

三维 Ising 模型的封闭近似解 (III)

用高阶超复数改进数值结果的可能性

石 赫 郝柏林

(中 国 科 学 院)

1980 年 11 月 26 日收到

提 要

在分析 Ising 模型二维严格解和三维 Q 近似^[1]的基础上, 讨论统计配分函数解析表达式应当具备的各种性质. 在此基础上探讨引用高阶超复数从数值上改进 Q 近似所得结果的可能性, 为构造高低温之间的配分函数的内插公式作好准备.

一、引 言

我们在上一篇文章^[2]中, 用反例说明了不存在循现有途径解决三维 Ising 问题的转角映象. 然而这并不排除存在着其它超复数或代数系统 A , 使 $\varphi \rightarrow A$ 的映象给出比四元数体 Q 更好的近似封闭表达式的可能性. n 阶超复数是 2^n 维的代数. $n = 1$ 时这是普通复数. $n = 2$ 时就是文献 [1] 中引用的四元数 Q . $n = 3$ 时是八元数或双四元数. $n = 4$ 时是狄拉克矩阵或 Clifford 代数等等. 为了引用它们来从数值上改进以往的结果, 须要建立无规行走转角与代数元素的对应关系. 本文在不具体写出这种对应关系的前提下, 讨论配分函数表达式应当具有的一些性质, 并且将证明, 一切 n 为奇数的超复数应当排除在外. 因此, 四元数 Q 是可以用来逼近三维 Ising 模型解的最简单的代数.

本文只考虑简立方晶格.

二、配分函数的一般形式

Q 近似的配分函数(归算到每个自旋)可以写成

$$\ln \lambda = \ln 2 - \frac{3}{2} \ln(1 - u^2) + S(u), \quad (1)$$

其中

$$S(u) = \frac{1}{2(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln D(u, \theta) d\theta_1 d\theta_2 d\theta_3, \quad (2)$$
$$D = 1 + \sum_{i=1}^6 A_i u^i,$$

$$\begin{aligned} A_1 &= -\Sigma_1, \quad A_2 = 3, \quad A_3 = 2\Sigma_1 + (2 - \sqrt{2})\Sigma_3, \\ A_4 &= 3 + 2(\sqrt{2} - 1)\Sigma_2, \quad A_5 = (4\sqrt{2} - 5)\Sigma_1, \\ A_6 &= 57 - 40\sqrt{2}. \end{aligned} \quad (3)$$

这里出现的三种余弦组合(本文中其余弦 $\cos \vartheta_i$ 简记为 c_i)为

$$\begin{aligned} \Sigma_1 &= 2(c_1 + c_2 + c_3), \\ \Sigma_2 &= 4(c_1 \cdot c_2 + c_2 \cdot c_3 + c_3 \cdot c_1), \\ \Sigma_3 &= 8c_1 \cdot c_2 \cdot c_3. \end{aligned} \quad (4)$$

它们对于立方对称是很自然的。(3)式作为较好的高温近似,其展开式直到 u^6 次项给出准确结果(见文献[1])。

通常代数或超复系统 A 有复数域 C 或实数域 R 上的矩阵表示,使得最初定义在不可约代数 A 上的矩阵,成为更高阶的 C 或 R 上的矩阵,因此能使用行列式等等概念。定义在 A 上的转移矩阵的阶仍为 6,这是简立方格子的配位数决定的。如果代数 A 可用 C 上的 $n \times n$ 矩阵表示,则要计算一个 $k = 6n$ 阶的行列式,它导致 u 的 k 阶多项式。文献[1]中从 $\mathfrak{M}_6(Q)$ 上的计算(见文献[1]附录一)转到 $\mathfrak{M}_{12}(C)$ 上普通行列式的计算(见文献[1]附录二)就是一例。

这样,(3)式应成为 $k = 6n$ 次的多项式

$$D = 1 + \sum_{i=1}^k A_i(\theta) u^i, \quad (5)$$

其中自然要出现高阶的角度组合

$$A_i(\theta) = \sum_j x_{ij} \Theta^j, \quad (6)$$

$$\Theta^j = \Sigma_1^{j_1} \cdot \Sigma_2^{j_2} \cdot \Sigma_3^{j_3}, \quad j = (j_1, j_2, j_3). \quad (7)$$

