

一种推广伊辛自旋模型的实空间 重正化群理论

唐 坤 发 胡 嘉 桢

(上海交通大学应用物理系, 凝聚态物理研究所)

1985年10月12日收到

提 要

本文提出了一种推广的伊辛自旋模型, 它包括了伊辛自旋模型、Schofield 和 Bowers 提出的混合自旋模型以及一种特殊的格点稀释伊辛自旋模型作为特例. 运用实空间重正化群得到了这个推广模型的相变流图和三个非平庸不动点(一个伊辛不动点, 一个三相不动点和一个一级相变不动点). 结果表明: 混合自旋模型和伊辛模型属于同一普适类. 证实了 Schofield 和 Bowers 通过直接对混合自旋模型临界指数的计算所做的结论.

一、引 言

一九七一年, 威尔逊将量子场论中的重正化群方法用到相变理论, 论证了标度律和普适类这两个从实验事实中总结出来的新概念, 并发展了具体计算临界指数的技术, 得到了与实验一致的结果^[1]. 他的工作被人们公认为是统计物理近年来的一个重要进展. 他的突破引起了大量的理论研究, 形成浩如烟海的文献.

根据威尔逊的重正化群基本理论, Niemeijer 和 van Leeuwen 于一九七三年提出了实空间重正化群理论^[2]. 至今已发展了许多不同的具体计算方法, 成为计算各类相变模型临界点和临界指数的有力武器. 另外, 还有人把重正化群理论用到动态临界现象^[3]和无序系统^[4]. 几乎所有的计算都得到了令人满意的结果.

平衡相变的理论研究, 大量工作集中于铁磁和反铁磁相变, 比如伊辛模型、海森堡模型以及 Potts 模型等, 它们的一个共同特点就是系统中所有晶格格点都是等价的, 因而具有以晶格常数为单位的平移对称性. 一九八〇年, Schofield 和 Bowers 提出了一种自旋 $1/2$ 和自旋 1 相间排列的混合自旋模型^[5], 作为一种可能的单轴亚铁磁模型. 这个模型的对称性比起一般的铁磁或反铁磁模型来有所降低, 平移不变的最小长度单位为两个晶格常数. 实空间重正化群计算以及级数展开均表明这个模型可能与纯伊辛模型属于同一普适类. 不能完全确定的原因是由于这种判断是通过比较临界指数的数值结果进行的, 而混合自旋模型目前还没有严格解, 究竟准确到小数点后哪一位才被判断是相等或不等, 这一点很难确定. 即使是混合模型的临界指数近似计算值与伊辛模型很接近, 但也不能排除这两种模型的临界指数实际上就很接近但不完全相等的可能性. 作为进一步研究, 本文提出了一种推广的伊辛自旋模型, 纯伊辛模型和混合自旋模型作为两个特例, 可由推广模型中的一个参量取适当值时分别得到. 这样, 我们就可以利用重正化群理论的普适类概念, 根

据参数空间相变流图的普适类区域来判断它们的普适类。由于这种决定普适类的方法是建立在重正化群理论的坚实基础之上的, 结论的正确性要比直接进行数值比较可靠。

除了纯伊辛模型和混合伊辛模型外, 我们的推广模型还包含了一种特殊的格点稀释模型(不是整个晶格, 而只是其中一个子晶格的格点上有可能存在空穴)。在热平衡条件下, 这些空穴可以运动, 这种稀释模型称为退火的稀释模型。

