

一维互作用扭折-声子气体的统计理论

杨 振 青

(南开大学物理系)

1980年2月9日收到

提 要

本文系统地研究并改进了位移型相变中一维互作用扭折-声子气体模型的统计理论。通过对扭折和声子的配分函数各自采用适当的路径积分表式并改进声子路径积分的计算方法,得到一个较合理且较普遍的巨配分函数表达式。在基态近似下,它可简化为一个与文献[6]相似的结果;在经典近似下,由它计算出的平均扭折密度与计算机模拟实验结果^[1]比文献上的符合得要好。

一、引 言

一维位移型铁电晶体的哈密顿量为

$$H = \sum_i \left(\frac{1}{2} P_i^2 - \frac{k^2}{2} \phi_i^2 + \frac{u}{4} \phi_i^4 \right) + \sum_{ij} \frac{1}{2} C_{ij} (\phi_i - \phi_j)^2 \dots, \quad (1)$$

其中 ϕ_i , P_i 分别代表第 i 个离子偏离平衡位置的位移和动量,第二、第三两项分别表示单体势的简谐项和非谐项,第四项为相互作用势或弹性势。

由于简谐项系数为负,单体势是一个双阱势。离子可在势阱之一中作谐振动。同时,当弹性势超过阱深时,离子还可由一个势阱飞越到另一个势阱。因此,离子运动的动力学特性,必然是这两种运动的综合表现。这就是 Schneider 和 Stoll^[1]在电子计算机模拟实验中首先得出的重要结论。

基于这一思想, Krumhansl 和 Schrieffer^[2], 还有 Aubry^[3] 分别在连续近似下求解一维位移场经典运动方程,果然得到两类特解。一类是简谐波解,描述离子在势阱中的小振动,对应通常的声振动模式。另一类是扭折解,描述离子从一个势阱飞越到另一个势阱的运动,对应所谓的中心模式。他们采用自由扭折-声子混合气体模型,对离子的上述两种运动进行综合处理,定性解释了临界点附近出现的中心峰和软模阻尼现象^[4]。后来, Koehler 等^[5] 再次进行计算机模拟实验以考核 K-S 理论,他们得到的位移场分布曲线,更为直观地显示了两种运动的存在,并证实 K-S 理论基本上是正确的。同时,他们也提出了计及散射态及声子衣作用的必要性。

最近, Mazenko 和 Sahni^[6] 对此进行了详细的研究,解决了散射态的贡献问题,但在声子衣作用方面,存在问题。他们没有注意声波解的速度条件是 $v_p > c_0$, 在 $\partial\phi/\partial z' = 0$ 的动坐标系中 $x' = (x - vt)/\sqrt{1 - \beta^2}$ ($\beta = v_p/c_0$) 为虚数,因而声波解具有实指数形式

$$\psi = \psi_0 \exp \left\{ \pm \frac{\sqrt{2k}}{c_0} x' \right\}.$$

他们的声子路径积分中的拉氏密度用了 $\partial\psi/\partial t' = 0$ 的动坐标系, 但却误用了静止积分限 $0 \rightarrow l$ (l 为实数), 因而得到的实际是指数解的阵迹而不是声子配分函数. 这导致他们的扭折能量的声子修正项与温度的关系是不可靠的. 另外, 在他们的声子路径积分形式下, 基态近似实际成了基波近似, 使模型过于简单. 本文是要在他们的工作基础上, 改进并完善这一理论. 文中改正了声子配分函数的路径积分表式, 并采用了较普遍的计算方法. 还计及了所有模式声波的贡献. 得到一个较合理和较普遍的巨配分函数表达式, 它在基态近似下, 可退化为改正的文献^[6]的结果, 而在高温近似下, 由它计算出的平均扭折密度与计算机实验结果比文献上的符合得都要好.

二、模 型

由于拉氏密度是洛伦兹标量密度, 在场论中较适用, 下面改用拉氏函数来代替 (1) 式的哈密顿量.

对相互作用常数 C_{ij} 取紧邻近似

$$C_{ij} = \begin{cases} C & \text{当 } j = i \pm 1, \\ 0 & \text{其他情形.} \end{cases} \quad (2)$$

并过渡到连续极限, 得到位移场拉氏函数为

$$L\{\phi\} = \int_0^l dx \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial\phi}{\partial t} \right)^2 - \frac{c_0^2}{2} \left(\frac{\partial\phi}{\partial x} \right)^2 + \frac{k^2}{2} \phi^2 - \frac{u}{4} \phi^4 \right], \quad (3)$$

其中 $c_0 = \sqrt{c}a$ 是单体势为 0 时的声速, a 是离子间距, 在这里取作 1. l 是离子链全长.

