

考虑一个晶格，用  $i$  标记其上格点。在  $i$  上有自旋变量  $S_i$ 。只可取两个分立值， $S_i = \pm \frac{1}{2}$ 。若  $J > 0$ ，则相邻的自旋倾向于平行，否则反之。

该模型可用于研究铁磁相变的性质  $\rightarrow$  需要一个临界温度。

或考虑另外磁矩  $h$  的能量： $H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - \sum_i S_i h$ 。

这不是近独立子系统，故不能用普通的微扰理论。（近似正比：短程相互作用  $E = \sum_i \epsilon_i S_i$ ）。

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \exp(-\beta H(S_i))$$

常用方法：1). 平均场：将其他自旋对某一特定自旋的相互作用用一常数代替，从而使各个自旋互相独立。但对于一些低维问题还会得到错误结论，只有  $d \rightarrow \infty$  时才趋于平均。

2). 高维展开 3). 重整化群 4). Monte Carlo

先看平均场： $H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - \sum_i S_i h$ 。对于某个自旋  $S_i$ ，与它有关的项： $-S_i(h + J \sum_{j \sim i} S_j)$ 。

$\rightarrow$  等效场  $h$ ，这需要一个“附加磁矩”。

设磁场的期望值为  $\langle S_j \rangle$ ，则平均场为： $h_{eff} = \langle J \sum_{j \sim i} S_j \rangle = q J \langle S_j \rangle$ 。

从而将此时的能量写作： $H(M) = - \sum_i S_i (h + h_{eff})$ 。从而，此时每个格点独立，可以写作：

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \exp(\beta(h + h_{eff}) \sum_i S_i) = \prod_i \exp(\beta(h + h_{eff}) S_i) = (2 \cosh[\beta(h + h_{eff})])^N$$

1/4 独立，N 个。

从而  $\langle S_i \rangle = \frac{\sum_{S_i = \pm 1/2} S_i \frac{1}{2} \exp(-\beta(h + h_{eff}) S_i)}{\sum_{S_i = \pm 1/2} \frac{1}{2} \exp(-\beta(h + h_{eff}) S_i)} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial h} \ln 2 = \tanh[\beta(h + h_{eff})]$

这给出一个自洽方程： $h_{eff} = q J \tanh[\beta(h + h_{eff})]$ 。

这个模型在什么时候会发生铁磁相变？ $\Rightarrow$  可从自洽性条件入手， $h = q J \tanh(\beta h)$ ， $\Rightarrow h = q J (\beta h - \frac{1}{3} \beta^3 h^3)$ 。在  $T_c < \frac{qJ}{k_B}$  时，有铁磁态，而  $T_c > \frac{qJ}{k_B}$  则没有。

求导解： $m = \langle S_i \rangle = \frac{1}{2} (1 - T_c/T)^{1/2} \sim (T_c - T)^{1/2} \Rightarrow$  临界指数  $1/2$ 。

也可以使用类似于微扰或其他临界指数，e.g. 磁化率  $\chi_T = (\frac{\partial m}{\partial h})_{T, h=0}$ 。

$$m = \tanh[\beta(h + J q m)] \sim \beta(h + J q m) \Rightarrow m = \frac{h}{k_B(T - T_c)} \sim (T - T_c)^{-1}$$

e.g. 在  $T_c$  处  $m$  与外场的微扰： $m = \tanh(m + \beta h) \approx m + \beta h + \frac{1}{6}(m + \beta h)^3 \Rightarrow m \sim h^{1/2}$ 。

总之，从自洽方程出发，微扰近似，然后把各个格点解出来。

下面介绍一个与平均场等效的近似理论（Bragg-Williams 近似）。设每个格点上自旋  $S_i$ ，若平均为  $P_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm m)$ ， $\Rightarrow m = \langle S_i \rangle = m$ ， $\langle S_i S_j \rangle = \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle = m^2$ 。

我们要利用 Helmholtz 自由能  $F = \langle H \rangle = -\frac{1}{2} J N q m^2 - N m h$ ， $S = N k_B (\frac{1}{2} \ln(1+m) + \frac{1}{2} \ln(1-m))$ ， $\Rightarrow -\frac{\partial(F/T)}{\partial m} = -q J m - h + \frac{k_B T}{2} \ln\left(\frac{1-m}{1+m}\right) = 0 \Rightarrow m = \tanh[q J m + h]$ 。

