

二维伊辛模型相变临界点上的分形维度的探究

周俊辰 薛梦轩 田家源

摘要：在二维正方形铁磁性伊辛模型及其衍生模型上，通过 box counting 与尺度变换两种方法计算了相变点处的分形维度。并利用重正化群理论推导了具有次临近相互作用的铁磁性伊辛模型的相变临界点与临界指数。结果揭示相变点处的分形维度满足标度不变性，同时在一定程度上具有标度律与普适性。

关键词：伊辛模型、临界现象、分形、铁磁、反铁磁、次临近相互作用

I. 引言

在连续相变的临界点，热力学函数与关联函数呈现奇异性，这种奇异性来源于粒子间的相互作用。在临界点处关联长度趋于无穷大，如果在相变点处观察自旋图样，总可以看到相似的结构特征，这表现出一种尺度变换下的不变性。[1] 这种无特征尺度却有“自相似结构”的现象称为分形，[2] 分形现象与相变密切相关，相变点处的分形特征也一直是研究的热点。

尽管近年来此话题的研究热点似乎集中于考察具有分形特征的晶格上相变特征[3]，但直接考察相变点处的分形结构，却可以揭示更加本质的特征。相变点处的分形特征与相变种类与临界指数密切相关，1983 年 Suzuki 根据有限系统的标度律求得临界指数与分形维度的关系[4]： $D = d - \beta/\nu$ ，使得分形维度与临界指数关联起来。已有许多研究考察过这一维度特点[7, 16, 17]，但这些研究大都基于已有精确解的简单正方形晶格。分形维度是否确为一个与具有某种内在标度律与普适性的值，是值得探究的。

伊辛模型作为研究临界现象的简化理论模型得到了很多应用和拓展，但多数实验和理论研究均集中于铁磁部分，本文在改变铁磁模型参数的基础上同时考察了反铁磁情形。利用 box counting 与尺度变换两种维度计算方法，我们在五种不同的伊辛模型上计算得到维度值。我们还根据重正化群理论[1, 9]，推导得到了考虑次近邻相互作用的铁磁与反铁磁的临界理论，定性地解释了实验中临界温度的变化。

在本篇报告的第二部分，我们将简要叙述理论背景，包括数值计算与分形维度计算的算法；在第三部分，我们将展示分形维度的数值计算的结果，并在此基础上给出我们对结果的解释与分析；在第四部分，我们将叙述重整化群方法对含有次近邻相互作用的伊辛模型的解释；最后，我们对全文内容

进行总结，做出结论。

II. 理论背景

a. 二维伊辛 (Ising) 模型

Ising 模型所研究的系统由周期性点阵构成，每个点的自旋有向上或向下两种取值。该系统固定了粒子的位置，使温度直接与自旋磁矩相互作用竞争。该系统中的哈密顿量表达式为

$$H = -J \left(\sum_{NN} S_i S_j + k \sum_{NNN} S_i S_j \right) - \mu B \sum_i S_i$$

第一项为每个相邻粒子 (Nearest Neighbor) i 与 j 的相互作用，第二项为次近邻粒子 (Next Nearest Neighbor) 的相互作用，第三项表示外场的影响。式中 J 为相互作用的耦合系数， k 为表征次近邻粒子与近邻粒子相对作用强度的参量。对于普通的不考虑相互作用的正方形晶格， $k=0$ ；当 $J>0$ 时，表示铁磁系统，处于基态时，任意两相邻粒子自旋方向相同；当 $J<0$ 且不考虑次近邻相互作用时，表示反铁磁系统，处于基态时，任意两相邻粒子自旋方向相反。

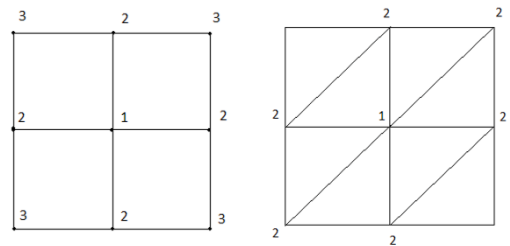


Fig 1 正方形晶格与三角形晶格

对于晶格中的格点 1，哈密顿第一项考虑 1 与所有标为 2 的格点间的相互作用；若考虑次近邻相互作用，则哈密顿量第二项不为 0，表示格点 1 与标为 3 的格点间的相互作用。

b. 蒙特卡洛模拟

为了解决这个问题，数学上引入蒙特卡洛模拟法，即通过随机抽样的方法，在保证抽样的随机性的前提下，以某种事件出现的频率估计该事件出现的概率。根据 Metropolis 接受准则，粒子的行为由其作用前后的能量变化所决定。若粒子当前能量为 E_1 ，则其变化至 E_2 的过程可能发生的概率为：

$$p = \begin{cases} 1, & E_1 > E_2 \\ R = e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}, & E_1 < E_2 \end{cases} \quad (2)$$

实际的编程计算的方法为：随机生成二维点阵初始状态，按照上述概率表达式对每点是否反转进行判断。若反转后能量不增大，则反转；若能量增大，则生成随机数 x ，当 x 小于 R 时反转，否则不反转。

对于所有边界上的点，采用周期性边界条件，即考虑其与点阵另一端的粒子的相互作用，这一步使得程序计算方法对于整个点阵都是普适的。

c. 分形及分形维度计算

目前我们对于分形的定量描述主要是分形维数，若用尺度为 r 的某种“尺子”去度量分形对象，且得到的数量 N 满足指数关系[2]：

$$N = \frac{1}{r^D}$$

一种直观地定义是直接将指数 D 定义为分形维数，即

$$D = -\frac{\ln N}{\ln r}$$

在这个概念下，我们需要将固有的“面积”与“维数为 2”相对应的观念打破。在分形的世界里，二维平面内的图形可以具有分数维的维度，而维度为 2 仅是一个特例。例如，对于二维平面内的 Koch 雪花，当它每个小角的边长（线度）扩大三倍后，可以与原图像重叠，但是其面积扩大了 6 倍，因此其分形维数为：

$$D = \log_3 6 = \frac{\ln 6}{\ln 3} \approx 1.631$$

对于理想的 Ising 模型，也可以用类似的方法进行考察。如前文所述，当 Ising 模型处于临界点附近时，体系内部的自旋既不完全由自旋磁矩所控制而取向一致，也不因为无规热运动而完全无序，而是两者竞争关系明显，相互关联与无规同时存在。

