晶体复杂相互作用的一般特征, 是自然界具有平移对称晶体的理想化晶格. 因而, 对该晶格上自旋系统相变问题的研究具有十分重要的理论意义. 在已有的工作中, 对自旋取分立值的离散自旋模型的临界性质做了一些研究, 得到了一些有意义的结果<sup>[21-23]</sup>, 但对其上取连续自旋模型的研究却少见报道. 本文利用等效变换和自旋重标相结合的方法, 讨论镶嵌正方晶格上自旋取连续值的 Gauss 模型的临界行为, 进一步研究了该晶格系统的相变性质.

## 2 模型

对于如图 1 所示的正方晶格, 若在两相邻格点之间镶嵌一个格点, 在每个格点上设置自旋变量, 考虑自旋变量之间的最近邻相互作用和次近邻相互作用, 并假设次近邻相互作用在格子中交替存在, 即构成了本文所要研究的镶嵌正方晶格. 显然, 这种晶格由元胞 A 和元胞 B 交错铺展而成, 具有平移对称结构, 如图 2 所示. 元胞 A 中存在最近邻和次近邻相互作用, 元胞 B 中只有最近邻相互作用. 若无外场存在, 考虑元胞 A 构成的子系统, Gauss 模型的有效 Hamilton 量为<sup>[24]</sup>

\* 湖北省教育厅科学技术计划研究重点项目(批准号: D200726001)资助的课题.

† E-mail: sun439@sina.com

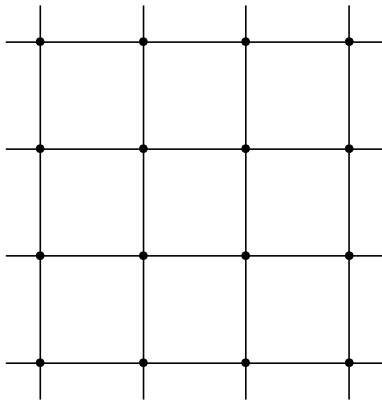


图1 正方晶格结构

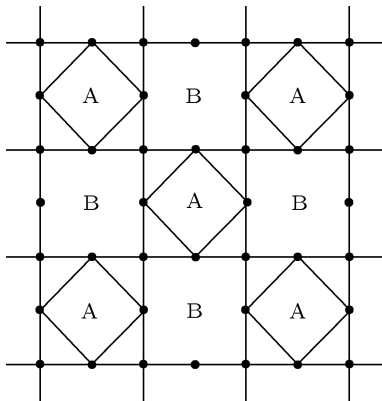


图2 具有两种元胞的镶嵌正方晶格上格点自旋间的相互作用

$$H_{\text{eff}}^A = K_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + K_2 \sum_{\langle m,n \rangle} S_m S_n - \frac{b}{2} \sum_i S_i^2 \quad (-\infty \leq S_i, S_j, S_m, S_n \leq +\infty). \quad (1)$$

(1) 式中,  $S_i$  表示任意格点  $i$  上的 Gauss 自旋变量,  $b$  是 Gauss 分布常数,  $K_1 = \frac{J_1}{k_B T}$  表示两个最近邻格点  $\langle i, j \rangle$  自旋  $S_i$  和  $S_j$  的相互作用,  $K_2 = \frac{J_2}{k_B T}$  表示两个次近邻格点  $\langle m, n \rangle$  自旋  $S_m$  和  $S_n$  的相互作用, 其中  $k_B$  是 Boltzmann 常数,  $T$  是热力学温度,  $J_1$  和  $J_2$  分别为最近邻自旋和次近邻自旋的交换积分. 因而镶嵌正方晶格系统的有效 Hamilton 量为

$$H_{\text{eff}} = H_{\text{eff}}^A. \quad (2)$$

故系统的配分函数可写为

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_i dS_i \exp(H_{\text{eff}}). \quad (3)$$

