

Ising 晶格系统可容纳的相数

刘建民 龚昌德

(南京大学物理系)

1982年9月6日收到

提 要

我们应用突变论 (Catastrophe theory) 讨论了均匀各向同性和均匀非各向同性 Ising 晶格系统可容纳相数的问题. $d = 3$ 的 Ising 晶格系统至少可容纳三个相.

一、引 言

Chang, Hankey 和 Stanley 在文献 [1] 中提出了相变系统临界点的拓扑分类. 在该分类中, 每个临界点有 order 数 θ ; 通常临界点的 order 数为 $\theta = 2$; order 数为 $(\theta + 1)$ 的临界点由几条 order 数为 θ 的临界点线相交而成.

突变论 (CT) 利用函数扩展 (unfolding) 的拓扑稳定理论研究系统的结构突变现象 [2-4]. 最早尝试把 Thom 的 CT 应用于系统在临界点附近相图分类问题的是 Schulman 和 Revzen [5]. 较完整的分类工作则可在 Vendrik [6], Coleman 和 O'Shea [7] 的文献中找到.

相变系统临界点的拓扑分类, 同该临界点附近局域相图的 Thom 分类之间存有一定的关系. 这关系是, 只要取 $i = \theta$, 形如

$$y^{2i} + \sum_{j=1}^{i-1} c_{2j} y^{2j} + c_1 y$$

的 Thom 分类自动给出 order 数为 θ 的拓扑分类 [8].

这样, CT 就为计算临界点的 order 数提供了方法, 就是说, 从系统的哈密顿量和序参量出发, 确定出系统的自由能函数扩展, 我们就能应用 CT 求出系统在临界点附近局域相图所属的标准型和临界点的 order 数. 由于临界点 order 数 θ 有明确的物理意义, 即 order 数为 θ 的临界点是系统 θ 个相合而为一点, 进一步, 我们可以讨论系统可容纳相数的问题 [9]. 下文我们就沿这一路线讨论均匀各向同性和均匀非各向同性 Ising 晶格系统可容纳相数的问题.

二、均匀各向同性 Ising 晶格系统的自由能函数扩展

由 N 个格点组成的均匀各向同性的 Ising 晶格系统, 其哈密顿量为

$$H^* = -\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i, \quad (1)$$

式中 $\langle ij \rangle$ 为自旋近邻对, $h = \mu H$, μ 为单个自旋的磁矩, H 为外磁场, σ 为 Pauli 矩阵 $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.

利用配分函数作下面定义:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\text{all}} \langle \exp(-\beta H^*) | \rangle = \sum_L \sum_{(L)} \langle L | \exp(-\beta H^*) | L \rangle \\ &= \exp(-N\beta F(t, h)) \stackrel{d}{=} \sum_L \exp\{-N\beta F(L, t, h)\}, \end{aligned} \quad (2)$$

式中 L 为长程序 (LRO), (L) 是当 L 固定时系统所有的态, 共有

$$W(L) = N! / \left[\left(\frac{N}{2} (1+L) \right)! \left(\frac{N}{2} (1-L) \right)! \right]$$

个, t 为约化温度 $(T - T_c)/T_c$.

由 (2) 式, 有

$$\begin{aligned} F(L, t, h) &= -\frac{1}{\beta N} \left[\beta N h L + \ln \sum_{(L)} \langle L | \exp(KS) | L \rangle \right], \\ K &= \beta J/2 = J/2kT, \quad S = \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j. \end{aligned} \quad (3)$$

经陡降法^[10], 可证

$$\sum_L \exp\{-N\beta F(L, t, h)\} = \frac{A}{\sqrt{N}} \exp\{-N\beta F(L^*, t, h)\},$$

其中 L^* 为 $F(L, t, h)$ 的极小点, A 是同 N 无关的正数.

因此, 在热力学极限下或者当 N 足够大时, 系统平衡态自由能 $F(t, h)$ 满足

$$F(t, h) = F(L^*, t, h), \quad L^* \text{ 为 } F(L, t, h) \text{ 的极小点.}$$

这样, 以 $F(L, t, h)$ 为其自由能函数扩展的系统就属于 CT 意义下的系统. 我们也能用 CT 去分析 $F(L, t, h)$ 所包含的突变性状, 即系统在 LRO 参量下的相变性状了.

考虑到统计系统的特殊性, 在 CT 分析中我们采纳 Maxwell 约定^[2,11,13].

