

违反标度定律的一种相变模型*

孙 鑫
(复旦大学物理系)

提 要

本文准确地求得了一种三维八顶点模型(能量参数满足条件 $\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \varepsilon_3 + \varepsilon_4$) 的全部临界指数:

$$\alpha = \alpha' = 0, \beta = \frac{1}{4}, \delta = 7, \gamma = \frac{1}{2}, \gamma' = \frac{3}{2}, \nu = \nu' = 1, \eta = \frac{3}{2}.$$

它们不满足标度定律,其原因是在相变时极化关联的范围发生了收缩(从晶面(1, 1, 1)和(1, 1, 1)收缩成晶轴[1, 0, 1]).

一、引 言

相变是量变转化为质量的辩证发展过程,在临界点上出现了奇性(它们用临界指数来表征),相变理论就要研究奇性的来源和各种奇性的内在联系.近十年来提出了一套以“标度性”为基础的相变理论^[1],对奇性的成因作了解释,并推导出在九个临界指数之间存在七个关系式(称为“标度定律”):

$$\begin{aligned} 2\beta = 2 - \alpha - \gamma, \delta = \frac{2 - \alpha + \gamma}{2 - \alpha - \gamma}, \gamma = \gamma', \alpha = \alpha', \nu = \nu' \\ 2 - \alpha = \nu d, \gamma = (2 - \eta)\nu. \end{aligned} \quad (1.1)$$

最近几年对标度性理论进行了大量研究.重正化群给标度性提供了理论根据^[2],各种统计模型又对标度定律从理论上作了检验,其结果列于表 1,它们都符合标度定律.但这些还不足以从理论上说明标度定律普遍成立.因为由重正化群得出标度定律是有条件的,同时现有的严格可解的统计模型都是二维或四维的.三维相变(真实相变正是三维的)是现在相变理论的薄弱环节,对标度定律的理论检验也不够(只有近似数值计算)^[6].本文将讨论一种三维相变,提供一个违反标度定律的模型,它是金刚石结构的氢键铁电体,用满足条件 $\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \varepsilon_3 + \varepsilon_4$ 的三维八顶点模型表示.氢键晶格的序参量是极化强度.下面将准确地算出该模型的自由能和极化关联函数,并求得相变时的全部临界指数.

二、对偶自旋晶格

金刚石结构的格点如图 1 中黑点所示,每个格点周围的八种氢键位形及能量见图 2.

* 1975 年 8 月 27 日收到; 1976 年 2 月 9 日收到修改稿.

表 1

	α	α'	β	δ	r	r'	ν	ν'	η
二维 Ising 模型	0	0	$\frac{1}{8}$	15	$\frac{7}{4}$	$\frac{7}{4}$	1	1	$\frac{1}{4}$
二维八顶点模型 ^[3]	$2 - \frac{\pi}{\mu}$	$2 - \frac{\pi}{\mu}$	$\beta_m = \frac{\pi}{16\mu}$ $\beta_e = -\frac{1}{4} + \frac{\pi}{4\mu}$				$\frac{\pi}{2\mu}$	$\frac{\pi}{2\mu}$	
Modified F 模型 ^[4]	0	0	$\frac{1}{4}$		$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	1	1	$\frac{1}{2}$
非对称八顶点模型 ^[5]	0	0	1	1	0	0	1	1	2
三维 Ising 模型 ^[6]	0.125 ± 0.015		0.312 ± 0.003	5.150 ± 0.02	1.250 ± 0.003		0.642 ± 0.003		0.055 ± 0.010
σ 展式 ^[7]	$\frac{\alpha}{r} = -\frac{n-4}{2(n+8)}\sigma + \frac{n+2}{(n+8)^2} \left[\frac{5}{2} - \frac{3(3n+14)}{n+8} \right] \sigma^2,$ $r = 1 + \frac{n+2}{2(n+8)}\sigma + \frac{n+2}{4(n+8)^3} (n^2 + 22n + 52)\sigma^2$ $+ \frac{n+2}{8(n+8)^5} [n^4 + 44n^3 + 664n^2 + 2496n + 3104$ $- 96(5n+22)(n+8)T] \sigma^3,$ $\eta = \frac{n+2}{2(n+8)^2} \sigma^2 + \frac{n+2}{8(n+8)^4} (-n^2 + 56n + 272)\sigma^3$ $+ \frac{n+2}{32(n+8)^6} [-5n^4 - 230n^3 + 1124n^2 + 17920n + 46144$ $- 768(5n+22)(n+8)T] \sigma^4.$								

