

混合自旋模型的临界点

孙凤国

(应用物理系)

摘要 本文利用 Δ -Y变换严格给出了 n 维经典自旋矢量 \vec{S} 与伊辛自旋 σ 在六角格子上相间排列的模型的临界点表达式。

关键词 分子物理学, Δ -Y变换, 临界点, n 维经典自旋矢量, 伊辛自旋, 混合模型

1. 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。1986年唐坤发和胡嘉桢^[2]提出了一种推广的伊辛自旋模型, 将Schofield和Bowers的模型作为它的一个特例。他们运用实空间重整化群计算得到了正方格子上这种推广伊辛自旋模型的相变流图、非平庸不动点、热指数等, 并指出Schofield和Bowers的混合模型与伊辛模型属于同一个普适类。我们^[3]曾分别用实空间重整化群、平均场近似和 Δ -Y变换对六角格子上的这种推广伊辛自旋模型进行了研究。这里我们讨论由伊辛自旋 σ 和经典自旋矢量 \vec{S} 在六角格子上混合排列的模型。我们的模型与L.L.Goncalves^[4]的二维混合模型不同, 在他们的模型中伊辛自旋 σ 和经典自旋矢量 \vec{S} 相间排列于正方格子上, 而且只在一个方向相间排列, 另一个方向则只存在 σ 之间的相互作用。

2. 模型及临界点的确定

首先我们考虑模型

$$\mathcal{H} = -\frac{H}{k_B T} = K \sum_i \sigma_i S_i \quad (2.1)$$

这里 \vec{S} 是三维空间中模为1的经典自旋矢量, 求和遍及所有近邻对。作 Δ -Y变换^{[5][6]}

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi e^{K(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) \cos \theta} \sin \theta d\theta d\varphi = \text{Re}^{L(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_1)} \quad (2.2)$$

直接积分给出

$$\frac{4\pi \text{sh} K(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)}{K(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)} = \text{Re}^{L(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_1)} \quad (2.3)$$

容易看出(2.3)式两端对于 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ 反向和轮换都不变, 所以(2.3)式实际上只给出两个方程

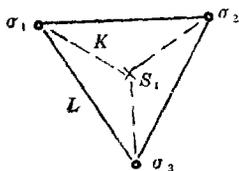


图 1

$$\frac{4\pi}{3K} \operatorname{sh} 3K = R e^{3L} \quad (2.4a)$$

$$\frac{4\pi}{K} \operatorname{sh} K = R e^{-L} \quad (2.4b)$$

由(2.4)容易确定 R 和 L

$$e^{4L} = \frac{\operatorname{sh} 3K}{3\operatorname{sh} K} \quad (2.5a)$$

$$R = \left(\frac{\operatorname{sh} 3K}{3\operatorname{sh} K} \right)^{1/4} \cdot \frac{4\pi}{K} \operatorname{sh} K \quad (2.5b)$$

经过 Δ -Y 变换六角格子上的混合自旋模型(1)化成了三角格子上的伊辛模型, 它们的配分函数之间关系为

$$Z_{2N}^M(K) = R^N Z_N^I(L) \quad (2.6)$$

每格点的自由能 ψ

$$-\psi = k_B T \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_N \quad (2.7)$$

$$\psi^M(K) = -\frac{k_B T R}{2} + \frac{1}{2} \psi^I(L) \quad (2.8)$$

R 是 T 的解析函数, 因而六角格子上混合自旋模型(1)的自由能 $\psi^M(K)$ 与伊辛模型的自由能 $\psi^I(L)$ 对温度的奇异性是一样的, 所以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^[7], $\alpha=0$. 临界点 $L=0.274653\cdots$ 满足 $e^{4L}=3$, 从(5.a)模型(1)的临界点由下式确定

$$\frac{\operatorname{sh} 3K}{3\operatorname{sh} K} = 3 \quad (2.9)$$

下面我们考虑更普遍的模型

$$\mathcal{H} = K \sum_{i,j} \sigma_i \vec{S}_j + h \left(\sum_i \sigma_i + \sum_j \vec{S}_j \right) \quad (2.10)$$

