臨界易行模型之有限尺度修正與普適尺度函數

吳明佳[*]　胡進錕[†]
中央研究院物理研究所
[*]e-mail: mcwu@phys.sinica.edu.tw
[†]e-mail: huck@phys.sinica.edu.tw

摘　要

對於有限臨界系統的研究分析，有限尺度理論極為重要，而普適尺度函數則是近來備受重視的概念。本文以最近的研究結果，介紹臨界易行模型的有限尺度修正，以及普適尺度函數。

巨觀的系統有非常多的自由度，但是只有少數的物理量是可以測量的，而熱力學主要便是研究這些少數，但足以描述整個熱力學系統的變量。這些變量一般稱為熱力學變量，而根據其性質，可區分為外延量（extensive variables）與內含量（intensive variables）。所謂的外延量是指變量的值是系統特徵大小的函數，而內含量則跟系統大小無關。外延量的例子如內能、熵、體積與質量，內含量的例子則如溫度、密度與壓力。通常我們使用內含量來描述熱力學系統，不過實驗室中通常是藉由控制內含量來測量外延量。當熱力學系統處於平衡狀態的時候，這些內含量在整個系統中是常數，而系統的狀態變量之間可以藉由狀態方程式來關聯。對於處於平衡狀態物理系統，有些物理量與這些熱力學變量有關，但與系統的歷史無關，我們稱這些物理量為狀態函數（state fucntions）。其中有一類狀態函數是實驗室測量的物理量，例如比熱與壓縮率，稱為反應函數（response functions）。這些反應函數通常是屬於外延量，而我們實際上是控制內含量或其他外延量來測量這些反應函數，並獲得描述該物理系統的性質。例如，實驗中可以利用壓力控制，測量壓力不變情況下的比熱；或者是藉由體積的控制，測量體積不變情況下的比熱。

另一方面，由於外延量與內含量的性質，我們可以在保持系統內含量不變的情況下，改變其外延量的值。這意味著在系統的反應函數與系統的外延量、內含量之間，除了狀態方程式的關聯外，還存在著另一個與系統的尺度有關的性質。對於這個性質，我們最感興趣的是系統處於臨界溫度附近時，所表現出與臨界現象相關的行為。在熱力學理論中，我們使用序參量（order parameter）與一系列的臨界指數（critical exponents）來描述系統的臨界行為。其中，特別與系統特徵尺度有很大關係的是系統的關聯長度（correlation length）。所謂關聯長度，是指熱力學系統一個地方的原子或分子的狀態發生變化時，隔多遠的原子或分子會受到影響。以易行模型（Ising model）為例，關聯長度是變換晶格點上的自旋方向，影響所及的範圍。由於在臨界點附近，系統的關聯長度趨近於無限大，對於有限大小的系統，便存在有限尺度的效應。研究反應函數與系統大小的關係的理論，就是所謂的「有限尺度理論（Finite-size scaling theory）」。

有限尺度理論是研究臨界點附近的有限尺度效應。這個理論最早是由 Fisher 於 1971 年提出[1]，主要是希望能夠從有限系統中，獲得熱力學極限下的行為。有限尺度理論無論是從理論或實驗的觀點來看，都是非常重要的理論。

這個理論提出兩個重要的概念。首先，有限尺度系統的熱力學函數存在有限尺度的效應，經由有限尺度修正的分析，可以獲得無限系統的行為。另一方面，除了個別系統的特徵差異之外，熱力學函數包含一個尺度函數（scaling function）。這個尺度函數可以藉由非普適性量測因子（non-universal metric factor）的引進，改寫成普適尺度函數（universal scaling function）。這個普適尺度函數最重要的特徵是屬於相同普適類別（universal class）的不同系統，具有相同的行為。