(6)式中 x_{ij} 是一批数值系数。本文要着重说明:不必具体规定所用的复代数和转角映象规则,只须充分利用从 Q 近似和三维 Ising 模型级数展开解^[3]所积累的知识,并经常与二维严格解对比,提出若干合理的假定或猜测,就可以得到一批确定(6)式系数 x_{ij} 的代数条件,减少未知项的数目。将(5)式代入(2)式后,它也可以看作用三重傅里叶级数逼近准确配分函数时的前若干项。

1. 奇偶考虑

余弦组合(7)式分为奇偶两组。奇者如 $\Sigma_1, \Sigma_3, \Sigma_1 \Sigma_2, \Sigma_2 \Sigma_3, \Sigma_1^3$ 等等;偶者如 $\Sigma_2, \Sigma_1^2, \Sigma_1 \Sigma_3, \Sigma_2^2, \Sigma_1 \Sigma_2 \Sigma_3$ 等等。将(5)式代入(2)式作高温展开时,一切奇组合的角度积分为零。为了保证最终的高温展开式中只有 u 的偶次幂,我们必须要求 A_i 中当 i 为奇数时只有奇组合, i 为偶数时只有偶组合。这个要求可以缩写为(6)式的求和条件

$$j_1 + 2j_2 + 3j_3 = i \pmod{2}. \quad (8)$$

二维严格解和 Q 近似的配分函数都满足这一条件。

用(7)式表示的各阶余弦组合都是完全的。 n 阶组合有 n 个。它和直接从余弦的立方对称式写出的组合,只差一个适当的线性变换。例如, $n = 4$ 时,有

$$16(c_1^2 c_2 c_3 + c_1 c_2^2 c_3 + c_1 c_2 c_3^2) = \Sigma_1 \cdot \Sigma_3,$$

$$16(c_1^2 c_2^2 + c_2^2 c_3^2 + c_3^2 c_1^2) = \Sigma_2^2 - 2\Sigma_1 \cdot \Sigma_3,$$

$$16(c_1^3 c_2 + c_1 c_2^3 + c_2^3 c_3 + c_2 c_3^3 + c_3^3 c_1 + c_3 c_1^3) = \Sigma_1^2 \Sigma_2 - 2\Sigma_2^2 - \Sigma_1 \Sigma_3,$$

$$16(c_1^4 + c_2^4 + c_3^4) = \Sigma_1^4 - 4\Sigma_1^2 \Sigma_2 + 2\Sigma_2^2 + 4\Sigma_1 \Sigma_3.$$

我们将视方便而定,混用两种表示办法.

2. 高低温之间的变换

在文献 [2] 中已经指出,任何改进 Q 近似的企图,都必须改善低温行为. 现在考虑这一要求. 引入低温变量 $x = \frac{1-u}{1+u}$, 将配分函数^[1]用它表示出来,写成

$$\ln \lambda = -\frac{3}{2} \ln x + \ln \Lambda(x), \quad (9)$$

其中

$$\ln \Lambda(x) = 3 \ln(1+x) - 2 \ln 2 + S\left(\frac{1-x}{1+x}\right) \quad (10)$$

的展开式目前已经计算到 x^{40} 项^[3]. (10) 式中最后一项就是积分 (2) 式,只不过对于 (5) 式中一般的 k , 我们把积分前的系数 $1/2$ 改记为 q . 于是

$$\ln \Lambda(x) = (3 - qk) \ln(1+x) - 2 \ln 2 + \frac{q}{2\pi^3} \iiint \ln \sum_{i=0}^k B_i x^i d\theta_1 d\theta_2 d\theta_3, \quad (11)$$

其中 B_i 由下式定义 ($A_0 \equiv 1$):

$$\sum_{i=0}^k B_i x^i \equiv \sum_{i=0}^k A_i (1-x)^i (1+x)^{k-i}. \quad (12)$$

实际上,它们是与 (6) 式类似的余弦幂的线性组合

$$B_i = \sum_{l=0}^k T_{il} A_l = \sum_{l=0}^k T_{il} \sum_j x_{lj} \Theta^j \equiv \sum_j y_{ij} \Theta^j. \quad (13)$$