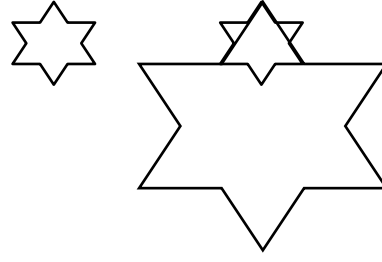


Fig 2 Koch 雪花示例

相互关联的部分点组成若干不同的集合，它们内部磁矩朝向相同。这里将一般的分形几何体称为规则分形，而 Ising 模型临界点附近的分形称为无规分形。无规分形不再受到“放大重叠”这样的严格自相似性的控制，而是以统计平均的角度呈现其分形特征。

在具体的程序计算中，我们可以通过两种方法考察相变点的分形特征。第一种方法的思路是从分形图样的几何特征入手。我们采用的是应用较为广泛的 box counting 算法[6]。将整个晶格划分为若干个 $r \times r$ 的正方形，对于二维平面晶格内的一个分形簇，若它的某一部分在一个大的 $r \times r$ 正方形 box 内，我们就称这个 box 被 count 到了。对于每个 r ，统计所有这样的正方形的个数 N 。在这个方法中，正方形就是一把尺子，其边长 r 则为尺子的线度。 N , r 应满足（3）式，通过（4）式即可得到分形维度。

由于相变点处关联长度趋于无穷，自旋相同的分形簇倾向于互相嵌套连成一片。实际计算时我们对数量最大的分形簇进行上述计算，得到对应参数下的分形维度。

第二种方法实际上来自重正化群思想。相变点处的临界特征应具有尺度变换下的不变性。若我们能够对原系统进行某种尺度变换，变换前后的系统的序参量应满足某种指数关系（power law）。我们计尺度变换因子为 b ，并用体系总磁化强度作为序参量，则这种 power law 可被表示成：

$$\frac{M_b}{M_1} = \left(\frac{1}{b}\right)^D$$

，其中 M_1 为变换前的总磁化强度， M_b 为变换后的磁化强度。故：

$$D_b = \frac{\log M_1 / M_b}{\log b}$$

应该指出的是,这两种方法各自其实都是一种对分形维度的独立的定义。虽然算法上不乏相似之处,但现在还并没有文献可以说明这两种方法是完全等价。事实上,在本文的结果讨论中,读者就会感受两种方法各自的优劣与适用范围。Box counting 非常直截了当,但不适用于没有明显的几何分形特征的情形;尺度变换方法适用较广,更有可能被第一性原理解释,但其结果依赖于序参量的合理选取。

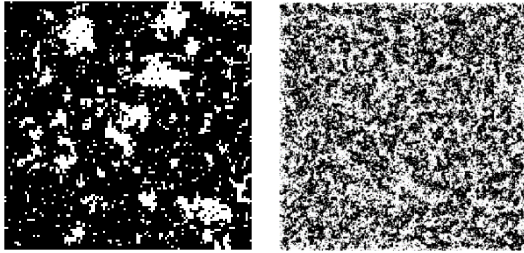


Fig 3 lattice 分别为 120*120 与 300*300 的临界图像

d. 重正化群方法计算临界温度

二维正方形铁磁性伊辛模型以及其衍生模型虽然在理论上存在严格解,但是其实际计算十分复杂,尤其是实验中所考察到的考虑次近邻相互作用的衍生模型。然而,运用合理的近似计算方法,可以对相变点附近的临界现象进行一定的解释。这里我们以文献中[10]不存在次近邻相互作用的二维铁磁伊辛模型的重正化群方法为基础,进行一定的模型拓展,得到存在次近邻相互作用时铁磁伊辛模型的理论相变温度与临界指数,同时对于反铁磁临界温度的计算提出猜想。

重正化群的思想主要是通过选取 kadanoff 集团计算新的集体自旋变量,通过确定重整化不动点得到临界温度。对于 NNN 相互作用的伊辛模型,无疑采用九点集团的重正化群近似更为精确,但由于该模型理论计算过于复杂,我们决定采用四点集团进行计算。重整化群的具体算法参见附录 4,我们将在结果部分展示重正化群的具体算法与结果。

第三部分 蒙特卡罗数值模拟与分形维度计算结果

a. box counting 方法计算五种伊辛模型相变点处的分形维度

(1) 简单正方晶格的铁磁性 Ising 模型的热力学量

在进行具体的维度计算前有必要重复一下伊辛模型热力学量的计算,这么做的原因有二。其一,

我们需要验证编程建模的正确性;其二,分形维度的计算需要在相变点处进行,我们需要从热力学量的模拟中获得临界温度的实验数值。

本节热力学量的计算是在 90×90 初始自旋随机排列的二维点阵上进行的。计算前的平衡步数为 3000 次。模拟中通过改变约化温度 $t = k_B T / J$ 的取值,模拟不同温度下点阵达到稳态时体系各物理量的性质。具体的热力学量算法可参见附录 1。

其中最直观的可验证二维伊辛模型相变的物理量为自旋差。它被定义为自旋向上与向下的粒子的数量差(自旋差其实表征磁化强度,只是磁化强度出现了时正时负的情况,我们才选择自旋差来表征序参量的变化情况)。当温度小于 1.0 时,平衡态自旋差趋近于点阵总粒子数;随着温度的升高,开始出现自旋方向相反的粒子。在该图中相变斜率绝对值最大的位置为临界点。可以看到,临界点位于 2.27 附近。

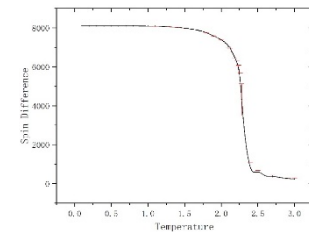


Fig 4 自旋差随约化温度的变化

尽管自旋差可以较直观地表现体系状态的变化,但在计算临界温度时却不够精确。我们可以进一步考察热容与磁化率随温度的变化。根据二维伊辛模型的 Onsager 严格解[1],热容在临界点呈对数发散。故从热容峰值的特性,我们可以更精确地判定临界温度的位置。

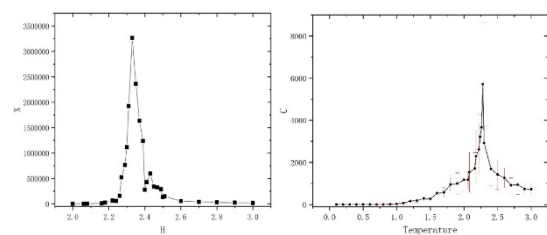


Fig 5 磁化率与热容在相变点附近的变化趋势

两物理量所显示的临界点位置基本一致,数值为 2.27,与理论值 2.269 相差无几。对于剩下的其他 4 种模型,我们也一一模拟得到了对应的热力学量。由于我们的主要目的是获得临界温度,其结果不多赘述,我们会在下一节直接给出临界温度的计