由於真實物理系統的研究，很容易受限於實驗技術、測量能力等因素，實驗數據的分析，通常屬於有限系統的範疇，這時候尺度函數的分析就非常有用。舉例來說，實驗的時候可以分析不同系統大小的反應函數，並利用外插法推測無限大系統的情況。同樣的情況發生在理論模型的分析上。由於大部分模型的解析解不容易獲得，利用蒙地卡羅或分子動力論的技術，成了統計系統模擬分析最有力的技術之一。這是因為統計系統通常涉及龐大的微觀交互作用單元，在解析解不可得的情況下，利用電腦的強大計算能力，與逼真的動畫介面，是最可行的方法。可是，電腦模擬仍然有受限於計算能力與系統大小設定的問題，因此仍然必須求助於有限尺度效應的分析。

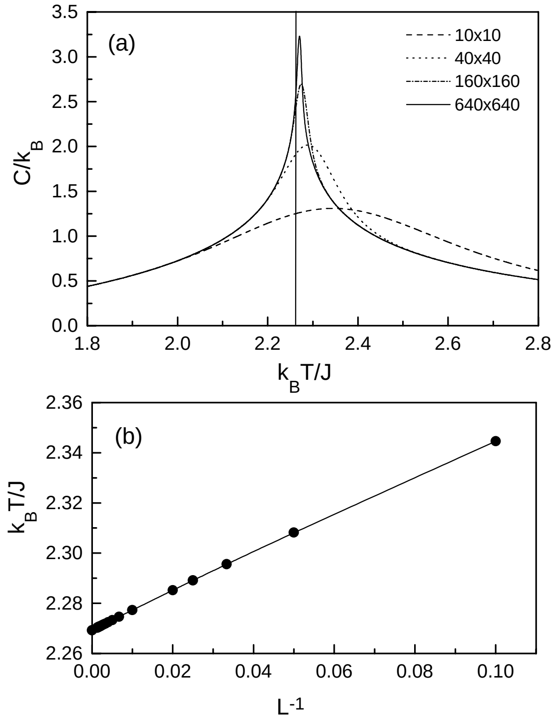

圖1.(a)正方形易行模型的比熱，(b)比熱最高點隨著晶格大小變化情形。

關於有限尺度的效應，在這裡我們舉二維正方形易行模型在週期邊界條件（periodic boundary condition）下的比熱為例子。有限大小的易行模型與無限大的易行晶格的比熱圖形，主要有兩個差別：一個是有限大小的易行模型的比熱是有限高度的曲線，而無限大晶格則是無限的發散曲線；另一個是兩種情況下比熱曲線最高點的溫度不相同。這可以從圖 1 中看出來[2]。圖 1(a)中有限晶格的比熱曲線隨著晶格大小的逐步增大，高度越來越高，最高點的位置也越來越靠近無限大晶格的溫度。圖 1(b)顯示比熱最高點溫度隨著晶格大小變化的情形；利用外插法可以求出無限大晶格的臨界溫度。

前面提到有限尺度理論假設熱力學函數中存在一個尺度函數，關於這一點可以用下式來說明：

$$F = F_{reg} + F_{sing}(\sum_i a_i z_i) \quad (1)$$

其中 F_{reg} 是系統的主要特徵函數，從數學的性質來看，它是熱力學函數的解析部分，F_{sing} 是尺度函數，而從數學的性質來看，它是熱力學函數的奇異部分，z_i 由系統中成對的內含量與外延量乘積所組成，例如簡約溫度（reduced temperature）與系統特徵長度的組合，$tL^{1/\nu}$，其中 ν 是關聯長度的臨界指數。在熱力學極限（系統趨近無限大）下，尺度函數的貢獻是最大的，因此系統的行為主要由其決定，例如二維易行模型的比熱圖形中，曲線的變化為對數的發散，其貢獻來自熱力學函數的奇異部分 F_{sing}。

研究熱力學系統的尺度函數必須限定在臨界點附近，因為在臨界點附近微觀交互作用的關聯長度趨向於無限大，因而具有尺度不變（scaling invariance）的性質。在這種情況下，從不同的尺度看系統，可以發現有自相似（self-similar）的現象。這個行為提供了重整化群理論（renormalization group theory）的基礎，從而建立了臨界現象中系統的尺度行為（scaling behavior）與臨界指數之間關係的完整理論架構。