### 3 格点自旋消约变换

考察任一元胞 A 中格点自旋相互作用, 为方便, 格点标记如图 3 所示. 对元胞 A 构成的子系统,  $H_{\text{eff}}^A$  亦可表示为对晶格中所有元胞 A 的有效 Hamilton 量  $H_{\text{eff}}^{\text{cell}}$  求和, 而

$$H_{\text{eff}}^{\text{cell}} = H_1 + H_2 + H_3. \quad (4)$$

这里

$$H_1 = K_1 (S_1 S_5 + S_5 S_2 + S_2 S_6 + S_6 S_3 + S_3 S_7 + S_7 S_4 + S_4 S_8 + S_8 S_1), \quad (5)$$

$$H_2 = K_2 (S_5 S_6 + S_6 S_7 + S_7 S_8 + S_8 S_5), \quad (6)$$

$$H_3 = -\frac{b}{2} \left[ \frac{1}{2} (S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 + S_4^2) + S_5^2 + S_6^2 + S_7^2 + S_8^2 \right]. \quad (7)$$

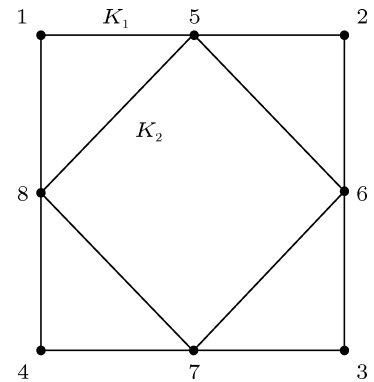


图3 元胞 A 中格点及其自旋相互作用

因为格点 1, 2, 3, 4 是重整化方法中的外点, 故 (7) 式中  $(S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 + S_4^2)$  乘上了  $1/2$  因子. 采用部分格点自旋消约变换<sup>[25]</sup>, 将格点 5, 6, 7, 8 处的自旋变量消去, 则元胞 A 变换为如图 4 所示 (图 4 中的点  $P_1, P_2, P_3, P_4$  分别对应图 3 中的点 1, 2, 3, 4) 的正方元胞.

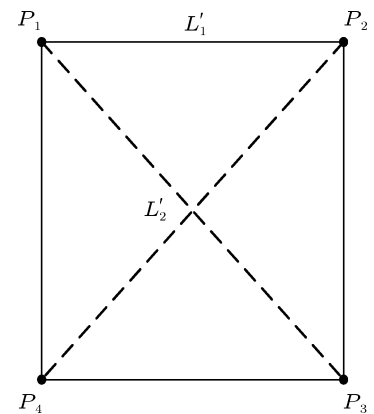


图4 元胞 A 变换后的自旋相互作用

对连续自旋变量  $S_i$  积分, 其积分运算由下式给出:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(H_{\text{eff}}^{\text{cell}}) dS_5 dS_6 dS_7 dS_8 = C \exp(H'), \quad (8)$$

式中,  $C$  是变换常数,  $H'$  是变换后正方元胞的有效 Hamilton 量,  $H'$  可表示为

$$H' = L'_1(S'_1S'_2 + S'_2S'_3 + S'_3S'_4 + S'_4S'_1) + L'_2(S'_1S'_3 + S'_2S'_4) - \frac{b}{4}(S_1'^2 + S_2'^2 + S_3'^2 + S_4'^2). \quad (9)$$

这里,  $S'$  为变换后的自旋变量,  $L'_1$  和  $L'_2$  分别表示变换后的最近邻和次近邻相互作用参数, 它们有下列关系:

$$S'_i = \xi S_i \quad (i = 1, 2, 3, 4), \quad (10)$$

$$L'_1 = \frac{K_1^2}{(b - 2K_2)\xi^2}, \quad (11)$$

$$L'_2 = \frac{2K_1^2K_2}{b(b - 2K_2)\xi^2}, \quad (12)$$

其中

$$\xi = \sqrt{1 - \frac{2K_1^2}{b^2} - \frac{2K_1^2}{b(b - 2K_2)}}. \quad (13)$$

实际上, 上述过程是一个自旋重标过程, 而 (11) 和 (12) 式是将原 Hamilton 量中的相互作用参数  $K_1, K_2$  变为新的相互作用参数  $L'_1, L'_2$  所进行的等效变换.

