

# 以路徑積分求易行相變模型的解析解

吳明佳

中央研究院物理研究所

e-mail: mcwu@phys.sinica.edu.tw

## 摘要

傳統求易行模型的解析解多採用所謂的轉移矩陣 (transfer matrix) 方法, 過程相當複雜冗長, 並且有其實質上的應用侷限。本文將介紹一種新的方法, 稱為格拉施曼路徑積分法 (Grassmann path integral approach)。這個方法可以有系統的求解一系列平面晶格上的易行模型, 其過程較傳統方法簡化許多。

在臨界現象的研究中, 易行模型 (Ising model) 一直是物理學家很感興趣的一個模型。主要的原因之一, 是因為它的微觀交互作用模式非常簡單, 卻能呈現出類似真實物理系統的相變行為; 而對它的研究, 不僅可以用來預測系統的行為, 也可以增進對真實物理系統相變機制的了解。關於易行模型的歷史, 清華大學林克瀛教授曾於本刊之 1984 年八月號統計物理專輯系列中作過介紹, 本文不再詳述。本文將著重於易行模型的解析解, 尤其是介紹一種新的求解方法。

關於二維易行模型的解析解, 最早是由 Onsager 用李代數 (Lie algebra) 的方法解出來的<sup>[1]</sup>。原來的的方法相當複雜, 並且僅適用於正方形無限大晶格的情況。後來 Kaufman 使用自旋子表示法 (spinor representation) 將其簡化, 並進一步適用於有限大小的圓環面 (torus)<sup>[2]</sup>。接著, Schultz、Mattis 與 Lieb 以轉移矩陣 (transfer-matrix) 方法的架構, 給出明確的費米處理<sup>[3]</sup>。另一方面, Kac

與 Ward<sup>[4]</sup> 則發展組合方法 (combinatorial method), 並由 Hurst 與 Green<sup>[5]</sup> 嚴格地敘述二維易行模型為自由費米子場 (free fermionic field)。雖然此後仍有許多方法被發展出來, 但求解易行模型的解析解大部分仍採用轉移矩陣的方法。

最近, 俄國物理學家 Plechko 引進一種新的方法<sup>[6]</sup>, 利用格拉施曼變量 (Grassmann variables) 的反對易 (anticommuting) 性質及其代數關係, 以比較起來簡化許多的推導, 重覆 Onsager 長方形無限晶格及後來 Kaufman 的長方形有限晶格的解析解; 他的方法也可以進一步推廣到特定系列的平面晶格<sup>[7,8]</sup>, 例如三角形、六邊形, 與裝飾型 (Decorated) 的晶格<sup>[7-12]</sup>。由於這個方法是一個相當有系統的方法, 已知對求解特定晶格模型的解析解很有效, 但是目前僅應用在相關晶格模型的研究上, 也少為學者所熟知; 因此, 我們希望在本文中介紹這個方法, 如此對於相關研究, 甚至其他領域的研究的學者, 也許可以提供一些新的想法。在本

文中，我們除了將介紹這套方法的構想之外，也將以格拉施曼路線積分方法為架構，有系統地求解二維易行模型在一系列晶格的解析解。

所謂的格拉施曼變量 (Grassmann variables)，是反對易的費米變量，也就是說，一組格拉施曼變量， $\{\chi_i, i = 1, 2, \dots, n\}$ ，滿足下列反對易關係<sup>[13]</sup>：

$$\{\chi_i, \chi_j\} = \chi_i \chi_j + \chi_j \chi_i = 0 \quad (1)$$

根據這個關係，任意格拉施曼變量的平方或更高次方為零，

$$\chi_i^2 = 0 \quad (2)$$

而任意格拉施曼變量的函數則可表示成有限項之和

$$\Omega(\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_n) = \sum_{\alpha_i=0,1} f(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \chi_1^{\alpha_1} \chi_2^{\alpha_2} \dots \chi_n^{\alpha_n} \quad (3)$$