在統計力學中，使用重整化群理論最早是在 1971 年由 Wilson 所提出的[3]。這個理論除了提供臨界現象中尺度行為研究的理論基礎，另外也揭示了系統中存在一些普適的性質。其中，已為物理學家所熟知的是臨界指數的普適性。由於重整化群理論整合了系統的維度與尺度函數的關係，獲致系統維度、交互作用類型與系統序參量對稱性是決定普適類別（universal class）之條件的結論，因此二維的易行模型，無論是正方形、長方形、三角形，或六邊形，都屬於相同的普適類別，具有相同的臨界指數。

另一個普適的性質是振幅（amplitude）之間的關係[4]。這裡所說的振幅是指尺度函數在臨界點附近，對不同的 z_i 或系統的尺度做展開時，所獲得的係數。最近這方面的進展，源自臨界易行模型有限修正的研究[5-9]。研究發現，相同普適類別的晶格，具有普適振幅的性質[6]。以二維易行模型為例，將一邊有限，一邊無限大系統的自由能與關聯長度對系統的有限長度展開，可以發現長方形、三角形、六邊形的展開係數，彼此之間有一個很簡單的關係，而且這個簡單的關係適用於任意次方的展開[6]。以數學形式來表示，則為自由能與關聯長度對晶格特徵長度 N 的級數展開，

$$N\left(f_N - f_\infty\right) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{a_k}{N^{2k-1}}, \qquad (2)$$

$$\xi_N^{-1} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{b_k}{N^{2k-1}}, \qquad (3)$$

其中 f_N 是有限晶格的自由能，f_∞ 是無限晶格的自由能，ξ 是關聯長度。展開係數 a_k 與 b_k 之間，存在下列簡單關係[6]

$$\frac{b_k}{a_k} = \frac{2^{2k}-1}{2^{2k-1}-1}. \qquad (4)$$

這個關係適用於一邊有限，一邊無限大，週期邊界條件下的正方形、三角形與六邊形平面晶格。最近，對於兩邊有限的平面晶格，已經有類似簡單關係的討論[7]；而對於不同的邊界條件，如反週期邊界條件（anti-periodic boundary condition）與 Brascamp-Kunz 邊界條件，是否存在類似的關係，則是許多學者感興趣的問題[9]。由於這些振幅表示有限系統的尺度修正，因此普適振幅也意味著尺度的修正存在普適性；而研究系統的普適振福，則有助於釐清臨界系統的普適性質。

相同普適類別的晶格系統所具有的相同臨界指數與普適振幅關係，雖然看似彼此獨立，兩者卻是彼此相關的。這是因為定義系統的尺度或 z_i 時，會用到臨界指數的關係。在尺度函數中，形成 z_i 的是兩個對偶的變量，例如前面所提到的簡約溫度 t 與系統特徵尺度 L，而兩者藉由臨界指數 ν 結合在一

起。由於簡約溫度係定義為 $t=(T-T_c)/T_c$，隨著系統 L 變大， t 會趨近零，正好和 $L^{1/\nu}$ 的變大關係相反，使得 $tL^{1/\nu}$ 成為很好的尺度變量（scaling variable）。

從理論的觀點來探討尺度函數，通常會將它假設成由 z_i 所組成的特定形式，例如 z_i 的級數展開形式。不過，在實作方面，由於函數 F 通常具有複雜的形式，想要直接寫成級數展開的形式就不是件容易的事。尤其是在沒有解析解的情況之下，如何將尺度函數 F_{sing} 從整個函數 F 中擷取出來，就必須作更進一步的分析。

最早探討易行模型有限尺度效應的是 1969 年由 Ferdinand 與 Fisher 所作的分析[5]。他們將長方形有限易行模型的比熱扣除比熱最高點的值，然後對剩下來的函數作分析，亦即定義函數 Δ_F 為

$$\Delta_F = \frac{1}{k_B}\left[C(\tau,R,N) - C_{max}(\tau_{max},R,N)\right] \qquad (5)$$

