

T-H 模型临界面的确定和相变研究

范卫军 孙凤国

(国防科学技术大学应用物理系)

1987 年 6 月 3 日收到

运用实空间重整化群得到了六角格子上 T-H 模型的相变流图、非平凡不动点、热指数等。用平均场自治方程组确定了 T-H 模型的一级相变、二级相变临界面及三临界点。由 r - Δ 变换严格给出了 T-H 模型的临界面和部分临界指数。

一、引 言

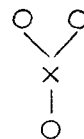
1980 年 Schofield 和 Bowers^[1] 提出了一种自旋 1/2 和自旋 1 相间排列的混合自旋模型,作为一种可能的单轴亚铁磁模型。为了考察这种混合模型的普适类,1986 年唐坤发和胡嘉桢^[2]两人提出了一种推广的伊辛自旋模型(为行文方便我们称之为 T-H 模型),其哈密顿量为

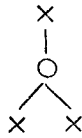
$$\mathcal{H} = -\frac{H}{k_B T} = K \sum_{ij} \sigma_i s_j + G \sum_i s_i^2, \quad (1)$$

式中 $\sigma_i = \pm 1$, $s_i = 0, \pm 1$, 第一个求和遍及所有近邻对参量 G 的大小可以调节自旋 s 取 ± 1 态和取 0 态的相对几率。 G 取正无穷大时,自旋 s 只能取 ± 1 , T-H 模型退化为伊辛模型。 G 等于零时,自旋 s 以相等的几率取 ± 1 和 0,这时 T-H 模型化为混合模型。唐坤发和胡嘉桢两人通过实空间重整化群累积量展开的计算给出了正方格子上 T-H 模型在 (K, G) 参数平面上的相图和三个非平凡不动点:伊辛不动点、三临界不动点和一级相变不动点。在三临界点以上的临界面上发生二级相变,在三临界点以下的临界面上发生一级相变。这里分别用重整化群、平均场和 r - Δ 变换给出了六角格子上 T-H 模型的相图,研究了临界面上的相变行为。

二、实空间重整化群的计算

选取集团、划分格子如图 1 所示。图中 $\times$ 和 $\circ$ 分别表示自旋 1/2 和自旋 1,



重整化为自旋 s' ,  重整化为自旋 σ' 。自旋 s' 和 σ' 的取值由下列规则确定:对 s' ,

集团中有两个以上自旋为 0 时, s' 确定为 0, 其余情况 s' 视集团中心 σ 取值确定为 ± 1 。

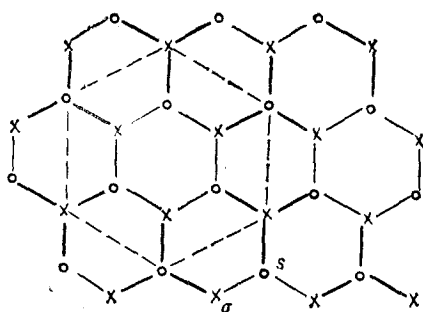


图 1

粗线为集团内相互作用；细线为集团间相互作用

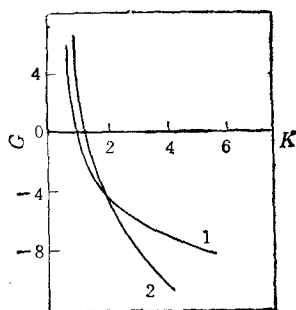


图 2

1 为正方格子；2 为六角格子

对 σ' , 集团中心 s 为 ± 1 时 σ' 也相应取 ± 1 , 中心 s 为 0 的构形分别对 $\sigma' = \pm 1$ 贡献一半。按照唐坤发和胡嘉桢两人的方法, 一阶累积量展开给出重整化递推关系

$$K' = 2KCD, \quad (2)$$

$$G' = \ln A/B, \quad (3)$$

式中

$$A = 2(\text{ch}3K + 3\text{ch}K)\exp 3G + 6(\text{ch}2K + 1)\exp 2G, \quad (4)$$

$$B = 12\text{ch}K \cdot \exp G + 2, \quad (5)$$

$$C = 2[(\text{sh}3K + \text{sh}K)\exp G + 1]/Z_0(\sigma'), \quad (6)$$

$$D = [2(\text{sh}3K + \text{sh}K)\exp 3G + 4\text{sh}2K \cdot \exp 2G]/A \quad (7)$$

$$Z_0(\sigma') = 2(\text{ch}3K + 3\text{ch}K)\exp G + 2. \quad (8)$$

计算得到的相图与唐坤发、胡嘉桢两人在正方格子上的结果一起画在图 2 中。

表 1 列出了所得不动点、本征值等。作为比较, 文献[2]的结果也列在表 1 中。

表 1

		a	b	c
六角格子	不动点	$(0.881, \infty)$	$(1.858, -3.871)$	$(\infty, -3K)$
	本征值	2.2528	2.6556 1.1968	
	相应指数	1.172	1.409 0.259	
正方格子	不动点	$(0.593, \infty)$	$(1.623, -4.198)$	$(\infty, -2K)$
	本征值	2.0643	3.0978 1.3538	
	相应指数	0.901	1.405 0.377	