其中  $f$  是普通的數字，而  $\alpha_i (1 \leq i \leq n)$  是 1 或 0。格拉施曼變量的複數共軛定義為

$$(\chi_1 \chi_2 \dots \chi_n)^* = \chi_1^* \chi_2^* \dots \chi_n^* \quad (4)$$

而其共軛之共軛則定義為

$$(\chi_i^*)^* = -\chi_i \quad (5)$$

在這個定義下，我們有下列關係

$$(\chi_i^* \chi_j)^* = \chi_j^* \chi_i \quad (6)$$

另外，格拉施曼變量的積分滿足移動不變的性質，亦即：

$$\int d\chi = 0, \int d\chi \cdot \chi = 1, \int d\chi \cdot \Omega(\chi + \eta) = \int d\chi \cdot \Omega(\chi) \quad (7)$$

其中  $\Omega$  為任意格拉施曼函數， $\eta$  為任意格拉施曼向量的任意分量。

以格拉施曼積分求解二維易行模型的方法，又稱為格拉施曼路徑積分法 (Grassmann path integral

approach)。這個方法是根據反對易格拉施曼變量的積分、線性排序分解 (linear-ordering factorization) 與鏡像排序分解 (mirror-ordering factorization) 的原理，而引進格拉施曼變量基本上是利用費米分解 (fermionic factorization) 程序中數學上的等價，將耦合的自旋變量分離開來，然後再利用格拉施曼變量的反對易代數關係，找出晶格上易行自旋變量的循環關係，以簡化分配函數中自旋變量的求和計算。以這個方法求解二維易行模型解析解的程序大致上可以由下式來說明：

$$Q = \text{Sp}_{(\sigma)}\{Q(\sigma)\} \rightarrow \text{Sp}_{(\sigma|\chi)}\{Q(\sigma|\chi)\} \rightarrow \text{Sp}_{(\chi)}\{Q(\chi)\} = Q \quad (8)$$

系統配分函數 (partition function) 的原始形式係由自旋變量  $\sigma$  所寫成，經由對每一個連結 (link) 引進一對格拉施曼變量  $\{\chi, \chi^*\}$ ，可以將原先耦合在一起的自旋變量分離開來，並將配分函數改寫成自旋變量與格拉施曼變量的混合表示；接著利用格拉施曼變量的代數關係與線性排序與鏡像排序規則，將表達式中的格拉施曼因子 (Grassmann factor) 重新排序，使得相同的自旋變量收集在一起，然後對這些變量取自旋平均，而得到一個完全由格拉施曼變量表示的配分函數；最後再對這些格拉施曼變量作傅立葉轉換 (Fourier transform)，便可求出系統配分函數與自由能的解析表達式。

為了具體說明這個方法，以下我們實際求解定義於長方形、三角形與六邊形上的易行模型。由於這三種晶格可以寫成一個通式，我們將把三種晶格合併起來討論，如此可以比較容易了解三種晶格的相似與差異之處。首先，我們考慮二維易行模型的配分函數

$$Z = \sum_{(\sigma)} \exp \left( \sum_{\langle ij \rangle} \beta J_{ij} \sigma_i \sigma_j \right) \quad (9)$$

其中  $\beta = 1/(k_B T)$  為溫度的倒數， $J_{ij}$  是是自旋耦合強度， $\sigma_i = \pm 1$  是晶格點  $i$  上的自旋變量，符號  $(\sigma)$  表示所有自旋變量，符號  $\langle \rangle$  表示晶格間僅有鄰近交互作用。根據波茲曼權重 ( Boltzmann weight ) 等式

$$\exp[\beta J_{ij} \sigma_i \sigma_j] = (1 - t_{ij}^2)^{-1/2} (1 + t_{ij} \sigma_i \sigma_j) \quad (10)$$

其中  $t_{ij} = \tanh(\beta J_{ij})$ ，配分函數可以改寫成

$$Z = 2^{N_s} \left( \prod_{\langle ij \rangle} (1 - t_{ij}^2)^{-1/2} \right) \text{Sp}_{(\sigma)} \left\{ \prod_{\langle ij \rangle} (1 + t_{ij} \sigma_i \sigma_j) \right\} \quad (11)$$