其中 $\tau = Nt$， R 是晶格的長寬比（aspect ratio）。由於扣除的比熱仍然是屬於有限晶格的比熱，因此有一部份尺度效應也會被扣除，所得的函數並不是完整與尺度效應有關函數. 1986 年 Privman 與 Rudnick 首先定義了系統自由能的尺度函數[10]，他們將有限系統的自由能扣除無限系統的自由能，獲取系統的尺度函數，亦即定義系統自由能的尺度函數 F_s 為

$$F_s = f(\tau,R,N) - \lim_{N\to\infty} f(\tau,R,N) \qquad (6)$$

由於扣除的是無限大系統的自由能，以這種方式可以完全保留系統的尺度效應。

為了說明這一點，在此以我們最近完成的易行模型普適尺度函數分析為例。我們將系統比熱的尺度函數 Δ^B 寫成：

$$\Delta^B = \frac{1}{k_B}\left[C^B(\tau,R,N) - \lim_{N\to\infty} C^B(\tau,R,N)\right] \qquad (7)$$

其中上標 B 表示邊界條件。我們將尺度函數對 τ 作

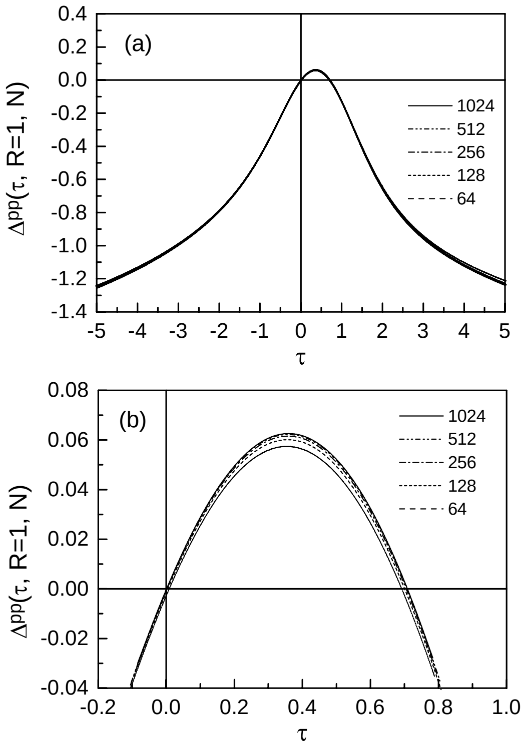

圖2(a)尺度函數Δ為τ的函數，(b)為圖(a)之局部放大。

圖，便得到如圖 2 的曲線。其中圖 2（a）是正方形晶格在週期邊界條件、均向耦合且長寬比等於 1 的情況下，尺度函數為 τ 之函數的曲線，圖 2(b)是圖 2(a)在臨界點附近的局部放大. 圖 2 顯示不同大小的系統，其比熱的尺度函數 Δ^B 可以重疊在一起，這表示系統在臨界點附近，有好的有限尺度行為。

在反週期的邊界條件（anti-periodic boundary condition）情況下，尺度函數也有類似的曲線，但有限尺度效應較大，這顯示尺度函數與邊界條件有關。除此之外，三角形、六邊形的晶格均具有類似的行為，而這似乎也意味著這三種晶格具有某種普適性。

Privman 與 Fisher[4]於 1984 年首先提出了普適有限尺度函數（universal finite-size scaling functions）的概念，這個概念是說利用非普適性的量測因子