a 为伊辛不动点； b 为三临界不动点； c 为一级相变不动点。

三、T-H 模型的平均场处理

在平均场近似 (MFA) 下, 六角格子上的 T-H 模型的有效哈密顿量可写成

$$\mathcal{H} = 3K\langle s \rangle \sigma_i + G\langle s \rangle^2. \quad (9)$$

由(9)式得

$$\langle \sigma \rangle = \text{th}(3K\langle s \rangle). \quad (10)$$

同样可将有效哈密顿量写成

$$\mathcal{H} = 3K\langle \sigma \rangle s_i + Gs_i^2. \quad (11)$$

由(11)式得

$$\langle s \rangle = \frac{2\text{sh}(3K\langle \sigma \rangle) \cdot \exp G}{1 + 2\text{ch}(3K\langle \sigma \rangle) \cdot \exp G}. \quad (12)$$

(10)和(12)式是自洽求解 $\langle \sigma \rangle$ 和 $\langle s \rangle$ 的方程组. 不难看出 $\langle \sigma \rangle = \langle s \rangle = 0$, 永远是方程组的解. 但在 (K, G) 参数平面上存在一条临界曲线, 在曲线一侧方程组只有零解, 在另一侧方程组则存在非零解. 在发生二级相变的临界点, $\langle \sigma \rangle, \langle s \rangle$ 是连续的, 即在临界点附近 $\langle \sigma \rangle \rightarrow 0, \langle s \rangle \rightarrow 0$. 我们对(10), (12)式作泰勒展开得到

$$\langle \sigma \rangle = 3K\langle s \rangle, \quad (13)$$

$$\langle s \rangle = \frac{6K \exp G}{1 + 2 \exp G} \langle \sigma \rangle. \quad (14)$$

因此二级相变的临界面方程为

$$G = -\ln 2(9K^2 - 1). \quad (15)$$

对正方格子上的 T-H 模型也可类似处理. 虽然平均场方法是很粗糙的方法, 但定性上看(15)式给出的相图与重整化群的结果相似. 更有趣的是对(10), (12)式叠代求解 $\langle \sigma \rangle, \langle s \rangle$ 随参数 K, G 的变化可以给出一级相变、二级相变和三临界点, 这是不多见的. 图 3 给出了由方程(15)和数值方法确定的临界面.

图 4 是发生一级、二级相变时自旋平均值改变的典型曲线. 数值叠代的计算确定三临界点位置是 $(K, G) = (0.76 \pm 0.08, -2.1 \pm 0.2)$.

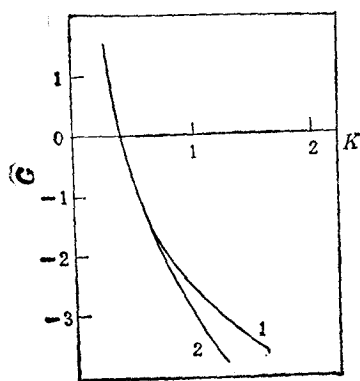


图 3

1 为(15)式给出的结果; 2 为数值结果

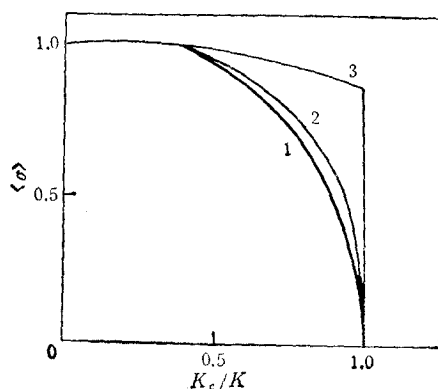


图 4

1 为 $G/K = \infty, K_c = 0.333$; 2 为 $G/K = 0, K_c = 0.408$; 3 为 $G/K = -3.13, K_c = 1.319$

四、六角格子上 T-H 模型临界面的严格解

在六角格子上 T-H 模型可以通过 γ - Δ 变换^[3,4]化成三角格子上的伊辛模型。如图 5 作 γ - Δ 变换

$$\sum_{\sigma_i=0\pm1} \exp[Ks_0(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) + Gs_0^2] = R \exp[L(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_1)], \quad (16)$$

R 和 L 是待定的参数。表面上看 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ 都可取 ± 1 , (16) 式好象会给出八个方程, 但实际上 (16) 式两端对所有自旋倒向和 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ 的轮换均不变, 因此它只给出两个方程

$$1 + 2 \exp G \cdot \text{ch} 3K = R \exp 3L, \quad (17a)$$

$$1 + 2 \exp G \cdot \text{ch} K = R \exp(-L). \quad (17b)$$

从 (17) 式容易得到

$$\exp 4L = \frac{1 + 2 \exp G \cdot \text{ch} 3K}{1 + 2 \exp G \cdot \text{ch} K}, \quad (18a)$$

$$R = \left(\frac{1 + 2 \exp G \cdot \text{ch} 3K}{1 + 2 \exp G \cdot \text{ch} K} \right)^{1/4} \cdot (1 + 2 \exp G \cdot \text{ch} K). \quad (18b)$$