其中  $N_s$  為晶格點總數， $\text{Sp}$  為自旋變量平均值，其定義為

$$\text{Sp}_{(\sigma)} \{ \dots \} = \frac{1}{2} \sum_{(\sigma_i = \pm 1)} \{ \dots \}, \quad \text{Sp}_{(\sigma)} \{ 1 \} = 1, \quad \text{Sp}_{(\sigma)} \{ \sigma_i \} = 0 \quad (12)$$

因此，

$$\sum_{(\sigma)} [ \dots ] = 2^{N_s} \text{Sp}_{(\sigma)} \{ \dots \} \quad (13)$$

如此一來，問題便簡化成簡約的配分函數 ( reduced partition function ) 的計算

$$Q = \text{Sp}_{(\sigma)} \left\{ \prod_{\langle ij \rangle} (1 + t_{ij} \sigma_i \sigma_j) \right\} \quad (14)$$

接下來，我們為每一個連結引進一對格拉施曼變量。基本上，格拉施曼變量的引進必須考慮晶格的對稱性。舉例來說，對於長方形晶格，我們對引進兩組格拉施曼變量，以分別處理橫向與縱向的自旋交互作用。對於三角形與六邊形的晶格，則引進三組格拉施曼變量，以處理其三個方向的自旋交互作用。利用格拉施曼變量的反對易性質，我們可以将局部鍵結的波茲曼權重 ( local bond Boltzmann weight ) 做費米分解

$$1 + t_{ij} \sigma_i \sigma_j = \int d\chi_{ij}^* d\chi_{ij} e^{Z_{ij} \chi_{ij}^*} (1 + \chi_{ij} \sigma_i) (1 + t_{ij} \chi_{ij}^* \sigma_j) = \text{Sp}_{(\chi_{ij})} \{ A_{ij}(\sigma_i) A_{ij}^*(\sigma_j) \} \quad (15)$$

其中

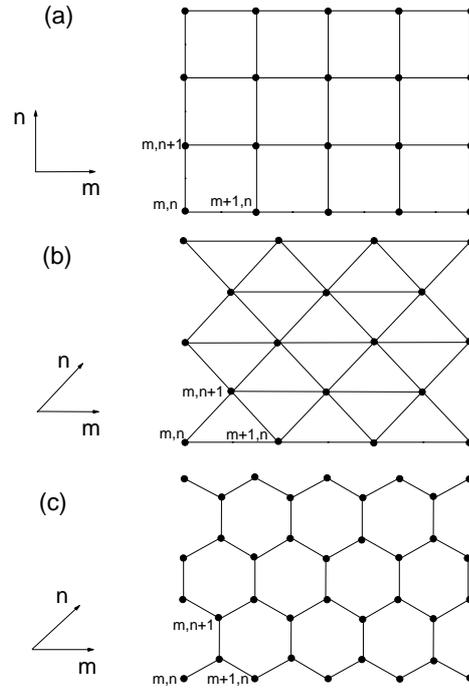


圖 1. (a) 5x4 長方形晶格, (b) 4x5 三角形晶格, (c) 9x4 六邊形晶格。

$$\text{Sp}_{(\chi_{ij})} \{ \dots \} = \int d\chi_{ij}^* d\chi_{ij} e^{Z_{ij} \chi_{ij}^*} [ \dots ] \quad (16)$$

滿足下列規則

$$\begin{aligned} \text{Sp}_{(\chi_{ij})} \{ \chi_{ij} \chi_{ij}^* \} &= - \text{Sp}_{(\chi_{ij})} \{ \chi_{ij}^* \chi_{ij} \}, \\ \text{Sp}_{(\chi_{ij})} \{ \chi_{ij} \} &= \text{Sp}_{(\chi_{ij})} \{ \chi_{ij}^* \} = 0 \end{aligned} \quad (17)$$

引進格拉施曼變量之後，我們可以得到以格拉施曼變量與自旋變量混合表示的簡約配分函數，即：

$$Q = \text{Sp}_{(\sigma)} \text{Sp}_{(\chi_{ij})} \left\{ \prod_{\langle ij \rangle} [ A_{ij}(\chi_{ij}, \sigma_i) A_{ij}^*(\chi_{ij}^*, \sigma_j) ] \right\} \quad (18)$$