以下作为全文的准备, 先简要介绍 Niemeijer 和 van Leeuwen 的实空间重正化群方法, 然后运用这个方法研究推广的伊辛自旋模型。

二、实空间重正化群

对于连续相变, 当温度接近临界点时, 系统涨落的关联长度趋向无穷大^[6], 这使得统计物理传统的展开方法(比如维里集团展开、微扰展开等)失效。同时关联长度趋向无穷带来了系统的一个新性质。因为在关联长度范围内, 系统具有标度不变性, 即无论你用怎样的尺度去观察, 所看到的情形都是一样的, 因此在接近临界点时, 关联长度趋向无穷, 整个系统具有这种标度不变性。这种性质所对应的对称性称为 dilatation 对称性^[7]。当我们对系统进行 dilatation 操作时, 即用不同尺度去进行描述时, 系统的热力学性质将保持不变。这些变换的总体在数学上构成一个半群(因为没有逆变换, 物理上对应于对微观结构只能进行粗粒平均, 而不能细化)。根据其物理意义称为重正化群。由于只是在临界点上, 系统才具有标度不变性, 因此, 重正化变换的不动点对应于系统的临界点。通过计算不动点附近线性化后的变换群本征值, 可以得到临界指数。这种不去直接计算配分函数, 而是研究保持配分函数不变的变换群的性质, 从中得到相应的物理结论的方法, 就是所谓的重正化群方法。这种方法对其它无穷多自由度体系的理论也有参考价值。

根据重正化群的基本思想, 实空间重正化群的基本方程可记为

$$\exp[H'(\sigma')] = \sum_{\sigma} P(\sigma', \sigma) \exp[H(\sigma)]. \quad (1)$$

这里 $H(\sigma)$ 和 $H'(\sigma')$ 分别为变换前后的哈密顿量, σ 和 σ' 分别为变换前后的自旋变量, $P(\sigma', \sigma)$ 是连接这两种自旋的权重因子, 它满足条件

$$\sum_{\sigma'} P(\sigma', \sigma) = 1. \quad (2)$$

因此相对于 H 和 H' , 配分函数是相同的。一般地, 方程(1)无法精确求解, 只能采用各种近似方法进行计算。不同的近似导致不同的重正化方案。

累积量展开是第一个对方程(1)进行近似计算的方法^[2]。为了推导这种方法的计算公式, 我们把晶格分成一些小格子 (cell), 每个小格子由若干格点组成。格点上的自旋称为格点自旋, 记为 σ , 格子中所有格点自旋按照某一原则(比如多数原则)平均为一个新的自旋, 称为格子自旋, 记为 σ' , 自旋 σ' 和 σ 所占有的线度之比称为重正化群变换的标度因子。如果把哈密顿量分成格子内的相互作用和格子之间的相互作用两部分, 即

$$H(\sigma) = H_0(\sigma) + V(\sigma), \quad (3)$$

并定义平均值:

$$\langle A \rangle_0 = \sum_{\sigma} P(\sigma', \sigma) A(\sigma) \exp[H_0(\sigma)] / \sum_{\sigma} P(\sigma', \sigma) \exp[H_0(\sigma)], \quad (4)$$

则由(1)式有

$$H'(\sigma') = \ln Z_0(\sigma') + \ln \langle \exp[V(\sigma)] \rangle_0. \quad (5)$$

这里

$$Z_0(\sigma') = \sum_{\sigma} P(\sigma', \sigma) \exp[H_0(\sigma)], \quad (6)$$

引入累积量展开:

$$\ln \langle \exp[V(\sigma)] \rangle_0 = \langle V \rangle_0 + \frac{1}{2!} [\langle V^2 \rangle_0 - \langle V \rangle_0^2] + \dots, \quad (7)$$

比较(5)式左右两端相同自旋相互作用项前的耦合常数, 可得到一组重正化变换的递推方程

$$\mathbf{K}' = f(\mathbf{K}). \quad (8)$$

这里 $\mathbf{K}$ 表示由耦合常数组成的参数空间的向量 $\mathbf{K}(k_1, k_2, \dots)$. 不动点由方程

$$\mathbf{K}^* = f(\mathbf{K}^*) \quad (9)$$

决定. 一般这种变换是非线性的. 在不动点附近将重正化变换线性化, 得矩阵

$$T_{\alpha\beta}^* = \left(\frac{\partial K_{\alpha}}{\partial K_{\beta}} \right)_{\mathbf{K}^*}. \quad (10)$$

由该矩阵的本征值, 可求出相变系统的临界指数^[8].