对 (3) 式作累积展开^[13], 即得

$$\begin{aligned} F(L, t, h) &= -\frac{1}{\beta N} \left[\beta N h L + \ln W(L) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{K^n}{n!} \langle S^n \rangle_c \right], \\ \langle S^n \rangle_c &= -n! \sum' \left(\sum_i K_i - 1 \right)! (-1)^{\sum_i K_i} \prod_i \frac{1}{K_i!} \frac{\langle S^{m_i} \rangle^{K_i}}{(m_i!)^{K_i}}, \\ \sum_i m_i K_i &= n, \quad \sum' \text{ 表示对 } S^n \text{ 的一切可能的分解求和, } \langle S_1^{m_1} \rangle^{K_1} \langle S_2^{m_2} \rangle^{K_2} \cdots \\ &\cdots \text{ 是 } \langle S^n \rangle_c \text{ 的一种分解,} \\ \langle A \rangle &\stackrel{d}{=} \sum_{(L)} \langle L | A | L \rangle / W(L). \end{aligned} \quad (4)$$

应用 Kirkwood 近似^[14], 把 $\langle S \rangle$ 和各关联项 $\langle S^n \rangle$, $n = 2, 3, \cdots$ 用 L 表示出来, 并

且移动原点,使 $(L, t, h) = (0, 0, 0)$ 为系统的临界点,就能得到在平方晶格或简立方晶格情形中 $F(L, t, h)$ 的一、二和四级近似表达式.

$$\begin{aligned}
 F_1(L, t, h) &= -hL - \frac{dJL}{2} + kT_c t \frac{1+L}{2} \ln \frac{1+L}{2} + kT_c t \frac{1-L}{2} \ln \frac{1-L}{2} \\
 &\quad + kT_c \frac{1+L}{2} \ln \frac{1+L}{2} + kT_c \frac{1-L}{2} \ln \frac{1-L}{2}; \\
 F_2(L, t, h) &= F_1(L, t, h) - \frac{kT_c d K_c^2}{2} (-2L^2 + L^4) \\
 &\quad + \frac{kT_c d K_c^2}{2} \frac{t}{1+t} (1 - 2L^2 + L^4); \\
 F_4(L, t, h) &= F_2(L, t, h) - kT_c d \left\{ \frac{2K_c^3 L^2}{3} (1 - 2L^2 + L^4) \right. \\
 &\quad + \frac{K_c^4}{12} [(20 - 24d)L^2 + (36d - 10)L^4 - (24d + 12)L^6 \\
 &\quad \left. + (9 + 6d)L^8] \right\} + kT_c d \left\{ \frac{2K_c^3 L^2}{3} \frac{t(2+t)}{(1+t)^2} (1 - 2L^2 + L^4) \right. \\
 &\quad + \frac{K_c^4}{12} \frac{t(3+3t+t^2)}{(1+t)^3} [(20 - 24d)L^2 + (36d - 10)L^4 \\
 &\quad \left. - (24d + 12)L^6 + (9 + 6d)L^8] \right\},
 \end{aligned}$$

式中 $K_c = J/2kT_c$, d 为晶格系统的空间维度; 脚标 1, 2 和 4 分别表示 (4) 式的求和号中取至 $n=1, 2$ 和 4 项.

$F_1(L, t, h)$ 相当于平均场近似, $F_2(L, t, h)$ 和 $F_4(L, t, h)$ 则是超平均场的近似.

三、CT 分析

由 $F_1(L, t, h)$ 知,

$$F_1(L, 0, 0) = \left(-dJ + \frac{J}{2K_c} \right) L^2 + \frac{1}{12} kT_c L^4 + \dots \quad (5)$$

所以, $dF_1|_0 = 0$, 而 $d^2 F_1|_0 = 0$ 给出

$$-dJ + \frac{J}{2K_c} = 0 \quad \text{或} \quad T_c = dJ/k. \quad (6)$$

因为 (5) 式, 我们有

$$L^5 = \overline{(3L^2/kT_c) \tilde{f} \left(\frac{d}{dL} F_1(L, 0, 0) \right)^5}, \quad (3L^2/kT_c) \in R_1^2,$$

从而 $F_1(L, 0, 0)$ 是 4 强定的 (4-strong determinate). 又因为

$$L^3 = \overline{(3/kT_c) \tilde{f} \left(\frac{d}{dL} F_1(L, 0, 0) \right)^3},$$

我们有 $\text{cod } F_1(L, 0, 0) = 2$. 可以选 L 和 L^3 为 $F_1(L, 0, 0)$ 的余基.

由于 $\frac{\partial}{\partial h} J^2 F_1(L, 0, h)_0 = -L$ 和 $\frac{\partial}{\partial t} J^2 F_1(L, t, 0)_0 = dJL^2/2$ 张满了 $F_1(L, 0, 0)$ 的余基空间 $\{L, L^2\}$, 按 Thom 定理 (transversality theorem), $F_1(L, t, h)$ 是稳定的扩展. 加上 $\text{cod } F_1(L, 0, 0) = 2$, $F_1(L, t, h)$ 还是 universal 扩展.

