

三维 Ising 模型的封闭近似解 (II)

Q 近似的局限性

石 赫 郝 柏 林

(中国科学院)

1980 年 2 月 23 日收到

提 要

本文进一步分析了 Q 近似^[1]的物理内容和它所反映的格点上封闭图形数目。用反例(“蚊香”图)说明三维情况下不存在足以正确反映图形数目的转角映象。

一、引 言

二维 Ising 模型的严格解^[2]曾是相变统计理论的一项重要成果。求得这个解的最简途径,是从排列组合法^[3]发展起来的“无规行走”法。它把问题化为平面格子上具有复数转移概率的无规行走,每个转移概率由两个因子组成:温度因子就是约化温度 $u \equiv \tanh K$, $K = J/kT$ (本文符号与文献 [1] 一致), 转角因子可以看作从转角 φ 到复代数的映象 $\varphi \rightarrow \exp\left(\frac{\varphi}{2}i\right)$ 或 $U(1)$ 转动群的双值表示。文献 [1] 中把这个映象推广到四元数体 Q (或与之同构的 $SU(2)$ 群), 经过严格的数学推导, 为三维 Ising 模型的统计配分函数求得了一个物理上近似的封闭的解析表达式。这个表达式不同于通常所说的“封闭近似”(可参看文献 [4]), 那里配分函数的近似表达式包含与温度有关的参数, 要用变分方法在每个温度下确定它们的值。 Q 近似则是得出了对整个温度区间 $T(0, \infty)$ 都适用的表达式, 其中只含有若干确定的常数, 因此从形式和原则上都更象真正的严格解。我们应当进一步分析这一近似的局限性, 同时从中提取对严格解的某些启示。

二、高温展开分析

统计配分函数的高温展开式, 就是格子上封闭图形数目的生成函数(参看文献 [1] 中 (3) 式)。比较各种近似的办法之一, 在于分析它正确计入了那些图形, 特别是指出它不能正确反映的图形。 Q 近似正确反映了一切平面图和六边立体图, 我们着重讨论八边图。

简立方晶体上有限个格点 N 的配分函数可展开为

$$Z = 2^N (\cosh K)^{3N} (1 + P(4)u^4 + P(6)u^6 + P(8)u^8 + \cdots), \quad (1)$$

式中 $P(m)$ 是 N 点格子上的 m 边图总数, 包括有自交点的图和不相连图。将 (1) 式开 N

次方并取对数得

$$\ln \lambda \equiv \frac{1}{N} \ln Z = \ln 2 + 3 \ln h K + S(u), \quad (2)$$

$$S(u) = h_4 u^4 + h_6 u^6 + h_8 u^8 + \dots,$$

式中

$$h_4 = p_4 \equiv \frac{1}{N} P(4) = 3,$$

因为四边图只有正方形一种, 每个坐标平面内有一个; 而

$$h_6 = p_6 \equiv \frac{1}{N} P(6)$$

来自三类图 (见图 1), 其中每类图的数目可由简单的对称考虑得出: 简单立方体具有点对称群 O_h , 其阶是 48, 一个图形如果具有点对称群 $g \subset O_h$, 其阶为 d , 则在一个格点上

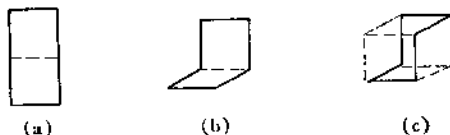


图 1

放置这个图形的不等价方式有 $48/d$ 种, 图 1(a) 属于点群 D_{2h} (阶 8), (b) 属于 D_{1h} (阶 4), (c) 属于 D_{3h} (阶 12), 因此 $p_6 = 6 + 12 + 4 = 22$.