满足 (17) 式的 K, G 所描述的六角格子上的 T-H 模型转化成了相互作用参数为 L 的三角格子上的伊辛模型。它们的配分函数满足关系

$$Z_{2N}^{T-H} = R^N Z_N^I \quad (19)$$

式中 Z_{2N}^{T-H} 和 Z_N^I 分别是具有 $2N$ 个格点的六角格子上 T-H 模型和 N 个格点的三角格子上伊辛模型的配分函数。每格点的自由能 ϕ

$$-\phi = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_N. \quad (20)$$

因此

$$\phi^{T-H}(K, G) = \frac{1}{2} \ln R + \frac{1}{2} \phi^I(L), \quad (21)$$

式中 $\phi^{T-H}(K, G)$ 和 $\phi^I(L)$ 分别是 T-H 模型和伊辛模型每格点的自由能。由于 K, G 是实量, R 是 K, G 的解析函数, 因此 T-H 模型自由能对温度的奇异性与伊辛模型的相

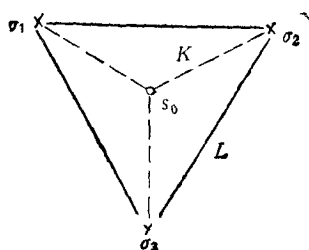


图 5

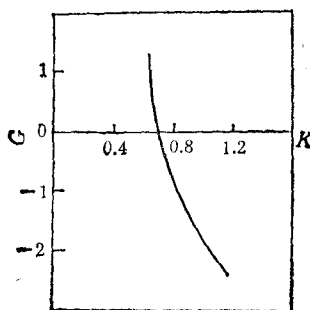


图 6 严格解确定的临界面

同,也就是说它们有相同的比热临界指数 α . 三角格子上的伊辛模型早有严格解,其临界点 $L_c = 0.274653 \cdots$ 满足 $\exp 4L_c = 3$, 这样从 (18a) 式可知 T-H 模型的临界面由下式确定:

$$\frac{1 + 2 \exp G \cdot \operatorname{ch} 3K}{1 + 2 \exp G \cdot \operatorname{ch} K} = 3. \quad (22)$$

它可写成

$$G = -\ln(\operatorname{ch} 3K - 3 \operatorname{ch} K). \quad (23)$$

图 6 给出了由 (23) 式确定的临界面. 其实这种解法还不限于 T-H 模型, 我们更普遍地考虑模型

$$\mathcal{H} = K \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j + G \sum_i s_i^2. \quad (24)$$

这里 $s_i = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm N$; $\sigma_i = \pm 1$. 同样作 r - Δ 变换给出

$$\exp 4L = \frac{1 + \sum_{m=1}^N 2 \exp(m^2 G) \cdot \operatorname{ch} 3mK}{1 + \sum_{m=1}^N 2 \exp(m^2 G) \cdot \operatorname{ch} mK}, \quad (25a)$$

$$R = \left(\frac{1 + \sum_{m=1}^N 2 \exp(m^2 G) \cdot \operatorname{ch} 3mK}{1 + \sum_{m=1}^N 2 \exp(m^2 G) \cdot \operatorname{ch} mK} \right)^{1/4} \cdot \left(1 + \sum_{m=1}^N 2 \exp(m^2 G) \cdot \operatorname{ch} mK \right). \quad (25b)$$

其相图亦可类似地确定, 这里不再赘述.

我们严格确定了六角格子上 T-H 模型的相图及临界指数 α , 但由于导出的配分函数关系中不含磁场, 因此还不能确定临界指数 β 和 γ , 也无法给出临界面上的三临界点.

1 S. L. Schofield and R. G. Bowers, *J. Phys. A*, **13**(1980), 3697.

2 唐坤发、胡嘉桢, 物理学报, **35**(1986), 1048.

3 C. Domb, *Adv. in Phys.*, **9**(1960), 149.

4 I. Syozi, *Transformation of Ising Models (ibid)*, **1** (1972), 268.

STUDIES OF THE CRITICAL SURFACE AND PHASE TRANSITION OF THE T-H MODEL

FAN WEI-JUN SUN FENG-GUO

(Department of Applied Physics, National University of Defence Technology, Changsha)

ABSTRACT

The critical properties of a generalized mixed spin model (T-H model) on two dimensional hexagonal lattice are studied by using real space renormalization group and mean field methods. An Ising, a tricritical and a first-order phase transition fixed point are found. At last, some exact results of this model are found by using star-triangle transformation method.