根據上述方法，對於  $N_x \times N_y$  之長方形、三角形與六邊形的平面晶格，如圖 1 所示，其配分函數

可以寫成以下通式：

$$Z^{ap} = 2^{N_s-1} \left[ \prod_{i=1}^{z/2} \cosh(\beta J_i) \right]^{N_s} \times \left[ \Omega_{\frac{11}{22}} - \Omega_{\frac{10}{20}} + \Omega_{\frac{01}{21}} + \text{sgn}(t)\Omega_{00} \right], \quad (19)$$

其中  $z$  是晶格的配位數 ( coordination number )，對於正方形與三角形晶格， $L_x, L_y$  與  $N_x, N_y$  的關係為  $L_x = N_x, L_y = N_y$ ，而對於六邊形晶格，其關係則為  $L_x = \frac{1}{2} N_x, L_y = N_y$ 。另外， $A, A^*, B, B^*, C, C^*$  稱為波茲曼因子 ( Boltzmann factors )，其形式為：

$$\begin{aligned} A_{mn} &= 1 + a_{mn} \sigma_{mn}, & A_{mn}^* &= 1 + r_1 a_{m-1n}^* \sigma_{mn}; \\ B_{mn} &= 1 + b_{mn} \sigma_{mn}, & B_{mn}^* &= 1 + r_2 b_{mn-1}^* \sigma_{mn}; \\ C_{mn} &= 1 + c_{mn-1} \sigma_{mn}, & C_{mn}^* &= 1 + r_3 c_{m-1n}^* \sigma_{mn}. \end{aligned}$$

其中  $r_i, i=1,2,3$  是晶格結構的函數，具體的形式由下列等式決定：

長方形：

$$r_0 = 1, \quad r_1 = t_1, \quad r_2 = t_2, \quad r_3 = 0$$

三角形：

$$r_0 = 1, \quad r_i = t_i$$

六邊形：

$$\begin{aligned} r_0(1 + r_1 r_2 r_3) &= 1, & r_0(r_1 + r_2 r_3) &= t_1 t_3, \\ r_0(r_2 + r_1 r_3) &= t_1 t_2, & r_0(r_3 + r_1 r_2) &= t_2 t_3 \end{aligned}$$

在以格拉施曼變量與自旋變量混合表示配分函數的表達式中，波茲曼權重被分成包含不同自旋之波茲曼因子的乘積，每一個波茲曼因子具有一個格拉施曼變量。接下來，利用格拉施曼變量的反對易性質，將波茲曼因子重新排序。排序的方法主要有兩種，即線性排序分解與鏡像排序分解，兩者皆利用成對波茲曼因子可互相交換次序的性質。所謂的線性排序分解，是將波茲曼因子按順序排列，結果可以將成對的格拉施曼因子當成一個單元，以符號表

示，則為

$$\begin{aligned} & [A_1(\sigma_1)A_2^*(\sigma_2)][A_2(\sigma_2)A_3^*(\sigma_3)][A_3(\sigma_3)A_4^*(\sigma_4)] \\ & \times \cdots [A_N(\sigma_N)A_{N+1}^*(\sigma_{N+1})] \\ & = A_1(\sigma_1)[A_2^*(\sigma_2)A_2(\sigma_2)][A_3^*(\sigma_3)A_3(\sigma_3)] \\ & \times \cdots [A_N^*(\sigma_N)A_N(\sigma_N)]A_{N+1}^*(\sigma_{N+1}) \end{aligned}$$

鏡像排序分解係利用逐次將一對波茲曼因子插入另外一對波茲曼因子中間的程序來獲得，以符號表示，則為

$$\begin{aligned} & [A_1(\sigma_1)A_2^*(\sigma_2)][A_2(\sigma_2)A_3^*(\sigma_3)][A_3(\sigma_3)A_4^*(\sigma_4)] \\ & \times \cdots [A_N(\sigma_N)A_{N+1}^*(\sigma_{N+1})] \\ & = A_1(\sigma_1) \left\{ A_2(\sigma_2) \left[ A_3(\sigma_3) \left( \cdots A_N(\sigma_N) A_{N+1}^*(\sigma_{N+1}) \cdots \right) \right. \right. \\ & \left. \left. \times A_4^*(\sigma_4) \right] A_3^*(\sigma_3) \right\} A_2^*(\sigma_2) \end{aligned}$$