对于元胞 B, 元胞 A 与元胞 B 交错铺展, 格点自旋是公共的, 在元胞 A 的格点自旋消约变换后, 元胞 B 上的格点自旋随着元胞 A 的等效变换而自然地变换成如图 5 所示的正方元胞. 为保持系统在变换后的均匀性, 考虑可解的 Gauss 自旋作用情形, 变换后元胞 B 上最近邻格点自旋间的相互作用同样是  $L'_1$ , 而次近邻格点自旋间的相互作用为  $L$ , 且满足<sup>[21]</sup>  $L = L'_2$ . 在这种情形下, 元胞 A 构成的子系统和元胞 B 构成的子系统都变换成具有相同最近邻相互作用  $L'_1$  和相同次近邻相互作用  $L'_2$  的正方晶格, 亦即具有  $K_1, K_2$  相互作用的镶嵌正方 Gauss 晶格变换成为等效的具有  $L'_1$  和  $L'_2$  相互作用的正

方 Gauss 晶格.

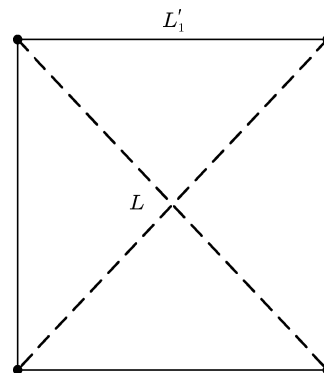


图 5 元胞 B 变换后的自旋相互作用

## 4 临界温度

设晶格常数为  $a$ , 元胞总数为  $N$ , 则  $a^d$  为  $d$  维超立方的元胞体积,  $V = Na^d$  为总体积.  $d$  维超立方晶格上 Gauss 模型的配分函数为<sup>[26]</sup>

$$Z(K) = \prod_{\mathbf{k}} \left[ \frac{2\pi V a^d}{b - B(\mathbf{k})} \right]^{1/2}. \quad (14)$$

这里,  $K = \frac{J}{k_B T}$  为最近邻格点自旋的相互作用参数,  $J$  为交换积分,  $\mathbf{k} = (k_1, k_2, \dots, k_d)$  为动量空间波矢, 而

$$B(\mathbf{k}) = \sum_{i,j} K(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)], \quad (15)$$

式中  $(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$  为格点  $i$  到格点  $j$  的矢量. 当  $i, j$  为最近邻格点时

$$B(\mathbf{k}) = \sum_{\langle i,j \rangle} K(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)]. \quad (16)$$

(16) 式中求和对最近邻格点进行, (16) 式还可以写为

$$B(\mathbf{k}) = K[\exp(ik_1a) + \exp(-ik_1a) + \exp(ik_2a) + \exp(-ik_2a) + \cdots + \exp(ik_da) + \exp(-ik_da)] = 2K(\cos k_1a + \cos k_2a + \cdots + \cos k_da). \quad (17)$$

故系统的自由能为

$$F = -k_B T \ln Z(K) = -\frac{1}{2} k_B T \sum_{\mathbf{k}} \ln[b - B(\mathbf{k})] - \frac{1}{2} k_B T \sum_{\mathbf{k}} \ln(2\pi V a^d). \quad (18)$$

(18) 式即为自旋间只存在最近邻相互作用时,  $d$  维超立方 Gauss 晶格自由能的严格解, 此时系统的热力学性质都可由  $F$  导出. (18) 式是对对数函数求和, 故对任意  $\mathbf{k}$  都应保证  $b - B(\mathbf{k}) \geq 0$ , 而第二项求和后与  $\mathbf{k}$  无关, 奇异性必出现在  $B(\mathbf{k}) \rightarrow b$  处, 即

$$b = B_{\max}(\mathbf{k}) = B(\mathbf{k} = 0). \quad (19)$$

由 (19) 式便可确定系统的临界温度. 利用上述结果可以得到具有最近邻和次近邻相互作用 Gauss 模型的严格解.

