



论文

长程相互作用 Blume-Emery-Griffiths 模型: 微正则系综的临界指数

李粮生*, 史庆藩, 郑宁*

北京理工大学物理系, 北京 100081

* 联系人, E-mail: liliangsheng@gmail.com; ningzheng@bit.edu.cn

收稿日期: 2010-05-31; 接受日期: 2011-03-10; 网络出版日期: 2011-06-02

国家自然科学基金资助项目(批准号: 10975014)

摘要 我们研究了长程 Blume-Emery-Griffiths 模型在微正则系综下的热力学量, 发现在一级相变附近不仅出现负比热, 磁化率也呈现负值, 并且温度、比热和磁化率在一级相变点都不连续. 当系统发生有序-无序的二级相变时, 比热的临界指数 $\alpha = \alpha' = 0$ 和磁化率的临界指数 $\gamma = \gamma' = 1$ 与平均场的结果一致. 当耦合常数对应于正则系综的三临界点时, 比热的临界指数 $0 = \alpha \neq \alpha' = 1$ 和磁化率的临界指数 $1 = \gamma \neq \gamma' = 2$ 被获得. 我们发现临界指数关系 $\alpha' + \beta + \gamma' > 2$ 破坏 Widom 标度律和等价性.

关键词 相变, 热力学, 系综理论, 临界指数

PACS: 05.70.Fh, 05.70.Aa, 05.20.Gg, 75.40.Cx

1 引言

正则系综理论通常用于描述一个粒子数不变、与大热源充分接触的平衡态系统. 而对于孤立系统, 用微正则系综理论描述则更为适合. 传统的平衡态统计物理认为在热力学极限下微正则系综与正则系综理论等价, 也就是说两种理论对于物理量的预测将给出同样的结果. 然而, 最近人们发现这种等价性假设在有长程相互作用的系统中明显被破坏^[1]. 历史上, Lynden-Bell^[2]在纯引力模型里面发现, 如果系统的总能量被固定(孤立系统)在一定的参数范围内, 系统的比热为负值. 在微正则系综下系统出现负比热, 而正则系综中比热始终保持正值, 这个特点体现系综

的不等价. Ellis 等人^[3,4]基于 Legendre-Fenchel 变换和局域熵的性质提出较为一般的数学理论描述系综不等价性. 以长程相互作用的 Blume-Emery-Griffiths (BEG)模型为例, 在微正则系综中不仅发现有负比热, 而且温度作为能量的函数有不连续的点出现^[5]. 除此之外, 发现一维长程 Ising 模型的有限系统通过局域的微正则动力学不能遍历整个相空间, 意味着在微正则系统下, 有限系统可以发生遍历性破缺^[6,7]. 而在经典长程相互作用的 XY 模型中, 由于负比热的出现, 热力学第零定律也遭到破坏^[8,9].

本文通过研究微正则系综下的 BEG 模型, 在相图中给出发生遍历性破缺的区域. 并且在一级、二级和三临界相变点附近计算能量、磁化强度、比热和磁

引用格式: 李粮生, 史庆藩, 郑宁. 长程相互作用 Blume-Emery-Griffiths 模型: 微正则系综的临界指数. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2011, 41: 911-916
Li L S, Shi Q F, Zheng N. Long-range interaction Blume-Emery-Griffiths model: Critical exponents in microcanonical ensemble (in Chinese). Sci Sin Phys Mech Astron, 2011, 41: 911-916. doi: 10.1360/132010-572

化率. 为了研究比热和磁化率的奇异性, 我们还计算比热和磁化率的临界指数. 在微正则系综的相图中, 微正则三临界点低于所对应的正则三临界点. 因此, 我们分别研究: 高于正则三临界点区域、正则三临界点、正则三临界点到微正则三临界点的区间以及微正则三临界点的临界行为.