這些排序方法可以有系統地使相同自旋的波茲曼因子集中在一起，方便在隨後的自旋變量求和程序中，消除自旋的自由度。事實上，這個程序是格拉施曼方法求解過程中最重要與關鍵的步驟。值得注意的是，在上述的排序分解過程中，將波茲曼因子重新排序成線性或鏡像成對的形式，必須將每一個方向中的晶格點頭尾相接，因此必須設定適當的邊界條件，如週期邊界條件 ( periodic boundary condition ) 或反週期邊界條件 ( anti-periodic boundary condition )。所謂的週期邊界條件，是指晶格在單一方向上頭尾相連，尾端晶格點上的自旋變量與下一個晶格點上的自旋變量耦合時，下一個晶格點上的自旋變量與頭端晶格點上的自旋變量方向相同；而所謂的反週期邊界條件，則是尾端晶格點上的自旋變量與下一個晶格點上的自旋變量耦合時，下一個晶格點上的自旋變量與頭端晶格點上的自旋變量方向相反。以格拉施曼積分方法處理邊界問題基本上是比较簡單的，只需要找出自旋與格拉施曼變量在邊界上的關係即可。舉例來說，在

週期邊界條件的情況中，我們要求第 1 個晶格點上自旋  $\sigma_1$  與第  $N+1$  個晶格點上的自旋  $\sigma_{N+1}$  必須相同，亦即  $\sigma_1 = \sigma_{N+1}$ ，而在格拉施曼路徑積分方法中，為了保持排序的規則，我們必須要求  $\chi_0^* = -\chi_N^*$ 。結果，線性排序分解可以進一步寫成：

$$\sum_{n=1}^N A_n^*(\chi_0^*, \sigma_1) A_n(\chi_1, \sigma_1) \quad (20)$$

而鏡像排序分解則表示成

$$\sum_{n=1}^N \overset{\leftarrow}{A}_n A_n^* \quad \text{或} \quad \sum_{n=1}^N \overset{\leftarrow}{A}_n \overset{\leftarrow}{A}_n^* \quad (21)$$

其中箭頭的方向表示波茲曼因子乘積的順序。如此一來，原先自旋上的邊界條件變成加諸在格拉施曼變量上的邊界條件，而且兩者在符號的正負上剛好是相反的。包含邊界條件處理的線性排序分解與鏡像排序分解，可以進一步推廣並應用到二維的情況，但是排序的過程會遇到更多移動格拉施曼變量的步驟，因此必須考慮格拉施曼變量的反對易代數關係，也因此情形會稍微複雜一些。其中，邊界波茲曼因子的處理會使簡約配分函數包含四個項，分別對應到四種不同的邊界格拉施曼變量，亦即  $Q^{pp} = \frac{1}{2}[Q_1(pp) + Q_2(pa) + Q_3(ap) - Q_4(aa)]$  (22) 其中 pp 表示週期週期邊界條件，pa 表示週期反週期邊界條件，ap 表示反週期週期邊界條件，aa 則表示反週期反週期邊界條件，其中每一個  $Q_i$  均包含簡約配分函數的形式，而個別的  $Q_i$  之間，差別僅在於邊界上所設定的邊界格拉施曼變量關係。對於這個關係，從推導過程來看，僅是含格拉施曼變量的邊界波茲曼因子的交換，由於反對易關係要求的結果，目的是為了和隨後的傅立葉轉換要求相符。但是事實上，從晶格場論的觀點來看，包含四個項有其他的含意 [14]。由於四種邊界條件的簡