由 (3) 式可得位移场经典运动方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial L}{\partial \phi'} - \frac{\partial L}{\partial \phi} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - c_0^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - k^2 \phi + u\phi^3 = 0. \quad (4)$$

(4) 式对变换

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad t' = \frac{t - \frac{v}{c_0^2} x}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad (5)$$

为不变. 其中 $\beta = v/c_0$, v 为位移场传播速度. 取动坐标系, 则有 $\partial\phi/\partial t' = 0$, (4) 式化为

$$c_0^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x'^2} + k^2 \phi - u\phi^3 = 0. \quad (4')$$

(4') 式有两常数特解

$$\phi = \begin{cases} 0, \\ \pm \frac{k}{\sqrt{u}}, \end{cases} \quad (6)$$

对应能量为

$$V\{\phi\} = \begin{cases} 0, \\ -\frac{k^4}{4u}l. \end{cases} \quad (7)$$

前一解为不稳定解;后一解为真空态,对应的能量 $-k^4/4ul = E_{vac}$ 为真空态能量.

(4') 式另有非常数特解^[7]

$$\phi = \pm \frac{k}{\sqrt{u}} \tanh \left[\frac{k}{\sqrt{2}c_0} (x' - x'_0) \right]. \quad (8)$$

变到静坐标系则为

$$\phi = \pm \frac{k}{\sqrt{u}} \tanh \left[\frac{k}{\sqrt{2}} \frac{x - x_0 - v_k t}{\sqrt{c_0^2 - v_k^2}} \right]. \quad (8')$$

(8) 和 (8') 式分别称为扭折和孤立波. v_k 为波速.

另外,若将位移参考点移至阱谷,则新位移

$$\psi = \phi \mp \frac{k}{\sqrt{u}},$$

(3) 式用新位移表出,得到

$$L\{\psi\} = \frac{k^4}{4u}l + \int_0^l dx \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2 - \frac{c_0^2}{2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 - k^2 \psi^2 + o(\psi^3) \right]. \quad (9)$$

由 (9) 式得到经典运动方程

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - c_0^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + 2k^2 \psi + o(\psi^2) = 0. \quad (10)$$

当 ψ 甚小,高次项 $o(\psi^2)$ 可忽略,则 (10) 式化为

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - c_0^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + 2k^2 \psi = 0. \quad (11)$$

取动坐标系,则有

$$c_0^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x'^2} - 2k^2 \psi = 0. \quad (11')$$

此方程的解为

$$\psi = \psi_0 \exp \left[\pm \frac{\sqrt{2}k}{c_0} x' \right]. \quad (12)$$

变到静坐标系则为

$$\psi = \psi_0 \exp \left[\pm i \sqrt{2}k \frac{x - v_p t}{\sqrt{v_p^2 - c_0^2}} \right]. \quad (12')$$

这就是通常的声波,波数及频率分别为

$$q = \frac{\sqrt{2}k}{\sqrt{v_p^2 - c_0^2}}, \quad (13)$$

$$\omega = qv_p. \quad (14)$$

它们满足色散关系

$$\omega^2 = 2k^2 + q^2 c_0^2. \quad (15)$$

根据边界条件, q 可取 N 个值

$$q_i = \left(\frac{j\pi}{l}\right) \quad j = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N/2. \quad (16)$$

每对 $\pm q_i$ 的行波形成一列驻波, 因而 (11) 式的通解为

$$\psi = \sum_{j=1}^{N/2} A_j \sin\left(\frac{j\pi x}{l}\right) e^{i\omega_j t}, \quad (17)$$

$$\omega_j^2 = 2k^2 + \left(\frac{j\pi}{l}\right)^2 c_0^2, \quad j = 1, 2, \dots, N/2, \quad (18)$$

其中 A_j 是初始位移分布函数的傅氏正弦级数的展开系数.

根据文献 [5] 计算机模拟实验所得位移场分布曲线, 取 n 个扭折乘积与全部驻波叠加构成通解

$$\phi = \varphi + \psi, \quad (19)$$

其中

$$\varphi = \frac{k}{\sqrt{u}} \prod_{i=1}^n \varphi_i = \frac{k}{\sqrt{u}} \prod_{i=1}^n \tanh\left[\frac{k}{\sqrt{2}c_0}(x' - x'_i)\right], \quad (20)$$

$$\psi = \sum_{j=1}^{N/2} \psi_j = \sum_{j=1}^{N/2} A_j \sin\left(\frac{j\pi x}{l}\right) e^{i\omega_j t}. \quad (21)$$

将 (19) 式代入 (3) 式, 得到

$$\begin{aligned} L\{\varphi + \psi\} = \int_0^l dx \left\{ \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 - \frac{c_0^2}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + \frac{k^2}{2} \varphi^2 - \frac{u}{4} \varphi^4 \right] \right. \\ \left. + 4 \left[-\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} + c_0^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + k^2 \varphi - u \varphi^3 \right] + \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2 \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{c_0^2}{2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 - k^2 \psi^2 \right] - \left[\frac{3}{2} (u \varphi^2 - k^2) \psi^2 + u \varphi \psi^3 + \frac{u}{4} \psi^4 \right] \right\}. \quad (22) \end{aligned}$$