2 长程 BEG 模型

首先考察在长程相互作用下 BEG 模型中最简单的情况, 系统的哈密顿量可以写成

$$H = \Delta \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 - \frac{J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i \right)^2. \quad (1)$$

每一个格点上附有一个自旋 σ_i , 自旋可以取值 $\sigma_i = \pm 1$ (磁性态) 和 $\sigma_i = 0$ (非磁性态). $J > 0$ 是铁磁耦合常数, $\Delta > 0$ 是化学势, N 是粒子数. 因此我们可以得到系统的总能量:

$$E = \Delta Q - \frac{J}{2N} M^2, \quad (2)$$

这里 Q 表示系统磁性粒子数, $Q = \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 = N_+ + N_-$;

M 表示系统总强度, $M = \sum_{i=1}^N \sigma_i = N_+ - N_-$. N_+ , N_- ,

N_0 , N 分别表示自旋向上(+), 自旋向下(-), 自旋为零(0)和系统粒子数. 对于给定系统的总能量 E 和磁化强度 M (同时磁性粒子数 Q 被固定), 系统的微观状态数表示为

$$\Omega = \frac{N!}{N_+! N_-! N_0!}. \quad (3)$$

系统熵 $S = k_B \ln \Omega$, k_B 为玻尔兹曼常数. 当系统足够

大时, 粒子的单位熵 $s = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{S}{k_B N}$ 可以表示为

$$s = - \left[(1-q) \ln(1-q) + \frac{1}{2}(m+q) \ln(m+q) + \frac{1}{2}(q-m) \ln(q-m) - q \ln 2 \right], \quad (4)$$

这里磁性粒子密度 $q = Q/N$, 粒子单位磁化强度

$m = M/N$, 粒子单位能量 $\varepsilon = \frac{E}{\Delta N}$. 由方程(1)可得到

$$q = \varepsilon + Km^2, \quad (5)$$

这里耦合常数比率 $K = J/2\Delta$. 为了确定一级和二级相变线以及其交点三临界点的位置, 我们对粒子的单位熵在 $m=0$ 附近做泰勒展开:

$$s = s_0 + Am^2 + Bm^4 + Cm^6 + o(m^8), \quad (6)$$

可得到其展开系数 $s_0 = \varepsilon \ln \frac{2}{\varepsilon} - (1-\varepsilon) \ln(1-\varepsilon)$, $A =$

$$K \ln \frac{2(1-\varepsilon)}{\varepsilon} - \frac{1}{2\varepsilon}, B = -\frac{1-\varepsilon-6K\varepsilon+6K\varepsilon^2+6K^2\varepsilon^2}{12(1-\varepsilon)\varepsilon^3}$$
 和

$$C = \frac{-2+15K\varepsilon-30K^2\varepsilon^2}{60\varepsilon^5} + \frac{10K^3(1-2\varepsilon)}{60(1-\varepsilon)^2\varepsilon^2}.$$
 对于微正则

系综, 在能量和耦合参数比率的平面里表示相图会更加直观和方便. 如图 1 中黑色曲线表示铁磁系统连续相变线, 由 $A=0$ 和 $B>0$ 得到. 而三临界点对应于 $A=B=0$, 给出微正则系综的三临界能量 $\varepsilon_{\text{tri}} = 0.33034$ 和耦合常数比率 $K_{\text{tri}} = 1.0813$. 图 1 中红色曲线是通过计算 $s_{\text{max}}(m=0) = s_{\text{max}}(m^* \neq 0)$ 确定的一级相变线. 图 1 中蓝色曲线表示系统发生遍历性破缺. 当系统能