可见 y_{ij} 是 x_{ij} 的线性组合. 阶数依赖于 k 的常数矩阵 (T_{il}), 可以具体计算出来,

$$T_{il} = \sum_{n=0}^l \sum_{j=0}^{k-l} (-1)^n c_n^l c_j^{k-l} \delta_{i, k-l+n}. \quad (14)$$

这里 δ_{ij} 是 Kronecker 符号. 从 (11) 式中分出与 x 无关的 B_0 项后,由于 $\ln \Lambda(0) = 0$, 必须有

$$\frac{q}{(2\pi)^3} \iiint \ln B_0 d\theta_1 d\theta_2 d\theta_3 = 2 \ln 2. \quad (15)$$

这样, (11) 式本身变成

$$\ln \Lambda(x) = (3 - qk) \ln(1+x) + \frac{q}{(2\pi)^3} \iiint \ln \left(1 + \sum_{i=1}^k \frac{B_i}{B_0} x^i\right) d\theta_1 d\theta_2 d\theta_3. \quad (16)$$

对于一切有严格解的二维 Ising 模型(不限于四角格子),相应于 $B_0 \equiv D(u=1)$ 的量都是与角度无关的常数. 这是与二维时存在对偶变换密切相关的一条性质. 三维下不存在类似的对偶变换. 我们做一项重要猜测,即对于三维简立方格子, B_0 仍是与角度无关的常数. 这一要求导致 x_{ij} 间的一组线性关系. 于是由 (15) 式得

$$B_0 = 4^{1/q}. \quad (17)$$

如果这一猜测不成立, 至少应要求 B_0 不含有余弦幂的奇组合, 才能保证 $\ln \Lambda(x)$ 展开式中不出现奇次项. 这时下面的大部分讨论原则上仍能通过, 但计算中出现复杂得多的含余弦幂组合有理分式的三重积分. 我们尚未全面分析由此引起的后果.

注意到 $\ln \Lambda(x)$ 的展开式中只有偶次幂, 我们必须进一步要求

$$qk = 3. \quad (18)$$

(关于这一要求的合理性和 k 的具体选择, 以后还要讨论.) 这时 (16) 式中剩下的积分具有与高温展开 (2) 式完全相似的结构. 因此, 同样由奇偶考虑得知, (13) 式中的 i 亦应满足 (8) 式.

B_i 和 A_i 均应满足 (8) 式, 这对它们的结构提出新的限制. 例如, 在 $k = 24$ 情形下要求偶 B_i 中不含有奇 A_j , 由 (13) 式导致如下齐次方程组:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 230 & 150 & 86 & 38 & 6 & -10 \\ 7084 & 2604 & 556 & -84 & -84 & 44 \\ 67298 & 9842 & -1102 & -350 & 322 & -110 \\ 245157 & -2097 & -2907 & 1445 & -603 & 165 \\ 326876 & -34884 & 6460 & -1700 & 540 & -132 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 + A_{23} \\ A_3 + A_{21} \\ A_5 + A_{19} \\ A_7 + A_{17} \\ A_9 + A_{15} \\ A_{11} + A_{13} \end{bmatrix} = 0.$$

系数矩阵的行列式等于 -2^{60} , 故得

$$A_i = -A_{k-i} \quad (i = 1, 3, 5, \dots). \quad (19a)$$

类似地, 要求奇 B_i 中不含有偶 A_j , 相应齐次方程组的系数矩阵行列式等于 -2^{72} , 导致

$$A_i = A_{k-i} \quad (i = 0, 2, 4, \dots). \quad (19b)$$

(19) 式对于其它 k 值也是成立的. 把它代回 (13) 式中, 可以看出 B_i 也满足类似条件

$$B_i = (-1)^i B_{k-i} \quad (i = 0, 1, 2, \dots). \quad (20)$$

现在回到 (11) 式中引入的 q . 文献 [1] 中在复数域上求得的 12×12 行列式, 恰是 $\mathcal{Q}$ 体上直接计算结果的平方, 因此代回 $S(u)$ 时要开一次方, 这相当于取 $q = 1/4$, 满足 (18) 式. 一般情形下, 须开 n 次方而有 $q = 1/2n$, (17) 式成为

$$B_0 = 4^{2n}. \quad (21)$$

3. “主子式”考虑和回到二维严格解的条件

采用具有 $n \times n$ 的复矩阵表示的代数后, 配分函数被积表达式仍由以下形式的行列式决定(参看文献 [1] 中 (14) 和 (A.20) 诸式).