約配分函數所包含的組成波茲曼因子都一樣，我們可以僅計算其中一種情況，最後再做代換。不過，即使如此簡化，整個過程仍然相當冗長，在此我們僅將結果寫下來，有興趣的讀者可以參考參考文獻 [6,9,10,11,13]。經過處理之後，等式 (22) 中簡約配分函數的第四項可以寫成：

$$Q_4 = r_0^{L_x L_y} \text{Sp}_{(a,b,c)} \left\{ \prod_{m=1}^{L_x} \prod_{n=1}^{L_y} \text{Sp} [C_{mn}^* A_{mn}^* B_{mn}^* C_{mn} A_{mn} B_{mn}] \right\} \quad (23)$$

在這個表示式中，所有包含相同自旋  $\sigma_{mn}$  的波茲曼因子都集中在一起，因此可以直接計算自旋平均值。結果，便得到下式：

$$Q_4 = r_0^{L_x L_y} \int \prod_{m=1}^{L_x} \prod_{n=1}^{L_y} da_{mn}^* da_{mn} db_{mn}^* db_{mn} dc_{mn}^* dc_{mn} \times \exp \left( \sum_{m=1}^{L_x} \sum_{n=1}^{L_y} F_{mn} \right) \quad (24)$$

其中

$$F_{mn} = a_{mn} a_{mn}^* + b_{mn} b_{mn}^* + c_{mn} c_{mn}^* + r_1 r_3 c_{m-1n}^* a_{m-1n}^* + (r_3 c_{m-1n}^* + r_1 a_{m-1n}^*) r_2 b_{mn-1}^* + (r_3 c_{m-1n}^* + r_1 a_{m-1n}^* + r_2 b_{mn-1}^*) c_{mn-1} + (r_3 c_{m-1n}^* + r_1 a_{m-1n}^* + r_2 b_{mn-1}^* + c_{mn-1}) a_{mn} + (r_3 c_{m-1n}^* + r_1 a_{m-1n}^* + r_2 b_{mn-1}^* + c_{mn-1} + a_{mn}) b_{mn} \quad (25)$$

等式 (22) 中的其他三項  $Q_1(pp)$ ,  $Q_2(pa)$ ,  $Q_3(ap)$ ，具有與  $Q_4(aa)$  相同的形式。在這個表達式中，配分函數已經完全以格拉施曼變量來表示。這個表達式對研究對應的場論非常方便，僅需要適當地定義格拉施曼變量所對應的費米子場，便可以用來證明二維易行晶格所對應的自由費米子場論。

由於簡約配分函數中格拉施曼變量互相耦合，為了獲得解析解，我們進一步使用傅立葉轉換

的技巧，來計算格拉施曼積分。我們定義：

$$X_{mn} = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}} \sum_{p=0}^{L_x-1} \sum_{q=0}^{L_y-1} X_{pq} \exp\left(-i \frac{2\pi}{L_x} mp - i \frac{2\pi}{L_y} nq\right) \quad (26)$$

$$X_{mn}^* = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}} \sum_{p=0}^{L_x-1} \sum_{q=0}^{L_y-1} X_{pq}^* \exp\left(i \frac{2\pi}{L_x} mp + i \frac{2\pi}{L_y} nq\right)$$

其中  $X_{mn}, X_{mn}^*$  分別表示格拉施曼變量  $\{a_{mn}, b_{mn}, c_{mn}\}$  與  $\{a_{mn}^*, b_{mn}^*, c_{mn}^*\}$ 。整個積分過程包含六個變量的積分，因此比較複雜，但是過程中有許多對稱性可以依循，所得的結果也非常簡潔。下列是計算結果：

$$Q_4 = \prod_{p=0}^{L_x-1} \prod_{q=0}^{L_y-1} \left[ A_0 - A_1 \cos \frac{2\pi p}{L_x} - A_2 \cos \frac{2\pi q}{L_y} - A_3 \cos \left( \frac{2\pi p}{L_x} - \frac{2\pi q}{L_y} \right) \right]^{1/2} \quad (27)$$

