

# Potts 模型相变的解析研究\*

宋永燊

(四川大学物理系,成都 610064)

崔建营 杨金民 鲁公儒 刘文生

(河南师范大学物理系,新乡 453002)

## 摘要

本文应用一种新的解析方法——等效平均场广义累积展开法研究了立方点阵和三角点阵上的  $Z(N)$  Potts 模型,作为例子我们对  $Z(3)$ ,  $Z(4)$ ,  $Z(5)$  和  $Z(6)$  Potts 模型进行了精确到广义累积展开第三级修正的计算,所得临界点随修正级别的升高而逐级逼近已有的精确解。

## 一、引言

$Z(N)$  自旋 Potts 模型<sup>[1]</sup>由于其在粒子物理中的重要性,最近人们对这类系统很感兴趣<sup>[2-5]</sup>.  $SU(N)$  纯规范场具有  $Z(N)$  整体对称性,  $SU(N)$  规范系统的临界行为和  $Z(N)$  Potts 系统的临界行为是对应的,即  $Z(N)$  系统的有序相对应于  $SU(N)$  系统的禁闭相;  $Z(N)$  系统的无序相对应于  $SU(N)$  系统的退禁闭相. Yaff 等人因此认为一个  $d+1$  维的欧氏规范系统对应于一个  $d$  维的自旋系统<sup>[6]</sup>. 这样  $SU(3)$  规范系统相应于一个三态自旋模型, $SU(3)$  规范系统的相变和  $Z(3)$  Potts 模型的相变是同级别的. 所以对  $Z(N)$  Potts 模型的研究将有助于对  $SU(N)$  规范理论的理解。

对 Potts 模型以及各种格点规范系统的研究, Monte Carlo 等数值方法一直起着主导作用,但所有数值方法都有不足之处,即都只能在有限格点上进行模拟. 因此发展解析方法是很有意义的研究课题. 最近宋永燊等综合运用平均场思想和广义累积展开方法<sup>[7]</sup>,提出了一种新的解析方法<sup>[8]</sup>. 将此方法运用于 Ising 模型得到了好的结果<sup>[9]</sup>, 使用这种方法,我们可以对所研究的系统进行逐级修正计算,高级修正所包含的大量的连接图形可以用投影-筛方案<sup>[10]</sup>来严格数出. 这虽需要较繁的解析运算,但计算机上的计算量不大,并且只要计算到一定的修正级别,总可以给出可靠的结果. 本文将这一方法应用于 Potts 模型的研究,我们计算了所选的序参数  $P$ , 平均键内能  $U$  和比热  $C$ , 给出了  $q=3, 4, 5, 6$  的  $Z(q)$  Potts 模型的临界点,并和严格解进行了比较.

本文 1991 年 6 月 5 日收到.

\* 河南基应所和河南省教委资助.

## 二、计算过程

我们仅以三维立方点阵上的  $Z(3)$  Potts 模型为例, 给出具体的计算过程。考虑定义在立方点阵上的  $Z(3)$  Potts 模型, 其哈密顿量为

$$\begin{aligned} H &= -\frac{3}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\delta \sigma_i \sigma_j - 1) \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i^* \sigma_j + \sigma_i \sigma_j^* - 2) \end{aligned} \quad (1)$$

其中  $\langle i, j \rangle$  表示对所有最近邻格点上的“自旋对”求和,  $\sigma_i$  是定义在第  $i$  个格点上的自旋变量, 其取值为

$$\sigma = \exp(i2\pi n/3), (n = 0, 1, 2). \quad (2)$$

体系的作用量为

$$S = \frac{\beta}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i^* \sigma_j + \sigma_i \sigma_j^* - 2). \quad (3)$$

我们只考虑作用量

$$S = \frac{\beta}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i^* \sigma_j + \sigma_i \sigma_j^*). \quad (4)$$

配分函数定义为

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp(S). \quad (5)$$

自由能定义为

$$F = -\ln Z. \quad (6)$$

本文要计算的物理量为单个自旋的平均值  $P$ , 平均键内能  $U$  和比热  $C$ .

$$P = \langle \sigma_0 \rangle, \quad (7)$$

$$U = \frac{1}{N_l} \langle H \rangle = 1 - \langle \sigma_0 \sigma_1^* \rangle, \quad (8)$$

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = -\beta^2 \frac{\partial U}{\partial \beta}. \quad (9)$$

上式中的  $N_l$  为所有键的数目,  $\sigma_0$  为某一确定格点上的自旋,  $\sigma_0, \sigma_1$  为某两个确定的最近邻格点上的自旋。