因此, 在临界点的某邻域中有下面同胚等价关系:

$$F_1(L, t, h) \sim y^4 + c_2(t, h)y^2 + c_1(t, h)y, \quad (7)$$

$\sim$ 表示同胚等价.

(7) 式说明, 平均场近似下的系统 (1) 式在临界点附近有 cusp 型的局域相图, 临界点的 order 数是 $\theta = 2$, 并且这些结论同晶格系统的空间维度 d 无关.

文献 [6] 和 [15] 所给的结果同于此.

进一步, 由超平均场近似的自由能函数扩展 $F_2(L, t, h)$, 我们有

$$\begin{aligned} F_2(L, 0, 0) = & \left(-\frac{d}{2} + \frac{1}{4K_c} + \frac{dK_c}{2}\right) JL^2 + \left(\frac{1}{24K_c} - \frac{dK_c}{4}\right) JL^4 \\ & + \frac{1}{60K_c} JL^6 + \dots \end{aligned} \quad (8)$$

容易算得, $df_2|_0 = 0$ 成立, 并且当 $d = 16/6$, $K_c = 1/4$ 时有

$$\frac{1}{2d} = K_c - K_c^2, \quad \frac{1}{24K_c} - \frac{dK_c}{4} = 0. \quad (9)$$

(9) 式中第一式表示 $d^2 f_2|_0 = 0$, 是临界点的要求, 由它即得 $T_c = 2J/k$. 把 (9) 式代入 (8) 式, 当 $d = 16/6$ 时, 我们得到

$$F_2(L, 0, 0) = \frac{1}{15} JL^6 + \dots \quad (10)$$

因为

$$L^7 = (15L^2/6J) \overline{\left(\frac{d}{dL} F_2(L, 0, 0)\right)}, \quad (15L^2/6J) \in l_1^1, \quad F_2(L, 0, 0)$$

是 6 强定的, 因为

$$L^5 = (15/6J) \overline{\left(\frac{d}{dL} F_2(L, 0, 0)\right)}, \quad \text{cod } F_2(L, 0, 0) = 4.$$

我们可以选 L, L^2, L^3 和 L^4 为 $F_2(L, 0, 0)$ 的余基. 由于

$$\frac{\partial}{\partial h} J^4 F_2(L, 0, h)_0 = -L \quad \text{和} \quad \frac{\partial}{\partial t} J^4 F_2(L, t, 0)_0 = \frac{2}{3} JL^2$$

彼此独立, 且含在 $F_2(L, 0, 0)$ 的余基空间 $\{L, L^2, L^3, L^4\}$ 中, 我们补充两个场变量 t_3 和 t_4 , 以扩充系统. 扩充了的系统有 F 扩展:

$$F_2(L, t, h, t_3, t_4) = F_2(L, t, h) + t_3 L^3 + t_4 L^4. \quad (11)$$

利用

$$F_2(L, 0, 0, 0, 0) = F_2(L, 0, 0), \quad F_2(L, 0, h, 0, 0) = F_2(L, 0, h)$$

和

$$F_2(L, t, 0, 0, 0) = F_2(L, t, 0),$$

并就 $F_2(L, t, h, t_3, t_4)$ 应用 Thom 定理, 可证 $F_2(L, t, h, t_3, t_4)$ 是 universal 扩展.

然后依 CT 中的同胚定理, 并令 $t_3 = t_4 = 0$, 便得到, 当 $d = 16/6 = 2.667$ 时, 在临界点的某邻域中有

$$F_2(L, t, h) \sim y^6 + e_4(t, h)y^4 + e_3(t, h)y^3 + e_2(t, h)y^2 + e_1(t, h)y. \quad (12)$$

这就是说, 当 $d = 2.667$ 时, $F_2(L, t, h)$ 在临界点附近的局域相图为 butterfly 型, 临界点的 order 数为 $\theta = 3$.