下一个系数

$$h_8 = \frac{1}{N} P(8) - \frac{N}{2} p_4^2$$

应讨论得稍细一点. N 点格子上八边图总数有三种来源:

$$P(8) = N p_8 + N [p_4, p_4] + N p_{8h}, \quad (3)$$

式中 p_8 是归算到一个点上的八边无自交点相连图数目, $[p_4, p_4]$ 代表由两个四边图组合出来的无公共点的八边图数目, p_{8h} 是有一个自交点的八边图数目 (我们使用与文献 [5] 一致的记号来代表各种图形). 为了确定 $[p_4, p_4]$, 可在 N 点格子上取两套四边图来任意组合, 得出无公共点图、有一个公共点即自交点的图、有一个公共边的图 (实为七边图, 记为 p_{7a}), 以及四边都重合的图即 p_4 本身:

$$\frac{(N p_4)^2}{2} = N [p_4, p_4] + N p_{8h} + N p_{7a} + \frac{1}{2} N p_4.$$

由此解出 $[p_4, p_4]$, 代入 (3) 式后得

$$h_8 = p_8 - p_{7a} - \frac{1}{2} p_4. \quad (4)$$

注意 p_{8h} 已消去, 可见图形计数问题的困难并不在于简单的自交. p_{7a} 只有两类, 即图 1(a) 和 (b) 中虚线改为实线所得的七边图, 因此 $p_{7a} = 6 + 12 = 18$. 转角映象 $\varphi \rightarrow Q$ 可以正确计入 p_4, p_6, p_{7a} , 问题出在没有自交点的 p_8 中. 这样的图共有 11 类 (图 2), 它们的对称

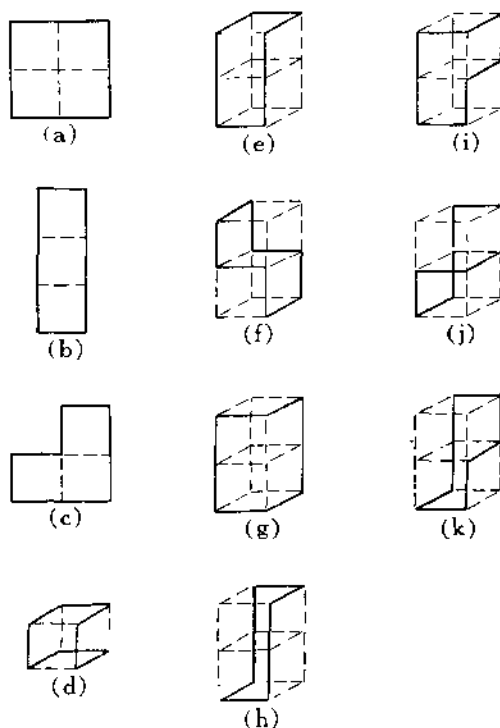


图 2

表 1

图	对 称		图 数	备 注
	点 群	阶		
(a)	D_{4h}	16	3	} Q 映象不能正确计入
(b)	D_{2h}	8	6	
(c)	C_{2v}	4	12	
(d)	D_{2d}	8	6	
(e)	C_s	2	24	
(f)	D_{1d}	4	12	
(g)	D_{1h}	4	12	
(h)	D_{1d}	4	12	
(i)	E	1	48	
(j)	C_2	2	24	
(k)	E	1	48	

和数目列于表 1 中。 Q 近似能正确给出前八类图的数目。后三类图应有 120 个, 实际算得 $48\sqrt{2}$, 故 h_8 从正确值 187.5 降到 $135/2 + 48\sqrt{2} \cong 135.38$ 。这些图的共同特点是具有奇数个转角, 它们的对称性较低, 因而在高阶图中所占权重渐大。这是 Q 近似中高温展开系数从 h_8 起逐渐偏低(见文献 [1] 中表 1) 的原因之一。本文后面还要说明, 更高阶图中还会出现贡献相消的情形。我们不再讨论 73 类 2412 个十边图的详情, 只在此指出, 相应数字从正确值 1572 降到 $312\sqrt{2}$, 使 h_{10} 从应有的 1980 降到 $408 + 312\sqrt{2} \cong$

849.23.