这里 \vec{S} 是 n 维空间中模为 1 的经典自旋矢量, 即它满足

$$\sum_{\beta=1}^n S_j^{\beta 2}(\beta) = 1 \quad j=1, 2, \dots, N \quad (2.11)$$

$S_j(\beta)$ 是 \vec{S}_j 的第 β 个分量, 设 σ_i 是在第 1 方向取值 ± 1 的伊辛自旋, 磁场 h 加在第 2 方向上, 则

$$\mathcal{H} = K \sum_{i,j} \sigma_i S_j(1) + h \sum_j S_j(2) \quad (2.12)$$

它的配分函数为

$$Z_{2N}^M = \sum_{\sigma_1} \cdots \sum_{\sigma_N} \int \cdots \int ds_1 ds_2 \cdots ds_N \prod_{j=1}^N \delta(1 - S_j^2) \exp \left[K \sum_{i,j} \sigma_i S_j(1) + h \sum_j S_j(2) \right] \quad (2.13)$$

作 Δ -Y 变换

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} ds_1(1) \dots ds_1(n) \delta \left[1 - \sum_{\beta=1}^n s_1^2(\beta) \right] e^{Ks_1(1)(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) + hs_1(2)}$$

$$= Re^{L(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_1)} \quad (2.14)$$

我们运用 H. E. Stanley^[8]的方法计算(2.14)式左端积分(见附录), 得到

$$\frac{x}{2} \left(\frac{2\pi}{x} \right)^{\frac{n}{2}} I_{\frac{n-1}{2}}(x) = Re^{L(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_1)} \quad (2.15)$$

I_m 是第一类修正的 Bessel 函数

$$x = [K^2(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)^2 + h^2]^{1/2} \quad (2.16)$$

方程(2.15)两端对 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ 反向和轮换也不变, 只给出两个方程

$$\frac{x_3}{2} \left(\frac{2\pi}{x_3} \right)^{\frac{n}{2}} I_{\frac{n-1}{2}}(x_3) = Re^{3L} \quad (2.17a)$$

$$\frac{x_1}{2} \left(\frac{2\pi}{x_1} \right)^{\frac{n}{2}} I_{\frac{n-1}{2}}(x_1) = Re^{-L} \quad (2.17b)$$

这里

$$x_3 = (9K^2 + h^2)^{1/2}, \quad x_1 = (K^2 + h^2)^{1/2} \quad (2.18)$$

从(2.17)容易解出

$$e^{4L} = \left(\frac{x_1}{x_3} \right)^{\frac{n-1}{2}} \frac{I_{\frac{n-1}{2}}(x_3)}{I_{\frac{n-1}{2}}(x_1)} \quad (2.19a)$$

$$R = e^L \frac{x_1}{2} \left(\frac{2\pi}{x_1} \right)^{\frac{n}{2}} I_{\frac{n-1}{2}}(x_1) \quad (2.19b)$$

与前面讨论类似, 这种混合自旋模型(9)与伊辛模型有一样的比热奇异性, 它在 Kh 平面上的相图由下式确定

$$\left(\frac{K^2 + h^2}{9K^2 + h^2} \right)^{\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{n-1}{2} \right)} \frac{I_{\frac{n-1}{2}}(\sqrt{9K^2 + h^2})}{I_{\frac{n-1}{2}}(\sqrt{K^2 + h^2})} = 3 \quad (2.20)$$

附 录

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} e^{Ks_1(1)(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) + hs_1(2)} \delta \left[1 - \sum_{\beta=1}^n s_1^2(\beta) \right] ds_1(1) \dots ds_1(n)$$

$$= \frac{x}{2\pi i} \int_{-\infty - i\infty}^{+\infty + i\infty} \dots \int_{-\infty - i\infty}^{+\infty + i\infty} ds_1(1) \dots ds_1(n) du \exp \{ ux [1 - \sum_{\beta=1}^n s_1^2(\beta)] \}$$

$$\exp [Ks_1(1)(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) + hs_1(2)]$$