类似, 对 $F_4(L, t, h)$, 我们有

$$\begin{aligned} F_4(L, 0, 0) = & \left\{ -\frac{d}{2} + \frac{1}{4K_c} - \frac{d}{2} \left[-K_c + \frac{2}{3}K_c^2 + \frac{5-6d}{3}K_c^3 \right] \right\} JL^2 \\ & + \left\{ \frac{1}{24K_c} - \frac{d}{2} \left[\frac{1}{2}K_c - \frac{4}{3}K_c^2 + \frac{36d-10}{4}K_c^3 \right] \right\} JL^4 \\ & + \left\{ \frac{1}{60K_c} - \frac{d}{2} \left[\frac{2}{3}K_c^2 - (1+2d)K_c^3 \right] \right\} JL^6 + \dots \end{aligned} \quad (13)$$

数值计算结果: 当 $d = 3.176$ 和 $K_c = 0.209$, 即 $T_c = J/0.418k$ 时, (13) 式中 L^2 和 L^4 项的系数为 0, 且 L^6 项的系数

$$\frac{J}{60K_c} - \frac{dJ}{2} \left[\frac{2}{3}K_c^2 - (1+2d)K_c^3 \right] > 0.$$

从而 $F_4(L, 0, 0)$ 是 6 强定的, 并且 $\text{cod } F_4(L, 0, 0) = 4$.

由同样的 CT 计算可证, 对 $F_4(L, t, h)$ 也有 (12) 式和 order 数 $\theta = 3$.

系统 order 数为 θ 的临界点, 是系统 θ 个相合而为一点. 所以, 由 (7) 式, 在平均场近似下系统 (1) 式只能容纳两个相. 这两个相在场变量 t 和 h 的控制下呈现出来. 但在超平均场近似下, 例如在 $F_2(L, t, h)$ 和 $F_4(L, t, h)$ 近似中, 当 d 靠近 3 时, 系统 (1) 式可容纳三个相, 虽然在场变量 t 和 h 的控制中只呈现了两个相. 实际上, 局域相图 (12) 式在 (e_1, e_2, e_3, e_4) 空间的二维曲面 $(e_1(t, h), e_2(t, h), e_3(t, h), e_4(t, h))$ 上只截出了两个相.

我们估计, 在 (3) 式的累积展开中 $F(L, t, h)$ 的更高阶近似给出, d 左右摆动地趋于 3, 和 $\theta = 3$. 这样, 空间维度 $d = 3$ 的晶格系统 (1) 式至少可容纳三个相.

四、均匀非各向同性的 Ising 晶格系统

在超平均场近似下, 当空间维度 d 靠近 3 时, 晶格系统 (1) 式可容纳三个相, 这指点我们, 可以在系统 (1) 式中加进新的场变量控制以使它呈现出三个相来.

取无量纲场变量 R , 它只对 z 方向上的自旋近邻对 $\langle ij \rangle_z$ 起作用, 即引入均匀非各向同性的 Ising 晶格系统, 其哈密顿量为

$$H^* = -\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i - \frac{J}{2} R \sum_{\langle ij \rangle_z} \sigma_i \sigma_j. \quad (14)$$

类似于 (4) 式, 我们有

$$F(L, t, h, R) = -\frac{1}{\beta N} \left[\beta N h L + \ln W(L) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{K_n^*}{n!} \langle (S + R S_z)^n \rangle_c \right],$$

$$K = J/2kT, \quad S = \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad S_z = \sum_{\langle ij \rangle_z} \sigma_i \sigma_j. \quad (15)$$

$\langle S_z \rangle$, $\langle S_z^2 \rangle$ 和 $\langle S_{xy} S_z \rangle$ 分别有一种, 三种和两种位形, 见图 1—3. 各图右边两列分别是该位形的位形数和位形平均值.

 图 1	N	L^2
 图 2	N	1
 图 3	$2N$	$\frac{NL^2 - 2}{N - 2}$
 图 4	$2\left[\binom{N}{2} - N\right]$	$\left(\frac{NL^2 - 2}{N - 2}\right)^2$
 图 5	$2(2d - 2)N$	$\frac{NL^2 - 2}{N - 2}$
 图 6	$(d - 1)N^2 - 2(2d - 2)N \left(\frac{NL^2 - 2}{N - 2}\right)^2$	

把上面结果代入 $\langle (S + RS_z) \rangle_c$ 和 $\langle (S + RS_z)^2 \rangle_c$, 再把这后面两个式子代入 (15) 式, 就得到

$$F_1(L, t, h, R) = F_1(L, t, h) - \frac{1}{2} R J L^2;$$

$$F_2(L, t, h, R) = F_2(L, t, h) - \frac{1}{2} R J L^2$$

$$- \frac{1}{2} k T_c K_c^2 (2R + R^2)(1 - L^2)^2$$

$$+ \frac{1}{2} k T_c K_c^2 \frac{t}{1 + t} (2R + R^2)(1 - L^2)^2.$$

$F_3(L, t, h, R)$ 可同法得到.

由于在 $F_1(L, t, h, R)$ 中也只计及了非关联项, $F_1(L, t, h, R)$ 仍只相当于平均场近似. $F_2(L, t, h, R)$ 和 $F_3(L, t, h, R)$ 是超平均场近似.