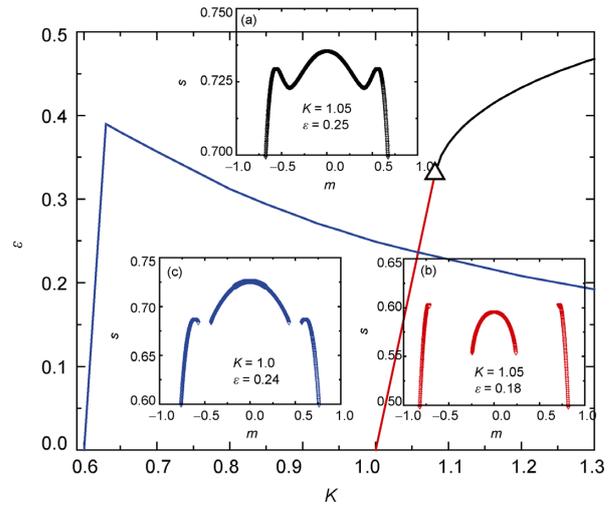


图 1 黑色曲线代表二级有序-无序相变线, 红色曲线表示一级相变线, 三角形表示三临界点位置, 蓝色曲线表示系统发生遍历性破缺

熵在相变和遍历性破缺前后的对照图: (a) 有序且可遍历区域; (b) 有序且非遍历区域; (c) 无序且非遍历区域

Figure 1 The critical line (black line) of order-disorder phase transitions terminates at the tri-critical point (black triangle), where the transition becomes first order phase transition (red line). The blue curve is the transition of breaking ergodicity in the system. The insets show the entropy curves: (a) in the ergodic and order region, (b) in the non-ergodic and order region and (c) in the non-ergodic and disorder region.

量足够高时, 系统没有发生相变 $s_{\max}(m=0)$ 和遍历性破缺, 如图 1(a)所示. 然而, 在适合参数下, 系统先发生遍历性破缺, 然后再发生相变, 如图 1(b)所示. 而当 $K < 1$ 时, 系统不发生相变, 但遍历性破缺仍然会发生, 如图 1(c)所示. 由于局域动力学不能越过禁带^[6,7], 系统能够观察到这种简并结构.

3 比热和磁化率

微正则系综温度的热力学关系是

$$\frac{\Delta}{k_B T} = \frac{\partial s}{\partial \varepsilon}. \quad (7)$$

我们这里定义约化温度 $T^* = k_B T / \Delta$, 磁化强度可由熵的极大值给出, 即 $\partial s / \partial m = 0$, 如图 2(a)和 2(b)所示. 磁化强度在临界点的跳跃表示系统发生了一级相变, 并且微正则温度在相变点也不连续. 通过单个粒子的比热容和磁化率定义 $c_V = d\varepsilon / dT$ 和 $\chi = \partial m / \partial h$, 可以得到

$$c_V = \beta^2 \frac{s_{mm}}{s_{\varepsilon m}^2 - s_{\varepsilon\varepsilon} s_{mm}}, \quad (8)$$

$$\chi = \beta \frac{s_{\varepsilon\varepsilon}}{s_{\varepsilon m}^2 - s_{\varepsilon\varepsilon} s_{mm}}. \quad (9)$$

在图 2(c)中, 比热在相变点附近随着能量的降低而保持定值, 当遇上一级相变线时, 比热突然跳跃到一个很小的负值. 随着能量继续减小, 比热迅速减小逼近负无穷, 比热奇异性的位置对应着系统的绝对不稳定线(Spinodal). 而磁化率在相变点附近随着能量的降低逐渐增大, 当遇上一级相变线时, 磁化率突然跳跃到另一个很大的负值, 如图 2(d)所示. 但当能量继续减小时, 磁化率遇上绝对不稳定线表现出发散性.

当耦合常数比率高于正则三临界点时, 如图 3所示 $K=1.2$ 的结果. 序参量 m 随能量降低连续增加, 在临界点 ε_c 处, $m(\varepsilon_c)=0$. 微正则温度随能量降低连续单调下降, 比热和磁化率在临界点附近按幂指数形式变化^[10]:

$$c(\varepsilon) \propto (\varepsilon - \varepsilon_c)^\alpha, \quad \varepsilon > \varepsilon_c, \quad (10)$$