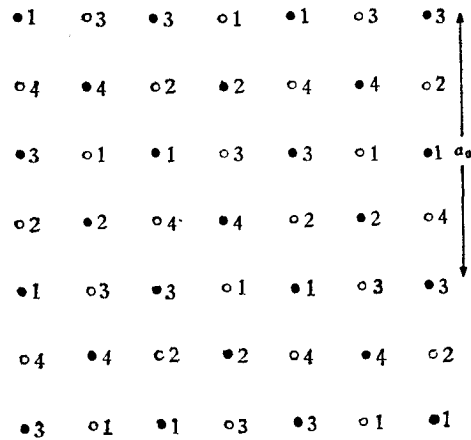


图 1 金刚石晶格

黑点是原晶格, 圆圈是对偶自旋晶格, 格点旁边的数字表示该格点在原胞中的层次

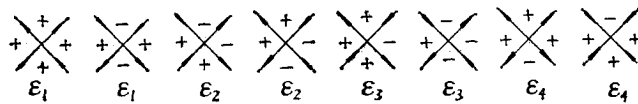


图 2 八种顶点的氢键位形及其能量

“+”和“-”表示对偶晶格中自旋的取向(氢键并不在纸平面上, 其空间方位根据图 1 确定)

为了用哈密顿形式来表述此统计模型, 可引用对偶晶格将此氢键晶格用等效的自旋晶格来代替. 将原晶格向左移动 $a_0/4$, 再向纸面内移动 $a_0/8$, 在新格点上放上自旋 s_i (取 ± 1), 就形成对偶自旋晶格(图 1 中小圆圈). 以图 2 中第一个位形为氢键的正方向, 正方向氢键两侧的自旋取同号, 反方向氢键两侧的自旋取反号(见图 2).

令每个格点 i 周围的四个自旋 s_i, s'_i, s''_i, s'''_i (其位置如图 3 所示) 之间有相互作用:

$$H_i = -I - J s_i s'_i - J' s'_i s''_i - J_4 s_i s'_i s''_i s'''_i,$$

$$I = -\frac{1}{4}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 + \varepsilon_4), \quad J = \frac{1}{4}(\varepsilon_2 + \varepsilon_3 - \varepsilon_1 - \varepsilon_4) \quad (2.1)$$

$$J' = \frac{1}{4}(\varepsilon_2 + \varepsilon_4 - \varepsilon_1 - \varepsilon_3), \quad J_4 = \frac{1}{4}(\varepsilon_3 + \varepsilon_4 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2).$$

不难看出, 八种顶点的能量可用 (2.1) 式表述, 同时整个氢键晶体的能量状态可用下述哈密顿量表达:

$$H = \sum_i H_i. \quad (2.2)$$

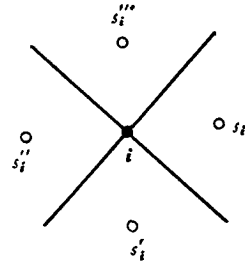


图 3 格点 i 周围 s_i, s'_i, s''_i, s'''_i 的位置 (它们不在一个面上, 空间位置可由图 1 确定)

如加上不均匀的外电场 $\mathbf{E}(i)$, 氢键晶格就要极化, 极化强度 $\mathbf{P}(i)$ 也可用自旋表示如下: 将外电场沿三个正交基矢 $(-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0), (\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0), (0, 0, 1)$ 分解为 $E_1(i), E_2(i), E_3(i)$, 由图 2 可知外电场引起的附加哈密顿量为

$$H' = \sum_i \left[-\sqrt{\frac{2}{3}} E_1(i) (s_i s'_i + s''_i s'''_i) - \sqrt{\frac{2}{3}} E_2(i) (s_i s'''_i + s'_i s''_i) \pm \frac{1}{\sqrt{3}} E_3(i) (s'_i + s'''_i) (s''_i - s_i) \right]. \quad (2.3)$$

故

$$p_1(i) = -\frac{\partial H'}{\partial E_1(i)} = \sqrt{\frac{2}{3}} (s_i s'_i + s''_i s'''_i), \quad p_2(i) = -\frac{\partial H'}{\partial E_2(i)} = \sqrt{\frac{2}{3}} (s_i s'''_i + s'_i s''_i), \\ p_3(i) = -\frac{\partial H'}{\partial E_3(i)} = \pm \frac{1}{\sqrt{3}} (s'_i + s'''_i) (s_i - s''_i). \quad (2.4)$$

以上两式中奇数层取正号, 偶数层取负号. (2.4) 式说明极化强度的每一项都是两个自旋的乘积. 特别注意, 相乘的两个自旋中一个属奇数层(记为 $s_i^{(o)}$), 另一个属偶数层(记为 $s_i^{(e)}$).