所以可验证和平均场理论等效。另外，在  $h \rightarrow 0$ ， $m \rightarrow 0$  时，它的自由能可以展开成  $m$  幂级数的零级数，并且级数的正负与前面讨论的结论一致， $\Rightarrow$  级相变与平均场条件。

下面用唯象理论讨论铁磁（系统中磁矩不均匀），更以下述方程给出：

$$F[m(x)] = \int d^d x \left[ f(x) + \frac{qJ}{2} m^2(x) + \frac{D}{2} (\nabla m(x))^2 + \frac{b}{4} m^4(x) \right]$$

均匀系统， $T < T_c$ ， $\bar{m}^2 = -a(T)/b(T)$ 。

令磁矩取值为  $m(x) = \bar{m} + \delta m(x)$ ，一个主要物理量是关联函数，即两磁矩处磁量的协方差： $C(r_1, r_2) = \langle m(r_1) m(r_2) \rangle - \langle m(r_1) \rangle \langle m(r_2) \rangle$ 。

故, 我们先求“类”“更平模”(随机程中的叫法), 或具有“平移不变性”的程, 有两大要素: 1).  $\forall r_1, r_2 \in [m(r)] = [m(r)] = \bar{m}$  2).  $\forall r_1, r_2 \in [ ] \in [ ] = C(r_1 - r_2)$

一. 构造函数: 将  $\delta m(r) = m(r) - \bar{m}$  展开成级数:  $\delta m(r) = m(r) - \bar{m} = \frac{1}{V} \sum_k \tilde{m}_k \exp(i \cdot k \cdot r)$

其逆变换:  $\int d^3r \delta m(r) \exp(-i \cdot p \cdot r) = \sum_k \tilde{m}_k \cdot \frac{1}{V} \int \exp(i(\tilde{k} - p) \cdot r) d^3r = \tilde{m}_p = \{\tilde{m}_k\}$  和  $\delta m(r)$  是互共轭的。

由于关联函数是实的  $\Rightarrow \text{Im}(\tilde{m}_k \exp(i \cdot k \cdot r)) = \text{Im}(\tilde{m}_{-k} \cdot \exp(-i \cdot k \cdot r)) \Rightarrow \tilde{m}_k = \tilde{m}_{-k}^*$  用展开的  $\delta m$  写成关联函数:

$$C(r_1 - r_2) = \frac{1}{V^2} \sum_k \sum_{k'} \tilde{m}_k \tilde{m}_{k'} \exp(i \cdot k \cdot r_1) \exp(i \cdot k' \cdot r_2) \cdot \exp(-i \cdot (k + k') \cdot r_2) \\ = \frac{1}{V^2} \sum_{k, k'} \tilde{m}_k \tilde{m}_{k'} \exp(i \cdot k \cdot r_1 + i \cdot (k + k') \cdot r_2)$$

由于微扰论的, 不依赖于超定元的, 所以我们将超定抵消掉。

$$C(r) = \frac{1}{V} \int d^3r C(r, r) = \frac{1}{V} \int \sum_k \frac{1}{V} \tilde{m}_k \tilde{m}_k \exp(i \cdot k \cdot r) \exp(i \cdot k \cdot r) \exp(-i \cdot k \cdot r) d^3r = \frac{1}{V} \sum_k \tilde{m}_k \tilde{m}_k \exp(i \cdot k \cdot r) \delta_{k,0}$$

$\Rightarrow C(r) = \frac{1}{V} \sum_k \tilde{m}_k \tilde{m}_k \exp(i \cdot k \cdot r) \Rightarrow$  我们将  $|\tilde{m}_k|^2$  的平均值 (沿有源长度) 和系统中的统计关联  $C(r)$  联系在一起。

若存在不规则, 则不规则的能态发生干涉的概率为:  $W \propto \exp(-\frac{\Delta F}{k_B T})$

$$\text{而 } \Delta F = F - \bar{F} = \int d^3r \cdot \Delta f \quad \Delta f = \frac{a(T)}{2} [\delta m(r)]^2 + \frac{d(T)}{2} [\delta m(r)]^2 \quad \text{利用 Fourier 展开得 } \delta m(r) = \frac{1}{V} \sum_k \tilde{m}_k \exp(i \cdot k \cdot r)$$

$$\Rightarrow \Delta F = \frac{1}{2} \int \frac{a(T)}{2} \left( \sum_k \tilde{m}_k \exp(i \cdot k \cdot r) \right)^2 + \frac{d(T)}{2} \cdot b^2 \left( \sum_k \tilde{m}_k \exp(i \cdot k \cdot r) \right)^2$$