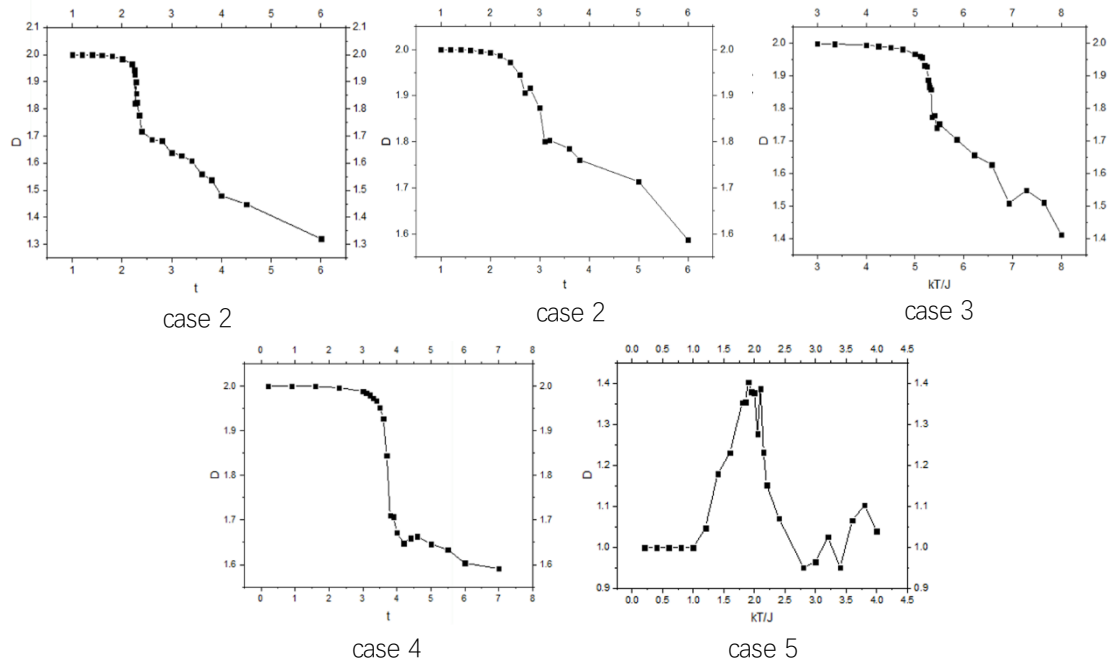


Fig 6 Case1: 零外场铁磁性正方形晶格下的伊辛模型; Case2: **外场不为0**的铁磁性正方形晶格下的伊辛模型; Case3: **考虑近邻相互作用的**零外场铁磁性正方形晶格下的伊辛模型; Case4: 外场为0的铁磁性**三角形**晶格下的伊辛模型; Case5: **考虑近邻相互作用的**零外场反铁磁性正方形晶格下的伊辛模型

算值。

(2) 五种伊辛模型下相变点处分形维度的计算

我们关心的是临界点处自旋图样的分形结构，以及分形维度在温度极大与极小两个极限下的表现。采用原理中所叙述的 box counting 维度计算方法，我们画出了分形维度 D 随约化温度变化的图像。通过对热容曲线的峰值进行拟合可以得到的获得的临界点的值。我们再在维度 $D-t$ (t 为约化温度 $t = k_B T/J$) 曲线上寻找对应的维度值，得到相变点上的维度。

所有的模型结果都是在 120×120 晶格数，平衡步数 4000 的参数下完成的。我们一共考察了 5 种模型，其中 4 种为铁磁模型。

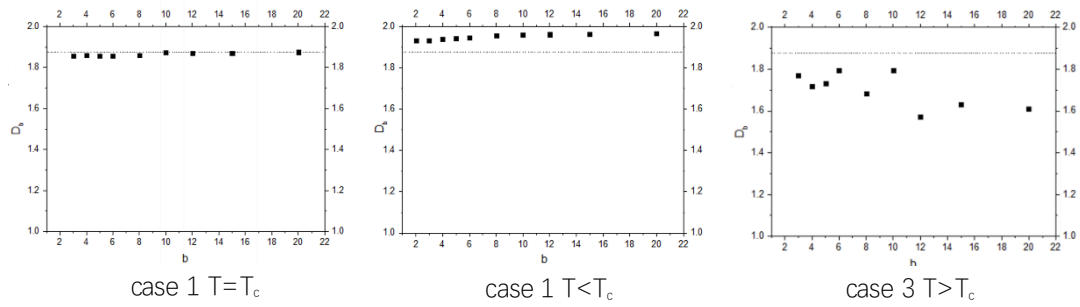
晶格与外部参数	$k_B T/J$	分形维度 D
1. 零外场正方形	2.276	1.876
2. 外场为 0.1T 的正方形	2.94	1.89
3. 零外场有次近邻作用的正方形铁磁	5.28	1.885
4. 零外场三角形	3.65	1.87
5. 零外场有次近邻作用的正方形反铁磁	2.07	1.4

我们将实验得到的结果作图见 Fig 6，并列表统一表示相变温度与分形维度。

结果显示，对于四种铁磁相变，虽然相变临界点的温度各不相同，但它们相变点的分形维度都大致为 1.88。这个结果是可以从理论上预测的 [7]。利用维度与临界指数的关系 $D = d - \beta/\nu$ ，从文献 [9] 查得伊辛模型临界指数理论值与实验值。昂萨格严格解的计算结果为 1.875，从实测的临界指数计算得到的结果为 1.888。可见，在铁磁情况下，数值计算得到的维度值与标度律推导得到的值吻合地很好。

四种铁磁相变在两个极值处的维度特征相似：在低温时，它们都为自旋取向一致的基态，维度趋于 2；而在高温时 ($t > 100$ ，图中并没有画出)，体系趋于无序，维度计算值在 1 附近波动。不同模型维度的一致性似乎证实了分形维度具有的内在标度性，无论是外场的改变还是晶格形状的改变抑或是相互作用的改变，都不影响分形维度的值。这是不难理解的，在临界点附近，关联长度趋于无穷大，使得其他一切有限的特征长度以及微观细节都显得无关紧要了。 [1]

这一结论似乎应该同样适用反铁磁系统。然而，我们的数值计算却未能支持这一结论，Case5 计算出的维度为 1.4；反铁磁系统的 $D-t$ 关系也异于铁

Fig 7 $T=T_c$, $T<T_c$, $T>T_c$ 三种情况下的 D-b 关系

磁情况。这无疑成为了结果中的一朵乌云。在第一版的论文中,我们推测造成这一结果是 box counting 方法分辨率不够以及分形特征在这样一个模型中并不反映在直接的自旋图样上。经过更进一步的文献调研后,我们得到了初步的回答。