由于配分函数中的求和是对所有组态进行的, 因此直接解析求解  $Z, F$  和  $P, U, C$  都是难以进行的, 为了解析求解这一系统, 我们引入一个可以解析求解的等效系统, 其作用量为

$$S_0(\sigma, J) = \sum_i (J_i \sigma_i + J_i^* \sigma_i^*), \quad (10)$$

其中  $J_i, J_i^*$  是我们引入的外源参数。

我们再定义  $S_0(\sigma, J'), Z(J, J'), F(J, J')$  为

$$S_0(\sigma, J') = \sum (J'_i \sigma_i + J'^*_i \sigma^*_i), \quad (11a)$$

$$\begin{aligned} Z(J, J') &= \sum_{\{\sigma_i\}} \exp [S - S_0(\sigma, J')] \exp [S_0(\sigma, J)] \\ &= Z_0 \langle \exp [S - S_0(\sigma, J')] \rangle_0, \end{aligned} \quad (11b)$$

$$F(J, J') = -\ln Z(J, J'), \quad (11c)$$

其中  $J', J'^*$  为引入的参数，并且

$$Z_0 = \sum_{\{\sigma\}} \exp [S_0(\sigma, J)], \quad (12)$$

$$\langle \cdots \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \sum \exp(S_0) (\cdots), \quad (13)$$

于是

$$Z = Z(J, J')|_{J'=J}, \quad (14)$$

$$F = F(J, J')|_{J'=J}. \quad (15)$$

$$P = -\left. \frac{\partial F(J, J')}{\partial J_0} \right|_{J'=J}. \quad (16)$$

$$\begin{aligned} U &= 1 - \left[ \frac{\partial F(J, J')}{\partial J_0} \frac{\partial F(J, J')}{\partial J_1^*} - \frac{\partial^2 F(J, J')}{\partial J_0 \partial J_1^*} \right]_{J=J'} \\ &= 1 - P^2 + \left. \frac{\partial^2 F(J, J')}{\partial J_0 \partial J_1^*} \right|_{J=J'}. \end{aligned} \quad (17)$$

为表述方便，引入图形标记：

$$\left| \begin{array}{c} i \\ j \end{array} \right| = \frac{\beta}{2} (\sigma_i^* \sigma_j + \sigma_i \sigma_j^*). \quad (18a)$$

$$\cdot_i = -(J_i \sigma_i + J_i^* \sigma_i^*). \quad (18b)$$

现在我们对  $Z(J, J')$  作广义累积展开

$$Z(J, J') = Z_0 \exp \left( \sum_{\nu} K(\nu) / \nu ! \right). \quad (19)$$

$$\nu ! = \prod \nu_i !. \quad (20)$$

其中的展开变量是定义在每个键  $\langle i, j \rangle$  上的 “ $|_i^j$ ” 和定义在每个格点上的 “ $\cdot_i$ ”，而矢量  $\nu = (\nu_1, \nu_2, \nu_3, \dots)$  中的  $\nu_1, \nu_2, \nu_3, \dots$  是相应于  $\nu$  的广义累积量  $K(\nu)$  中的各展开变量出现的重数（次方数）。

这样，自由能  $F$  就可以通过累积展开来逐级近似求解

$$F(J, J') = -\ln Z_0 - \sum_{\nu} K(\nu) / \nu !. \quad (21)$$

$F(J, J')$  的第  $n$  级修正定义为

$$F_n(J, J') = -\sum_{\nu} K(\nu) / \nu !. \left( \sum_i \nu_i = n \right) \quad (22)$$

为求序参数  $P$ ，我们只需把  $F$  中含  $J_0$  的部分逐级求出即可。 $F$  中的修正项都可以表示为由 “ $|_i^j$ ” 和 “ $\cdot_i$ ” 所构成的连接图的累积平均。因此，我们只须数出和格点 “ $\cdot_i$ ”（与  $J_0$  对应）相连的所有连接图，便可以逐级求解序参数  $P$ 。把  $F(J, J')$  的第  $n$  级修正中对  $P$  有

贡献的部分记为  $F_u$ , 这里我们给出  $F_0, F_1$  和  $F_2$ , 而  $F_3$  则不再给出。

$$F_0 = -\ln f_0. \quad (23a)$$

$$F_1 = -6\langle |_0 \rangle_0 - \langle \cdot 0 \rangle_0. \quad (23b)$$

$$\begin{aligned} F_2 = & -3\langle \|_0 \rangle_0 - 15\langle \circ \square \rangle_0 - 30\langle \square \circ \rangle_0 - 6\langle | \cdot 0 \rangle_0 \\ & - 6\langle |_0 \rangle_0 - \frac{1}{2}\langle \cdot \cdot 0 \rangle_0. \end{aligned} \quad (23c)$$

