三角晶格反铁磁序的相变

吴晋渊

2021年10月12日

(a) 设晶格被往右移动了一个晶格常数的距离,这相当于标有(a,b,c)的三角形观察窗被向左移动了一个晶格常数的距离,从图1可以看出,设晶格移动后的a,b,c点为a',b',c',则

$$a' = c, \quad b' = a, \quad c' = b,$$

即

$$m_1' = m_3, \quad m_2' = m_1, \quad m_3' = m_2.$$

于是

$$\psi' = m_1' + m_2' e^{i4\pi/3} + m_3' e^{-i4\pi/3}$$
$$= m_3 + m_1 e^{i4\pi/3} + m_2 e^{-i4\pi/3}$$
$$= e^{i4\pi/3} \psi,$$

则对应的用 $m和\theta$ 表示的变换是

$$m' = m, \quad \theta' = \theta + \frac{4\pi}{3}.\tag{1}$$

类似的,设晶格被往斜上方60°的方向移动,此时发生的变换为

$$c' = a$$
, $b' = c$, $a' = b$,

然后

$$\psi' = m_1' + m_2' e^{i4\pi/3} + m_3' e^{-i4\pi/3}$$
$$= m_2 + m_3 e^{i4\pi/3} + m_1 e^{-i4\pi/3}$$
$$= e^{-i4\pi/3} \psi.$$

即

$$m' = m, \quad \theta' = \theta - \frac{4\pi}{3}. \tag{2}$$

一个一般的晶格平移变换是以上两种平移变换的组合,设平移矢量为

$$\boldsymbol{l} = n_1 \boldsymbol{e}_1 + n_2 \boldsymbol{e}_2, \quad n_1, n_2 \in \mathbb{Z}, \tag{3}$$

则ψ的变换为

$$m' = m, \quad \theta' = \theta + n_1 \frac{4\pi}{3} - n_2 \frac{4\pi}{3}.$$
 (4)

本模型允许三种类型的旋转。旋转中心可以设置在格点上,可以设置在三角形的中心,也可以设置在边的中点上。如果旋转中心设置在格点上,可能的旋转角度为60°的倍数。为简便起见下面仅考虑晶格被顺时针旋转60°的情况,其它角度的情况只需要重复若干次60°的旋转即可。如果旋转中心在a点上,晶格被顺时针旋转60°即相当于观察窗被逆时针旋转了60°,即相当于交换了b和c,于是 ψ 的变换为

$$\psi' = m_1 + m_3 e^{i4\pi/3} + m_2 e^{-i4\pi/3},$$

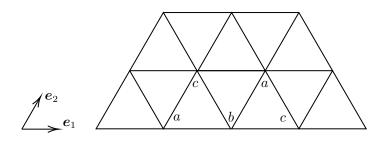


图 1: 晶格平移示意

即

$$\psi' = \psi^*. \tag{5}$$

类似的如果旋转中心设置在b点上,变换为交换a和c,即

$$\psi' = e^{-i4\pi/3}\psi^*,\tag{6}$$

而如果旋转中心设置在c点上则

$$\psi' = e^{i4\pi/3}\psi^*. \tag{7}$$

如果旋转中心设置在三角形中心,旋转就是a,b,c的轮换,因此此时 ψ 的变换和平移完全相同。此时只有顺时针旋转120°和逆时针旋转120°两种可能,晶格被逆时针旋转120°时有(1),晶格被顺时针旋转120°时有(2)。

如果旋转中心设置在边的中心上,那么旋转角度只有180°,因此相当于交换ab,bc,ca中的任意两个,从而如果旋转中心在ab边上 ψ 的变换就是(7),如果旋转中心在bc边上那么 ψ 的变换就是(5),如果旋转中心在ca边上那么 ψ 的变换就是(6)。

在变换 $\sigma \to -\sigma \Gamma \psi$ 的变换就是简单的 $\psi' = -\psi$,即

$$m' = m, \quad \theta' = \theta + \pi.$$
 (8)