$$D = \det(I - u\Lambda_1\Lambda_0).$$

为了讨论回到二维严格解的条件, 我们考虑各向异性情形. 这时可把温度因子 u, v, w 并入矩阵 Λ_0 , 仍记为 Λ_0 . 以 $k = 12$ 为例, 有

$$\Lambda_0 = \text{diag}[ue^{i\theta_1}, ue^{i\theta_1}, ue^{-i\theta_1}, ue^{-i\theta_1}, ve^{i\theta_2}, ve^{i\theta_2}, ve^{-i\theta_2}, ve^{-i\theta_2}, we^{i\theta_3}, we^{i\theta_3}, we^{-i\theta_3}, we^{-i\theta_3}], \quad (22)$$

于是

$$D = \det(\Lambda_0^{-1} - \Lambda_1) \cdot \det \Lambda_0 = u^4 \cdot v^4 \cdot w^4 \cdot \det(\Lambda_0^{-1} - \Lambda_1). \quad (23)$$

在矩阵 $\Lambda_0^{-1} - \Lambda$ 的主对角线上为

$$\left(\frac{e^{-i\theta_1}}{u} - 1\right), \left(\frac{e^{-i\theta_1}}{u} - 1\right), \dots, \left(\frac{e^{i\theta_3}}{w} - 1\right), \left(\frac{e^{i\theta_3}}{w} - 1\right),$$

其它元素中均不出现 u, v, w , 也没有对角度 θ_i 的依赖性. 由此出发, 不把代数 A 具体化, 即可讨论 D 中 u, v, w 一定幂次的系数中可能出现那些角度组合. 它们由 $\Lambda_0^{-1} - \Lambda$ 的各阶主子式决定. 仍看 $k = 12$ 的情形. 我们的考虑对象可以象征性地记为

$$u^4 v^4 w^4 \left(\frac{1}{u} \frac{1}{u} \frac{1}{u} \frac{1}{u}, \frac{2}{v} \frac{2}{v} \frac{2}{v} \frac{2}{v}, \frac{3}{w} \frac{3}{w} \frac{3}{w} \frac{3}{w} \right). \quad (24)$$

以四次项为例. 从 (24) 式括号中不取 4 个因子的方式有 $\binom{12}{4} = 495$ 种. 它们可以按整数 4 的分割划分为四组:

(4, 0, 0) 类, 共 3 种, 即 u^4, v^4, w^4 各项;

(3, 1, 0) 类, 共 $6 \binom{4}{3} \binom{4}{1} = 96$ 种, 即 $u^3 v c_1 c_2$ 型的各项. 在各向同性情形下归并为 $u^4 \Sigma_2$ 项;

(2, 2, 0) 类, 共 $3 \binom{4}{2} \binom{4}{2} = 108$ 种, 又分属 $u^2 v^2 c_1^2 c_2^2, u^2 v^2 c_1^2, u^2 v^2$ 三种类型. 各向同性情形下分别归并为 $u^4 (\Sigma_2^2 - 2 \Sigma_1 \Sigma_3), u^4 (\Sigma_1 - 2 \Sigma_2), u^4$ 项;

(2, 1, 1) 类, 共 $3 \binom{4}{2} \binom{4}{1} \binom{4}{1} = 288$ 种, 由 $u^2 v w c_1^2 c_2 c_3$ 和 $u^2 v w c_2 c_3$ 两种类型的项组成. 在各项同性情形下, 分别归并为 $u^4 \Sigma_1 \Sigma_3$ 和 $u^4 \Sigma_2$ 项.

我们看到, 四阶余弦组合中没有出现 Σ_1^4 和 $\Sigma_1^2 \Sigma_2$ 项. 事实上, 由 (24) 式看出, $k = 12$ 时不可能有 c_i^3 以上因子.