各大物理刊物上不乏对我们所考察反铁磁模型的各种研究[9, 12, 16]。某些文章声称在存在次近邻相互作用的 Ising 反铁磁模型上发现了二级相变。然而,他们所定义的序参量和铁磁系统不太一样。这是由于低温时体系的基态不同所导致的。比较常见的定义方法是[13] the Binder fourth-order cumulants method。这种方法不选择简单求和的磁化强度作为序参量,而是将整个格子分为 4 个次晶格来考虑,并通过算法间接定义序参量。这样看来,我们所选择的序参量可能不能很好地反映体系的变化。数值计算中的一些结果也能支持这一说法:在铁磁相变点,用于计算维度的最大分形簇的大小往往能达到整个晶格的 2/3;反铁磁情况下,这一数字不足 1/10,长程关联的特性似乎没有得到体现。

box counting 方法是直接基于简单自旋图样,通过几何方式计算分形维度的方法。这种方法不能适应较为复杂的其他序参量的定义方式,反铁磁的维度计算可能不适用 box counting 方法。为了考察反铁磁情形,我们需要走另外一条路。

b. 尺度变换方法计算五种伊辛模型相变点处的分形维度

尺度变换算法直接基于序参量的计算值,因而具有更强的普适性。在尺度变换下,若系统具有与分形维度关联的 power law,所计算出来的分形维度应满足尺度变换下的不变性。我们利用这种方法重新考察了之前的 5 中模型。得到一些意料之中与意料之外的结果。

除了反铁磁情形,以下所有的模拟参数与 box counting 方法相同。

(1) 简单正方形伊辛模型

应该指出的是,这一模拟结果已有文献结果[7],我们的模拟结果经对比与之相同(见 Fig 7)。

可以看出,处于临界点时,分形维度的计算值满足尺度不变性。图中的虚线表征理论值 1.875,以下图中虚线若未经特殊说明,都为 1.875 的理论值。在温度偏离临界点时,我们也可以得到 D-b 变化关系,直观地感受到尺度不变性在偏离平衡点时被破坏:温度小于临界点时(ii),随着 b 的增大,可以看出 D 逐渐趋于 2;温度增大时(iii),体系明显地不满足尺度变换下的不变性,D 数据点随 b 增大有减小的趋势,并且波动较大。

这些特征和文献[7]相同,检验了我们方法基本的正确性。在此基础上,我们检验了其他四种模型。

(2) 三角晶格伊辛模型

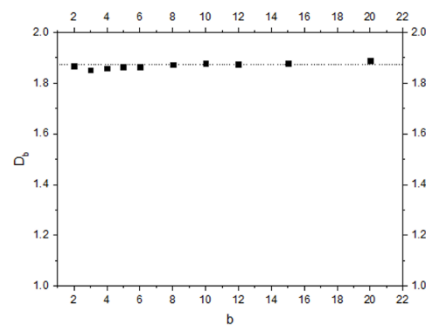


Fig 8 三角晶格 D-b 关系

尺度变换下的不变性依然符合得很好,D 数值也为理论值

(3) 存在次近邻相互作用的铁磁与反铁磁模型

通过重新定义序参量(见附录 2),我们能够考察反铁磁模型。当然,在考察反铁磁模型中存在着其他困难,我们一一克服了这些困难(见附录 2)。反铁磁的模拟是在 $N=315$ 的情况下(而非常规的 120)完成的。

由于结果的相似性，我们将都存在近邻相互作用的两个 case 的结果一起展示。

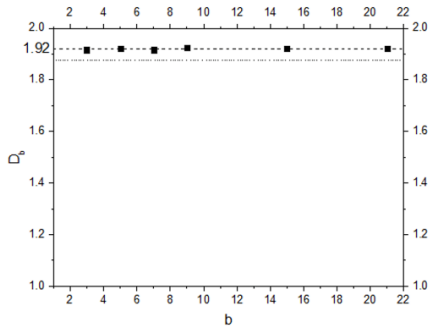


Fig 9 存在次近邻相互作用的反铁磁的 D-b 关系

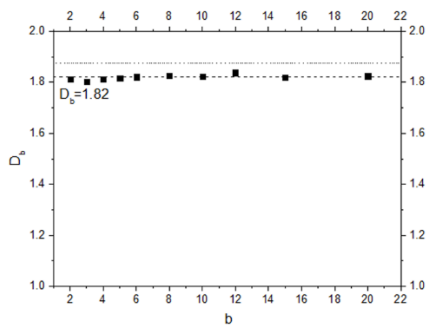


Fig 10 存在次近邻相互作用的铁磁的 D-b 关系

在临界点处，尺度变换下的不变性依然满足的很好，然而，所计算出来的维度值不同于理论值。（图中较长的虚线）由于偏移比较显著，这是不能用简单的数据波动解释的。

(4) 意料之外：有外场的简单正方形晶格模型

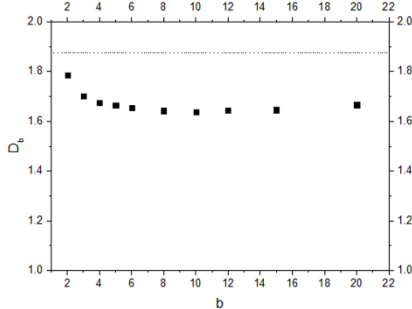


Fig 11 加有 0.1 外场的简单正方形晶格的 D-b 关系

加有外场后，D-b 关系不再呈现尺度变换下的不变性。虽然其变化规律很像 $T > T_c$ 时的，但这是否是由于我们临界温度找的不准呢？不是的，经过额外的考察，D-b 至少在 0.1 单位约化温度内都呈现类似的规律。

这是很奇怪的，简单正方形与三角晶格计算出的维度满足理论预言；次近邻相互作用两个模型的

结果虽然支持 power law，但计算值与标度律预言的不同；加有外场后，维度的内在不变性消失，连一个计算值也得不到了。

结合 box counting 方法结果，我们初步认为不是维度真的不同，而是在加有次近邻相互作用与磁场后，序参量需要做一些现在未知的修正才能符合理论值。现在基于简单磁化强度尺度变换定义分形维度的方法需要进一步推广。在具有近邻相互作用的反铁磁 case，我们实际上已近采用了不同定义下的序参量，并得到了至少支持 power law 这一形式本身的结果。既然在铁磁的四种情况下，直接考察分形簇的几何特征都能得到相同的结果，这种共同性也应该能从理论上得到解释。不幸的是，本研究考察的加有磁场与存在次近邻相互作用的模型至今还不存在严格解[14]，从理论上证明这一点，还似乎存在着很大的困难。

c. 进一步的讨论与说明

(1) 关于分形维度的普适性

我们的大部分模拟结果都直接支持分形维度具有标度不变性，那些符合理论值 1.875 的 case 也支持分形维度具有一定的普适性。尽管在尺度变换算法中，并非所有的 case 计算值都为 1.875，但我们已经指出，这可能是序参量的定义与选择问题。