三、一种推广的伊辛自旋模型

伊辛自旋模型^[9]是一个十分重要的统计模型. 理论上, 它是第一个被严格求解并表明有相变存在的统计模型; 实验上, 它可以用来描述铁磁相变、格气、二元合金以及 DNA 的融化等. 根据伊辛模型, 人们提出了一些很有意义的推广模型. 这里我们提出一个新的推广模型.

1. 模型

为了描述亚铁磁相变问题, Schofield 和 Bowers^[5] 提出了一个混合自旋模型. 该模型由自旋 1/2 和自旋 1 混合组成, 其结构如图 1 所示. 图 1 中“×”和“○”分别表示自旋 1/2 和自旋 1. 由于它有二个互相穿透的子晶格(每个子晶格由不同的自旋占据). 因此可以作为一种特殊形式的单轴亚铁磁模型. 之所以这样称呼, 是因为混合模型的两个子晶格之间不是反铁磁相互作用, 只是与 Néel^[10] 的亚铁磁模型具有相同的晶格结构和对称性. 我们分别用 $\bar{\sigma}$ 和 s 来表示自旋 1/2 和自旋 1 的大小. 如果只考虑最近邻相互作用, 哈密顿量可记为

$$\mathcal{H}\{\bar{\sigma}, s\} = K' \sum_{ij} \bar{\sigma}_i s_j \quad (11)$$

这里 $\bar{\sigma} = \pm \frac{1}{2}$, $s = 0, \pm 1$. $K' \equiv -\beta J$ 表示约化耦合常数. 为了研究混合模型与伊辛

模型是否属于同一普适类的问题。我们把(11)式推广为

$$\mathcal{H}\{\sigma, s\} = k \sum_{ij} \sigma_i s_j + G \sum_i s_i^2. \quad (12)$$

这里 $\sigma_i = 2\bar{\sigma}_i = \pm 1$, $k = k'/2$. 参量 G 的大小可以调节自旋 1 取 ± 1 态和取零态的相对几率。 G 趋向于无穷大时, 自旋 1 只能取 ± 1 , $\mathcal{H}$ 退化为伊辛模型。 G 等于零时自旋 1 以相等的几率取 $+1, -1$ 和 0 , 这时对应于混合模型。随着 G 的减少, 自旋 1 取零态的几率相对增加。尽管只有自旋 1

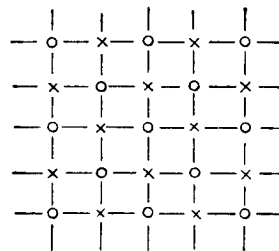
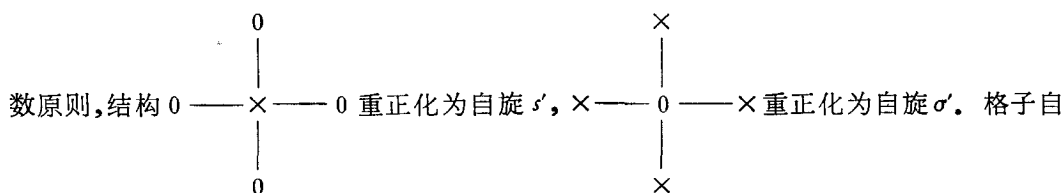


图 1

的子晶格上才有可能取零态, 但由于我们只考虑最近邻相互作用, 自旋 1/2 只能与自旋 1 发生相互作用。随着自旋 1 取零态的几率增加, 整个系统的相互作用大大减弱, 相变温度随之变小。由于相互作用是有序的来源, 因此当相互作用太弱时将不会有长程序存在, 即不可能发生连续相变。我们还可以从另一个角度来分析这个问题, 即把零态看成一个空穴, 这样, 自旋 1/2 子晶格全由自旋 1/2 占据, 自旋 1 子晶格看成是由自旋 1/2 和空穴占据。参数 G 是自旋 1/2 占据自旋 1 子晶格的化学势, 其大小可改变自旋 1 子晶格上自旋 1/2 或空穴的数目。 G 趋向于无穷大时, 自旋 1 子晶格上无空穴, 两个子晶格全由自旋 1/2 占据, 这时对应伊辛模型。随着 G 的减少, 空穴数目增加。由于我们现在考虑的是退火的情况, 在热平衡条件下, 空穴可以运动。为了系统的稳定, 它们有聚积起来形成集团的趋势。当空穴数目增加到一定量时, 自旋 1/2 不能形成无穷大集团, 从而不可能建立起长程序, 系统无连续相变。然而, 有限的自旋 1/2 集团和等效空穴集团的形成可使系统发生一级相变。所谓等效的空穴集团是指该集团中自旋 1 子晶格全部由空穴占据。尽管该集团中的自旋 1/2 子晶格上由自旋 1/2 占据着, 但自旋间均由空穴隔开, 相互之间无作用, 与完全由空穴组成的集团等效。由于推广模型既有连续相变又有一级相变, 因此我们期待推广模型有一个三相临界点。