为了回到二维严格解, 应与 Onsager 解

$$D_2 = (1 + u^2)(1 + v^2) - 2u(1 - v^2)c_1 - 2v(1 - u^2)c_2 \quad (25)$$

的平方对比. 结果发现 D_2^2 中并没有对应 (2, 2, 0) 类中 $u^2 v^2 c_1^2 c_2^2$ 型的项, 因此 A_4 中 Σ_2^2 项的系数必须为零. 用同样的办法可以证明, A_2 中 Σ_2 项的系数为零等等. 这样 $k = 12$ 时一般有

$$A_4 = x_{40} + x_{42} \Sigma_2 + x_{41} \Sigma_1^2 + x_{43} \Sigma_1 \Sigma_3.$$

如果把上面讨论中“不取”一词改为“只取”, 则所得的角度组合仍是相同的, 但是已经对应 8 次项即 A_8 的情形. 这是与 (19b) 式的要求一致的.

一般情形下, 对应 $k = 6n$ 的余弦组合中只能出现 c_i^n 以内的幂次. 仅此一条即限制了 A_i 中所能遇到的余弦组合类型. 与二维严格解的相应方次 D_i^n 对比后, 又可确定一批等于零的 x_{ij} . 事实上, 由于 Q 近似的高温展开直到 u^6 项是准确的, 还可以与相应 D^n 比较, 确定更多的 x_{ij} .

4. $D(u, \theta)$ 的零点性质

无论对于二维严格解或三维 Q 近似, 配分函数的奇异点均出现在 $\theta_i = 0$ 处, 而且是 $D \equiv D(u, \theta = 0)$ 的二重零点. 图 1 中绘出二维严格解的 D 函数对于 $\theta_i = 0, \pi/2$ 和 π

三种角度值的曲线. 只有 $\theta_i = 0$ 的一条曲线在 $u = u_c$ 处有二重零点. 这是对铁磁情形, 即 Ising 模型中耦合常数 $J > 0$ 而言. 对于 $J < 0$ 的反铁磁情形, 各曲线的形状不变, 但依次对应 $\theta_i = \pi, \pi/2$ 和 0 , 只有 $\theta_i = \pi$ 的曲线有二重零点. 如果把 Q 近似的 $D(u, \theta)$ 画出来, 定性图象是相同的, 只是低温端 ($u \rightarrow 1$) 三条曲线的顺序与图 1 不同. 角度 θ 也可以看作波矢, 在第一布里渊区中取值, 而 $D(u, \theta)$ 可以看成与温度有关的谱, 以 θ 为参量画出后, 在 $u = u_c$ 处出现了软模. 铁磁情形下, 软模出现在布里渊区中心, 即 $\theta_i = 0$ 处. 而反铁磁情形下, 软模出现在布里渊区边缘 $\theta_i = \pi$ 处. 这当然是与铁磁理论的一般观念相一致的.

以上考虑有助于我们进一步限制配分函数中的系数 x_{ij} .

首先, 一般情形下 u_c 也必须是 $D(u, \theta = 0) = 0$ 的偶重根, 否则在 u_c 附近就会出现 $D \leq 0$ 的区域, 使 $S(u)$ 积分下的 $\ln D$ 失去意义.

其次, 二维严格解和三维 Q 近似还有一个共同特点, 就是 $D(u, \theta)$ 都蜕化为另一个多项式的完全平方. 我们要求 (5) 式仍然具有这一性质. 引入记号

$$a_i \equiv A_i(\theta = 0), \quad (26)$$

这些 a_i 都是 x_{ij} 的线性组合. 由完全平方条件

$$D(u, \theta) = \sum_{i=0}^k a_i u^i = [P(u)]^2, \quad (27)$$

其中 (注意 $k/2 = 3n$)