对于一般的三维八顶点模型 (2.2) 式现在还不能严格求解. 本文将讨论一个特殊情况, 能量参数满足下述条件:

$$\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \varepsilon_3 + \varepsilon_4. \quad (2.5)$$

它将是严格可解的. 在此条件下, $J_4 = 0$, 适当选取能量零点还能使 $I = 0$, 于是只剩下二体相互作用:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_i [(\varepsilon_3 - \varepsilon_1) s_i s''_i + (\varepsilon_2 - \varepsilon_3) s'_i s'''_i]. \quad (2.6)$$

根据此哈密顿量,仔细观察图 1,就可看到:

(1) 奇数层自旋与偶数层自旋之间无相互作用,于是自旋晶格分解成两个面心立方的子晶格;

(2) 在奇数层子晶格中,只在同一晶面 $(\bar{1}, 1, 1)$ 上相邻自旋间有相互作用,于是面心立方晶格沿 $(\bar{1}, 1, 1)$ 面解理成二维 Ising 模型;

(3) 在偶数层子晶格中,只在同一晶面 $(\bar{1}, \bar{1}, 1)$ 上相邻自旋间有相互作用,于是它沿 $(\bar{1}, \bar{1}, 1)$ 面解理成二维 Ising 模型.

这样,满足(2.5)式的三维八顶点模型可解理为两组二维 Ising 模型,于是自由能是

$$F = -\frac{NkT}{2\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \ln \left(\text{ch} \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_3}{kT} \text{ch} \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2}{kT} - \text{sh} \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_3}{kT} \cos \omega - \text{sh} \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2}{kT} \cos \omega' \right) d\omega d\omega'. \quad (2.7)$$

临界点 T_c 由下式确定:

$$\text{sh} \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_3}{kT_c} \text{sh} \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2}{kT_c} = 1.$$

在临界点上发生二级相变,且

$$\alpha = \alpha' = 0. \quad (2.8)$$

三、临界指数

1. 自发极化和指数 β

因为无外电场时,奇数层自旋与偶数层自旋互相独立,所以由(2.4)式得到自发极化强度为

$$p_1 = p_2 = 2 \sqrt{\frac{2}{3}} \langle s_i^{(o)} \rangle \langle s_i^{(e)} \rangle \sim \begin{cases} (T_c - T)^{\nu_1} & (T \lesssim T_c), \\ 0 & (T \gtrsim T_c), \end{cases} \quad p_3 = 0, \quad (3.1)$$

故

$$\beta = \frac{1}{4}. \quad (3.2)$$

2. 极化关联函数和指数 ν , ν' 和 η

因极化强度的每一项都是 $s_i^{(o)} s_j^{(e)}$, 所以极化关联函数的每一项都是

$$g(\mathbf{R}, T) = \langle s_i^{(o)} s_j^{(o)} \rangle \langle s_i^{(e)} s_j^{(e)} \rangle - \langle s_i^{(o)} \rangle^2 \langle s_j^{(e)} \rangle^2.$$

对于 i 和 j 的不同相对位置,极化关联有如下四种情况:

(1) i 和 j 位于晶轴 $[1, 0, 1]$ 的近旁

因晶轴 $[1, 0, 1]$ 是晶面 $(\bar{1}, 1, 1)$ 和 $(\bar{1}, \bar{1}, 1)$ 的交线,故 $s_i^{(o)}$ 和 $s_j^{(o)}$ 以及 $s_i^{(e)}$ 和 $s_j^{(e)}$ 都是相关的,利用二维 Ising 模型的关联函数^[8]可得

$$g(\mathbf{R}, T) \sim \begin{cases} (T_c - T)^{\nu_2} f_2(R(T_c - T)) + A(T_c - T)^{\nu_2} f_2(R(T_c - T)) & (T \lesssim T_c), \\ \frac{1}{R^{\nu_2}} & (T = T_c), \\ (T - T_c)^{\nu_2} f_2(R(T - T_c)) & (T \gtrsim T_c), \end{cases} \quad (3.3)$$