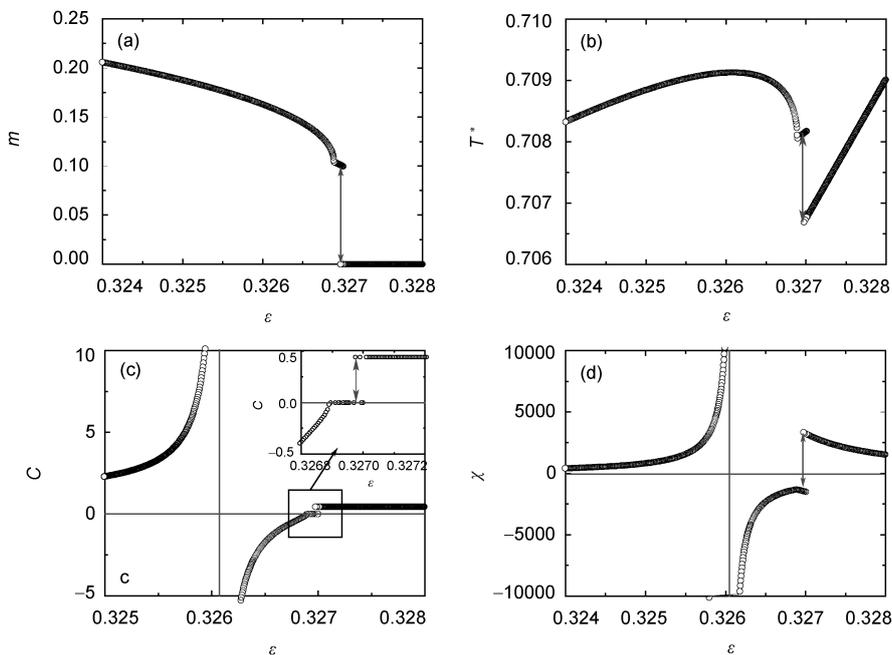


图 2 $K=1.0805$ 时, (a) 磁化强度、(b) 温度、(c) 比热、(d) 磁化率随能量的变化
(c)中的插图显示负比热的出现位置

Figure 2 When $K=1.0805$, (a) magnetization, (b) temperature, (c) specific heat and (d) susceptibility versus energy relation. The jump of specific heat is roomed in the inset.

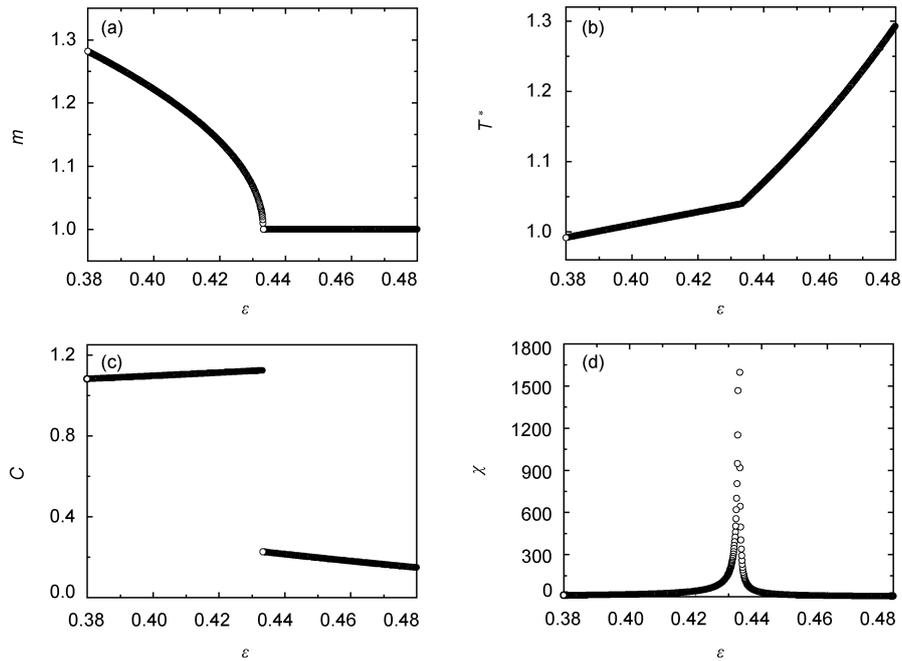


图3 有序-无序临界点 $K=1.2$ 时, (a) 磁化强度、(b) 温度、(c) 比热、(d) 磁化率随能量的变化
 Figure 3 When $K=1.2$, relationship between energy and (a) magnetization, (b) temperature, (c) specific heat and (d) susceptibility.