对于 (22) 式中的第一方括号, 在温度不太高扭折密度不太大, 扭折不重叠的情况下, 在任意一扭折 φ_i 的宽度内, 其余扭折 $\varphi_j = \pm 1$ ($j \neq i$), 所以有

$$\begin{aligned} \int_0^l \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 - \frac{c_0^2}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + \frac{k^2}{2} \varphi^2 - \frac{u}{4} \varphi^4 \right] dx \\ = \sum_{i=1}^n \frac{k^2}{u} \int_{\Delta_i} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} \right)^2 - \frac{c_0^2}{2} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \right)^2 + \frac{k^2}{2} \varphi_i^2 - \frac{k^2}{4} \varphi_i^4 \right] dx, \end{aligned}$$

其中 Δ_i 是以 x'_i 为中心的扭折宽度. 进一步考虑到在 Δ_i 以外区间上, $\varphi_i = \pm 1$, 可将积分限由 Δ_i 扩大到 $0 \rightarrow l$ 而不改变扭折拉氏函数值 (只增加真空能). 于是可改写

$$\begin{aligned} \int_0^l \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 - \frac{c_0^2}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + \frac{k^2}{2} \varphi^2 - \frac{u}{4} \varphi^4 \right] dx \\ = \sum_{i=1}^n \frac{k^2}{u} \int_0^l \left[-\frac{c_0^2}{2} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x'} \right)^2 + \frac{k^2}{2} \varphi_i^2 - \frac{k^2}{4} \varphi_i^4 \right] dx' \quad (23) \end{aligned}$$

(22) 式第二方括号对经典路径 φ_c 为零, 可不计.

对于 (22) 式中第三个方括号, 由于三角级数项的正交性, 即

$$\int_0^l \sin\left(\frac{j\pi x}{l}\right) \sin\left(\frac{j'\pi x}{l}\right) dx = \int_0^l \cos\left(\frac{j\pi x}{l}\right) \cos\left(\frac{j'\pi x}{l}\right) dx = 0,$$

当 $j \neq j'$ 导致驻波的独立性, 即有

$$\begin{aligned} & \int_0^l \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 - \frac{c_0^2}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 - k^2 \phi^2 \right] dx \\ &= \sum_{j=1}^{N/2} \int_0^l \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi_j}{\partial t} \right)^2 - \frac{c_0^2}{2} \left(\frac{\partial \phi_j}{\partial x} \right)^2 - k^2 \phi_j^2 \right] dx. \end{aligned} \quad (24)$$

进一步将 ϕ_j 分离变量, 令

$$\phi_j(x, t) = \phi_j(x) \phi_j(t). \quad (25)$$

由边界条件, 有

$$\int_0^l \phi_j^2(x) dx = \int_0^l \frac{1}{q^2} \left(\frac{\partial \phi_j(x)}{\partial x} \right)^2 dx = \frac{l}{2}. \quad (26)$$

此 $l/2$ 可并入 A_j 中, 于是有

$$\int_0^l \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi_j}{\partial t} \right)^2 - \frac{c_0^2}{2} \left(\frac{\partial \phi_j}{\partial x} \right)^2 - k^2 \phi_j^2 \right] dx = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi_j(t)}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{2} \omega_j^2 \phi_j^2(t). \quad (27)$$

即每一列驻波作为一个整体可视作一谐振子

$$\phi_j(t) = \left(\frac{l}{2} \right)^{1/2} A_j e^{i\omega_j t} = A'_j e^{i\omega_j t}. \quad (28)$$

所以得到

$$\int_0^l \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 - \frac{c_0^2}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 - k^2 \phi^2 \right] dx = \sum_{j=1}^{N/2} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi_j(t)}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{2} \omega_j^2 \phi_j^2(t) \right]. \quad (29)$$

对于 (22) 式中的第四方括号, 其中的非相互作用项, 可如前处理. 其中的相互作用项, 考虑到扭折是以一定速度扫过驻波, 积分号下的含 φ 的因子, 可用位置平均值代替. 因而有

$$\begin{aligned} & \int_0^l \left[\frac{3}{2} (u\varphi^2 - k^2)\phi^2 + u\varphi\phi^3 + \frac{u}{4} \phi^4 \right] dx \\ &= \sum_{j=1}^{N/2} \left\{ \phi_j^2(t) \left[-\frac{3k^2}{2} + \frac{3k^2}{2l} \sum_{i=1}^n \int_{x'_i} \varphi_i^2 dx' \right] + \frac{3}{4} \frac{u}{l} \phi_j^4(t) \right\}. \end{aligned} \quad (30)$$

根据以上处理, (22) 式可写成

$$L\{\phi\} = \sum_{i=1}^n L_{ki} + \sum_{j=1}^{N/2} L_{pj} + \sum_{j=1}^{N/2} V_{Ij}, \quad (31)$$

其中

$$L_{ki} = -\frac{k^2}{u} \int_0^{l'} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x'} \right)^2 - \frac{k^2}{2} \varphi_i^2 + \frac{k^2}{4} \varphi_i^4 \right] dx', \quad (32)$$

$$L_{pj} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi_j}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{2} \omega_j^2 \phi_j^2, \quad (33)$$

$$V_{Ij} = -\frac{3k^2}{2l} \phi_j^2 \sum_{i=1}^n \int_{x'_i} \varphi_i^2 dx' + \frac{3k^2}{2} \phi_j^2(t) - \frac{3u}{4l} \phi_j^4 \quad (34)$$