其他文献的模拟结果也揭示了这一点。特别是在临界指数似乎会随次近邻耦合常数变动的次近邻模型中，模拟得到的两个临界指数的商 β/ν 却是一个不变量[8]。这个商正是出现在用于计算分形维度的标度律 $D = d - \beta/\nu$ 中，表明分形维度是一个不随次近邻耦合常数变动的值，暗示分形维度的普适性甚至强于临界指数。

(2) 其他疑点

模拟结果中存在许多我们不能解释的现象，这里举出两例：

1. 直接考察几何特征（box counting）所得到的分形维度与尺度变换下得到的值相同（简单伊辛模型下）。我们无法说明为何两种定义得到的结果都为 1.875 左右。其中，box counting 方法在铁磁情况下得到的值的普适性甚至好于尺度变换方法。

2. 在尺度变换下，加有次近邻相互作用与磁场后维度计算出现异常，但次近邻作用与磁场对于 D-b 关系的影响不同。次近邻作用下，体系仍保持了标度不变性，只是计算出的 D 不同；磁场作用下，似乎标度不变性都被破坏了。如果我们能够得到这

两种模型的精确解，我相信能够说明这一点。

第四部分 次近邻模型的重正化群解释

a. 重正化群理论解释具有次近邻相互作用的正方形晶格相变点的变化

基于数值计算与标度律的对分形维数的唯象解释，虽然取得了一定的成功，但也存在不小的问题。毫无疑问，模型的不同是产生这些问题的根源。我们尤其对具有次近邻相互作用的铁磁与反铁磁模型感兴趣。对于铁磁情况，box counting 计算得到的分形维度能在次近邻相互作用参量 k 的变化情况下仍保持不变；对于反铁磁情况，box counting 计算得到的分形维度的表现与已有的理论不符，我们希望能从理论上更进一步地理解这些现象。为此，我们从普通正方形晶格的重正化群理论出发，得到具有次近邻相互作用的重正化群方法，并根据理论定性解释了临界温度随次近邻相互作用系数 k 的变化。鉴于重正化群模型为课上所讲，此处不再赘述计算步骤，仅对于集团划分和相互作用项进行说明，并列计算结果。

(1) 四点集团重正化群

对于格点总数为 N 的正方形晶格，其系统的哈密顿量 H 可表示为(1)式，

令 $H^* = \frac{-H}{k_B T}$ ，则：

$$H^* = K \left(\sum_{NN} S_i S_j + k \sum_{NNN} S_i' S_j' \right) + h \sum_i S_i$$

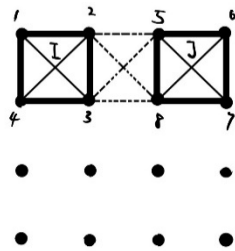


Fig 12 四点集团相互作用示意图

将 H^* 分为 $H^* = H_0^* + V$ ，其中 H_0^* 只包括集团内部格点的相互作用， V 包括集团间格点作用及外场作用。集团划分如左图所示，由于自旋数为偶数，

$S_i = +1$	++	++	++	+-	++	+-	+-	+-
$S_i = -1$	--	--	--	+-	--	+-	+-	++
内部自由度 ϕ_i	1	2	3	4	5	6	7	8

Fig 13 四点集团自由度

因此用左上角即编号 1 位置自旋作为集团自旋。则新的自旋集团所具有的自由度包括则可得到

$$\begin{aligned} \langle V \rangle_0 &= K \sum_{I,J} (\langle S_I^2 \rangle_0 \langle S_J^5 \rangle_0 + \langle S_I^3 \rangle_0 \langle S_J^8 \rangle_0) \\ &+ kK \sum_{I,J} (\langle S_I^2 \rangle_0 \langle S_J^8 \rangle_0 + \langle S_I^3 \rangle_0 \langle S_J^5 \rangle_0) \\ &+ h \sum_I (\langle S_I^1 \rangle_0 + \langle S_I^2 \rangle_0 + \langle S_I^3 \rangle_0 + \langle S_I^4 \rangle_0) \end{aligned}$$

利用式 $\langle x \rangle_0 = \frac{\sum \delta_i x e^{H_0^*}}{\sum \delta_i e^{H_0^*}}$ 即可得到新自旋集团每个位置上的自旋平均值：

$$\begin{aligned} \langle S_I^1 \rangle_0 &= \frac{e^{(4+2k)K} + 2e^{-2kK} + e^{(-4+2k)K} + 4}{(e^{(4+2k)K} + e^{(-4+2k)K} + 2e^{-2kK} + 4)} S_I \\ \langle S_I^2 \rangle_0 &= \frac{e^{(4+2k)K} - e^{(-4+2k)K}}{(e^{(4+2k)K} + e^{(-4+2k)K} + 2e^{-2kK} + 4)} S_I \\ \langle S_I^3 \rangle_0 &= \frac{e^{(4+2k)K} - 2e^{-2kK} + e^{(-4+2k)K}}{(e^{(4+2k)K} + e^{(-4+2k)K} + 2e^{-2kK} + 4)} S_I \\ \langle S_I^4 \rangle_0 &= \frac{e^{(4+2k)K} - e^{(-4+2k)K}}{(e^{(4+2k)K} + e^{(-4+2k)K} + 2e^{-2kK} + 4)} S_I \end{aligned}$$

代入 $\langle V \rangle_0$ 计算得到

$$H'^* (\{S'_I\}) = \langle V \rangle_0 = K' \sum_{I,J} S'_I S'_J + h' \sum_I S'_I$$

其中新的相互作用系数满足：

$$\begin{aligned} K'_1 &= 2K \frac{e^{(4k-8)K} (e^{16K} (1+k) + k - 1)}{(e^{(4+2k)K} + e^{(-4+2k)K} + 2e^{-2kK} + 4)^2} \\ &+ \frac{2e^{(2k-4)K} (e^{8K} (1+k) + k - 1) - 4e^{-2kK} k - 2e^{-4kK} k}{(e^{(4+2k)K} + e^{(-4+2k)K} + 2e^{-2kK} + 4)^2} \\ h'_1 &= 4h \frac{e^{(4+2k)K} + 1}{(e^{(4+2k)K} + e^{(-4+2k)K} + 2e^{-2kK} + 4)} \end{aligned}$$