三、比热临界指数

Q 近似的比热临界指数可以算出来, 结果是 $\alpha = -1$. 为此将配分函数积分表达式中的 $D(u)$, 即文献[11]中(33)式, 在奇异点 $u_c = 1/(2\sqrt{2} + 1)$ 和 $\omega_p = \omega_q = \omega_s = 0$ 附近展开. 注意 u_c 是 $D(u)$ 的二重零点, 得到

$$S(u) \cong \frac{1}{2(2\pi)^3} \iiint \ln [a(u - u_c)^2 + b(\omega_p^2 + \omega_q^2 + \omega_s^2)] d\omega_p d\omega_q d\omega_s, \quad (5)$$

式中

$$a = \frac{3126 - 1716\sqrt{2}}{49} = 14.2696, \quad b = \frac{3718 - 2284\sqrt{2}}{2401} = 0.203222.$$

我们只关心原点附近积分的贡献, 可以转入球坐标而有

$$S(u) \sim \int \ln [a(u - u_c)^2 + b\rho^2] \rho^2 d\rho.$$

这是一个初等积分. 在下限 $\rho = 0$ 附近的主要贡献来自

$$-\frac{2}{3} \left(\frac{a}{b}\right)^{3/2} (u - u_c)^3 \arctg \left[\left(\frac{b}{a}\right)^{1/2} \frac{\rho}{(u - u_c)} \right].$$

当 $|u - u_c| \rightarrow 0$ 时, 反正切函数给出

$$\frac{\pi}{2} \operatorname{sign}(u - u_c),$$

因此配分函数在奇异点 u_c 附近具有很弱的非解析性

$$S(u) \sim |u - u_c|^3 \quad (\text{当 } u \rightarrow u_c). \quad (6)$$

归算到单个自旋的比热是

$$C(u) = K^2(1 - u^2) \left[3 - 2u \frac{dS}{du} + (1 - u^2) \frac{d^2S}{du^2} \right], \quad (7)$$

它在奇异点附近展开式的线性项

$$C(u) = C_0 - C_{\pm} |u - u_c|^{-\alpha} \quad (\text{当 } u \rightarrow u_c) \quad (8)$$

来自(6)式的二阶微商, 故 $\alpha = -1$. 由重正化群方法^[6]直接算出的临界指数是 $\alpha = 25/32 = 0.077$.

比热本身在 u_c 处连续, 只是 $\partial C / \partial u$ 呈有限跃变. 这也说明 Q 近似的热力学函数奇异性偏弱, 不是对应二类相变, 而是给出某种三类相变, 其比热行为类似理想玻色气体的爱因斯坦凝聚点附近.

四、 Q 近似的低温展开

在文献[11]中已经指出, Q 近似反映了一批与晶格对称有关的封闭图形, 是一种较好的高温近似. 现在给出 Q 近似下配分函数的低温展开式. 在文献[11]的(32)式中变换

到低温变量 $x = (1 - u)/(1 + u)$, 得到

$$\ln \lambda = -\frac{3}{2} \ln x + \ln \Lambda(x), \quad (9)$$

其中

$$\ln \Lambda(x) = \frac{1}{2(2\pi)^3} \iiint \ln\left(\frac{B_0}{16}\right) d\omega + \frac{1}{2(2\pi)^3} \iiint \ln\left(1 + \sum_{i=1}^6 \frac{B_i}{B_0} x^i\right) d\omega, \quad (10)$$

B_0, B_i 等等都是余弦幂的线性组合。(10) 式第一个积分应为零, 但 Q 近似下是 -0.4664 , 这个常数当然对于比热没有贡献, 因为用低温变量表示后, 比热

$$C(x) = (\ln x)^2 \left(x \frac{d}{dx}\right)^2 \ln \lambda. \quad (11)$$

(10) 式第二个积分对 x 的展开式

$$\sum_{n=1}^{\infty} l_n x^n$$

中, 出现 x 的各种方次, 其前六个系数是 $l_1 = 0.8174$, $l_2 = -0.2175$, $l_3 = -0.433$, $l_4 = 1.53$, $l_5 = -1.23$, $l_6 = 2.6$ (这里只给出了数值积分时有保证的有效位). 真正的低温展开应从 x^6 方开始, 而且只含有偶次幂. 可见在低温端 Q 近似与严格解相去甚远. 任何改进 Q 近似的企图, 都必须注意改善低温行为. 我们将在下一篇文章中考虑这一点.