分别为自由单扭折、自由谐振子的拉氏函数及它们的相互作用势(其中包括单体势的微扰项)。上式表明,系统可以看作有相互作用的(指扭折声子间)扭折-声子气体,作为巨正则系综进行统计处理。

三、统计处理

扭折和声子都是元激发,数目都不固定,因而它们的化学势都为零,于是系综的密度矩阵为

$$\rho_G(\phi_2, \phi_1) = \sum_{n,s} \frac{1}{Z_G} \Psi_s\{\phi_2\} e^{-\beta \hat{H}} \Psi_s^*\{\phi_1\}, \quad (35)$$

其中 Z_G 是巨配分函数, n 是子系综扭折数, s 是能量本征态量子数。

对应 (31) 式,总哈密顿量可表为自由单扭折、自由谐振子的哈密顿量及它们的相互作用势之和。同时,总本征波函数可用自由单扭折、自由谐振子的本征波函数乘积的完备系表示,于是 (35) 式可表为

$$\begin{aligned} \rho_G(\phi_2, \phi_1) = & \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{1}{Z_G} \left\{ \sum_s \prod_{i=1}^n \Psi_s\{\phi_{i2}\} \right. \\ & \times \left[\prod_{j=1}^{N/2} \Psi_s\{\phi_{j2}\} e^{-\beta(\hat{A}_{pj} + \hat{V}_{ij})} \Psi_s^*\{\phi_{j1}\} \right] e^{-\beta \hat{H}_{kl}} \Psi_s^*\{\phi_{i1}\} \Big\}, \end{aligned} \quad (36)$$

其中除以 $n!$ 是由于 n 个扭折互换位置不产生新态。花括号内是 n 个扭折与全部谐振子组成的子系综的密度矩阵。现在要把它表为路径积分^[8,9]。

对于下述形式的哈密顿量:

$$H = \frac{1}{2} P^2 + V(q). \quad (37)$$

演化算符 $e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$ 的谱表示可表为路径积分如下:

$$g(q_2, q_1, t) = \sum_s \Psi_s(q_2) \Psi_s^*(q_1) e^{-\frac{i}{\hbar} E_s t} = \int_{q_1}^{q_2} \mathcal{D}q \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t L(q', q, t) dt \right\}. \quad (38)$$

仿此,密度矩阵可用路径积分表出为

$$\rho(q_2, q_1, \beta \hbar) = \sum_s \Psi_s\{q_2\} e^{-\beta \hat{H}} \Psi_s^*\{q_1\} = \int_{q_1}^{q_2} \mathcal{D}q \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^{-i\beta \hbar} L(q', q, t) dt \right\}. \quad (39)$$

对于自由谐振子

$$L_{pj} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi_j}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{2} \omega_j^2 \phi_j^2.$$

所以有

$$\rho_{Cj}(\phi_{j2}, \phi_{j1}, \beta \hbar) = \int_{\phi_{j1}}^{\phi_{j2}} \mathcal{D}\phi_j \exp \left\{ \frac{-1}{\hbar} \int_0^{\beta \hbar} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi_j}{\partial \xi} \right)^2 + \frac{1}{2} \omega_j^2 \phi_j^2 \right] d\xi \right\}, \quad (40)$$

其中引进了变量变换 $\xi = it$ 。而正则配分函数

$$\begin{aligned} Z_{Cpj} = & \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{Cj}(\phi_{j2}, \phi_{j1}, \beta \hbar) d\phi_{j1} \\ = & \int_{-\infty}^{\infty} d\phi_{j1} \int_{\phi_{j1}}^{\phi_{j1}} \mathcal{D}\phi_j \exp \left\{ \frac{-1}{\hbar} \int_0^{\beta \hbar} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi_j}{\partial \xi} \right)^2 + \frac{1}{2} \omega_j^2 \phi_j^2 \right] d\xi \right\} \end{aligned} \quad (41)$$

对于自由扭折, 由于

$$L_k = \int_0^{l'} \left[-\frac{c_0^2}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x'} \right)^2 + \frac{k^2}{2} \varphi^2 - \frac{u}{4} \varphi^4 \right] dx'$$

与时间无关, 时间积分可独立进行得到 $-i\beta\hbar$, 于是有

$$\rho_c(\varphi_2 \varphi_1 x') = \int \mathcal{D}\varphi \exp \left\{ -\beta \int_0^{l'} \left[\frac{c_0^2}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x'} \right)^2 - \frac{k^2}{2} \varphi^2 + \frac{u}{4} \varphi^4 \right] dx' \right\}. \quad (42)$$

又由于位移场 φ 具有空间周期性, $\varphi_1(x' = 0) = \varphi_2(x' = l')$, 扭折正则配分函数

$$Z_{Ck} = \int \rho_c(\varphi_1, \varphi_1, x') d\varphi_1 = \int \mathcal{D}\varphi \exp \left\{ -\beta \int_0^{l'} \left[\frac{c_0^2}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x'} \right)^2 - \frac{k^2}{2} \varphi^2 + \frac{u}{4} \varphi^4 \right] dx' \right\}, \quad (43)$$

其中 $d\varphi_1$ 已并入测度 $\mathcal{D}\varphi$ 之中.

