

三维 Ising 模型矩阵解法的简化与近似解

陈 小 余

(中国计量学院物理室, 杭州 310034)

(1994 年 4 月 20 日收到)

利用 Ising 模型在无外场周期边界条件下的哈密顿量的对称性, 对矩阵进行块对角化, 严格求得 $2 \times 2 \times n$ 简单立方晶格 Ising 模型的解析解, 对其他两种自旋集团较小的情况的热力学函数自由能进行数值计算, 在数据拟合的基础上提出一种近似解。

PACC: 7510H; 0550

1 引 言

三维 Ising 模型的研究, 历来是临界现象、理论磁学等领域中非常有兴趣的课题之一。自二维 Ising 模型的严格解被求出以来, 三维 Ising 模型的严格解, 一直是 50 多年来悬而未决的难题。近似的解法方面, 人们已做了许多工作, 如 Bethe 方法^[1]、Kichuchi 组合论方法^[2]、级数展开法、重整化群方法^[3]、格林函数法^[4]、超对称法^[5]等。Narumi 等人^[6]对 $2 \times 3 \times n$ 自然边界条件用组合论方法对严格解进行了理论探讨。

本文采用矩阵方法^[7], 先分析周期边界条件下简单立方晶格的哈密顿量的对称性, 对自旋集团的位形分布作分类, 利用量子力学共同本征态的方法将矩阵块对角化, $2 \times 2 \times n$ 情形可求得严格解, $2 \times 3 \times n$ 和 $2 \times 4 \times n$ 的情形在块对角化以后, 计算大为简化, 其数值解与本文给出的近似解在较精确的范围内符合。

2 块对角化

自旋为 $1/2$ 的三维 Ising 模型考虑最近邻相互作用的哈密量为^[7]

$$H = -J \sum_{i,j,k} (s_{ij}^k s_{i+1,j}^k + s_{ij}^k s_{i,j+1}^k + s_{ij}^k s_{i,j}^{k+1}),$$

式中 s_{ij}^k 为晶格位置 (i, j, k) ($i = 1, \dots, l; j = 1, \dots, m; k = 1, \dots, n$) 的格点上磁性原子的自旋分量, 取值 ± 1 , $J/2$ 为交换积分, 我们已令外磁场 $B = 0$, 配分函数 Z 的计算公式为

$$Z = \sum_{s_{ij}^k = \pm 1} e^{-\beta H}.$$

求和对所有的自旋及其取值进行, 用 $\mu^k = \mu^k(s_{11}^k, s_{12}^k, \dots, s_{lm}^k)$ 表示第 k 层上自旋集团的位形分布, 且令

$$E(\mu^k, \mu^{k+1}) = -\frac{J}{2} \sum_{ij} (2s_{ij}^k s_{ij}^{k+1} + s_{ij}^k s_{i+1,j}^{k+1} + s_{ij}^{k+1} s_{i+1,j}^k + s_{ij}^k s_{i,j+1}^{k+1} + s_{ij}^{k+1} s_{i,j+1}^k),$$

则哈密顿量 $H = \sum_k E(\mu^k, \mu^{k+1})$. 引入矩阵 Q , 其矩阵元定义为

$$\langle \mu^k | Q | \mu^{k+1} \rangle = \exp\{-\beta E(\mu^k, \mu^{k+1})\},$$

则配分函数 $Z(T) = \text{Tr}(Q^n)$.

上式已利用了周期边界条件, 且 Q 矩阵是对称的. 将 $E(\mu^k, \mu^{k+1})$ 简记为 E , μ^k 简称为态矢, 如果存在算符 P , 使 $[PE]=0$, 则 $P e^{-\beta E} P^{-1} = e^{-\beta E}$, Q 的矩阵元变为 $\langle \mu^k | P^{-1} Q P | \mu^{k+1} \rangle$, 这样我们要求 $P^r = 1$, r 为整数. 平移算符、使所有自旋都反号的算符 Q 和按晶格几何对称面反射的算符都满足上述性质. 将沿 i 方向平移一个晶格长度的算符记为 P_i , 即把每个自旋的下标 i 换为 $i+1$, j 方向记为 P_j , 反射算符记为 R_i, R_j , 则这些算符及其乘积构成一个群 G . 由于哈密顿量的整体平移不变性、反射不变性及所有自旋都反号下的不变性, 群 G 的每一元素与 E 对易.