从 $F_1(L, 0, 0, 0) = F_2(L, 0, 0)$ 和 $F_3(L, 0, 0)$ 为 4 强定知道, $F_1(L, 0, 0, 0)$ 也为 4 强定, 且 $\text{cod } F_1(L, 0, 0, 0) = 2$. 因为

$$\frac{\partial}{\partial R} J^2 F_1(L, 0, 0, R)_0 = -\frac{1}{2} J L^2, \quad \frac{\partial}{\partial t} J^2 F_1(L, t, 0, 0)_0 = \frac{1}{2} d J L^2$$

和

$$\frac{\partial}{\partial h} J^2 F_1(L, 0, h, 0)_0 = -L$$

盖住了 $F_1(L, 0, 0, 0)$ 的余基空间, 按 Thom 定理, $F_1(L, t, h, R)$ 是稳定的扩展. 但它不是 universal 扩展. 利用关于同一个函数的两个稳定扩展间关系的 CT 定理, 我们得到, 在临界点的某邻域中

$$F_1(L, t, h, R) \sim y^4 + c_2(t, h, R)y^2 + c_1(t, h, R)y. \quad (16)$$

所以, $F_1(L, t, h, R)$ 的局域相图仍属 cusp 型, 临界点的 order 数仍为 $\theta = 2$, 平均场近似下系统 (14) 式仍只能容纳两个相. 在平均场近似下增加系统 (1) 式的场变量不会增加系统可容纳的相数和临界点的 order 数.

由于当 $d = 16/6$ 和 $K_c = 1/4$ 时, $F_2(L, 0, 0, 0) = F_2(L, 0, 0)$ 和 $F_2(L, 0, 0)$ 为 6 强定, $F_2(L, 0, 0, 0)$ 也为 6 强定, 且 $\text{cod } F_2(L, 0, 0, 0) = 4$. 因为

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial R} J^4 F_2(L, 0, 0, R)_0 &= -\frac{1}{4} J L^2 - \frac{1}{8} J L^4, \\ \frac{\partial}{\partial t} J^4 F_2(L, t, 0, 0)_0 &= \frac{2}{3} J L^2 \end{aligned}$$

和

$$\frac{\partial}{\partial h} J^4 F_2(L, 0, h, 0)_0 = -L$$

均含在 $F_2(L, 0, 0, 0)$ 的余基空间 $\{L, L^2, L^3, L^4\}$ 中, 且互为独立, 我们补充场变量 t_3 给系统 (14) 式, 即

$$F_2(L, t, h, R, t_3) = F_2(L, t, h, R) + t_3 L^3.$$

对 $F_2(L, t, h, R, t_3)$ 应用 Thom 定理和 CT 的同胚定理, 并令 $t_3 = 0$, 就得到

当 $d = 16/6 = 2.667$ 时, 在临界点的某邻域中有

$$\begin{aligned} F_2(L, t, h, R) &\sim y^6 + c_4(t, h, R)y^4 + c_3(t, h, R)y^3 \\ &+ c_2(t, h, R)y^2 + c_1(t, h, R)y. \end{aligned} \quad (17)$$

当 $d = 3.176$ 时, $F_4(L, t, h, R)$ 也有相同结果.

(17) 式给出, 在超平均场近似下, 当 d 靠近 3 时, 在临界点附近系统 (14) 式的局域相图为 butterfly 型, 临界点的 order 数为 $\theta = 3$, 系统可容纳三个相, 并且这些相在场变量 t, h 和 R 的控制下能呈现出来. 于是, 在关于 $F(L, t, h, R)$ 更高阶近似的同样估计下, $d = 3$ 的系统 (14) 式至少可容纳三个相, 这三个相在场变量 t, h 和 R 的控制下能呈现出来.

五、近似求解相图的同胚判据

由定义

$$Z = \sum_{\text{all}} \langle |e^{-\beta H}| \rangle = \sum_{\eta} \sum_{\{\eta\}} \langle \eta | e^{-\beta H} | \eta \rangle \stackrel{d}{=} \sum_{\eta} e^{-N\beta f(\eta, \beta)},$$

其中 H 为系统的哈密顿量, $\eta = \eta_1, \eta_2, \dots, \eta_r$ 为系统的序参量, (η) 是当 η 固定时系统所有的态, $t = t_1 t_2, \dots, t_s$ 为场变量, 我们总能求出表征系统的自由能函数扩展

$$F(\eta, t) = -\frac{1}{N\beta} \ln \sum_{(\eta)} \langle \eta | e^{-\beta H} | \eta \rangle^{[16]}. \quad (18)$$