其中  $f_0$  按下式计算

$$f_i = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp(J_i \sigma_i + h.c.). \quad (24)$$

累积平均  $\langle \cdots \rangle_0$  可以通过下列式子求出

$$\langle x \rangle_0 = \langle x \rangle_0, \quad (25a)$$

$$\langle xy \rangle_0 = \langle xy \rangle_0 - \langle x \rangle_0 \langle y \rangle_0, \quad (25b)$$

$$\langle xyz \rangle_0 = \langle xyz \rangle_0 - \langle x \rangle_0 \langle yz \rangle_0 - \langle y \rangle_0 \langle xz \rangle_0 - \langle z \rangle_0 \langle xy \rangle_0 + 2\langle x \rangle_0 \langle y \rangle_0 \langle z \rangle_0. \quad (25c)$$

.....

为计算  $U$ , 由(17)式可以看出, 还需要计算  $\frac{\partial^3 F(J, J')}{\partial J_0 \partial J_1^*}$ , 而这只需要把  $F(J, J')$  中同时与  $J_0$  和  $J_1^*$  有关的项求出即可。把  $F(J, J')$  的  $n$  级修正中同时与  $J_0$  和  $J_1$  有关的部分用  $F_{u_n}$  表示。这里只给出  $F_{u0}, F_{u1}, F_{u2}$ , 第三级  $F_{u3}$  不再给出。

$$F_{u0} = 0, \quad (26a)$$

$$F_{u1} = -\langle |_0^1 \rangle_0, \quad (26b)$$

$$F_{u2} = -\frac{1}{2}\langle \|_0^1 \rangle_0 - 5\langle \circ \square_1 \rangle_0 - 5\langle \circ \square_0 \rangle_0 - \langle | \cdot 1 \rangle_0 - \langle | \cdot 0 \rangle_0. \quad (26c)$$

所有连接图形在  $S_0$  系统中的平均值都是容易解析求出的, 对  $Z(3)$  系统有

$$\langle \|_0^1 \rangle_0 = \frac{1}{4}\beta^2(2 + T_0^* T_1 + T_0 T_1^*), \quad (27a)$$

$$\langle \circ \square_1 \rangle_0 = \frac{1}{4}\beta^2(T_1 + T_1^* + T_0^* T_1 + T_0 T_1^*)T. \quad (27b)$$

其中  $T$  和  $T_i$  可以通过下式解析求解

$$T_i = \langle \sigma_i \rangle_0 = f_i^{-1} \sum_{\{\sigma_i \in Z(3)\}} \sigma_i \exp(J_i \sigma_i + h.c.), \quad T = T_i \text{ 当 } i \neq 0, 1. \quad (28)$$

最后, 把  $F_0(J, J'), F_1(J, J'), \dots$ , 对  $J_0$  求导之后, 令其中的外源参数都等于  $J$  便可得出  $P$  的各级修正。而把  $F_{u_n}$  对  $J_0, J_1^*$  两次求导之后, 令其中的外源参数等于  $J$ , 由(17)式便可求出  $U$  的各级近似。外源参数  $J$  由等效平均场假定求出:

$$\langle \sigma_0 \rangle = \langle \sigma_0 \rangle_0. \quad (29)$$

$C$  的计算是方便的, 把内能  $U$  的  $n$  级近似对  $\beta$  求导, 由(9)式即可得出比热  $C$  的  $n$  级近似。

以上给出了等效平均场方法在立方点阵  $Z(3)$  Potts 模型上的应用。实际上以上的计算过程适用于  $q$  为任意值的  $Z(q)$  Potts 模型,  $q$  的不同只会影响连接图形的累积平均

值,我们也计算了  $q = 4, 5, 6$  的  $Z(q)$  Potts 模型,具体计算过程不再给出.