综上,本模型在xy平面上的对称性是(4)和(5)的任意复合,完整的对称性是xy平面上的对称性、z方向平移和自旋翻转(8)的任意复合。

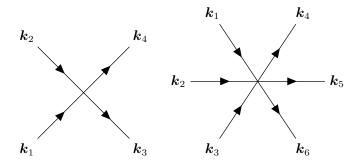
- (b) 由于自旋翻转对称性,有效自由能中只能出现 ψ 的偶数阶项。显然 $|\nabla \psi|^2$ 是一个允许出现的项,因为它在 ψ 的任何相位变化、取共轭、正负号变化之下都不变。由于系统中的相互作用高度局域,有效自由能中导数算符的阶数应该较低,于是以下始终假定含有导数算符的项只有 $|\nabla \psi|^2$ 。在不含导数算符的项中:
 - 1. ψ^2 阶满足对称性要求的只有 $|\psi|^2$;
 - 2. ψ^4 阶满足对称性要求的只有 $|\psi|^4$;
 - 3. 由于6含有因子3,而对称性并不要求有效自由能在任意的相位变化下都不变,只需要在 $4\pi/3$ 的倍数的相位变化下不变即可, ψ^6 阶项可以不是 $|\psi|$ 的函数,只需要所有 ψ^6 阶项之和的虚部为零即可。满足条件的项包括 $|\psi|^6$ 和 $\psi^6+(\psi^*)^6$ 。

取到 ψ 的六阶项,并照惯例做适当的单位变换使 $|\nabla\psi|^2$ 项系数为1,有

$$F = \int d^{d} \boldsymbol{r} (|\nabla \psi|^{2} + r|\psi|^{2} + u|\psi|^{4} + v|\psi|^{6} + \frac{1}{2}v'(\psi^{6} + (\psi^{*})^{6})).$$
 (9)

换用m和 θ 为场变量,就是

$$F = \int d^{d} \mathbf{r} \left(\underbrace{(\nabla m)^{2} + m^{2} (\nabla \theta)^{2}}_{|\nabla \psi|^{2}} + rm^{2} + um^{4} + vm^{6} + v'm^{6} \cos(6\theta) \right).$$
 (10)



(a) $|\psi|^4$ 顶角,入射粒子线可交 (b) $|\psi|^6$ 顶角,入射粒子线可交换,出射粒换,出射粒子线可交换 子线可交换

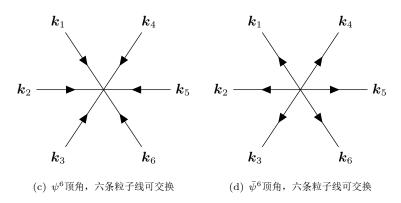


图 2: (9)中的相互作用顶角

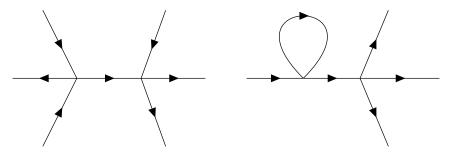
(c) (9)中有四种相互作用顶角。为了方便起见切换到动量表象下,场的变换为

$$\bar{\psi}(\mathbf{k}) = \int d^3 \mathbf{r} \, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \bar{\psi}(\mathbf{r}), \quad \psi(\mathbf{k}) = \int d^3 \mathbf{r} \, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}),$$

费曼规则为:

- 粒子线带有箭头。
- 有三种相互作用顶角,一种是二进二出,一种是三进三出,一种是六个粒子一起湮灭,一种是六个粒子一起创生。第一种顶角对应因子—4u,第二种顶角对应因子—(3!)²v,后两种顶角分别对应因子—6!v'/2; 多出来的数值因子来自入射粒子线和出射粒子线和外线之间的对应方式数目。
- 传播子对应 $1/(k^2+r)$ 。
- 对所有不确定的动量应该做积分 $\int d^d \mathbf{k} / (2\pi)^d$,动量上下限由需要积掉的动量区间确定,对每个顶角应该施加动量守恒因子 $(2\pi)^d \delta(\sum \mathbf{k})$ 。
- 闭合粒子线不贡献对称性因子,图形的整体对称贡献对称性因子。仅计算顶角个数小于等于2的树图和一圈图。对单顶角图,有

$$\begin{array}{c|c}
 & \mathbf{k} & \mathbf{k} \\
\hline
 & \mathbf{k} & = -4u \int^{\Lambda/\zeta} \frac{\mathrm{d}^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \bar{\psi}(\mathbf{k}) \psi(\mathbf{k}) \int_{\Lambda/\zeta}^{\Lambda} \frac{\mathrm{d}^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + r},
\end{array} (11)$$