但是一般来讲, 系统的 F 扩展很复杂, 甚至是一个无穷级数, 我们无法精确地得到系统的局域相图. 这样, 或者我们只得满足于 F 扩展局域相图的形貌——CT 能满足我们, 如同 (7), (12) 和 (17) 式分别给出了 $F_1(L, t, h)$, $F_2(L, t, h)$ 或 $F_4(L, t, h)$ 和 $F_2(L, t, h, R)$ 或 $F_4(L, t, h, R)$ 所属的标准型那样, 或者我们近似地计算 F 扩展的局域相图. 在近似计算中有一个重要问题, 那就是怎样判定所取近似下的相图与原相图同胚等价. 换句话讲, 相图近似只能限制在严格量的意义上, 如果一种近似相图定性地偏离了原相图, 把原相图的形貌都改变了, 那就过分近似了. 不改变原相图形貌的近似叫可行的近似. 一种近似是否可行, 近似计算方法本身往往并不提供判据, CT 则提供了.

例如取切断近似法. 在临界点处展开 $F_1(L, t, h)$, 起码取至 L^4 项的切断, 才能得到 $F_1(L, t, h)$ 的可行近似. 当 $d = 16/6$ 时, $F_2(L, t, h)$ 的最低阶可行近似是在 L^6 项处作切断, 即

$$\begin{aligned} F'_2(L, t, h) = & \frac{dJK_c t}{4(1+t)} - hL + \left[\left(-\frac{d}{2} + \frac{1}{4K_c} - \frac{dK_c}{2} \right) \right. \\ & + \left(\frac{1}{4K_c} - \frac{dK_c}{2(1+t)} \right) t \Big] JL^2 + \left[\left(\frac{1}{24K_c} - \frac{dK_c}{4} \right) \right. \\ & + \left(\frac{1}{24K_c} + \frac{dK_c}{4(1+t)} \right) t \Big] JL^4 + \frac{1}{60K_c} JL^6. \end{aligned}$$

实际上, 当 $d = 16/6$ 时, 由 CT 可证明在临界点的某邻域中 $F'_2(L, t, h)$ 同胚等价于 (12) 式右方. 然后, 由同胚等价的传递性, 就存在一个临界点邻域, 于中 $F'_2(L, t, h) \sim F_2(L, t, h)$.

下面计算 $d = 16/6$ 时的 $F_2(L, t, h, R)$ 的最低阶可行近似相图, 它也可以作为 $d = 3$ 的 $F(L, t, h, R)$ 的最低阶可行近似相图.

展开 $F_2(L, t, h, R)$, 在 L^6 项处切断它, 并利用 $d = 16/6$ 和 $K_c = 1/4$, 得到

$$\begin{aligned} F'_2(L, t, h, R) = & \frac{J}{15} \left\{ L^6 + \left(-\frac{15}{8} R \right) L^4 + \left(10t - \frac{15}{4} R \right) L^2 \right. \\ & + \left. \left(-\frac{15}{J} h \right) L \right\} + F_2(0, t, h, R). \end{aligned} \quad (19)$$