(2) 五点集团重正化群

在第一版中利用重正化群理论定性解释了模拟结果，但定量上存在一定误差。这里增加集团自旋数，对结果进行更精确的计算。

与四点集团不同，在五点集团中按如图所示划

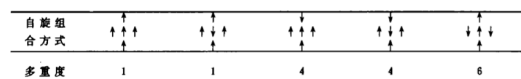


Fig 14 五点集团自由度

分新集团。并且将新集团自旋定义为 $\text{sign}(\sum_i S_i^i)$ ，即多数原则。则新自旋集团内部自由度如图 14 所示。

采用同样的方法计算得到

$$\begin{aligned} \langle S_I^1 \rangle_0 &= \langle S_I^2 \rangle_0 = \langle S_I^3 \rangle_0 = \langle S_I^4 \rangle_0 = \\ &= \frac{e^{4K+k*K} + 2e^{2K} + e^{-4K+k*K} + 2e^{-2K}}{e^{4K+k*K} + 4e^{2K} + e^{-4K+k*K} + 2e^{-4K+k*K} + 4e^{-2K} + 4} \\ \langle S_I^5 \rangle_0 &= \\ &= \frac{e^{4K+k*K} + 4e^{2K} - e^{-4K+k*K} + 2e^{-4K+k*K} - 4e^{-2K} + 4}{e^{4K+k*K} + 4e^{2K} + e^{-4K+k*K} + 2e^{-4K+k*K} + 4e^{-2K} + 4} \\ H'^*(\{S'_I\}) &= \langle V \rangle_0 = K' \sum_{IJ} S'_I S'_J + h' \sum_I S'_I \end{aligned}$$

新的相互作用系数满足：

$$\begin{aligned} K' &= 2kK \langle S_I^5 \rangle_0 \langle S_I^1 \rangle_0 + 3K \langle S_I^1 \rangle_0^2 \\ h' &= kK \langle S_I^5 \rangle_0 + 4K \langle S_I^1 \rangle_0 \end{aligned}$$

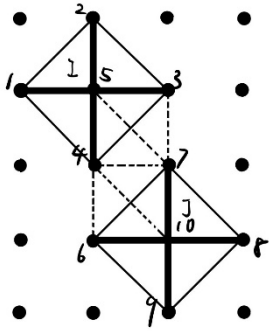


Fig 15 五点集团相互作用示意图

k	0	0.2	0.4	0.6
四点集团	1.63	2.10	2.57	3.06
五点集团	1.69	2.27	3.02	4.00
实验值	2.27	2.88	3.36	3.74

k	0.7	0.9	1.0
四点集团	3.30	3.82	4.08
五点集团	*	*	7.10
实验值	4.31	4.95	5.28

(3) 结果分析

Table 1 两种变换方法计算不同次临近作用下
铁磁相变温度

利用两种重正化群模型的尺度变换不变性即

$$\begin{cases} K' = K \\ h' = h \end{cases}$$

可得到体系的临界温度随次近邻相互作用与近邻相互作用比值参数 k 的关系：

可以看出，当 $0 < k < 0.5$ 时，五点集团所计算临界温度值更接近实验值。误差范围随 k 从 0 升至 0.5 不断减小，而 $k > 0.5$ 时则具有较大误差，与四点集团相比并没有体现出集团规模增大带来的修

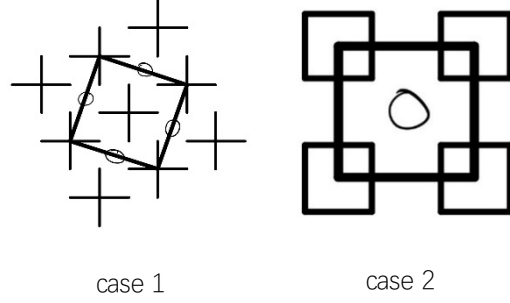


Fig 16 第二次重正化变换

正。

分析其原因在于：分析其原因在于重正化群变化时所作近似：变换忽略掉新自旋集团间的一部分次临近相互作用。忽略原因为本文所针对的是临界现象随比例系数 k 的变化，如果计及新自旋集团的集团间次临近作用，则重正化的不变性会对 k 有一定要求，即固定值。与本实验情况不符，由于没有找到更加合适的理论模型，只能做此近似。

而在重复重正化的过程中，四点集团能够将前一次变换没有计算的部分进行弥补，进行一定延拓后可得到未计算部分的 2/3 在下一变换中会被计算，而五点集团由于几何变换的形式不同，迭代的过程也不同，补上的部分为 1/2。因此当 k 较小时表现出五点集团由于集团尺度大而显现出的精确性，而 k 较大时则表现出忽略部分次临近的不精确性。

(5). 反铁磁推广

大多数文献在利用此方法得到临界温度时，均针对 $K > 0$ 部分进行，也即铁磁态。这里尝试对反铁磁态进行理论延伸。

五点集团：通过对 K 作图发现，五点集团的重正化群变换并不改变结构的铁磁状态，即 K'_2 的正负与 K 相同。则可以直接在 $K < 0$ 即反铁磁段得到方

程的解。基于以上考虑, $k > 0.5$ 时的结果不在具有参考性。

四点集团: 与五点集团不同, 四点集团重正化变化总是将原体系转化为铁磁态, 即 K'_1 总是大于 0。 $K < 0$ 时, 不存在交点。也即经过一次重整化变换后, 系统总是处于铁磁态。无法直接得出反铁磁的相变点, 但并不代表反铁磁不存在相变。关于这一点我们的猜想是: 重正化群不动点的根源在于重复多次重正化群操作, 体系不断逼近的稳定点。因此找到变化过程中与临界点相距最近的反铁磁态, 即为接近反铁磁不动点的状态。具体为存在某个反铁磁态, 其再进行一次重正化变换后即达到不动点位置。该反铁磁态即为我们寻找的临界状态。

首先, 针对 $k=0$ 情况, 也即不考虑次近邻相互作用。可以看出 K'_1 是偶函数, K'_2 是奇函数。两种理论均可得出: 反铁磁与铁磁伊辛模型 (仅考虑近邻相互作用) 在具有相同的相互作用系数时临界温度相同。通过数值计算模拟得到在作用系数 $J=0.3$ 时, 铁磁和反铁磁临界温度均为 $0.7kT/J$, 耦合系数 $j=0.6$ 时, 铁磁和反铁磁临界温度分别为 1.3 和 1.5, 因此近似认为上述猜想成立。