故

$$\nu = \nu' = 1, \quad \eta = \frac{3}{2}. \quad (3.4)$$

(2) i 和 j 在晶面 $(\bar{1}, 1, 1)$ 的近旁

此时 $s_i^{(o)}$ 和 $s_j^{(o)}$ 是相关的, 但 $s_i^{(e)}$ 和 $s_j^{(e)}$ 互不相关, 于是

$$g(\mathbf{R}, T) = \langle s_i^{(e)} \rangle^2 (\langle s_i^{(o)} s_j^{(o)} \rangle - \langle s_i^{(o)} \rangle^2) \sim \begin{cases} (T_c - T)^{1/2} f_c & (T \lesssim T_c), \\ 0 & (T \geq T_c). \end{cases} \quad (3.5)$$

所以当 $T \geq T_c$ 时, 晶面 $(\bar{1}, \bar{1}, 1)$ 上的关联就消失, 故 ν 无意义. 而

$$\nu' = 1, \quad g(\mathbf{R}, T) \sim \frac{(T_c - T)^{1/4}}{R^{1/4}} \quad (T \rightarrow T_c - 0). \quad (3.6)$$

(3) i 和 j 在晶面 $(\bar{1}, \bar{1}, 1)$ 的近旁

$s_i^{(e)}$ 和 $s_j^{(e)}$ 是相关的, $s_i^{(o)}$ 和 $s_j^{(o)}$ 不相关, 于是

$$g(\mathbf{R}, T) = \langle s_i^{(o)} \rangle^2 (\langle s_i^{(e)} s_j^{(e)} \rangle - \langle s_i^{(e)} \rangle^2) \sim \begin{cases} (T_c - T)^{1/2} f_c & (T \lesssim T_c), \\ 0 & (T \geq T_c). \end{cases}$$

所以当 $T \geq T_c$ 时, 晶面 $(\bar{1}, \bar{1}, 1)$ 上的关联也消失.

(4) i 和 j 在其它方位

此时 $s_i^{(o)}$ 和 $s_j^{(o)}$, $s_i^{(e)}$ 和 $s_j^{(e)}$ 都不相关, 故无极化关联.

由此可见, 本文模型的关联具有如下特性: 极化关联是各向异性的, 当 $T < T_c$ 时, 沿晶面 $(\bar{1}, 1, 1)$ 和 $(\bar{1}, \bar{1}, 1)$ 存在着二维关联, 其它方向无关联; 但当 $T \geq T_c$ 后, 二维关联消失, 只剩下沿晶轴 $[1, 0, 1]$ 的一维关联. 因此极化关联的范围在相变时发生了收缩.

我们知道, 标度性的物理基础是当 $T \rightarrow T_c \pm 0$ 时关联范围都趋向无限. 本模型在 $T \rightarrow T_c - 0$ 时, 晶面 $(\bar{1}, 1, 1)$ 和 $(\bar{1}, \bar{1}, 1)$ 上的关联范围趋向无限; 但当 $T \geq T_c$ 时, 除了晶轴 $[1, 0, 1]$ 外, 此两晶面上的关联全部消失, 这种关联范围的收缩破坏了标度性的基础, 可以预料到标度定律不再成立.

3. 极化率 χ 和指数 γ, γ'

$$\chi = \left. \frac{\partial p}{\partial E} \right|_{E=0} \sim \frac{1}{kT} \sum_{\mathbf{R}} g(\mathbf{R}, T).$$

当 $T \lesssim T_c$ 时, 存在二维关联, 利用(3.5)式并将 $\sum_{\mathbf{R}}$ 变为面积分, 得

$$\chi_{<} \sim \int_0^{\infty} (T_c - T)^{1/2} f_c (R(T_c - T)) 2\pi R dR \sim \frac{1}{(T_c - T)^{3/2}}, \quad (3.7)$$

故

$$\gamma' = \frac{3}{2}. \quad (3.8)$$

当 $T \geq T_c$ 时, 只有一维关联, 利用(3.3)式得

$$\chi_{>} \sim \int_{-\infty}^{\infty} (T - T_c)^{1/2} f_c [R(T - T_c)] dR \sim \frac{1}{(T - T_c)^{1/2}}, \quad (3.9)$$

故

$$\gamma = \frac{1}{2}. \quad (3.10)$$

注意 $\gamma \approx \gamma'$, 这是违反标度定律(1.1)式的。

4. T_c 上的极化和指数 δ

将 H' [(2.3) 式] 中的每一项 $s_i^{(o)} s_i^{(e)}$ 都分解成

$$E s_i^{(o)} s_i^{(e)} = E (s_i^{(o)} - \langle s_i^{(o)} \rangle) (s_i^{(e)} - \langle s_i^{(e)} \rangle) + E \langle s_i^{(e)} \rangle s_i^{(o)} + E \langle s_i^{(o)} \rangle s_i^{(e)} - E \langle s_i^{(o)} \rangle \langle s_i^{(e)} \rangle.$$