### 三、结果及讨论

图 1 是立方点阵上  $Z(3)$  Potts 模型的  $P$  随  $\beta$  的变化行为. 图 2、图 3 分别是其内能  $U$  和比热  $C$  随  $T(1/\beta)$  的变化行为. 从中可以看出该系统存在两个相,即: 有序相和无序相. 在有序相中  $P \rightarrow 1$ ,而在无序相中  $P = 0$ .  $P$  和  $U$  在临界点处都是不连续的,而  $C$  则具有  $\delta$ —函数的特征. 我们得到的  $Z(3)$  Potts 模型的相变为一级相变. 对立方点阵上的  $Z(4)、Z(5)$  Potts 模型,我们计算了所定义的序参数  $P$ ,也得到了一级相变的结果.

图 4、图 5、图 6 分别是三角点阵上  $Z(3)$  Potts 模型的  $P、U、C$  随  $\beta$  或  $T$  的变化行为. 可以看出在三角点阵上 Potts 模型同立方点阵上的情形相似,也存在一级相变.

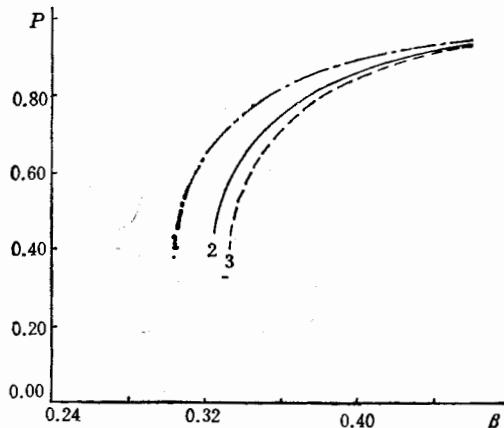


图 1 立方点阵上  $Z(3)$  Potts 系统序参数  $P$  随  $\beta$  的变化行为  
其中点画线、实线、虚线分别对应于一、二、三级近似

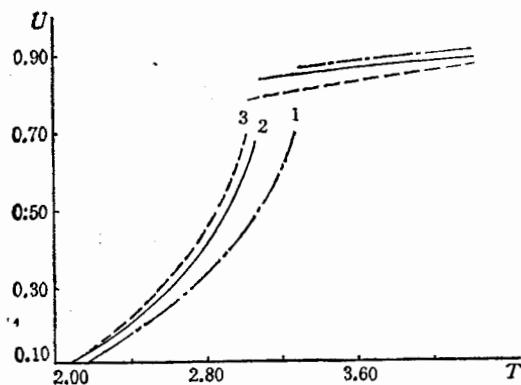
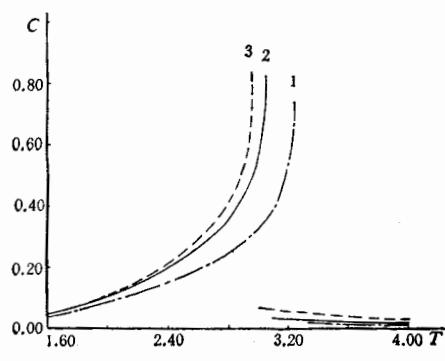
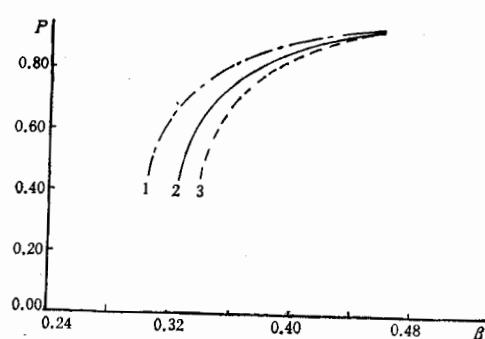


图 2 立方点阵上  $Z(3)$  Potts 系统内能  $U$  随  $T$  的变化行为

图3 立方点阵上  $Z(3)$  Potts 系统的比热  $C$  随  $T$  的变化行为图4 三角点阵上  $Z(3)$  Potts 系统的序参数  $P$  随  $\beta$  的变化行为

为了清楚起见, 我们把对立立方点阵和三角点阵上 Potts 模型所得结果分别在表 1 和表 2 中给出。作为比较, 在表中也列出了精确的结果或数值 MC 结果。从中可以看出我们的解析结果随修正级别的提高而逐渐逼近严格值或 MC 值。我们相信, 计算更高级的

表1  $d$  维立方点阵上  $Z(q)$  Potts 模型的临界值  $\beta_c$ 

$d =$		3	4	5	6	7	8	10
数值结果 [3]		0.367	0.387					
$q = 3$	等效平均场累积展开结果	一级	0.305	0.343				
		二级	0.323	0.360				
		三级	0.334	0.367				
数值结果 [4]		0.631	0.478	0.389	0.327	0.282	0.247	0.197
$q = 4$	等效平均场累积展开结果	一级	0.536	0.402	0.322	0.268	0.230	0.201
		二级	0.566	0.419	0.332	0.275	0.235	0.205
		三级	0.579	0.428	0.340	0.278	0.237	0.207
数值结果 [5]		0.750						
$q = 6$	等效平均场累积展开结果	一级	0.640					
		二级	0.669					
		三级	0.682					