对于 k 不等于 0 的情况, 铁磁与反铁磁临界温度不再相等。针对五点集团和四点集团分别得到理论温度和模拟温度如下:

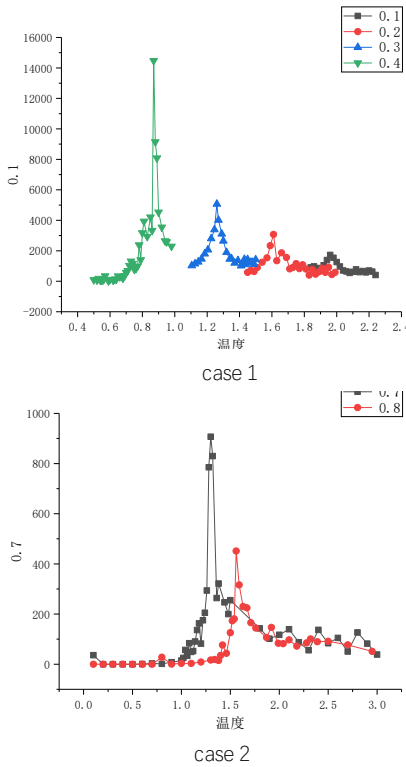


Fig 17 次临界作用下反铁磁相变温度

可以看出, 对于五点集团成立的范围即 $k < 0.5$ 时, 与铁磁系统相同, 得到的反铁磁的临界温度同样更加接近模拟值, 误差约在。而对于四点集团, 虽定量差距较大, 但从临界温度随比例系数 k 的变化趋势上, 与模拟值相同: 随比例系数 k 先减后增。但二者具有不同的极小值点。理论计算上找到的极小值点位于 0.75 附近, 而实际数值计算的点值出现在 0.5 左右, 具有一定的偏差。

k	0.1	0.2	0.3	0.4	0.6
四点集团	1.59	1.53	1.44	1.34	1.10
五点集团	1.49	1.30	1.10	0.91	*
实际模拟	1.96	1.61	1.26	0.87	0.96
k	0.7	0.75	0.8	0.9	1.0
四点集团	0.98	0.947	0.95	1.19	1.51
五点集团	*	*	*	*	*
实际模拟	1.3	1.46	1.66	1.83	2.1

Table 2 两种变换方法计算不同次临界作用下反铁磁相变温度

b. 重正化群理论对临界指数与分形维度的计算

临界指数反映了系统某物理量在临界点附近的行为[1], 因此, 通过考察临界点附近重正化群变换中性质, 并根据耦合常数 K 、 h 与温度 T 的对应关系可求出临界指数。考虑由耦合常数组成的参数矩阵:

$$K = \begin{bmatrix} K \\ h \end{bmatrix}$$

可将重正化群变换表示为

$$K' = R(K)$$

将变换在临界点 K_c 附近做 Taylor 展开至线性项, 有:

$$K' - K_c \approx \left(\frac{\partial K'}{\partial K} \right)_{K_c} \delta K = \Lambda \delta K$$

其中 Λ 为 $\left(\frac{\partial K'}{\partial K} \right)_{K_c}$ 的本征向量, 且:

$$\left(\frac{\partial K'}{\partial K} \right)_{K_c} = \begin{bmatrix} \frac{\partial K'}{\partial K} & \frac{\partial K'}{\partial h} \\ \frac{\partial h'}{\partial K} & \frac{\partial h'}{\partial h} \end{bmatrix}_{K_c, h_c}$$

于是有

$$\Lambda \delta K = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \delta K$$

$$\lambda_1 = \frac{\partial K'}{\partial K}; \lambda_2 = \frac{\partial h'}{\partial h}$$

多次进行重正化群变换, 得到

$$\delta\kappa_n = \Lambda^n \delta\kappa$$

在临界点附近, 表征涨落关联的特征距离的关联长度 ξ 趋于无穷大, 其尺度对系统物理量的影响远超其他长度变量, 此时关联长度为唯一的特征长度, 前文提到的各种物理量的奇异性都源于此。从这个角度考虑, 任何尺度变换都只改变体系自由能的标度, 而不影响其函数形式。由此, 我们引入标度理论:

$$g(T, B) = g_r(t, B) + g_s\left(\frac{T}{T_c} - 1, B\right)$$

式中 g 为自由能, 这里将自由能的奇异性与非奇异性分为 g_s 与 g_r 两部分, 并假定奇异部分可表示为

$$g_s\left(\lambda^p\left(\frac{T}{T_c} - 1\right), \lambda^q B\right) = \lambda g_s\left(\frac{T}{T_c} - 1, B\right)$$

当 $\delta\kappa \rightarrow \left[\frac{T}{T_c} - 1\right]$ 时, 可以得到

$$\lambda_2^q = \lambda_1^p = L^{-d}$$

由此可以求出 q 与 p 的值。式中 d 为体系的空间维数。L 为重正化群变换后的放大倍数。

本文所选的 4 点与 5 点两种集团在临界温度的确定上各有优劣, 由它们计算得到的分形维数的差别小于分形维数计算的系统误差, 因此这里只选择 4 点集团的计算结果进行计算, 有 $L=2$, $d=2$ 。

对标度理论假设所得公式进行计算可以得到各临界指数关于 p 、 q 的表达式:

$$\alpha = 2 - \frac{1}{p}; \beta = \frac{1-q}{p}$$

$$\gamma = \frac{2q-1}{p}; \nu = \frac{1}{2p}$$

分形维数:

$$D = 2 - \frac{\beta}{\nu} = 1 + \frac{\gamma}{2\nu} = \frac{\ln\lambda_2}{\ln 2}$$

$$= \frac{\ln\left(\frac{4(e^{(4+2k)K} + 1)}{(e^{(4+2k)K} + e^{(-4+2k)K} + 2e^{-2kK} + 4)}\right)}{\ln 2}$$

无论是铁磁还是反铁磁, 从理论上计算得到的维度都会随相互作用系数变化。这与 D 不随 k 变化的目标仍然存在一定差距。我们认为这种差距仍然是由于重整化群方法中的近似所导致的。这种误差直接传递到临界指数上, 所计算出的分形维度部分地丧失了内在普适性。

k	0	0.1	0.2	0.3
铁磁	1.506	1.444	1.388	1.339
反铁磁	1.506	1.596	1.682	1.768
k	0.4	0.5	0.6	0.7
铁磁	1.292	1.247	1.206	1.171
反铁磁	1.845	1.908	1.953	1.979