$$c(\varepsilon) \propto (\varepsilon_c - \varepsilon)^{\alpha'}, \quad \varepsilon < \varepsilon_c, \quad (11)$$

$$\chi(\varepsilon) \propto (\varepsilon - \varepsilon_c)^\gamma, \quad \varepsilon > \varepsilon_c, \quad (12)$$

$$\chi(\varepsilon) \propto (\varepsilon_c - \varepsilon)^{\gamma'}, \quad \varepsilon < \varepsilon_c, \quad (13)$$

这里 α 和 γ 相应于高于临界点, α' 和 γ' 对应于低于临界点的临界指数. 图 3(c)比热在临界点处不连续, 在高能量 $\varepsilon > \varepsilon_c$ 和低能量 $\varepsilon < \varepsilon_c$ 区间为有限值, 可以得到比热的临界指数 $\alpha = \alpha' = 0$. 图 3(d)中, 磁化率在临界点处发散, 磁化率的临界指数 $\gamma = \gamma' = 1$, 如图 4(a) 所示.

当耦合常数比率对应于正则系综的三临界点 $K=3/\ln 16$ 时^[5], 由于高于微正则三临界点, 所以此处还是对应微正则的二级相变. 序参量和温度随能量连续变化, 如图 5(a)和 5(b)所示. 比热在高能量区域 $\varepsilon > \varepsilon_c$ 基本不随能量变化, 按方程(10)给出高能量区域比热的临界指数 $\alpha=0$. 不同于前面的二级相变, 比热在耦合常数 $K=3/\ln 16$ 低能量区域 $\varepsilon < \varepsilon_c$ 有发散行为, 其临界指数 $\alpha'=1$. 比热高能量和低能量临界指数的不一致, 破坏了临界指数的等价性假设^[10]. 在正则系综下长程的 Ising 模型中, 在三临界点也观察到比热的临界指数 $0 = \alpha \neq \alpha' = 1/2$ 破坏临界指数等价性假设, 而磁化率的临界指数 $\gamma = \gamma' = 1$ 却满足等价性假

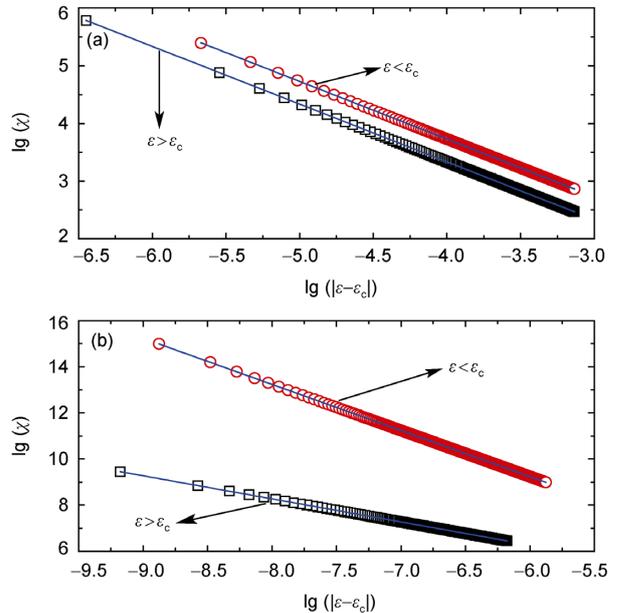


图4 在对数坐标里磁化率随能量的变化
 (a) $K=1.2$ 和 (b) $K=3/\ln 16$, 磁化率在二级相变点附近高能量(黑方块)和低能量(红圆圈)区间的发散行为. 蓝线是数据的直线拟合

Figure 4 Susceptibility as a function of energy, plotted on logarithmic scales. (a) $K=1.2$ and (b) $K=3/\ln 16$ for the proximity of the second order phase transition, the power laws of susceptibility are observed in higher energy region (black square) and lower energy region (red circle) respectively. The blue straight lines are fitting curves.