因此得到

$$Z_G = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} Z_{Cn}, \quad (44)$$

$$\begin{aligned} Z_{Cn} = & \prod_{i=1}^n \int \mathcal{D}\varphi_i \exp \left\{ -\frac{\beta k^2}{u} \int_0^{l'} \left[\frac{c_0^2}{2} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x'} \right)^2 - \frac{k^2}{2} \varphi_i^2 + \frac{k^2}{4} \varphi_i^4 \right] dx' \right\} \\ & \times \prod_{j=1}^{N/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\psi_{j1} \int_{\psi_{j1}}^{\psi_{j1}} \mathcal{D}\phi_j \exp \left\{ \frac{-1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi_j}{\partial \xi} \right)^2 + \frac{1}{2} \omega_j^2 \phi_j^2 - \lambda V_{1m} \right] d\xi \right\}. \end{aligned} \quad (45)$$

互作用势前乘以 λ 是为了便于在微扰处理时识别修正项.

下一步是计算路径积分.

先不计 λ 项, 可计算出单模谐振子的正则配分函数.

$$\begin{aligned} Z_{Cpj}^{(0)} = & \int_{-\infty}^{\infty} d\psi_{j1} \int_{\psi_{j1}}^{\psi_{j1}} \mathcal{D}\phi_j \exp \left\{ \frac{-1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi_j}{\partial \xi} \right)^2 + \frac{1}{2} \omega_j^2 \phi_j^2 \right] d\xi \right\} \\ = & \frac{1}{2 \sinh \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j \right)}. \end{aligned} \quad (46)$$

这就是通常形式的单模声子正则配分函数.

对于 λ 项的微扰处理, 鉴于基态近似的局限性, 改用路径积分微扰论方法^[8, 10], 过程虽繁, 但计算出的 1 级、2 级修正项具有简洁形式. 这里只写出 1 级修正项如下:

$$\begin{aligned} Z_{Cpj}^{(1)} = & \lambda \left\{ \left(1 - \frac{1}{l} \sum_{i=1}^n \int_{\Delta_i'} \varphi_i^2 dx' \right) \frac{3\beta\hbar k^2}{4\omega_j} \frac{\coth \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j \right)}{2 \sinh \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j \right)} \right. \\ & \left. - \frac{9\beta\hbar^2 u}{16l\omega_j^2} \frac{\coth^2 \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j \right)}{2 \sinh \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j \right)} \right\} \end{aligned} \quad (47)$$

在一级近似下, 重整化单模谐振子正则配分函数为

$$Z'_{Cpj} \cong Z_{Cpj}^{(0)} + Z_{Cpj}^{(1)} \cong \frac{1}{2 \sinh \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j \right)} \left\{ 1 + \lambda \left[\left(1 - \frac{1}{l} \sum_{i=1}^n \int_{\Delta_i'} \varphi_i^2 dx' \right) \right. \right.$$

$$\times \frac{3}{4} \frac{\beta \hbar k^2}{\omega_j} \coth \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j \right) - \frac{9}{16} \frac{u \beta \hbar^2}{l \omega_j^2} \coth^2 \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j \right) \Big] \Big\} \\ \cong \frac{1}{2 \sinh \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j' \right)} \left[1 - \lambda \frac{3}{4} \frac{\beta \hbar k^2}{l \omega_j} \coth \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j \right) \int_{\Delta_j'} \varphi_i^2 dx' \right]^n, \quad (48)$$

其中

$$\omega_j' = \omega_j \left\{ 1 + \lambda \left[-\frac{3}{2} \frac{k^2}{\omega_j^2} + \frac{9}{8} \frac{u \hbar}{l \omega_j^3} \coth \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j \right) \right] \right\} \quad (49)$$

为重整化声子频率.

全部谐振子正则配分函数

$$Z'_{CP} = \prod_{j=1}^{N/2} Z'_{Cpj} \cong \frac{1}{\prod_{j=1}^{N/2} 2 \sinh \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j' \right)} \\ \times \left[1 - \lambda \frac{3}{4} \sum_{j=1}^{N/2} \frac{\beta \hbar k^2}{l \omega_j} \coth \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j \right) \int_{\Delta_j'} \varphi_i^2 dx' \right]^n \quad (50)$$

前一因子即重整化声子总的正则配分函数,可提出扭折积分号外,后一因子尚含有 φ_i , 并入扭折路径积分成为微扰项,单个扭折路径积分变成

$$Z'_{Cki} = \int \mathcal{D} \varphi_i \exp \left\{ \frac{-\beta k^2}{u} \int_0^{l'} \left[\frac{c_0^2}{2} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x'} \right)^2 - \frac{k^2}{2} \varphi_i^2 + \frac{k^2}{4} \varphi_i^4 \right] dx' \right\} \\ \times \left[1 - \lambda \frac{3}{4} \sum_{j=1}^{N/2} \frac{\beta \hbar k^2}{l \omega_j} \coth \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j \right) \int_{\Delta_j'} \varphi_i^2 dx' \right]. \quad (51)$$