2. 重正化方案与递推关系

我们运用第一阶累积量展开来分析这个推广模型。格子的化分如图 2 所示。按照多



数原则, 结构 0 — $\times$ — 0 重正化为自旋 s' , $\times$ — 0 — $\times$ 重正化为自旋 σ' 。格子自旋 s' 和 σ' 的取值由多数原则决定, 即五个格点自旋至少有三个取某一值时, 格子自旋也取该值。对 σ' , 所有无法由多数原则决定的构形, 比如: $\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, s\} = \{1, -1, 1, -1, 0\}$ 等, 分别对 $\sigma' = \pm 1$ 贡献一半。对 s' , 无法由多数原则决定的构形, 比如 $\{s_1, s_2, s_3, s_4, \sigma\} = \{1, 1, -1, 0, -1\}$ 等, 由符号法则决定, 即

$$s' = \text{sgn} \left\{ \sum_{i=1}^4 s_i + \sigma \right\}. \quad (13)$$

这里, 我们定义 $\text{sgn}(0) = 0$ 。

对于第一阶累积量近似, 重正化方程(5)为

$$H(\sigma', s') = \ln Z_0(\sigma', s') + \langle V(\sigma, s) \rangle_0. \quad (14)$$

对于现在的情况, $V(\sigma, s)$ 具有如下形式:

$$V(\sigma, s) = K\sigma_1 s_1 + K\sigma_2 s_2 + K\sigma_1 s_2 + \dots \quad (15)$$

由于平均对 H_0 进行, 而 H_0 只含有格子内格点自旋的相互作用项. 因此

$$\langle V \rangle_0 = K\langle \sigma_1 \rangle_0 \langle s_1 \rangle_0 + K\langle \sigma_2 \rangle_0 \langle s_2 \rangle_0 + \dots \quad (16)$$

这样, 只须考虑两个格子(见图 3), 因为任意两格子自旋之间的相互作用是一样的. (14) 式可简化为

$$H(\sigma', s') = \ln Z_0(\sigma') Z_0(s') + K(\langle \sigma_1 \rangle_0 \langle s_1 \rangle_0 + \langle \sigma_2 \rangle_0 \langle s_2 \rangle_0 + \langle \sigma_1 \rangle_0 \langle s_2 \rangle_0). \quad (17)$$

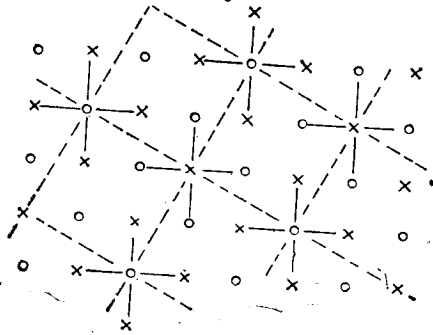


图 2

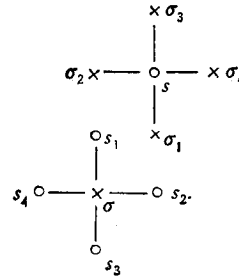


图 3

这里

$$Z_0(\sigma') = \sum_{\{s_i\}} \exp[K \cdot s \cdot (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4) + Gs^2], \quad (18)$$

$$Z_0(s') = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp[K \cdot \sigma \cdot (s_1 + s_2 + s_3 + s_4) + G(s_1^2 + s_2^2 + s_3^2 + s_4^2)], \quad (19)$$