五、三维情形下不存在所需的转角映象

为了改进 Q 近似, 我们曾经寻求从三维格子上无规行走转角 φ 到某个代数 A 的映象 $\varphi \rightarrow A$, 希望得到所需的符号规则: 每个无自交点的封闭图形给出权重 -1 , 而有自交点或重复边的图形应拆成若干个无自交点图, 相互抵消后剩下正确的权重 (参看文献 [1] 第二节). A 应是一个代数, 乃基于以下考虑. 一个具体图形 (例如图 2 中的任何一个) 在三维空间中可能有多种取向. 沿任何一种取向的图绕一圈后, 转角映象的乘积应给出相同的权重. 我们知道, 对于三维转动群, 绕一切不同的轴作同样角度的转动, 这些转动都属于同一个共轭类. 对于同一个闭回路, 不同的起算点导致循环乘积的不同取法, 而对于群乘法而言, 循环积恰恰属于同一个共轭类. 因此我们希望转角映象的乘积具有群性质, 而且转角映象实际上是类的映象. 此外, 图形数目的求和自然要求有加法运算. 因此, A 应是一个代数. 由于复数 C 足以解决平面问题, 而四元数体 Q 在 u^6 以内给出准确系数, 我

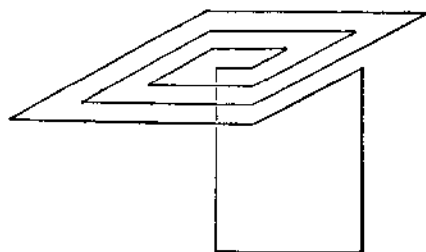


图3 “蚊香”图

们希望 C 和 Q 仍作为子代数包括在 A 内. 故 A 的一种很自然的选择, 是高维的超复系统. 然而, 下面的反例说明, 不存在任何能正确体现所需符号规则的转角映象 $\varphi \rightarrow A$.

任何一个候选的代数 A , 它首先对于平面图形应给出正确的符号. 考虑图 3 所示的“蚊香”图. 在平面部分内每转一个直角, 其映象 $\alpha \in A$ 应满足 $\alpha^4 = -1$. 于是只要增加在同一平面内的迴转圈数而不改变其它部分, 就可以得到 -1 的任何幂次. 另一方面, 借助延长“蚊香”柄的长度, 可以得到 α 的任何高阶偶次幂 (注意: 每单位长的边对应一个 α , 见文献 [1]). 因此, 无论取什么样的代数 A , 在足够高阶的图中都要发生图数的抵消, 即使求得配分函数的封闭表达式, 其高温展开式的增长也达不到应有的速率.

简化二维 Ising 模型严格解的关键, 曾是 Feynman 长期未正式发表的关于格子上带权重的封闭迴路数目的一项猜测^[7]. 这项猜测在二维情形下的正确性是在文献 [8] 中证明的, 该文还提到有人举过反例, 推测三维情形下找不到满足 Feynman 猜测的转角映象. 我们的反例更直观地否定了三维情形下循此道路严格解决 Ising 问题的可能性. 然而这并不意味着不能从数值上改进 Q 近似的结果. 我们将在下一篇文章中继续研究这个问题.

作者之一(郝柏林)感谢 D. H. Sattinger 博士在一次讨论中引起对文献 [8] 的注意.

参 考 文 献

- [1] 石赫, 许以超, 郝柏林, 物理学报, **27**(1978), 47.
- [2] L. Onsager, *Phys. Rev.*, **65**(1944), 117.
- [3] M. Kac, J. C. Ward, *Phys. Rev.*, **88**(1952), 1332.
- [4] D. M. Burley, In *Phase Transitions and Critical Phenomena*, ed. by C. Domb and M. S. Green, vol. 2, 329, Academic Press, (1972).
- [5] C. Domb, *Advances in Phys.*, **9**(1960), No. 34—35.
- [6] 于禄, 郝柏林, 物理学报, **24**(1975), 187.
- [7] R. P. Feynman, *Statistical Mechanics. A Set of Lectures*, (1972).
- [8] S. Sherman, *J. Math. Phys.*, **1**(1960), 202.

A CLOSED-FORM APPROXIMATION FOR THE 3-DIMENSIONAL ISING MODEL (II)

LIMITATIONS OF THE Q-APPROXIMATION

SHI HE HAO BAI-LIN

(Academia Sinica)

ABSTRACT

We present an analysis of further physical consequences of the Q -approximation^[1] and a discussion on the number of closed paths taken into account by this method. A counter example (“Incense” graph in Fig. 3) shows there exists no rotation angle mapping which would give the proper number of closed paths on a 3-dimensional lattice.