先不计微扰项. 在半经典近似下,可计算出单个自由扭折正则配分函数^[6]

$$Z_{Ck}^{(0)} = \frac{l' k}{2\sqrt{2}} \left(\frac{96}{\pi} \beta E_k \right)^{1/2} \exp \{ -\beta E_k \} = \frac{l' k}{2\sqrt{2}} A \exp \{ -\beta E_k \}, \quad (52)$$

其中

$$E_k = \frac{2\sqrt{2}}{3} \frac{k^3 c_0}{u} \quad (53)$$

是自由单扭折相对真空态的能量,而 A 代表 $\left(\frac{96}{\pi} \beta E_k \right)^{1/2}$. 再用路径积分微扰论计算出修正项

$$Z_{Ck}^{(1)} = -\lambda \sum_{j=1}^{N/2} \frac{\sqrt{2} \beta \hbar k}{l \omega_j} \coth \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j \right) \times Z_{Ck}^{(0)}. \quad (54)$$

于是得到重整化扭折正则配分函数

$$Z'_{Ck} = \frac{l' k}{2\sqrt{2}} A B \exp \{ -\beta E_k \}, \quad (55)$$

其中

$$B = \left[1 - \lambda \sum_{j=1}^{N/2} \frac{\sqrt{2} \beta \hbar k}{l \omega_j} \coth \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j \right) \right], \quad (56)$$

最后求得

$$Z_G = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (Z'_{ck})^n Z'_{cp} = Z'_{cp} \exp\{Z'_{ck}\}, \quad (57)$$

$$\zeta = \ln Z_G = \frac{l'k}{2\sqrt{2}} AB e^{-\beta E_k} - \sum_{j=1}^{N/2} \ln 2 \sinh\left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j'\right), \quad (58)$$

求得 ζ 之后, 可以由 ζ 求其他热力学量. 下面求重整化扭折和声子的平均数目 $\bar{n}'_k$ 、 $\bar{n}'_{pj}$ 以及系统的平均能量 $\bar{E}$, 以便看出结果的合理性, 并与文献上的结果比较. 由热力学公式可求得

$$\bar{n}'_k = -\frac{\partial \zeta}{\partial (\beta E'_k)} = \frac{l'k}{2\sqrt{2}} e^{-\beta E_k}, \quad (59)$$

$$\bar{n}'_{pj} + \frac{1}{2} = -\frac{\partial \zeta}{\partial (\beta \hbar \omega_j')} = \frac{1}{2} \coth\left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j'\right), \quad (60)$$

$$\begin{aligned} \bar{E} &= -\frac{\partial \zeta}{\partial \beta} = \frac{l'k}{2\sqrt{2}} E'_k e^{-\beta E'_k} - \sum_{j=1}^{N/2} \frac{1}{2} \hbar \omega_j' \coth\left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j'\right) \\ &= \bar{n}'_k E'_k + \sum_{j=1}^{N/2} \left(\bar{n}'_{pj} + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_j', \end{aligned} \quad (61)$$

其中

$$\begin{aligned} E'_k &= E_k \left[1 - \frac{1}{\beta E_k} \ln AB\right] = E_k \left\{1 - \frac{1}{2\beta E_k} \ln\left(\frac{96}{\pi} \beta E_k\right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\beta E_k} \ln \left[1 - \lambda \sum_{j=1}^{N/2} \frac{\sqrt{2} \beta \hbar k}{l \omega_j} \coth\left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j'\right)\right]\right\} \end{aligned} \quad (62)$$

为扭折重整化能量. 其中第二项是扭折散射态引进的修正项, 第三项是扭折声子相互作用引进的修正项.

可以看出, 当 $\lambda = 0$, (59)–(61)式便退化为扭折声子混合系统的通常表式.

四、结果讨论

对声子配分函数作基态近似

$$2 \sinh\left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j'\right) \cong e^{\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j'}, \quad \coth\left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j'\right) \cong 1. \quad (63)$$

则(58)式退化为

$$\begin{aligned} \zeta &= \frac{l'k}{2\sqrt{2}} \exp\left\{-\beta E_k \left[1 - \frac{1}{2\beta E_k} \ln\left(\frac{96}{\pi} \beta E_k\right) + \lambda \sum_{j=1}^{N/2} \frac{\sqrt{2} \hbar k}{E_k l \omega_j}\right]\right\} \\ &\quad - \sum_{j=1}^{N/2} \frac{1}{2} \beta \hbar \omega_j \left[1 + \lambda \left(-\frac{3}{2} \frac{k^2}{\omega_j^2} + \frac{9}{8} \frac{u \hbar}{l \omega_j^3}\right)\right]. \end{aligned} \quad (64)$$

这就是改正了声子路径积分表式的文献[6]的(6.3)式. 可以看出, 实际上, 在基态近似下, 相互作用引起的扭折能量修正项与温度无关. 这是合理的. 因为相互作用修正项中的温

度因子是激发态影响的反应,基态近似既然只考虑基态贡献,自然应当不出现温度因子。由于相互作用修正项与温度无关(它是一个很小的常数),基态近似得不出与计算机实验结果符合的结果。文献[6]中所谓基态近似下理论与计算机经典结果符合不仅理论上不当、实际上也是不可靠的。