- (a) 树图,修正v; 由于动量守恒基本上 对relevant的项没有贡献
- (b) 一圈图, 修正r; 不满足动量守恒关系

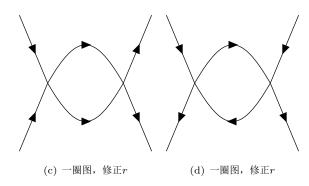


图 3: 由 $|\psi|^4$ 项形成的二顶角图

这是对r的修正。同样

$$k_1 \xrightarrow{q} k_4 \tag{12}$$

$$k_2 \qquad k_3 \tag{13}$$

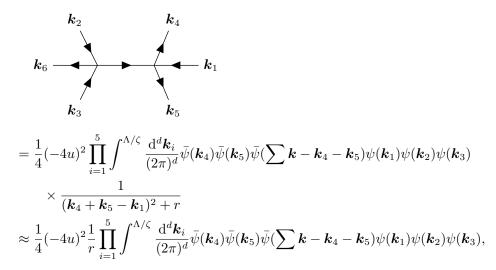
$$= -\frac{1}{4}(3!)^2 v \prod_{i=1}^3 \int^{\Lambda/\zeta} \frac{\mathrm{d}^d \mathbf{k}_i}{(2\pi)^d} \bar{\psi}(\mathbf{k}_3) \bar{\psi}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3) \psi(\mathbf{k}_1) \psi(\mathbf{k}_2) \int_{\Lambda/\zeta}^{\Lambda} \frac{\mathrm{d}^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + r},$$

因子1/4来自 k_1 外腿和 k_2 外腿可交换、 k_3 外腿和 k_4 外腿可交换。这是对u的修正。其余的单项角图或者为二圈图或者对低能过程没有修正。

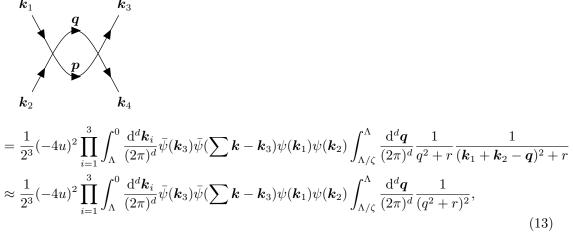
二顶角树图可以通过任意画两个顶角,然后将一个入射粒子线和一个出射粒子线连接得到,圈图可以通过将两对入射粒子线和出射粒子线连接得到。因此,含有两个六条腿的顶角的树图会给出一个十条腿的等效顶角而含有两个六条腿的顶角的一圈图会给出一个八条腿的等效顶角。由于我们只考虑六阶及以下的项,有意义的二项角树图中至少有一个顶角是 $|\psi|^4$ 。

两个 $|\psi|^4$ 项角形成的图为图3,其中图3(b)不满足动量守恒关系,因为一个低动量的粒子被第一个项角散射为了一个高动量的粒子。(将图3(b)中的所有粒子线调转方向可以得到

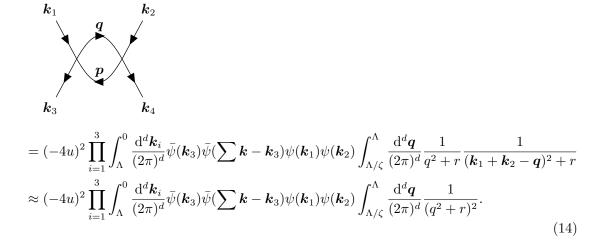
一个不同的图,但是这个图同样没有贡献)对v的修正为

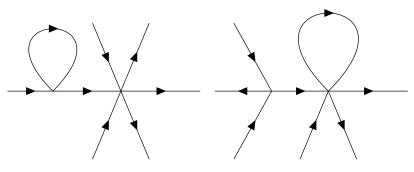


其中1/4的因子来自 \mathbf{k}_2 外腿和 \mathbf{k}_3 外腿可交换、 \mathbf{k}_4 外腿和 \mathbf{k}_5 外腿可交换。第一个等号后面给出的项实际上有动量依赖,但是既然只有没有动量依赖的 $|\psi|^6$ 项才是重要的,我们直接忽略这个动量依赖;但是这相当于假定了中间态粒子动量为0,而中间态应该在高能自由度上,因此这个图没有修正。图(c)给出的u的修正为



这里略去了对 \mathbf{k}_1 和 \mathbf{k}_2 的全部依赖,因为只有没有动量依赖的 $|\psi|^4$ 项才是重要的。图(d)给出的修正和图(c)基本一致,只是对称性因子不同:





- (a) 一圈图,修正v;不满足动量守恒关系
- (b) 一圈图,修正v,作用粒子-空穴变换还可以得到一个独立的图

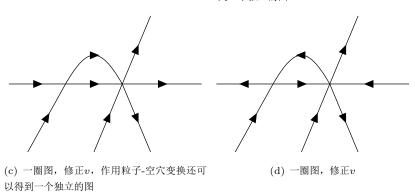
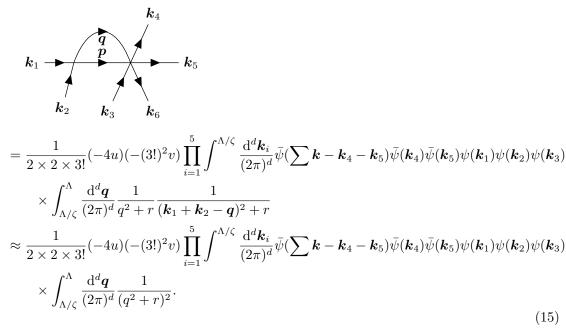


图 4: 由 $|\psi|^4$ 项和 $|\psi|^6$ 形成的二顶角图

下面考虑 $|\psi|^4$ 项和 $|\psi|^6$ 形成的二顶角图。这些图如果是树图将会导致 ψ^8 阶的项,所以我们只考虑一圈图,展示如图4。实际上将图4中的图中的所有箭头都倒转可以得到另一些图,但是因为只需要做粒子-空穴变换就可以得到这些图,无需单独考虑它们。其中,图(a)是不满足动量守恒的,因为最左端的入射粒子是低动量的但是被第一个相互作用顶角散射到了一个高动量模式上。

图(b)会给出v的修正的另一个贡献:

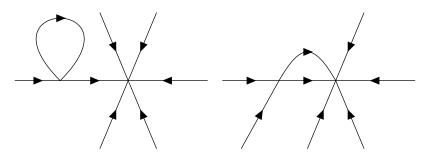
在最后的对v的修正中上式应该乘以2,因为将上式中所有箭头颠倒过来可以得到另一个图,它有一样的对v的修正。然而,实际上上式和图3(a)类似,由于我们仅保留对relevant的项的修正,我们要求 $\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_5$ 为零,但是这和中间态粒子应该是高能模式矛盾。因此上式实际上没有贡献。对图(c),有



同样在最后的对v的修正中上式应该乘以2,因为将上式中所有箭头颠倒过来可以得到另一个图,它有一样的对v的修正。图(d)带来的修正和图(c)大体上是一样的,但是对称性因子有变化,为

$$\frac{1}{2 \times 2} (-4u)(-(3!)^2 v) \prod_{i=1}^5 \int^{\Lambda/\zeta} \frac{\mathrm{d}^d \mathbf{k}_i}{(2\pi)^d} \bar{\psi}(\sum \mathbf{k} - \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_5) \bar{\psi}(\mathbf{k}_4) \bar{\psi}(\mathbf{k}_5) \psi(\mathbf{k}_1) \psi(\mathbf{k}_2) \psi(\mathbf{k}_3)
\times \int_{\Lambda/\zeta}^{\Lambda} \frac{\mathrm{d}^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + r} \frac{1}{(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{q})^2 + r}
\approx \frac{1}{2 \times 2} (-4u)(-(3!)^2 v) \prod_{i=1}^5 \int^{\Lambda/\zeta} \frac{\mathrm{d}^d \mathbf{k}_i}{(2\pi)^d} \bar{\psi}(\sum \mathbf{k} - \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_5) \bar{\psi}(\mathbf{k}_4) \bar{\psi}(\mathbf{k}_5) \psi(\mathbf{k}_1) \psi(\mathbf{k}_2) \psi(\mathbf{k}_3)
\times \int_{\Lambda/\zeta}^{\Lambda} \frac{\mathrm{d}^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{(q^2 + r)^2}.$$
(16)

由于 ψ^6 项和 $\bar{\psi}^6$ 项之间具有对称性,并且两者对对方的一圈重整化群流没有贡献,只需要算其中一个就可以得知另一个。图5给出了可能的图,其中(a)由于前述的低动量电子被