其中  $A_0, A_1, A_2, A_3$  分別為：

長方形：

$$A_0 = (1+t_1^2)(1+t_2^2),$$

$$A_1 = 2t_1(1-t_2^2),$$

$$A_2 = 2t_2(1-t_1^2),$$

$$A_3 = 0$$

三角形：

$$A_0 = (1+t_1^2)(1+t_2^2)(1+t_3^2) + 8t_1 t_2 t_3,$$

$$A_1 = 2t_1(1-t_2^2)(1-t_3^2),$$

$$A_2 = 2t_2(1-t_1^2)(1-t_3^2),$$

$$A_3 = 2t_3(1-t_2^2)(1-t_1^2),$$

六邊形：

$$A_0 = 1+t_1^2 t_2^2 + t_2^2 t_3^2 + t_3^2 t_1^2,$$

$$A_1 = 2t_1 t_3(1-t_2^2),$$

$$A_2 = 2t_1 t_2(1-t_3^2),$$

$$A_3 = 2t_2 t_3(1-t_1^2).$$

依據等式 (22)，將等式 (27) 設定成對應到四種邊界格拉施曼變量的值，然後代入原始配分函數 (22)，便可得到兩邊都是週期邊界條件的解析解

$$Z^{pp} = 2^{N_s-1} \left[ \prod_{i=1}^{z/2} \cosh(\beta J_i) \right]^{N_s} \times \left[ \Omega_{\frac{1}{2}} + \Omega_{\frac{1}{2}0} + \Omega_{0\frac{1}{2}} - \text{sgn}(t)\Omega_{00} \right] \quad (28)$$

其中

$$\Omega_{\mu\nu} = \prod_{p=0}^{L_x-1} \prod_{q=0}^{L_y-1} \left[ A_0 - A_1 \cos \frac{2\pi(p+\mu)}{L_x} - A_2 \cos \frac{2\pi(q+\nu)}{L_y} - A_3 \cos \left( \frac{2\pi(p+\mu)}{L_x} - \frac{2\pi(q+\nu)}{L_y} \right) \right]^{1/2} \quad (29)$$

對於其他邊界條件，結果為：

$$Z^{pa} = 2^{N_s-1} \left[ \prod_{i=1}^{z/2} \cosh(\beta J_i) \right]^{N_s} \times \left[ \Omega_{\frac{1}{2}} + \Omega_{\frac{1}{2}0} - \Omega_{0\frac{1}{2}} + \text{sgn}(t)\Omega_{00} \right] \quad (30)$$

$$Z^{ap} = 2^{N_s-1} \left[ \prod_{i=1}^{z/2} \cosh(\beta J_i) \right]^{N_s} \times \left[ \Omega_{\frac{1}{2}} - \Omega_{\frac{1}{2}0} + \Omega_{0\frac{1}{2}} + \text{sgn}(t)\Omega_{00} \right] \quad (31)$$

$$Z^{aa} = 2^{N_s-1} \left[ \prod_{i=1}^{z/2} \cosh(\beta J_i) \right]^{N_s} \times \left[ -\Omega_{\frac{1}{2}} + \Omega_{\frac{1}{2}0} + \Omega_{0\frac{1}{2}} + \text{sgn}(t)\Omega_{00} \right] \quad (32)$$

由於熱力學函數可以從配分函數導出，因此解出配分函數的解析解便可得到所有導出量，包括系統的自由能、內能與比熱。其中，均向耦合 (isotropic coupling) 週期邊界條件情況的有限晶格的比熱圖形如圖 2 所示。

另外，臨界溫度係由無限大系統的自由能零點所決定，我們可以經由計算滿足下列條件的耦合常數來決定臨界溫度，

$$A_0 - A_1 - A_2 - A_3 = 0 \quad (33)$$

所得的結果為

$$\text{長方形： } \theta_c = \frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})},$$

$$\text{三角形： } \theta_c = \frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln \sqrt{3}},$$

$$\text{六邊形： } \theta_c = \frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln(2+\sqrt{3})},$$