用 G 作用在态矢 $|\mu^k\rangle$ 上, 当群元素 g 跑遍群 G 时, 得到的所有态矢归为一类. 由于有些群元素作用在态矢上, 得到相同的态矢, 故一般态矢类的大小(类内态矢数目)要小于群 G 的阶数.

这样把所有的态矢分为许多类, 把属于同一类的态矢排列在一起, 所有的态矢按类排列, 这样 Q 矩阵被重新排列.

对于对称矩阵 Q , 按 $k=1$ 计算出矩阵元并重新排列好以后, 寻找一个与 Q 同阶的对称矩阵 T , 为使问题简化, 让 T 与参量 βJ 无关, 且 T 是块对角化的, 其块的大小与态矢类的大小相同. 确定 T 矩阵的矩阵元是非常繁杂的工作, 使 Q 与 T 对易, 定出 T 的矩阵元. 这样定出的 T 的矩阵元在块与块之间有很强的联系, 求出 T 矩阵各块的本征态和本征值, T 矩阵各块的本征值由于上述块矩阵元的线性联系, 有许多是相同的, 对同一本征值的各块态矢作线性组合(保持块矢量在总态矢中的位置不变), 即得到 Q 矩阵的本征态矢, 这样 Q 矩阵即块对角化. 其块的大小由 T 矩阵各块本征值重合程度决定, 与 T 矩阵的块是不同的概念. Q, T 对易, 两者有共同本征态矢, Q 进一步解除 T 的简并.

为使问题清楚起见, 假设群 G 作用在态矢 $|\mu^1\rangle = |\mu^1(s_{11}, s_{12}, \dots, s_{1n})\rangle$ 上, 把态矢分为两类, 重新标记为 $|\nu\rangle$ 与 $|\omega\rangle$ 两类, 两类态矢个数之和为 2^l 个. 令实对称矩阵 Q 在按两类态矢重新排列后有形式

$$Q = \begin{bmatrix} A & B \\ B^T & C \end{bmatrix},$$

其中 A, C 分别为作用在 $|\nu\rangle$ 和 $|\omega\rangle$ 子空间上的 Q 的实对称子矩阵, B 为 $|\nu\rangle, |\omega\rangle$ 交错下的实矩阵, B^T 为 B 的转置. 令未知的块对角实对称矩阵 T 为

$$T = \begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{bmatrix},$$

其中 a, b 为实对称子矩阵, 且 a, b 分别与 A, C 同阶. 这时由 $[QT]=0$, 有

$$[Aa] = 0, [Cb] = 0,$$

$$Bb - aB = 0, B^T a - bB^T = 0.$$

显然后两式相同, 都表示 a, b 两矩阵的矩阵元不是独立的. 由于 B 矩阵的各矩阵元都为

$e^{k' \beta J}$ 的形式,而 a, b 矩阵设与参量 βJ 无关,由矩阵公式 $Bb - aB = 0$ 得到的写成矩阵元的一系列等式的每一个都可写成

$$\sum_{k'} d_{k'} e^{k' \beta J} = 0,$$

其中 $d_{k'}$ 为 a, b 矩阵元的线性组合。由于上式对任意的 βJ 都成立,只有让 $d_{k'} = 0$, 即为 a, b 矩阵元之间在线性联系。同样的方法用于 $[Aa] = 0$ 可确定 a 矩阵内部矩阵元的联系。这些联系使得 a 矩阵可用较少的任意参数表示,对解出 a 矩阵的本征值是有利的。实际上如果子空间 $|v\rangle$ 按群论各元素作用的适当顺序排列, a 矩阵的对称性非常明显,其对称性与群的作用相应。