对正方 Gauss 晶格,  $d = 2$ . 在计及最近邻和次近邻相互作用时, 每一格点有 4 个最近邻格点和 4 个次近邻格点. 最近邻格点间距  $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| = a$ , 次近邻格点间距  $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| = \sqrt{2}a$ . 按 (15) 式将等效变换后的新相互作用参数做 Fourier 变换, 有

$$L'(\mathbf{k}) = \sum_{i,j} L'(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)], \quad (20)$$

于是有

$$\begin{aligned} L'(\mathbf{k}) &= L'_1[\exp(ik_1a) + \exp(-ik_1a) \\ &\quad + \exp(ik_2a) + \exp(-ik_2a)] \\ &\quad + L'_2\{\exp[i(k_1a + k_2a)] \\ &\quad + \exp[-i(k_1a + k_2a)] \\ &\quad + \exp[i(k_1a - k_2a)] \\ &\quad + \exp[-i(k_1a - k_2a)]\} \\ &= L'_1(2 \cos k_1a + 2 \cos k_2a) + L'_2[2 \cos(k_1a \\ &\quad + k_2a) + 2 \cos(k_1a - k_2a)]. \end{aligned} \quad (21)$$

当  $k_1 = k_2 = 0$  时,  $L'(\mathbf{k}) = L'_{\max}(\mathbf{k})$ , 有

$$L'_{\max}(\mathbf{k}) = L'(0) = 4L'_1 + 4L'_2. \quad (22)$$

由 (19) 式可知, 系统的临界点由  $L'_{\max}(\mathbf{k}) = b$  确定, 即

$$4L'_1 + 4L'_2 = b. \quad (23)$$

将 (11), (12) 代入 (23) 式, 考虑到 (13) 式, 即可得到镶嵌正方 Gauss 晶格系统临界点相互作用参数间的关系为

$$\frac{bK_{1c}^2 + 2K_{1c}^2K_{2c}}{b^3 - 2b^2K_{2c} - 4bK_{1c}^2 + 4K_{1c}^2K_{2c}} = \frac{1}{4}. \quad (24)$$

整理后得

$$\frac{K_{2c}}{b} = \frac{1 - 8(K_{1c}/b)^2}{2 + 4(K_{1c}/b)^2}, \quad (25)$$

其中,

$$K_{1c} = \frac{J_1}{k_B T_c},$$

$$K_{2c} = \frac{J_2}{k_B T_c},$$

$T_c$  即为严格求得的镶嵌正方晶格上 Gauss 模型的临界温度.

## 5 相图

以  $K_{1c} = \frac{J_1}{k_B T_c}$  为纵坐标,  $K_{2c} = \frac{J_2}{k_B T_c}$  为横坐标作图, 得到镶嵌正方晶格上 Gauss 模型的相图, (图 6).

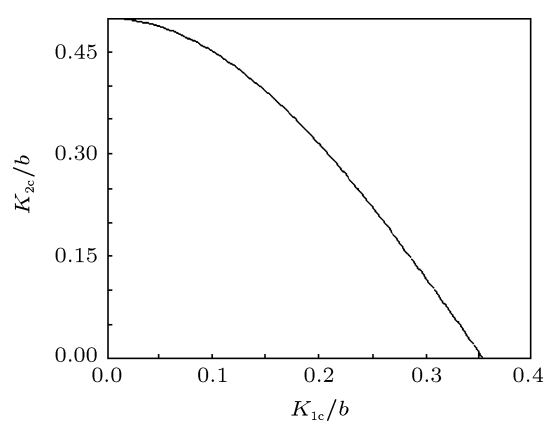


图 6 镶嵌正方 Gauss 晶格系统的相图

从相图可以看出, 当  $T < T_c$  时, 自发磁化强度不为零, 系统处于铁磁相, 对应于相图曲线的上部空间. 当  $T \geq T_c$  时, 自发磁化强度等于零, 系统处于顺磁相, 对应于相图曲线及曲线的下部空间. 当  $K_{2c} = 0$  时, 只存在  $K_{1c}$ , 对应只计及最近邻相互作用情况, 此时的临界点为  $K_{1c} = \sqrt{2}b/4$ .

## 6 结论

格点自旋消约方法是一种精确的重正化群方法, 在一些迭代型晶格 (hierarchical lattice) 中常被采用, 而对一些平移对称晶格往往不能通过简单地积分掉一些自旋实现标度变换<sup>[26]</sup>. 本文采用该方法成功实现了将镶嵌正方 Gauss 晶格变换成等效的正方 Gauss 晶格, 由于正方晶格上的 Gauss 系统可严格求解, 因而可得到镶嵌正方晶格上 Gauss 模型的严格解.