Table 34 点集团方法计算不同次临近作用下铁磁与反铁磁的分形维数

第四部分 结论

我们小组利用 box counting 维度计算方法, 通过对二维正方形伊辛模型及其衍生模型相变点处分形维度的计算, 确定二维铁磁伊辛模型的相变分形维度为 1.88, 这与之前的理论值符合得很好; 通过尺度变换方法, 重新检验了之前所考察的五种模型的相变点维度, 部分模型的结果偏离了理论值。我们认为这是序参量的选取所导致的, 其解释需从模型的严格解入手。我们还通过重正化群方法, 推导出具有次临近相互作用的铁磁性伊辛模型的相变临界点与临界指数, 并计算出分形维度, 推导结果定性地与数值计算结果相符。

分形维度与临界指数密切的关系, 以及 box counting 结果所支持的相变点处分形维度的不变性, 揭示了分形维度具有一定内在的标度律与普适性。

[1]林宗涵, 热力学与统计物理学, 北京大学出版社

[2]刘式达, 刘式适, 物理学中的分形, 北京大学出版社

[3] Jozef Genzor, Andrej Gendiar, Tomotoshi Nishino, PhysRevE.93.012141

[4] M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. 69 (1983), 65.

[5] Kenneth Falconer Fractal Geometry, Mathematical Foundations and Applications John Wiley & Sons Ltd. West Sussex England 3rd Edition 1990

- [6] K.J. Falconer, Fractal Geometry: Mathematical Foundations and Applications
- [7] Nobuyasu ITO, Masuo SUZUKI; Progress of Theoretical Physics, Vol. 77, No. 6, June 1987
- [8] D. P. Landau, K. Binder; Physical Review B, 1985 vol.31 No.9
- [9] A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, and M. K. Badiev; Low Temp. Phys. 37, 1001 (2011)
- [10] 赵欣, 周云松, 王薇; 重正化群方法处理正方格子伊辛模型; 首都师范大学学报, 1997 vol.18
- [11] I. Vilfan, Statistical Mechanics
- [12] D. P. Landau and K. Binder, Phys. Rev. B 31, 5946 (1985).
- [13] K. Binder, Phase diagrams and critical behavior in Ising square lattices with nearest- and next-nearest-neighbor interactions', Phys. Rev. B, vol 21, No. 5
- [14] 张志东, 伊辛模型的研究进展简介; Chinese Journal of Nature, V01.30 No.2
- [15] Junqi Yin and D. P. Landau, Phase diagram and critical behavior of the square-lattice Ising model with competing nearest-neighbor and next-nearest-neighbor interactions, PHYSICAL REVIEW E 80, 051117 (2009)
- [16] Wolfhard Janke and Adriaan M. J. Schakel, Fractal Structure of Spin Clusters and Domain Walls in two-dimensional Ising Model
- [17] S. Fortunato, Phys. Rev. B 66, 054107 (2002).

附录 1: 伊辛模型数值计算具体理论公式

考虑一个格点数为 N 的 ising 模型, 若以 $M(X_l)$ 和 $E(X_l)$ 表示微观态 X_l 所对应的磁化强度与能量, 则平均磁化强度:

$$\langle M \rangle = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L M(X_l)$$

平均能量为:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L E(X_l)$$

热容 C 和磁化强度 X 通过涨落计算:

$$C = \frac{1}{kT^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$$

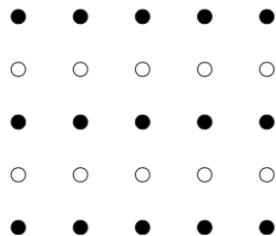
$$X = \frac{1}{kT^2} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$$

附录 2: 尺度变换方法计算反铁磁 case 出现的问题及解决

a. 序参量的重新定义问题

反铁磁情况下, 系统的基态发生了改变。原有仍然选取简单相加的磁化强度作为序参量, 不能够很好地表征系统的变化。为此, 我们需要变换序参量的定义方式。

对于我们所考察的反铁磁模型, 次近邻耦合系数为 1, 其基态为间隔排列的 2×1 自旋列:



为此, 我们采用 binder 的次晶格定义方式[13]:

$$M_\lambda = \frac{4}{N} \sum_{i \in \lambda} \sigma_i, \quad \lambda = 1, 2, 3, 4,$$

$$M^a = [M_1 + M_2 - (M_3 + M_4)]/4,$$

$$M^b = [M_1 + M_4 - (M_2 + M_3)]/4,$$

$$M^{\text{rms}} = \sqrt{(M^a)^2 + (M^b)^2}.$$

利用最后计算得到的 M^{rms} 作为体系序参量的表达式

b. 尺度变换算法出现的问题

尺度变换时需要依据简单多数原则对原图形进行兼并与压缩, 这种操作可能会损失一部分比较重要的微观结构, 尤其是在反铁磁系统。由于基态是 2×1 的自旋列, 在尺度变换因子为偶数时, 会产生大量两个方向自旋相同的集团, 破坏形如基态的自旋图样, 从而造成极大误差。为避免这一点, 在做尺度变换时, 需要选择变换因子为奇数。

由于尺度变换因子实际上变少了, 再加上反铁磁图样的异常, 我们不得不加大 N 以保证尺度变换的精度, 减小

相对误差。

附录3 组员分工记录

1. 选题：三位小组成员均热情地参与选题讨论，最终决定选择周俊辰同学提出的研究方向
2. 文献工作：三位小组成员共同参与
3. 数值计算程序编制：使用 MATLAB 与 python 两种程序，周俊辰同学负责 python 的编程，薛梦轩同学负责 MATLAB 编程。MATLAB 主要用于热力学量的计算与数据可视化；python 主要用于分形维度的计算并协助补充热力学量的数据。
4. 三人协同完成了程序的运行与数据的采集
5. 薛梦轩同学在文献调研基础上完成了重正化群理论在本文研究模型下的推广，得到理论公式和临界温度，而后田家源同学在此基础上计算了临界指数和分形维度。
6. 论文写作：田家源同学负责理论背景的写作，并完成了热力学量部分的写作与部分重正化群理论；薛梦轩同学负责大部分重正化群理论的写作；周俊辰负责引言，摘要，结论以及分形维度讨论的写作，并负责最后统稿修改。三位同学最后一起完成最后的编辑与定稿工作。
7. 审稿，回应均有三位同学一起完成
8. 第二版论文的修改：周俊辰负责第三部分分形维度的数值计算；薛梦轩与田家源同学负责重正化群理论推导与文字编辑；田家源同学负责论文的重新排版