$$\langle \sigma_i \rangle_0^{\sigma'} = [Z_0(\sigma')]^{-1} \sum_{\{s_i\}} \sigma_i \exp[K \cdot s \cdot (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4) + Gs^2], \quad (20)$$

$$\langle s_i \rangle_0^{s'} = [Z_0(s')]^{-1} \sum_{\{\sigma_i\}} s_i \exp[K \cdot \sigma \cdot (s_1 + s_2 + s_3 + s_4) + G(s_1^2 + s_2^2 + s_3^2 + s_4^2)]. \quad (21)$$

以上求和只对 σ' 或 s' 取某一值有贡献的构形进行. 例如求 $Z_0(\sigma' = 1)$ 时, 只对为重正化意义下属于 $\sigma' = 1$ 的那些构形求和, 自旋平均值上标 σ' 和 s' 分别表示它们与格子自旋有关. 由于 $Z_0(\sigma' = 1) = Z_0(\sigma' = -1)$, 因此 $Z_0(\sigma')$ 是一个与 σ' 无关的常数. 而 $Z_0(s' = 1) = Z_0(s' = -1) \neq Z_0(s' = 0)$, 因此 $Z_0(s')$ 与 s' 有关. 记 $Z_0(s' = 1) = Z_0(s' = -1) = A$ 和 $Z_0(s' = 0) = B$, 有

$$Z_0(s') = (A - B)s'^2 + B = B \cdot \exp[\ln(A/B) \cdot s'^2]. \quad (22)$$

此外 $\langle \sigma_i \rangle_0^{\sigma'=1} = -\langle \sigma_i \rangle_0^{\sigma'=-1}$, $\langle s_i \rangle_0^{s'=1} = -\langle s_i \rangle_0^{s'=-1}$ 及 $\langle s_i \rangle_0^{s'=0} = 0$. 记 $\langle \sigma_i \rangle_0^{\sigma'=1} = C$, $\langle s_i \rangle_0^{s'=1} = D$, 则

$$\langle \sigma_i \rangle^{\sigma'} = C\sigma', \quad (23)$$

$$\langle s_i \rangle^{s'} = Ds'. \quad (24)$$

把(22), (23)和(24)式代入(17)式, 并要求重正化后的哈密顿量保持原来的形式, 即

$$H'(\sigma', s') = \sum_{ij} K' \sigma'_i s'_j + \sum G' s_i^2 + \text{常数项}. \quad (25)$$

比较(17)式两端相同自旋相互作用项的系数, 可得重正化递推关系

$$K' = 3 \cdot K \cdot C \cdot D, \quad (26a)$$

$$G' = \ln(A/B). \quad (26b)$$

由上述的重正化方案, 计算(18)–(21)式, 可得

$$A = (8\text{ch}(2K) + 2\text{ch}(4K) + 6) \cdot \exp(4G) \\ + (12\exp K + 8\text{ch}(3K)) \cdot \exp(3G) + (12\text{ch}(2K) + 12) \cdot \exp(2G), \quad (27)$$

$$B = 24\exp(-K) \cdot \exp(3G) + 16\text{ch}K \cdot \exp G + 2, \quad (28)$$

$$Z_0(\sigma') = (8\text{ch}(2K) + 2\text{ch}(4K) + 6) \cdot \exp G + 8, \quad (29)$$

$$C = [Z_0(\sigma')]^{-1}[(2\text{ch}(4K) + 4\text{ch}(2K)) \cdot \exp G + 3], \quad (30)$$

$$D = [(4\text{ch}(2K) + 2\text{ch}(4K)) \cdot \exp(4G) + (3\exp K + 6\text{ch}(3K))\exp(3G) \\ + 6\text{ch}(2K) \cdot \exp(2G)] \cdot A^{-1}. \quad (31)$$