$$P(u) = \sum_{i=0}^{3n} b_i u^i, \quad (28)$$

和 (19) 式的推论

$$a_i = (-1)^i a_{k-i}, \quad (29)$$

立即可以得到 b_i 之间的一批关系. 例如由 $a_0 = a_k = 1$, 得

$$b_0^2 = b_{3n}^2 = 1. \quad (30)$$

我们当然有自由取 $b_0 = 1$. 由 $a_1 = -a_{k-1}$ 等等, 得

$$b_j = (-1)^j b_{3n-j} \cdot b_{3n} \quad (j = 1, 2, \dots),$$

特别是

$$b_j^2 = b_{3n-j}^2 \quad (j = 1, 2, \dots).$$

当 n 为奇数时, 由 $a_{3n} = 0$ 可以推得 $b_{3n} = 0$, 这与 (30) 式矛盾. 这就排除了 $k = 6n$ 中一切奇数 n . 此外, 为了使 $P(u)$ 在区间 $(0, 1)$ 上有单 (或奇数) 重根, $P(0)$ 与 $P(1)$ 必须反号. 由 $P(0) = b_0 = 1$, 而 $[P(1)]^2 = B_0$, 因此必须保证

$$P(1) = 1 + \sum_{i=1}^{3n} b_i = -4^n, \quad (31)$$

这是对 b_i (即 x_{ij}) 的限制.

再者, (30) 式中 $b_{3n} = \pm 1$ 的两种取法, 有着完全不同的定性结果. 为了保证在整个 $u(0, 1)$ 区间上只有一个铁磁相变点, 必须取 $b_{3n} = -1$. 这是因为 $b_{3n} = +1$ 时有

$$b_{2j} = b_{3n-2j}, \quad b_{2j+1} = -b_{3n-(2j+1)} \quad (j = 1, 2, \dots),$$

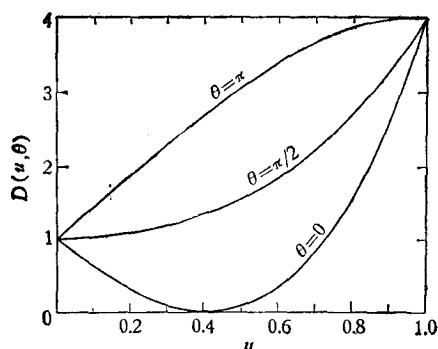
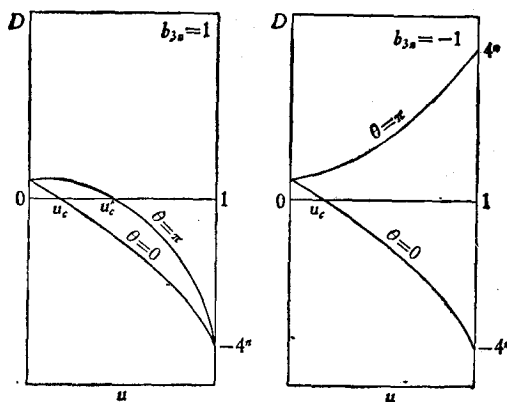
图 1 二维严格解的 $D(u, \theta)$ 曲线

图 2

而 $b_{3n} = -1$ 时, 相反有

$$b_{2j} = -b_{3n-2j}, \quad b_{2j+1} = b_{3n-(2j+1)}, \quad (j = 1, 2, \dots).$$

因此 (31) 式成立的方式, 当 $b_{3n} = +1$ 时为

$$\sum_j b_{2j} = -4^n, \quad \sum_j b_{2j+1} = 0,$$

而 $b_{3n} = -1$ 时为

$$\sum_j b_{2j} = 0, \quad \sum_j b_{2j+1} = -4^n.$$

于是

$$P(u, \theta = 0) = \sum_j b_{2j} u^{2j} + \sum_j b_{2j+1} u^{2j+1}$$

在区间 $(0, 1)$ 两端总是反号, 中间可能有奇数个根, 而

$$P(u, \theta = \pi) = \sum_j b_{2j} u^{2j} - \sum_j b_{2j+1} u^{2j+1}$$

只有 $b_{3n} = -1$ 时, 才可能不在 $(0, 1)$ 区间上另有一个根。

$P(u)$ 多项式的这两种行为, 定性地绘在图 2 中。顺便指出, $b_{3n} = 1$ 时, 有可能用 (5) 式给出统一的配分函数, 描述相继的两个相变点, 其中一个为铁磁相变, 一个是反铁磁相变。这种可能性值得以后注意。

最后, 选择 x_{ij} 的数值时, a_i 和 b_i 也就同时定下来。这时当然应使 u_c 的位置尽可能靠近从级数展开估计所得的 $u_c = 0.2181$ 处。