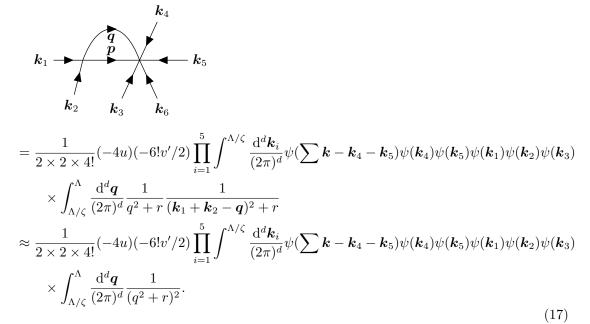


(a) 一圈图,修正v';不满足动量守恒关系

(b) 一圈图,修正v',作用粒子-空穴变换还可以得到一个独立的图

图 5: 由 ψ^6 项和| ψ | ⁴形成的二顶角图

散射到高动量模式上没有任何贡献,只需要计算(b),它给出



在最后对v'的修正中上式应该乘以2,因为将所有箭头颠倒过来可以得到另一个图,它给出的修正是完全一样的。

做量纲分析,取坐标的倒数为1,则有

$$\left[\int \mathrm{d}^d \boldsymbol{r} \, (\boldsymbol{\nabla} \psi)^2 \right] = 1,$$

即

$$[\psi] = \frac{d-2}{2}.\tag{18}$$

从而根据自由能的形式,有

$$[r] = 2, \quad [u] = 4 - d, \quad [v] = [v'] = 6 - 2d.$$
 (19)

这样就可以写出参数跑动的方式。对r,根据(11)有

$$r(\zeta) = \zeta^2 \left(r + 4u \int_{\Lambda/\zeta}^{\Lambda} \frac{\mathrm{d}^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + r} \right). \tag{20}$$

对u,根据(12), (13)和(14)有

$$u(\zeta) = \zeta^{4-d} \left(u + \frac{1}{4} (3!)^2 v \int_{\Lambda/\zeta}^{\Lambda} \frac{\mathrm{d}^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + r} - \frac{1}{2^3} (-4u)^2 \int_{\Lambda/\zeta}^{\Lambda} \frac{\mathrm{d}^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{(q^2 + r)^2} \right)$$

$$- (-4u)^2 \int_{\Lambda/\zeta}^{\Lambda} \frac{\mathrm{d}^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{(q^2 + r)^2} \right)$$

$$= \zeta^{4-d} \left(u + 9v \int_{\Lambda/\zeta}^{\Lambda} \frac{\mathrm{d}^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + r} - 18u^2 \int_{\Lambda/\zeta}^{\Lambda} \frac{\mathrm{d}^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{(q^2 + r)^2} \right).$$
(21)

对v的修正来自(15), (16), 为

$$v(\zeta) = \zeta^{6-2d} \left(v - 2 \times \frac{1}{2^2 \times 3!} (-4u) (-(3!)^2 v) \int_{\Lambda/\zeta}^{\Lambda} \frac{\mathrm{d}^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{(q^2 + r)^2} \right)$$

$$- \frac{1}{2^2} (-4u) (-(3!)^2 v) \int_{\Lambda/\zeta}^{\Lambda} \frac{\mathrm{d}^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{(q^2 + r)^2} \right)$$

$$= \zeta^{6-2d} \left(v - 48uv \int_{\Lambda/\zeta}^{\Lambda} \frac{\mathrm{d}^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{(q^2 + r)^2} \right).$$
(22)

对v'的修正来自(17),为

$$v'(\zeta) = \zeta^{6-2d} \left(v' - 2 \times \frac{1}{2 \times 2 \times 4!} (-4u)(-6!v'/2) \int_{\Lambda/\zeta}^{\Lambda} \frac{d^{d} \mathbf{q}}{(2\pi)^{d}} \frac{1}{(q^{2} + r)^{2}} \right)$$

$$= \zeta^{6-2d} \left(v' - 30uv' \int_{\Lambda/\zeta}^{\Lambda} \frac{d^{d} \mathbf{q}}{(2\pi)^{d}} \frac{1}{(q^{2} + r)^{2}} \right).$$
(23)

以上方程都是在 ζ 接近1的近似下成立的,根据它们计算 β 函数可以得到(下面已经做了适当的单位变换,使得 $\Lambda=1$)

$$\beta(r) = \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}\ln\zeta} = 2r + 4u \frac{S_{d-1}}{(2\pi)^d (1+r)},\tag{24}$$

$$\beta(u) = \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\ln\zeta} = (4-d)u + 9v\frac{S_{d-1}}{(2\pi)^d(1+r)} - 18u^2\frac{S_{d-1}}{(2\pi)^d(1+r)^2},\tag{25}$$

$$\beta(v) = \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\ln\zeta} = (6 - 2d)v - 48uv \frac{S_{d-1}}{(2\pi)^d (1+r)^2},\tag{26}$$

$$\beta(v') = \frac{\mathrm{d}v'}{\mathrm{d}\ln\zeta} = (6 - 2d)v' - 30uv' \frac{S_{d-1}}{(2\pi)^d (1+r)^2}.$$
 (27)