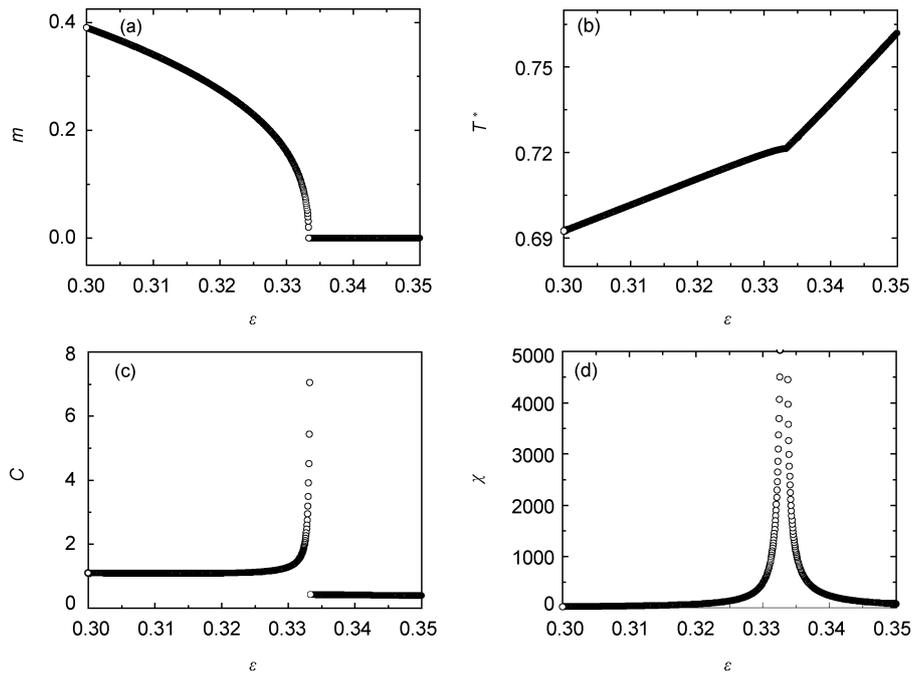


图5 $K=3/\ln 16$ (正则三临界点)时, (a) 磁化强度、(b) 温度、(c) 比热、(d) 磁化率随能量的变化

Figure 5 When $K=3/\ln 16$ (canonical tricritical point), (a) magnetization, (b) temperature, (c) specific heat and (d) susceptibility as a function of energy.

设^[11]. 但是在微正则系综下, 却发现磁化率高能量和低能量的临界指数 $1 = \gamma \neq \gamma' = 2$, 同样破坏等价性假设, 如图4(b)所示. 不仅如此, 低能量的临界指数关系 $\alpha' + 2\beta + \gamma' > 2$ 破坏 Widom 标度律^[10,12].

由于微正则和正则系综的三临界点不一致, 而在 BEG 模型微正则系综中观察到破坏标度律的现象只是当耦合常数比率对应正则三临界点. 当参数在正则三临界点到微正则三临界点的区间时, 尽管出现负比热和负磁化率, 但对于比热的临界指数 $\alpha = \alpha' = 0$ 和磁化率的临界指数 $\gamma = \gamma' = 1$ 却又重新满足等价性假设和 Widom 标度律^[12]. 因此不论从微正则或者正则系综来观察, 等价性假设和标度律破坏只出现在正则三临界点, 这也表明系综的不等价性.