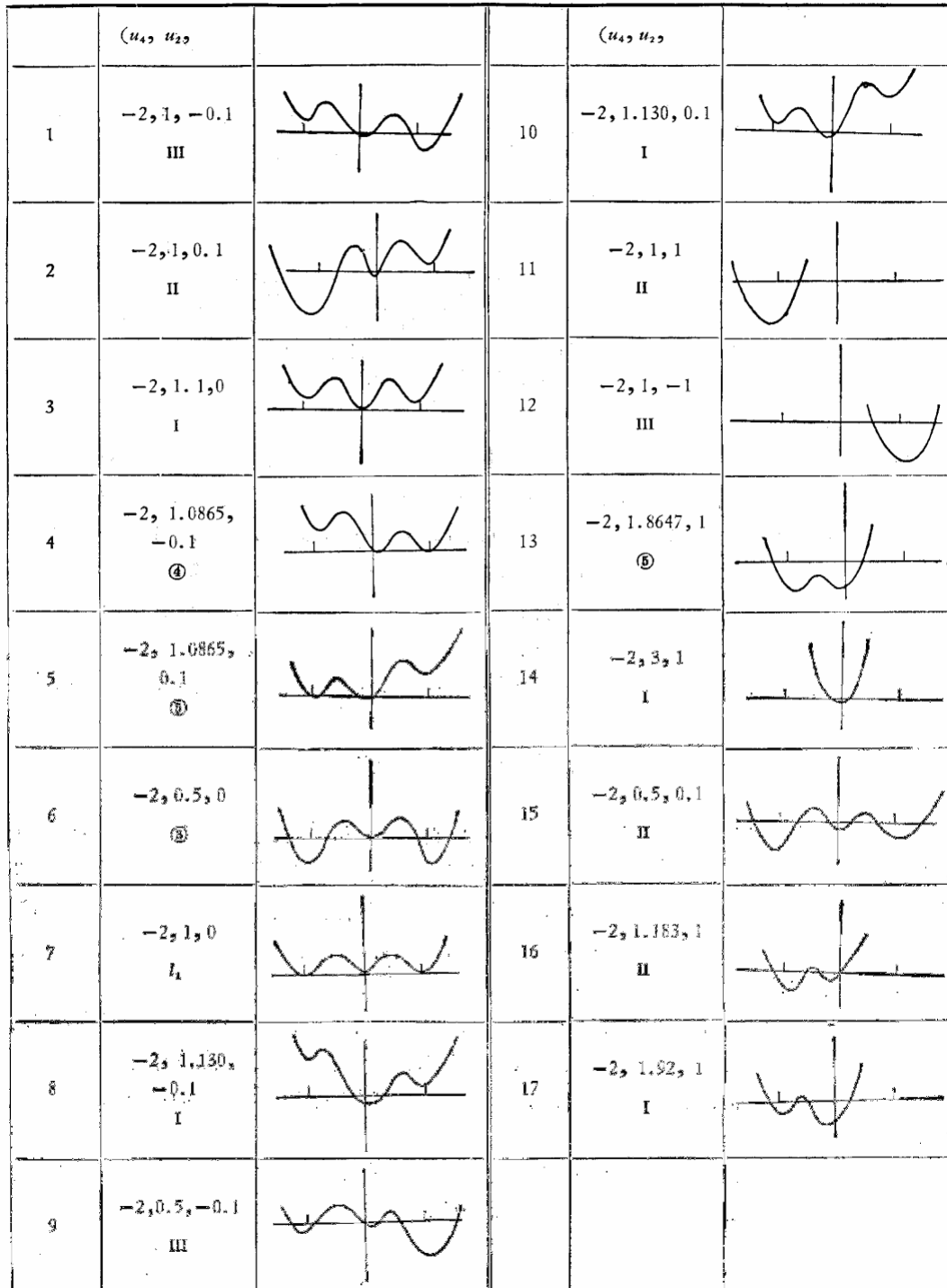
取变换

$$u_4 = -\frac{15}{8} R, \quad u_2 = 10t - \frac{15}{4} R, \quad u_1 = -\frac{15}{J} h. \quad (20)$$

我们先在 (u_4, u_2, u_1) 空间中计算

$$F_2^*(L, u_4, u_2, u_1) = L^6 + u_4 L^4 + u_2 L^2 + u_1 L \quad (21)$$

的局域相图, 然后依 (20) 式再得到 (t, h, R) 空间中 $F'_2(L, t, h, R)$ 的局域相图. 图 4 给出了相空间中一些点处的自由能函数图, 它们是按数值计算结果绘出的. 图 5 则是 $F_2^*(L, u_4, u_2, u_1)$ 在 (u_4, u_2, u_1) 空间中, 或者 $F'_2(L, t, h, R)$ 在 (t, h, R) 空间中

图 4 (u_4, u_2, u_1) 点处的系统平衡态自由能函数图纵坐标为 F_2^* , 横坐标为 L ; 点 (u_4, u_2, u_1) 在相图中所属的区域也已标出

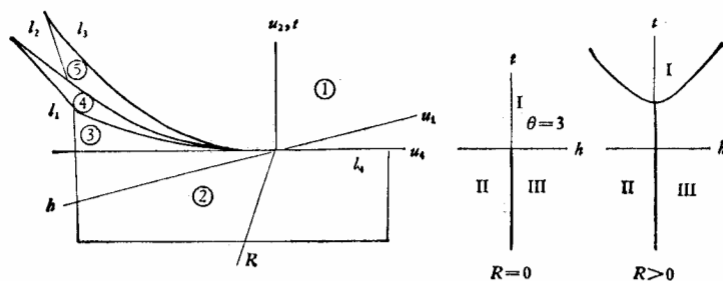


图 5 局域相图 (u_1, u_2, u_1) 是正交架, (t, h, R) 是仿射架, R 轴在(u_1, u_2) 平面内, h 轴反向于 u_1 轴, t 轴与 u_2 轴重合; ②, ③, ④和⑤是两相共存面, l_1 是三相共存线; l_2, l_3 和 l_4 是 order 数为 $\theta = 2$ 的临界点线, 原点是 order 数为 $\theta = 3$ 的临界点; 三条 order 数为 $\theta = 2$ 的临界点线相交出一个 order 数为 $\theta = 3$ 的临界点, 这同文献 [1] 中的定义一致; ①是三相合而为一区域; I, II 和 III 分别代表三个相区域