（non-universal metric factor）可以將尺度函數改寫成具有普適性的形式。這個概念後來經過推廣與實現，並應用在許多系統中。其中，本文作者之一和林財鈺與陳昭安（HLC）首先在展透模型（percolation model）中，利用蒙地卡羅數值模擬的方法，成功地獲得正方形、三角形與六邊形晶格的普適尺度函數[11]。接著，易行模型的普適函數也被找出來[12-15]。而在晶格系統之普適尺度函數的分析中，除了引進非普適量測因子外，HLC 還引進了一個固定區域（fixed-domain）的概念[11,16]。所謂固定區域是指將幾種不同的晶格拿來作普適性分析研究時，採取特定的長寬比，使不同晶格的區域相似，可以獲得最佳的結果。舉例來說，正方形晶格的長寬比為1時，整個有限晶格呈現正方形的區域，而當正三角形與蜂巢形（六邊形）晶格的長寬比分別取為 $\sqrt{3}/2$ 與 $\sqrt{3}$ 時，也會呈現正方形的區塊[11]。因此，為得到展透模型在二維晶格的普適尺度函數，HLC 將正方形、正三角形與蜂巢形晶格的長寬比取為 $1:\sqrt{3}/2:\sqrt{3}$ [11]。筆者之一與合作者也發現採用相似的區域後，連續空間與隨機晶格的展透模型和晶格上的展透模型也可以具有共同的普適尺度函數[18]。不過，上述關於普適尺度函數的研究分析，一方面源自理論的推論，另一方面則是採用數值模擬的方法，雖然兩者已經獲得一致的結論，但侷限於數值分析，還不是嚴格的解析證明。

最近，我們以二維易行模型的解析解[2]為基礎，並依據固定區域的原則，將正方形、三角形與六邊形三種晶格的尺度函數作普適性分析，發現藉由引進一個非普適性量測因子，三種晶格具有極佳的普適行為[19]，而這也提供了存在普適尺度函數的嚴格證明。圖 3 顯示在週期邊界條件下，三種晶格的普適函數在引進非普適量測因子 D_1 之後的曲線。從圖 3 中可以看出三條曲線幾乎完全重合，這表示在臨界點附近，三種晶格具有極佳的普適行為；而對於反週期邊界條件，也有類似的情況。

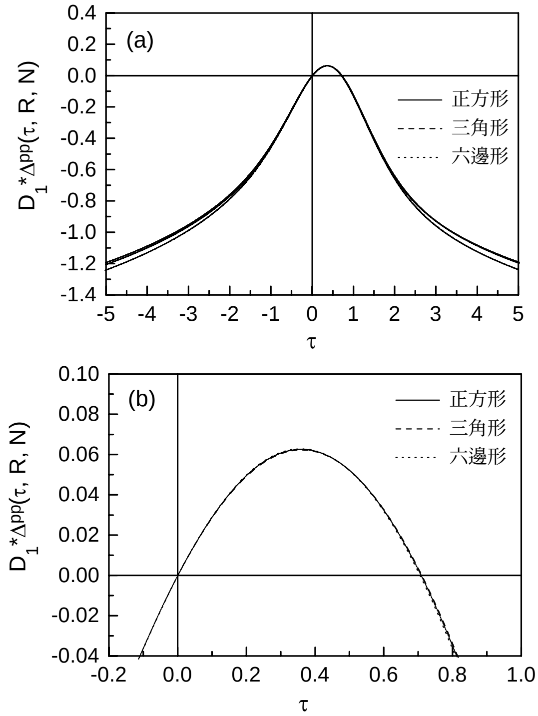

圖3(a)正方形、三角形與六邊形晶格的普適尺度函數，(b)為圖(a)之局部放大。

另外，我們從解析解出發，也獲得非普適量測因子的解析形式，發現三種晶格除了在固定區域的條件下具有普適行為外，由於晶格長寬比對於晶格比熱最高點的位置具有實質上的影響，普適行為也受長寬比的限制。在固定區域，即正方形、三角形與六邊形的長寬比為 $1:\sqrt{3}/2:\sqrt{3}$ 條件下，我們發現正方形的長寬比介於 0.05 至 0.75 之間時，三種晶格存在最佳的普適行為[19]。