3. 计算结果

解方程(26), 我们得到三个非平庸不动点. 根据前面的分析, 其中一个对应伊辛不动点. 一个是三相不动点, 最后一个对应一级相变不动点. 它们在参数空间 (K, G) 的位置分别为

$$I \text{ (伊辛不动点)} \quad (0.593, \infty);$$

$$T \text{ (三相不动点)} \quad (1.623, -4.1982);$$

$$F \text{ (一级相变不动点)} \quad (\infty, -2K^*).$$

伊辛不动点只有一个关涉量, 本征值 $\lambda_T = 2.0643$, 对应的热指数 $y_T = 0.901$. 精确值 $y_T = 1$. 考虑到这是第一阶累积量展开, 我们的结果已经是好的了. 因为一般第一阶累积量展开得到的结果为 $y_T = 0.894^{[8]}$. 三相不动点具有两个关涉量, 本征值分别为 $\lambda_1 = 3.0978$, $\lambda_2 = 1.3538$. 对应的指数 $y_1 = 1.405$, $y_2 = 0.377$. 交叉指数 $\varphi = y_2/y_1 = 0.268$. 相图(见图4)中的临界面被三相不动点分为连续相变临界面 TI 和一级相变临界面 TF. 临界面 TI 上的点(T点除外)流向伊辛不动点. TI 上的点所对应的系统均与伊辛模型属于同一普适类. 一级相变临界面 TF 上的点(T点除外)流向一级相变

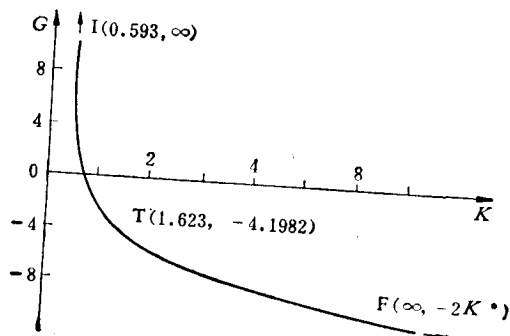


图4

不动点 F, 从相图中清楚看到, 点 $G = 0$ (对应混合模型) 位于连续相变临界面 TI 上, 因此, 混合模型与伊辛模型属于同一普适类. 这个结论与临界指数计算的精确度无关. 如果我们考虑更高阶的累积量展开, 将会得到更精确的临界点和临界指数.

参 考 文 献

- [1] K. G. Wilson, *Phys. Rev.*, B4 (1971), 3174; 3184.
- [2] T. Niemeijer and J. M. J. van Leeuwen, *Phys. Rev. Lett.*, 31 (1973), 1411.
- [3] M. P. Nightingale, *Physica* (Utrecht), A83 (1976), 561.
- [4] S. K. Ma, *Phys. Rev. Lett.*, 37 (1976), 461.
- [5] S. L. Schofield and R. G. Bowers, *J. Phys. A*, 13 (1980), 3697.
- [6] L. E. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics*, University of Texas Press, (1980), 316.
- [7] P. Pfeuty and G. Toulouse, *Introduction to the Renormalization Group and to Critical Phenomena*, John Wiley and Sons Ltd. (1977).
- [8] T. Niemeijer and J. M. J. van Leeuwen, in *Phase Transitions and Critical Phenomena* Vol. 6, Edited by C. Domb and M. S. Green, Academic, (1976), 425.
- [9] E. Ising, *Z. Phys.*, 31(1925), 251.
- [10] L. Neel, *Ann. Phys. Paris*, 3(1948), 137.

A GENERALIZED MIXED SPIN MODEL: A RENORMALISATION GROUP APPROACH

TANG KUN-FA HU JIA-ZHEN

(Department of Applied Physics, Institute of Condensed Matter Physics,
Shanghai Jiaotong University)

ABSTRACT

We propose a generalized Ising spin model, which contains the pure Ising model, the mixed spin model proposed by Schofield and Bowers and the particular site-diluted Ising spin model as special cases. A real space renormalisation group is applied to this model, the phase diagram is found to have three nontrivial fixed points (a Ising, a tricritical and a first order phase transition point). And it is demonstrated that mixed spin model and pure Ising spin model belong to the same universality, which is in agreement with the conclusion made by Schofield and Bowers who calculated the critical exponents of mixed model directly.