相反,在经典近似下, $\hbar \rightarrow 0$,

$$\sinh\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_i\right) \cong \frac{1}{2}\beta\hbar\omega_i, \quad \coth\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_i\right) \cong \frac{1}{\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_i}. \quad (65)$$

则(58)式退化为

$$\begin{aligned} \zeta = & \frac{l'k}{2\sqrt{2}} \exp\left\{-\beta E_k \left[1 - \frac{1}{2\beta E_k} \ln\left(\frac{96}{\pi}\beta E_k\right) \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{\beta E_k} \ln\left(1 - \lambda \sum_{j=1}^{N/2} \frac{2\sqrt{2}k}{l\omega_j^2}\right)\right]\right\} \\ & - \sum_{j=1}^{N/2} \ln\left\{\beta\hbar\omega_j \left[1 + \lambda \left(-\frac{3}{2} \frac{k^2}{\omega_j^2} + \frac{9}{4} \frac{u}{\beta l\omega_j^4}\right)\right]\right\}. \end{aligned} \quad (66)$$

(66)式出现了相互作用修正项的温度依赖性,反映了高温时声子激发态的影响。

如文献[5]所说,对理论的极敏锐考核是将理论计算出的平均扭折密度与计算机实验结果比较。下面就来进行这一考核。

按定义,扭折平均密度

$$\rho'_k = \frac{1}{l'} \bar{n}'_k. \quad (67)$$

写成归一化形式,并以经典近似下的 $\bar{n}'_k$ 代入得

$$\bar{\rho}'_k = \frac{k}{2\sqrt{2}} e^{-\beta E'_k(T)}, \quad (68)$$

$$E'_k(T) = E_k \left[1 - \frac{1}{2\beta E_k} \ln\left(\frac{96}{\pi}\beta E_k\right) - \frac{1}{\beta E_k} \ln\left(1 - \lambda \sum_{j=1}^{N/2} \frac{2\sqrt{2}k}{l\omega_j^2}\right)\right]. \quad (69)$$

由上看出,当 λ 项 < 1 , 扭折散射态使扭折激发能减小,使 $\bar{\rho}'_k$ 随温度增加得比 $\bar{\rho}_k$ 快,相互作用则使扭折激发能增大,使 $\bar{\rho}'_k$ 随温度增加速度放慢。

当 $T \rightarrow 0$, 两修正项均为零,(实际上相互作用修正项不为零,而是退化为基态近似下的小常数)(68)式退化为

$$\bar{\rho}'_k = \bar{\rho}_k = \frac{k}{2\sqrt{2}} e^{-\beta E_k}. \quad (70)$$

这就是 K-S 理论的结果。

当 T 增大到某一数值, $E'_k(T) \rightarrow 0$, 则(68)式趋于

$$\bar{\rho}'_k = \frac{k}{2\sqrt{2}}. \quad (71)$$

即每一宽度 $\left(\frac{k}{2\sqrt{2}}\right)^{-1}$ 上有一扭折,达到全部激发。

用文献[5]计算机模拟实验所用参数值 $k=1$, $u=1$, $C=1$, $a=1$, $\beta=1/T$ 代入(69)式得到

$$E'_k(\bar{T}) = \frac{2\sqrt{2}}{3} \left[1 - \frac{3\bar{T}}{4\sqrt{2}} \ln\left(\frac{64\sqrt{2}}{\pi} \frac{1}{\bar{T}}\right) + \lambda \frac{3}{2\sqrt{2}} \bar{T} \ln\left(1 - \frac{2}{\pi} \times 0.8\right) \right], \quad (72)$$

其中采用了近似计算

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{N/2} \frac{2\sqrt{2} k^2}{l\omega_j^2} &= \sum_{j=1}^{N/2} \frac{\sqrt{2}}{N} \frac{1}{1 + \left(\frac{j\pi}{\sqrt{2}N}\right)^2} \\ &\cong \frac{\sqrt{2}}{N} \int_0^{N/2} \frac{dx}{1 + \left(\frac{\pi}{\sqrt{2}} \frac{x}{N}\right)^2} = \frac{2}{\pi} \times 0.8. \end{aligned} \quad (73)$$

$\lambda=1$ 时, $E'_k(\bar{T})/E_k$ 随 $\bar{T}$ 变化如图1曲线I所示, 曲线II是 $\lambda=0$ 时的情形.