三、关于比热奇异性

把配分函数中 $S(u)$ 积分的被积表达式在奇异点, 即 $u = u_c$ 和 $\theta_i = 0$ 附近展开。如果 u_c 是 m 重零点 (前面已讲过, m 必须是偶数), 同时角度 θ_i 的组合从 n 次式开始系数不为零, 就应有

$$S(u) \sim \int d\theta \ln(t + b f_n(\theta)), \quad (32)$$

其中 $t = a(u - u_c)^m$, 而 $f_n(\theta)$ 是 θ_i 的 n 次齐次式. 由于它们来自 $\cos\theta_i$ 的展开, n 也必须是偶数, 例如, $n = 4$ 时, 是 $\theta_1^4 + \theta_2^4 + \theta_3^4$ 和 $\theta_1^2\theta_2^2 + \theta_2^2\theta_3^2 + \theta_3^2\theta_1^2$ 的线性组合. 将 (32) 式对 t 微分两次

$$\frac{\partial^2 S}{\partial t^2} \sim \int d\theta \frac{1}{[t + bf_n(\theta)]^2},$$

做变量代换 $\theta \rightarrow t^{\frac{1}{n}}\theta$, 于是

$$\frac{\partial^2 S}{\partial t^2} \sim t^{\frac{d}{n}-2} \int \frac{d\theta}{[1 + bf_n(\theta)]^2}, \quad (33)$$

其中 d 是积分的维数, 后面是一个与温度无关的数值积分. 由 (33) 式知道, 比热的奇异性部分(注意, 换算到以 u 为自变量)

$$C \sim \frac{\partial^2 S}{\partial u^2} \sim (u - u_c)^{\frac{md}{n}-2} \sim (u - u_c)^{-\alpha},$$

于是比热临界指数为

$$\alpha = 2 - \frac{md}{n}. \quad (34)$$

对于二维 Onsager 解, $m = n = 2$, (34) 式给出对数奇异性 $\alpha = 0$; 对于三维 Q 近似, 仍有 $m = n = 2$, 得 $\alpha = -1$. 在 $d = 3$ 时, 如果 m, n 不取极其特殊, 从而更没有物理根据的值, 就不可能接近目前从级数展开和重正化群技术^[4]估算的 α 值. 即使要求 $\alpha = 0$, 最简单的取法 $m = 4, n = 6$, 也意味着 $D(u, \theta)$ 应以 u_c 为四重零点, 并须另外满足三个代数条件, 使在 $\theta = 0$ 附近的展开式中, 不出现 $f_2(\theta)$ 项和两种 $f_4(\theta)$ 的组合.

这样, 无论取什么样的代数, 即任何形式的 (5) 式, 如果不附加新的非物理的条件, 一般也得不到临界指数 α 为小正数的结果. 看来似应有一个 $k \rightarrow \infty$ 的求和过程, 使 D 超越多项式的形式, 展开后出现非整数的 m 和 (或) n , 才能得到正确的 α 值. 同时, D 的形式必须保证在回到二维时, 仍成为 (5) 式那样的多项式. 人们从这一角度可以再次体会到三维 Ising 模型严格解的难度.

参 考 文 献

- [1] 石赫、许以超、郝柏林, 物理学报, **27** (1978), 47.
- [2] 石赫、郝柏林, 物理学报, **29** (1980), 1564.
- [3] C. Domb, 在 C. Domb 和 M. S. Green 主编的 "Phase Transitions and Critical Phenomena" 第三卷中的文章, Academic Press. (1974).
- [4] 于渌、郝柏林, 物理学报, **24** (1975), 187.

CLOSED-FORM APPROXIMATION FOR THE 3-DIMENSIONAL ISING MODEL (III)

THE POSSIBILITY OF IMPROVING THE NUMERICAL RESULTS WITH
HYPERCOMPLEX NUMBER SYSTEMS

SHI HE

(Institute of System Science, Academia Sinica)

HAO BAI-LIN

(Institute of Theoretical Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

Possible properties of the analytic expression for the partition function are analyzed on the basis of 2-dimensional rigorous solution and the 3-dimensional Q-approximation for the Ising model. The possibility to improve the numerical results by using high order hypercomplex numbers is discussed to get ready for deriving an interpolation formula for the partition function between low and high temperature limits.