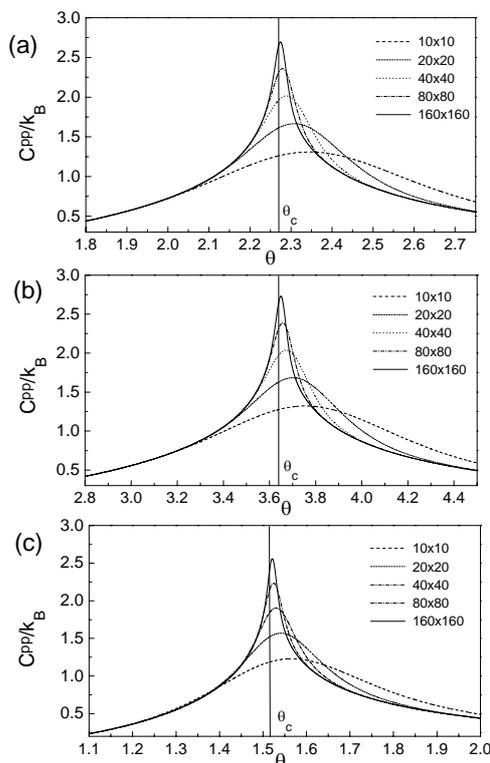


圖2. (a)正方形, (b)三角形, (c)六邊形晶格之比熱。

至此，我們已經利用格拉施曼路徑積分方法求出二維易行模型的解析解。從求解的過程可以發現，以這個方法求解易行模型主要是利用格拉施曼變量的反對易性質與波茲曼因子的排序分解原理。對於一維與二維的易行模型，這種反對易關係可以將原先對自旋變量的求和平均，轉換成對格拉施曼變量的代數與積分計算。至於三維晶格的情況，自旋變量耦合化成波茲曼因子分解的代數，並不是單純的反對易關係，這個方法尚未應用到三維的易行模型。另外，在利用這個方法求解解析解的過程中，我們利用格拉施曼變數的代數簡化求和的計算，使原先複雜的自旋耦合求和，變成相同自旋變量集中在一起的自旋平均計算，在這方面使得求解的問題簡化許多，但是付出的代價則是必須考慮波茲曼因子分解，與線性、鏡像排序分解的原則，

以及最後的傅立葉轉換積分，其中仍有相當多的代數推導與複雜的計算。所以嚴格說起來，這個方法最有效益的應該是它可以提供一套有系統的求解架構，只要符合限制條件，並依據規則逐步推導，就可以將解析解解出。

## 致謝

筆者經由中原大學物理系黃敏章教授的指導學習這套方法，學習過程中獲得中央研究院計算中心廖聰明博士與 V. N. Plechko 教授的協助，在此表示感謝。另外，中央研究院物理研究所胡進錕教授指導筆者對相關課題作進一步的研究，在此也一併表示感謝之意。

## 參考資料

1. L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944)
2. B. Kaufman, Phys. Rev. **76**, 1232 (1949)
3. T. D. Shultz, D. C. Mattis and E. H. Lieb, Phys. Rev. E **60**, 2716 (1964)
4. M. Kac and J. C. Ward, Phys. Rev. **88**, 1332 (1952)
5. H. S. Green and C. A. Hurst, *Order-disorder phenomena* (New York: Interscience, 1964)
6. V. N. Plechko, Theor. Math. Phys. **64**, 748 (1985)
7. V. N. Plechko, Physica A **152**, 51 (1988)
8. V. N. Plechko and I. K. Sobolev, Phys. Lett. A **157**, 335 (1991)
9. M. C. Wu, M. C. Huang, Y. P. Luo and T. M. Liaw, J. Phys. A: Math. Gen. **32**, 4897 (1999)
10. M. T. Liaw, M. C. Huang, S. C. Lin and M. C. Wu, Phys. Rev. B **60**, 12994 (1999)
11. 吳明佳, *易行條片介面張力與比熱之非均向耦合與有限尺度效應的解析分析*, 中原大學應用物理研究所博士論文, 1999年六月。
12. K. Efetov, *Supersymmetry in Disorder and Chaos* (Cambridge Univ. Press, New York, 1997)
13. M. C. Wu and C. K. Hu, *Exact partition functions of the Ising model on  $M \times N$  Planar lattices with periodic-aperiodic boundary conditions*, e-print cond-mat/0204217, and submitted to J. Phys. A: Math. Gen. (2002)
14. C. Nash and D. O'Connor, Ann. Phys. **273**, 72 (1999)