4 结论

本文研究了微正则系综下的 BEG 模型, 在相图中给出发生遍历性破缺的区域. 在高于正则三临界点区域里, 比热的临界指数 $\alpha = \alpha' = 0$ 和磁化率的临界指数 $\gamma = \gamma' = 1$ 与平均场的结果一致. 当耦合常数对应于正则三临界点时, 发现比热的临界指数 $0 = \alpha \neq \alpha' = 1$ 和磁化率的临界指数 $1 = \gamma \neq \gamma' = 2$ 破坏临界指数的等价性. 与此同时, 对应于低温部分的临界指数的关系 $\alpha' + 2\beta + \gamma' > 2$ 破坏 Widom 标度律. 当继续减小耦合常数进入从正则三临界点到微正则三临界点的区间时, 比热和磁化率的临界指数又回到平均场的结果.

参考文献

- 1 Campa A, Dauxois T, Ruffo S. Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long-range interactions. *Phys Rep*, 2009, 480(3): 57–159
- 2 Lynden-Bell D, Wood R. The gravo-thermal catastrophe in isothermal spheres and the onset of red-giant structure for stellar systems. *Mon Not Roy Astron Soc*, 1968, 138: 495–525
- 3 Ellis R S, Haven K, Turkington B. Large deviation principles and complete equivalence and nonequivalence results for pure and mixed

- ensembles. *J Stat Phys*, 2000, 101(5): 999–1064
- 4 Touchette H, Ellis R S, Turkington B. An introduction to the thermodynamic and macrostate levels of nonequivalent ensembles. *Physica A*, 2004, 340(1): 138–146
 - 5 Barre J, Mukamel D, Ruffo S. Inequivalence of ensembles in a system with long-range interactions. *Phys Rev Lett*, 2001, 87(3): 030601
 - 6 Mukamel D, Ruffo S, Schreiber N. Breaking of ergodicity and long relaxation times in systems with long-range interactions. *Phys Rev Lett*, 2005, 95(24): 240604
 - 7 Bouchet F, Dauxois T, Mukamel D, et al. Phase space gaps and ergodicity breaking in systems with long-range interactions. *Phys Rev E*, 2008, 77(1): 011125
 - 8 Ramírez-Hernández A, Larralde H, Leyvraz F. Violation of the zeroth law of thermodynamics in systems with negative specific heat. *Phys Rev Lett*, 2008, 100(12): 120601
 - 9 Ramírez-Hernández A, Larralde H, Leyvraz F. Systems with negative specific heat in thermal contact: Violation of the zeroth law. *Phys Rev E*, 2008, 78(6): 061133
 - 10 Cardy J. *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*. New York: Cambridge University Press, 1996.
 - 11 Nagle J F. Ising chain with competing interactions. *Phys Rev A*, 1970, 2(5): 2124–2128
 - 12 Widom B. Surface tension and molecular correlations near the critical point. *J Chem Phys*, 1965, 43(11): 3892–3897; Widom B. Equation of state in the neighborhood of the critical point. *J Chem Phys*, 1965, 43(11): 3898–3905

Long-range interaction Blume-Emery-Griffiths model: Critical exponents in microcanonical ensemble

LI LiangSheng^{*}, SHI QingFan & ZHENG Ning^{*}

Department of Physics, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China

We investigate the thermodynamic quantities of Blume-Emery-Griffiths model with long-range interactions and observe negative specific heat and susceptibility near the first order line, where the temperature, specific heat and susceptibility are discontinuity. When order-disorder phase transition takes place, the critical exponent of specific heat ($\alpha = \alpha' = 0$) and the critical exponent of susceptibility ($\gamma = \gamma' = 1$) are consistent with the prediction of mean field theory. However, when coupling constant corresponds to the value of canonical tri-critical point, the critical exponent of specific heat and susceptibility take the values of $0 = \alpha \neq \alpha' = 1$ and $1 = \gamma \neq \gamma' = 2$. The critical exponents violate the scaling homogeneity equalities and $\alpha' + \beta + \gamma' > 2$ breaks down the Widom scaling law.

phase transition, thermodynamics, ensemble theory, critical exponent

PACS: 05.70.Fh, 05.70.Aa, 05.20.Gg, 75.40.Cx

doi: 10.1360/132010-572