以上四个方程给出了重整化群方程,其中 S_{d-1} 表示半径为1的d-1维球面的表面积。

下面做 $4-\epsilon$ 展开以求解不动点。令所有 β 函数为零,注意到u=r=v=v'=0是一个不动点,Wilson-Fisher不动点中各个参数的量级均应为 ϵ 阶或者更高阶小量。计算可知在 $d=4-\epsilon$ 时

$$\frac{S_{d-1}}{(2\pi)^d} = \frac{1}{(2\pi)^d} \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} = \frac{1}{8\pi^2} + \mathcal{O}(\epsilon),$$

既然 S^{d-1} 因子在重整化群方程中都是和参数乘在一起的,而参数至少为 ϵ 阶,可以直接略去上式中的小量部分,从而得到方程组

$$\begin{split} &2r+4u\frac{1}{8\pi^2}\frac{1}{1+r}=0,\\ &\epsilon u+9v\frac{1}{8\pi^2}\frac{1}{1+r}-18u^2\frac{1}{8\pi^2}\frac{1}{(1+r)^2}=0,\\ &(2\epsilon-2)v-48uv\frac{1}{8\pi^2}\frac{1}{(1+r)^2}=0,\\ &(2\epsilon-2)v'-30uv'\frac{1}{8\pi^2}\frac{1}{(1+r)^2}=0. \end{split}$$

解之,得到三组解,一组是所有参数都是零的解,这我们已经知道了,一组是有限大小的解,这组解应该舍去,因为这不是Wilson-Fisher不动点。 Wilson-Fisher不动点,取到 ϵ 的一阶项,为

$$r^* = -\frac{\epsilon}{9}, \quad u^* = \frac{4}{9}\pi^2\epsilon, \quad v = v' = 0.$$
 (28)

下面考虑此不动点附近的重整化群流,设 $r = r^* + \delta r$,等等,取到 ϵ 的一阶项,有

$$\begin{split} \beta(r) &= \left(2 - \frac{2\epsilon}{9}\right) \delta r + \left(\frac{1}{2\pi^2} + \frac{\epsilon}{18\pi^2}\right) \delta u \,, \\ \beta(u) &= -\epsilon \, \delta u + \frac{9 + \epsilon}{8\pi^2} \, \delta v \,, \\ \beta(v) &= -\left(2 + \frac{2\epsilon}{3}\right) \delta v \,, \\ \beta(v') &= -\left(2 - \frac{\epsilon}{3}\right) \delta v' \,, \end{split}$$

因此v和v'都是irrelevant的;但v'是重整化群的本征方向而v不是。对以上方程右边的系数矩阵计算本征值,得到以下本征方向:

$$\delta r \sim \zeta^{2-\frac{2}{9}\epsilon}, \quad -\frac{9+\epsilon}{2\pi^2(18+7\epsilon)}\,\delta r + \delta u \sim \zeta^{-\epsilon}, \quad -\frac{3(9+\epsilon)}{64\pi^4(\epsilon-6)}\,\delta r - \frac{3(9+\epsilon)}{8\pi^2(\epsilon-6)}\,\delta u + \delta v \sim \zeta^{-2-\frac{2}{3}\epsilon}.$$

因此可以看出我们有

$$\delta r \sim \zeta^{2-\frac{2}{9}\epsilon}, \quad \delta u \sim \zeta^{2-\frac{2}{9}\epsilon}.$$
 (29)

因此,只要 ϵ 充分小,使得 $-\epsilon < 0$, $-2 - 2\epsilon/3 < 0$,那么u和r是relevant的而其它项都不是relevant的。 $\epsilon = 1$ 显然满足这一条件,因此在三维情况下,红外不动点处的有效理论应该形如

$$F = |\nabla \psi|^2 + r|\psi|^2 + u|\psi|^4. \tag{30}$$

由于 ψ 是一个复场,设其实部和虚部分别为 ψ_1 和 ψ_2 ,代入上式,得到

$$F = \int d^{d} \mathbf{r} \left((\nabla \psi_{1})^{2} + (\nabla \psi_{2})^{2} + r(\psi_{1}^{2} + \psi_{2}^{2}) + u(\psi_{1}^{2} + \psi_{2}^{2})^{2} \right), \tag{31}$$

这是一个O(2)模型,因此本文分析的模型(9)和经典XY模型的普适类是一样的。