在计算 $s_i^{(o)}$ 或 $s_i^{(e)}$ 的统计平均时, 第一项的贡献比起第二、三项来将是 E 的高次项(因为第二、三项的一次项有贡献, 第一项的二次项才有贡献)。因此在计算 δ 时 ($E \rightarrow 0$), 可略去第一项。于是, H' 相当于对奇数层自旋加上磁场 $h^{(e)} \sim E \langle s_i^{(e)} \rangle$, 对偶数层自旋加上磁场 $h^{(o)} \sim E \langle s_i^{(o)} \rangle$ 。因为二维 Ising 模型的 $\delta = 15$, 故

$$\begin{aligned} \langle s_i^{(o)} \rangle &\sim (h^{(e)})^{1/15} \sim E^{1/15} \langle s_i^{(e)} \rangle^{1/15}, \\ \langle s_i^{(e)} \rangle &\sim (h^{(o)})^{1/15} \sim E^{1/15} \langle s_i^{(o)} \rangle^{1/15}. \end{aligned}$$

由此可解得

$$\langle s_i^{(o)} \rangle \sim E^{1/14}, \quad \langle s_i^{(e)} \rangle \sim E^{1/14}.$$

故

$$p \sim E^{1/7}, \quad \delta = 7^{1/2}. \quad (3.11)$$

现在我们已准确地求得了相变时极化状态的全部临界指数:

$$\alpha = \alpha' = 0, \quad \beta = \frac{1}{4}, \quad \delta = 7, \quad \gamma = \frac{1}{2}, \quad \gamma' = \frac{3}{2}, \quad \nu = \nu' = 1, \quad \eta = \frac{3}{2}, \quad (3.12)$$

其中 ν 和 η 是沿晶轴 [101] 的一维关联的指数。

将上式代入 (1.1) 式可知, 前三个标度定律被破坏, 破坏的原因如前面所指出: 由于相变时极化关联的范围发生了收缩。这种收缩除了破坏标度定律外对相变还会产生什么影响, 有待进一步研究。

参 考 文 献

- [1] L. P. Kadanoff *et al.*, *Rev. Mod. Phys.*, **39** (1967), 395.
- [2] K. G. Wilson, *Phys. Rev.*, **4B** (1971), 3174; 3184. *Phys. Rev.*, **12C** (1974), 77.
- [3] R. J. Baxter, *Ann. Phys.*, **70** (1972), 193. *J. Phys.*, **C6** (1973), 2913; **C7** (1974), L403, J. D. Johnson *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **29** (1972), 492.
- [4] H. J. Brascamp *et al.*, *J. Phys.*, **C6** (1973), L164.
- [5] 孙鑫, 复旦学报, 1975 年第四期, 第 95 页.
- [6] H. Stanley, *Phase Transition and Critical Phenomena* (1971).
- [7] E. Brezin *et al.*, *Phys. Rev.*, **D8** (1973), 2418; 于泳、郝柏林, 物理学报, **24** (1975) 187.
- [8] L. P. Kadanoff, *Nuovo Cimento*, **44B** (1966), 276.

1) 因 Modified F 模型^[4]也可分解成两个次晶格, 故此结果也适用于它。这就求得了文献[4]中唯一未能算出的 δ , 补充上 $\delta = 7$, Modified F 模型完全符合标度定律(见表 1)。

A PHASE TRANSITION MODEL NOT IN ACCORDANCE WITH THE SCALING LAW

SUN XIN

(*Department of Physics, Fudan University*)

ABSTRACT

For a three-dimensional eight-vertex model with energy parameters satisfying the condition $\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \varepsilon_3 + \varepsilon_4$, all the critical exponents have been calculated:

$$\alpha = \alpha' = 0, \quad \beta = \frac{1}{4}, \quad \delta = 7, \quad \gamma = \frac{1}{2}, \quad \gamma' = \frac{3}{2}, \quad \nu = \nu' = 1, \quad \eta = \frac{3}{2}.$$

These do not satisfy the scaling law, the reason is that the correlative region of polarization contracts from the crystal planes $(\bar{1}, 1, 1)$ and $(\bar{1}, \bar{1}, 1)$ to the crystal axis $[1, 0, 1]$ at the critical point.