- [1] Ma S K 1976 *Modern Theory of Critical Phenomena* (London: Benjamin)
- [2] Goldenfeld N 1992 *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group* (Massachusetts: Addison-Wesley)
- [3] Cardy J 1998 *Scaling and Renormalization in Statistical Physics* (London: Cambridge University)
- [4] Stanley H E 1999 *Rev. Mod. Phys.* **71** 5358
- [5] Yang Z R 1996 *Fractal Physics* (Shanghai: Shanghai Scientific and Technological Education Publishing House) (in Chinese) [杨展如 1996 分形物理学 (上海: 上海科技教育出版社)]
- [6] Li S, Yang Z R 1997 *Phys. Rev. E* **55** 6656
- [7] Zhu J Y, Yang Z R 1999 *Phys. Rev. E* **59** 1551
- [8] Kong X M, Yang Z R 2004 *Phys. Rev. E* **69** 016101
- [9] Sun C F 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 3768 (in Chinese) [孙春峰 2005 物理学报 **54** 3768]
- [10] Yin X C, Yin H, Kong X M 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4901 (in Chinese) [尹训昌, 尹慧, 孔祥木 2006 物理学报 **55** 4901]
- [11] Li Y, Kong X M, Huang J Y 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1364 (in Chinese) [李英, 孔祥木, 黄家寅 2002 物理学报 **51** 1364]
- [12] Liu J, Kong X M, Li Y P, Huang J Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2275 (in Chinese) [刘杰, 孔祥木, 李永平, 黄家寅 2004 物理学报 **53** 2275]
- [13] Kong X M, Lin Z Q, Zhu J Y 2000 *Sci. Chin. A* **30** 661 (in Chinese) [孔祥木, 林振权, 朱建阳 2000 中国科学 A **30** 661]
- [14] Lin Z Q, Kong X M 2001 *Chin. Phys. Lett.* **18** 882
- [15] Zou W K, Kong X M, Wang C Y, Gao Z Y 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4874 (in Chinese) [邹维科, 孔祥木, 王春阳, 高中扬 2010 物理学报 **59** 4874]
- [16] Onsager L 1944 *Phys. Rev.* **65** 117
- [17] Baxter R J 1982 *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (New York: Academic)
- [18] Zhang S J, Jiang J J, Liu Y J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 531 (in Chinese) [张松俊, 蒋建军, 刘拥军 2008 物理学报 **57** 531]
- [19] Lackova L, Horiguchi T 2003 *Physica A* **319** 311
- [20] Wang C Y, Kong X M 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4365 (in Chinese) [王春阳, 孔祥木 2005 物理学报 **54** 4365]
- [21] Sun C F, Kong X M, Yin X C 2006 *Commun. Theor. Phys.* **45** 555
- [22] Strecka J, Jascur M 2002 *Phys. Rev. B* **66** 174415
- [23] Strecka J, Jascur M 2003 *J. Magn. Magn. Mater.* **260** 415
- [24] Berlin T H, Kac M 1952 *Phys. Rev.* **86** 821
- [25] Hu B 1982 *Phys. Rep.* **91** 233
- [26] Yang Z R 2007 *Quantum Statistical Physics* (Beijing: Higher Education Press) pp298, 299, 313 (in Chinese) [杨展如 2007 量子统计物理学 (北京: 高等教育出版社) 第 298, 299, 313 页]

## The phase diagram of the Gauss model on a decorated square lattice\*

Sun Chun-Feng<sup>†</sup>

(School of Physics and Electronic Information Engineering, Xiaogan University, Xiaogan 432000, China)

(Received 7 June 2011; revised manuscript received 2 November 2011)

### Abstract

Using equivalent transformation and spin-rescaling methods, the Gauss model on a decorated square lattice is studied. It is found that the square decorated Gauss lattice could be transformed into a regular square Gauss lattice with nearest-neighbor, and next-nearest-neighbor interactions. By calculating the regular square-lattice Gauss model, the critical temperature of the Gauss model is obtained on a decorated square lattice, and the exact phase diagram of this system can also be obtained.

**Keywords:** decorated square lattice, Gauss model, equivalent transformation, phase diagram

**PACS:** 68.35.Rh, 75.10.Hk

\* Project supported by the Key Program of Science and Technology Research of the Education Bureau of Hubei Province, China (Grant No. D200726001).

<sup>†</sup> E-mail: sun439@sina.com