对于本文的问题,群 G 把态矢分为许多类,方法与上述一样。也可分步进行,把 a 写成块对角化的,如果 A 还包含两个不同的类。 a, b 矩阵元的选择仍然有很大的自由度。选择的原则是使 T 矩阵本征值尽可能少地简并,同时使其本征态矢较简单。在这些本征态的表象下, Q 矩阵是块对角化的。

3 计算结果

对点阵为 $2 \times 2 \times n$ 的简单立方晶格的 Ising 模型,在周期边界条件下,用上述方法块对角化以后,最大块的阶数为 4 阶,其余的为 2 阶或 1 阶,因此是严格可解的。 Q 矩阵的 16 个本征值可以归纳为下列公式:

$$\lambda = (2 \sinh 2\beta J)^2 \exp \left[\frac{1}{2} (\pm r_0 \pm r_2 \pm r_4 \pm r_6) \right]$$

$$\text{与} \quad \lambda = (2 \sinh 2\beta J)^2 \exp \left[\frac{1}{2} (\pm r_1 \pm r_3 \pm r_5 \pm r_7) \right],$$

其中 $r_{k'}$ 由下式决定:

$$\cosh r_{k'} = \cosh 2\phi \cosh 2\theta - \cos \frac{\pi k'}{4} \sinh 2\phi \sinh 2\theta,$$

$$k' = 0, 1, \dots, 7, \phi = 2\beta J, \theta = \tanh^{-1} e^{-2\beta J}.$$

可以看出 $2 \times 2 \times n$ 的解与 $4 \times n$ 平面长方晶格的解相同,相当于在垂直于 k 轴的方向用双键的线键代替面上键构形,因此是平凡的,不是真正的三维问题。

对 $2 \times 3 \times n$ 的情况,64 个态矢分为 8 类,各类的大小分别为 2, 2, 6, 6, 12, 12, 12, 12 依此选择 T 矩阵,使 Q 矩阵块对角化以后,若将原 64 阶矩阵写成块大小之和为 $8 \oplus 2 \times 6 \oplus 2 \times 5 \oplus 2 \times 5 \oplus 5 \oplus 5 \oplus 2 \times 4 \oplus 2 \times 2 \oplus 2 \times 1$, 其中 $2 \times$ 表示 2 个完全相同的块,4 阶以下为可解的,有 14 个根可严格求得,另外其中一个 5 次的可分解为 $1 \oplus 4$ 。对计算配分函数有意义的是最大本征值。最大本征值在最高阶数 8 的子块中,只能进行数值计算, $2 \times 4 \times n$ 的情况更加繁杂而已。256 个态矢分为 22 类,各类的大小分别为 2, 2, 2, 2, 4, 4, 8, 8, 8, 8, 8, 8, 16, 16, 16, 16, 16, 16, 16, 16, 32, 32, 块对角化以后块的最高阶数为 22 阶。最大本征值在 22 阶的子矩阵中。

当 $n \rightarrow \infty$ 时,配分函数只与最大本征值有关,可把配分函数写成两部分的乘积,第一部分为行列式因子 $(2 \sinh 2\beta J)^{\frac{in}{2}}$ 的 N 次方, $N = 2^{in}$ 。第二部分为 $e^{\lambda_{\max}}, e^{\lambda_{\max}}$ 为 Q 矩

阵的最大本征值除行列式因子, 由 $f = -\frac{1}{\beta l_{mn}} \ln Z$ 计算的格点平均自由能知 f 与 $\lambda_{\max}$ 成线性关系。

我们对 $2 \times 3 \times n$ 和 $2 \times 4 \times n$ 的 $\lambda_{\max}(\beta J)$ 的数值结果进行反复的数据拟合, 发现平面长方晶格 $6 \times n$ 和 $8 \times n$ 的相应的 $\lambda_{\max}$ 与数值结果符合得最好。拟合公式为

$$\lambda_{\max} = \frac{1}{2} (r_1 + r_3 + r_5 + r_7 + \cdots + r_{2N-1}) \quad N = l \times m,$$