我们取

$$x = [K^2(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)^2 + h^2]^{1/2}$$

$$A = \frac{x}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} du \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} ds_1(1) \dots ds_1(n) \exp \{ ux [1 - \sum_{\beta=1}^n s_1^2(\beta)] \}$$

$$\begin{aligned}
& \exp\left\{ax\left[1 - \sum_{\beta=1}^n s_1^2(\beta)\right]\right\} \exp\left[Ks_1(1)(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) + \hbar s_1(2)\right] \\
&= \frac{x}{2\pi i} \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} dv \exp(vx) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[Ks_1(1)(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) - vxs_1^2(1)\right] ds_1(1) \\
&\quad \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[\hbar s_1(2) - vxs_1^2(2)\right] ds_1(2) \prod_{\beta=3}^n \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-vxs_1^2(\beta)\right] ds_1(\beta) \\
&= \frac{x}{2\pi i} \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} dv \exp(vx) \left(\frac{\pi}{vx}\right)^n \exp\left\{\frac{1}{4vx} [K^2(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)^2 + \hbar^2]\right\} \\
&= \frac{x}{2\pi i} \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} dv \exp\left[x\left(\frac{1}{4v} + v\right)\right] \left(\frac{\pi}{vx}\right)^n
\end{aligned}$$

令 $w = 2v$

$$\begin{aligned}
A &= \frac{x}{2\pi i} \left(\frac{2\pi}{x}\right)^n \int_{2a-i\infty}^{2a+i\infty} dw \exp\left[\frac{x}{2}\left(w + \frac{1}{w}\right)\right] w^{-n} \\
&= \frac{x}{2} \left(\frac{2\pi}{x}\right)^n I_{\frac{n}{2}-1}(x)
\end{aligned}$$

参 考 文 献

- [1] S.L.Schofield and R.G.Bowers, J.Phys. A13 (1980) 3697
- [2] 唐坤发, 胡嘉楨, 物理学报 Vol.35 No.6 (1986) 1048
- [3] L.L.Goncalves, Physica 110A (1982) 339
- [4] G.F.Newell and E.W.Montroll, Rev. Mod. Phys 25 (1953) 353
- [5] I.Syozii, in Phase Transitions and Critical Phenomena, edited by C. Domb and M. S.Green (Academic, London, 1972), Vol.1.
- [6] R.J.Baxter, Exactly Solved Model in Statistical Mechanics (1982)
- [7] H.E.Stanley, Phys. Rev, Vol.179 No.2 (1969) 570

Elastic Cross Sections of e^- -He and e^- -Ar Collisions Calculated Using Roothaan- Hartree-Fock Atomic Wavefunctions

Yuan Jianmin

Abstract

The elastic cross sections of e^- -He and e^- -Ar collisions are calculated using Roothaan-Hartree-Fock wavefunctions in a model potential scheme, including static, Slater's type exchange and polarization potentials. The calculations agree with the experimental data. By comparing our calculations and the empirical exchange parameter used in the calculations with those of other authors' by using different atomic wavefunctions, the effect of the difference of different approximate atomic wavefunctions on the calculations is investigated.

Key words: Atomic and Molecular physics, Low energy electron, Calculation of cross sections

The Critical line for the Spin Model

Sen Huengge

Abstract

In this paper, using A - Y transformation, we obtained an expression of the critical line for the model with n dimensional classical spin vector s and Ising spin σ arrayed alternately on the honeycomb lattice.

Key words: A - Y transformation, critical line, n dimensional classical spin vector, Ising spin, Model

The Application of the Automatic Correction Technique of Aberrations

Wang Yongzhong

Abstract

The paper discusses mainly how to define a rational original construction