由於正方形、三角形與六邊形三種平面晶格的易行模型屬於相同的普適類別，因此具有相同的臨界指數、普適振幅與普適有限尺度函數，是很容易理解的。本文中所討論的僅是易行模型的有限尺度修正與普適有限尺度函數，至於其他晶格模型，如前面提到的展透模型，以及所謂的波特模型（Potts model）中，也有相關的性質，有興趣的讀者可以參

考[17]與其中引用的文獻。

致謝：筆者感謝 N. Sh. Izmailian 合作完成本文參考文獻 19。

參考資料

1.M. E. Fisher, in *Proceedings of the 1970 E. Fermi International School of Physics*, edited by M. S. Green (Academic, New York, 1971), Vol. 51, p. 1.; M. E. Fisher and M. N. Barber, Phys. Rev. Lett. **28**, 1516 (1972).

2.M. C. Wu and C. K. Hu, *Exact partition functions of the Ising model on $M \times N$ Planner lattices with periodic-aperiodic boundary conditions*, e-print cond-mat/0204217, and submitted to J. Phys. A: Math. Gen. (2002)

3.K. G. Wilson, Phys. Rev. B **4**, 3174; 3184 (1971).

4.V. Privman and M. E. Fisher, Phys. Rev. B **30**, 322 (1984)

5.A. E. Ferdinand and M. E. Fisher, Phys. Rev. **185**, 832 (1969).

6.N. Sh. Izmailian and C. K. Hu, Phys. Rev. Lett. **86**, 5160 (2001).

7.N. Sh. Izmailian and C. K. Hu, e-print, cond-mat/0009024 and Phys. Rev. E **65**, 036103 (2002).

8.E. V. Ivashkevich, N. Sh. Izmailian and C. K. Hu, *Kronecker's Double Series and Exact Asymptotic Expansion for Free Models of Statistical Mechanics on Torus*, e-print, cond-mat/0102470.

9.N. Sh. Izmailian, K. B. Oganesyan and C. K. Hu, cond-mat/0202282, and Phys. Rev. E **65**, in press (2002).

10.V. Privman and J. Rudnick, J. Phys. A **19**, L1215 (1986).

11.C. K. Hu, C. Y. Lin and J. A. Chen, Phys. Rev. Lett. **75**, 193 (1995); **75**, 2786E(1995); Physica A **221**, 80 (1996); C. K. Hu and C. Y. Lin, Phys. Rev. Lett. **77**, 8 (1996); C. Y. Lin, C. K. Hu, and J. A. Chen, J. Phys. A: Math. Gen. **31**, L111 (1998); C. Y. Lin and C. K. Hu, Phys. Rev. E **58**, 1521 (1998).

12.Y. Okabe and M. Kikuchi, Int. J. Mode. Phys. C **7**, 287 (1996).

13.F. G. Wang and C. K. Hu, Phys. Rev. E **50**, 2310 (1997).

14.Y. Okabe, K. Kaneda, M. Kikuchi, and C. K. Hu, Phys. Rev. E **59**, 1585 (1999).

15.Y. Tomita, Y. Okabe and C. K. Hu, Phys. Rev. E **60**, 2716 (1999).

16.R. P. Langlands, C. Pichet, Ph. Pouliot, and Y. Saint-Aubin, J. Stat, Phys. **67**, 553 (1992).

17.C. K. Hu, Proc. Natl. Sci. Counc. ROC(A), **23**, 331 (1999).

18.C. K. Hu and F. G. Wang, J. Korean Phys. Soc. **31**, S271 (1997); H. Watanabe, S. Yukawa, N. Ito, C. K. Hu, C. Y. Lin and W. J. Ma, J. Phys. Soc. Jpn. **70**, 1537 (2001); H. P. Hsu, S. C. Lin and C. K. Hu, Phys. Rev. E **64**, 016127 (2001).

19.M. C. Wu, H. C. Hu and N. Sh. Izmailian, *Universal Finite-size scaling functions with Analytic Non-universal Metric Factors*, submitted to Phys. Rev. Lett. 2002.