表2 三角点阵上  $Z(3), Z(4), Z(5)$  Potts 模型的临界值  $\beta_c$ 

	等效平均场累积展开结果			严格结果 [2]	重整化群结果 [2]
	1 级	2 级	3 级		
$Z(3)$	0.306	0.326	0.340	0.4206	0.3517
$Z(4)$	0.55	0.58	0.60	0.693	
$Z(5)$	0.59	0.62	0.64	0.7437	

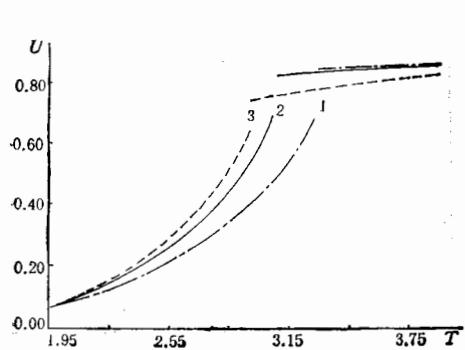


图5 三角点阵上  $Z(3)$ Potts 系统的内能  $U$  随  $T$  的变化行为

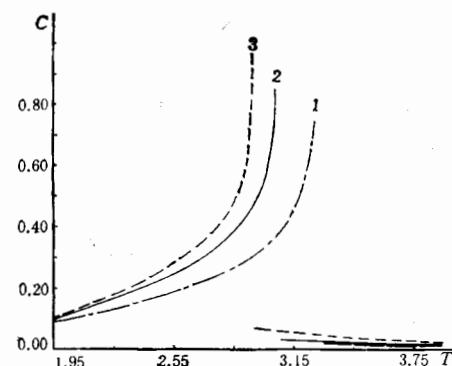


图6 三角点阵上  $Z(3)$ Potts 系统的比热  $C$  随  $T$  的变化行为

修正后将会得到更理想的结果, 不过这将会使解析工作量大大增加, 因为高级修正所包含的连接图形的累积平均的计算非常复杂, 其数量也非常之多, 但我们总可以利用投影一筛方案来严格数图, 计算从理论上讲是没有问题的。

### 参 考 文 献

- [1] For a review, see F. Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.*, **54**(1982), 235.
- [2] Schick, M. and R. B. Griffiths, *J. Phys.*, **A10**(1977), 2123.
- [3] Blote, H. W. and R. H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.*, **43**(1979), 799.
- [4] Ditziam, R. V. and L. P. Kadanoff, *Phys.*, **A12**(1979), L229.
- [5] Ono, I. and K. Ito, 1982 "Monte Carlo Simulation and Pair Approximation on the Phase Transition of Restricted Orientational Lattice Model for Liquid Crystal", Preprint.
- [6] L. G. Yaffe and B. Svetitsky, *Phys. Rev.*, **D26**(1982), 963; *Nucl. Phys.*, **B210**.
- [7] E. Meeron, *J. Chem. Phys.*, **27**(1957), 1238; R. Kubo, *J. Phys. Soc. Japan*, **17**(1962), 1100.
- [8] Y. X. Song, SU-DP-90-01; SU-DP-90-02; submitted to *J. Phys. A*.
- [9] Y. X. Song, J. M. Yang, G. R. Lu, *Submitted to J. Stat. Phys.*
- [10] Y. X. Song and Y. Dai, *J. Math. Phys.*, **31**(1990), 2015.

## The Phase Transition in $Z(N)$ Potts Spin Model: An Analytical Analysis

SONG YONGSHEN

(*Physics Department, Sichuan University, Chengdu 610064*)

CUI JIANYING YANG JINMIN LU GONGRU LIU WENSHE

(*Physics Department, Henan Normal University, Xinxiang 453002*)

### ABSTRACT

We study the phase transition in  $Z(N)$  Potts spin model by an analytical approach—the generalized cumulant expansion with mean field approximation. As a test, we perform the expansion to the third order correction for  $Z(3)$ ,  $Z(4)$ ,  $Z(5)$  and  $Z(6)$  cases. The critical points turn out to be closer to the exact values when higher order corrections are taken into account.