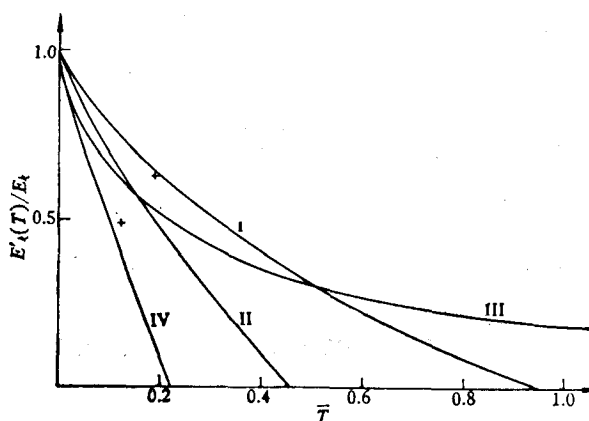


图1 $E'_k(T)/E_k$ 随 $\bar{T}$ 变化曲线

图1中还绘出了文献[5]的经验公式

$$E'_k(\bar{T}) = \frac{2\sqrt{2}}{3} (1 + 3\sqrt{2}\bar{T})^{-1} \quad (74)$$

(曲线III)和文献[6]的结果

$$E'_k(\bar{T}) = \frac{2\sqrt{2}}{3} \left(1 - \frac{3}{4\sqrt{2}} \bar{T} \ln\left(\frac{256\sqrt{2}}{\pi} \frac{1}{\bar{T}}\right) - \frac{9}{4\sqrt{2}} \bar{T} e^{-\left(\frac{256\sqrt{2}}{\pi} \frac{1}{\bar{T}}\right)^{1/2} e^{-\frac{2\sqrt{2}}{3} \frac{1}{\bar{T}}}} \right) \quad (76)$$

(曲线IV)以及 $\bar{T} = 0.117, 0.19, 0.26$ 时的计算机模拟实验结果.

比较各曲线可以看出:

在计算机模拟实验温度范围内, 即 $\bar{T} \leq 0.26$ 时, (72)式与经验公式(74)式有较好的符合. 且与计算机模拟实验结果有较全面的接近. 但当温度增大, (74)式趋零过于缓慢, 经验公式不再适用. 而(72)式在 $\bar{T} \cong 1$ 时趋零, 与计算机模拟实验在 $\bar{T} \cong 1.68$ 时扭折过多而混乱是定性相符的. 应当指出, 在文献[6]中, 由于对(74)式误作了

$$(1 + 3\sqrt{2}\bar{T})^{-1} \cong 1 - 3\sqrt{2}\bar{T}$$

的近似,他们关于(74)式的曲线和结论是不正确的。

至于(75)式,即便不考虑前面提到过的问题,它也只在 $\bar{T} = 0.117$ 一点上与计算机模拟实验结果符合得较好,它在 $\bar{T} \cong 0.22$ 时便趋零,显然与模拟实验结果不符。

定量地说,由(74)式计算出 $\bar{T} = 0.117, 0.19, 0.26$ 时的平均扭折密度分别为每 10^3 个离子有1, 12, 44个扭折。计算机模拟实验结果分别为每 10^3 个离子有8, 15, 30个扭折。只在 $\bar{T} = 0.117$ 一点相差较大,如在此温度采用基态近似,即近似令 λ 项为零,则计算得平均扭折密度为每 10^3 个离子有3个扭折。考虑到 ρ'_k 是 $E'_k(\bar{T})$ 的指数函数,上述的定量符合应当认为是满意的了。

由此可以得出结论。对于双阱势中离子的运动,可以采用扭折-声子耦合气体模型的统计行为加以描述。在这方面,本文的结果具有较大的普遍性。在极低温度下,声子衣对扭折的影响可忽略不计,随着温度的升高,计及声子衣影响是必要的。

参 考 文 献

- [1] S. Schneider and E. Stoll, *Phys. Rev.* **B13**(1976), 1216.
- [2] J. A. Krumhansl and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.*, **B11**(1975), 3535.
- [3] S. Aubry, *J. Chem. Phys.*, **62**(1975), 3217; **64**(1976), 3392.
- [4] T. Riste, E. J. Samudsen and K. Otnes, *Solid State Commun.*, **9**(1971), 1455; K. B. Lyons and P. A. Fleury, *Solid State Commun.*, **23**(1977), 477.
- [5] T. R. Koehler, A. R. Bishop, J. A. Krumhansl and J. R. Schrieffer, *Solid State Commun.* **17**(1975), 1515.
- [6] G. F. Mazenko and P. S. Sahni, *Phys. Rev.*, **B18**(1978), 6139.
- [7] R. Rajaraman, *Phys. Rep.*, **C21**(1975), 227.
- [8] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, "Quantum Mechanics and Path Integrals". (McGraw-Hill, New York, 1965).
- [9] M. S. Marinov, *Phys. Rep.*, **60**(1980), 1.
- [10] R. P. Feynman, "Statistical Mechanics", (W. A. Benjamin, Inc, Reading, Mass., 1972).

STATISTICAL THEORY OF A ONE-DIMENSIONAL INTERACTIVE KINK-PHONON GAS

YANG ZHEN-QING

(Department of Physics, Nankai University)

ABSTRACT

This paper systematically studies and improves the statistical theory of the kink-phonon interactive mixture in a one-dimensional model for the displacive phase transition. By taking applicable forms of the path integral for both the partition functions of kink and phonon and altering the method in calculating the path integral of phonon, a more reasonable and general expression of the partition function of the Grand ensemble is obtained. Under the lowest eigenstate approximation, the Grand partition function may be reduced to a result similar to that of reference^[1]. Under the classical approximation, the average density of the kink calculated from the Grand partition function is in agreement with the result of the computer simulation better than those obtained in earlier publications.