$r_{k'}$ 由下式决定:

$$\cosh r_{k'} = \cosh 2\phi \cosh 2\theta - \cos \frac{\pi k'}{lm} \sinh 2\phi \sinh 2\theta,$$

$$k' = 1, 3, \cdots, 2N-1, \phi = 2\beta J, \theta = \tan^{-1} e^{-2\beta J}.$$

表 1

$\frac{1}{\beta J}$	$2 \times 3 \times n$			$2 \times 4 \times n$		
	计算值	公式值	误差	计算值	公式值	误差
1	12.055499727	12.055500026	0.000000025	16.073991549	16.073991936	0.000000024
2	6.456219005	6.457762189	0.000239023	8.604245238	8.605885460	0.000190629
3	5.113696190	5.142704095	0.005672591	6.777853540	6.819138893	0.006091214
4	5.007052362	5.078622266	0.014293820	6.621967808	6.746267920	0.018770872
5	5.311463484	5.384407582	0.013733333	7.052504393	7.171524572	0.016876300
6	5.691167810	5.751862860	0.010664780	7.572916602	7.666642053	0.012376401
7	6.062052242	6.110825765	0.008045711	8.074180760	8.146819253	0.008996392
8	6.406483503	6.445820362	0.006140164	8.536908390	8.594019846	0.006689946
9	6.722678565	6.754818445	0.004780815	8.960468202	9.006230896	0.005107177
10	7.012816320	7.039459987	0.003799282	9.348511656	9.385846716	0.003993690

表 1 为两组数据及其相对误差。误差 = (公式值 - 计算值) / 计算值。上述比较结果误差最坏的情况 $< 2\%$ 。因此由自由能的数值结果我们提出以平面长方晶格 $N \times n$ ($N = lm$ 方向为双键, 即 $J_N = 2J_n = 2J$) 作为三维 $l \times m \times n$ 简单立方 Ising 模型的零级近似解。

4 讨 论

块对角方法, 由于配分函数的计算只与最大本征值有关, 本文对几种自旋集团较小的情况的计算结果表明, 最大本征值在 Q 矩阵块对角化后的最大子块中, 有理由推测这是普遍成立的。而最大块矩阵的矩阵元, 无需计算 T 矩阵, 只要将重排后的 Q 矩阵在类内一行相加就可得到, 因此简化了求最大本征值的工作量。由于简化程度取决于 G 群的阶数, G 群的阶数为 $l \times m \times 8$, 而 Q 矩阵的阶数为 2^l 阶, 故对一般的情况简化仍然是很有限的。

近似解的相变点在 $2\beta J = 0.60937790$ 处或 $\frac{kT}{J} = 3.28203600$, 而文献[2]的结果为 $\frac{kT}{J} = 4.60$, 数值计算的近似解与级数展开解在高温区符合得相当好。但把近似解展开并不与级数高温展开符合。

- [1] H. A. Bethe, *Proc. Roy. Soc.*, **A150**(1935), 552.
- [2] R. Kichuchi, *Phys. Rev.*, **81**(1951), 988.
- [3] 史美伦, 固体统计力学(科技文献出版社重庆分社, 重庆), 1984.
- [4] 藤保华, 物理学报, **40**(1991), 826.
- [5] V. A. Kazakov and A. A. Migdal, *Nucl. Phys.*, **B311**(1988), 171.
- [6] H. Narumi, H. Hosoya, *J. Math. Phys.*, **34**(3) (1993), 1043.
- [7] 量子统计物理学, (北京大学出版社, 北京), 1987.

3D ISING MODEL, SIMPLIFICATION OF MATRIX METHOD AND AN APPROXIMATE SOLUTION

CHEN XIAO-YU

(Mesrology Instituse of China, Hangzhou 310034)

(Received 20 April 1994)

ABSTRACT

With the symetries of Hamitonian in Ising model of cubic lattice under periodic boundary conditions and without external field, the matrices of the proplems are block diagonalised. The problem of $2 \times 2 \times n$ cubic lattice is rigorously solved. Free energy of two other simple cases are computed, an approximate solution is proposed based on numerical results.

PACC: 7510H; 0550