的局域相图。

从图 4 和图 5 可以看到, 在②, ③, ④, ⑤和 l_1 处场变量的微小变化会引起系统序参量 L 的突变, 也就是三个相 I, II 和 III 之间的相变. 不变 h , 控制 t 和 R , 由 I 相经⑤或 l_1 可变至 II 相, 例 $14 \rightarrow 17 \rightarrow 13 \rightarrow 16 \rightarrow 11, 10 \rightarrow 5 \rightarrow 2, 3 \rightarrow 7 \rightarrow 2$. I 相至 III 相情况类似. 控制 h , 由 II 相经③或 l_1 可变至 III 相, 例 $15 \rightarrow 6 \rightarrow 9, 11 \rightarrow 2 \rightarrow 7 \rightarrow 1 \rightarrow 12$.

由图 4 还能看到, 当场变量靠近两相共存面或三相共存线时, 系统有亚稳相, 甚至有两个亚稳相, 而当稍远离共存面或共存线时, 系统就没有亚稳相了.

如果能对 z 方向上的自旋间相互作用实现控制, 我们就能验证上面 CT 分析的结果.

六、结论与讨论

1. 我们应用 CT 分析得, 空间维度 $d = 3$ 的 Ising 晶格系统至少可容纳三个相. 因此适当地对系统施以新的场变量控制, 可使其呈现出三个相来. 值得注意的是, 系统有两个亚稳相的行为. 文中所引入的对 z 方向上自旋间相互作用的控制, 只是一种控制方式.

2. 在获取系统临界点附近局域相图的形貌, 以及计算临界点 order 数方面, CT 是有力的. 此外, CT 还为近似计算局域相图提供了可行性判据.

3. 如文中所述, 应用 CT 方法不单纯是, 甚至主要不是, 按 Thom 分类表去作选择. 会出现 F 扩展是稳定然非 universal 情况. CT 方法本身并不提供系统的自由能函数扩展, 并不提供何种近似的自由能函数扩展. 因此, 说 CT 方法相当于平均场近似, 是不妥当的.

4. 最后, 若能求得相变系统的 F 扩展, (18) 式, 在临界点处的渐近形式, 那么 CT 方法也能被用来讨论连续相变的临界现象问题^[16,17].

参 考 文 献

- [1] T. S. Chang, A. Hankey and H. E. Stanley, *Phys. Lett. A*, 44(1973), 25.
- [2] René Thom, *Structural Stability and Morphogenesis*, Benjamin-Wesley (1975).
- [3] T. Poston and I. Stewart, *Catastrophe Theory and its Applications*, Pitman, (1978).

- [4] M. Golubitsky, *SIAM. Rev.*, **20**(1978), 352.
- [5] L. S. Schulman and M. Revzen, *Collective Phenomena*, **1**(1972), 43.
- [6] M. C. M. Vendrik, *Physica, A*, **99**(1979), 103; 513.
- [7] A. J. Coleman and D. O'Shea, *Phys. Rev. B*, **22**(1980), 3428.
- [8] L. Benguigui and L. S. Schulman, *Phys. Lett. A*, **45**(1973), 315.
- [9] 刘建民、龚昌德, *Commun. Theor. Phys.* (Beijing), **2**(1983), 909.
- [10] H. Jeffreys and B. S. Jeffreys, *Method of Mathematical Physics*, Cambridge Univ. (1956), p. 503.
- [11] Yung-Chen Lu, *Singularity Theory and an Introduction to Catastrophe Theory*, Springer, (1976).
- [12] K. Keller, G. Dangelmayr and H. Eikemeier, *Phase Diagrams and Catastrophes*, in "Structural Stability in Physics", Springer, (1979), ed. W. Güttinger and H. Eikemeier.
- [13] R. Abe, *Statistical Mechanics*, Tokyo Univ., (1975).
- [14] D. ter Haar, *Elements of Statistical Mechanics*, St. Andrews Univ., (1955), p. 278.
- [15] D. E. G. Williams, *Am. J. Phys.*, **47**(1979), 156.
- [16] 刘建民、龚昌德, *物理学报*, **31**(1982), 1278.
- [17] 刘建民, 临界现象中推广的标度律(待发表).

THE NUMBER OF PERMISSIBLE PHASES IN ISING LATTICE SYSTEM

LIU JIAN-MIN GONG CHANG-DE
(Department of Physics, Nanjing University)

ABSTRACT

Catastrophe theory is applied to investigate the number of permissible phases in Ising lattice system. It is shown that the system with $d=3$ can contain three phases at least.