$$\text{而 } \int \left( \sum_k \tilde{m}_k \exp(i \cdot k \cdot r) \right)^2 dr = \int \left( \sum_k \tilde{m}_k \exp(i \cdot k \cdot r) \right) \cdot \left( \sum_{k'} \tilde{m}_{k'} \exp(i \cdot k' \cdot r) \right) \cdot d^3r = V \cdot \sum_k \sum_{k'} \tilde{m}_k \tilde{m}_{k'} \delta_{k+k',0}$$

$$\Rightarrow \Delta F = \frac{1}{2V} \sum_k [a(T) + d(T)k^2] |\tilde{m}_k|^2 = \text{涨落 } W \propto \pi \exp\left(-\frac{(a(T) + d(T)k^2)}{2Vk_B T} |\tilde{m}_k|^2\right) \quad \text{从指数中都独立} \Rightarrow C(r) = \frac{k_B T}{4\pi d(T)} \cdot \frac{1}{V} \sum_k \frac{4\pi}{a(T) + d(T)k^2} \exp(i \cdot k \cdot r)$$

\* 若  $V \rightarrow +\infty$ , 用积分代替求和:  $C(r) = \frac{k_B T}{4\pi d(T)} \cdot \frac{\exp(-\frac{r^2}{4Dt})}{r} \quad \text{这之前的 } C(r) \text{ 还记录着关联长度 } \xi = \frac{4\pi}{a(T)} \text{ 是所谓关联长度} \Rightarrow T \rightarrow T_0 \text{ 时, 系统存在元易关联}$

下面讨论 Ising 模型严格解: 考虑  $N$  个粒子, 周期边界, 则有  $H = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{h}{2} \sum_i (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \Rightarrow$  第  $i+1$  个粒子处于  $\sigma_{i+1}$  的概率:

$$P(\sigma_{i+1}) = \frac{1}{2} \exp\left(-J \cdot \sigma_i \cdot \sigma_{i+1} - \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1})\right) \Rightarrow \text{而 } Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_i P(\sigma_{i+1})$$

$$\text{为了更方便计算, 我们引入所谓转移矩阵: } T = \begin{bmatrix} P(+,+) & P(+,-) \\ P(-,+) & P(-,-) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \exp(\beta J + h) & \exp(-\beta J) \\ \exp(-\beta J) & \exp(\beta J - h) \end{bmatrix}$$

$$\text{从而, 将面函数写为: } Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} T_{\sigma_0, \sigma_1} \cdot T_{\sigma_1, \sigma_2} \cdots T_{\sigma_{N-1}, \sigma_N} = \text{Tr}(T^N) \Rightarrow Z_N = (\lambda_1)^N + (\lambda_2)^N \sim \lambda_1^N$$

$$\frac{\partial \ln Z_N}{\partial h} = \frac{\left[ \prod_{i=1}^N \exp(\cdot) \right] \left[ \sum_i \frac{\partial_i + \partial_{i+1}}{2} \right]}{Z_N} = \frac{[T]}{Z_N} \cdot \frac{[h]}{Z_N} \Rightarrow m = \frac{\partial F}{\partial h} = \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + \exp(-2\beta J)}} \Rightarrow \text{在 } h=0 \text{ 时, } m=0, \text{ 故不会有铁磁相变点}$$

\* 由于这是采取周期性边界, 故相当于在长度  $L$  元胞阵列中的处理。这样的系统有平移对称性, 我们又从中抽出一节长度为  $N$  的链研究。



下面求自旋自旋关联函数。为简便起见，只考虑无外场的情况。

$$C_{ij} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle \quad \text{将 } H \text{ 写为 } H = - \sum_{i=1}^N J_i \sigma_i \sigma_{i+1}, \quad J_1 = \dots = J_N = J, \Rightarrow C_{ij} = \frac{1}{2N} \sum_{\{\sigma_i\}} (\sigma_i \sigma_j) \exp\left(\sum_{i=1}^N \beta J_i \sigma_i \sigma_{i+1}\right) = \text{Tr} \left( \frac{1}{N} T^{(1)} J_{ij} \right).$$

$$T^{(1)}(T) = \begin{pmatrix} \exp(\beta T) & \exp(-\beta T) \\ \exp(-\beta T) & \exp(\beta T) \end{pmatrix} = \exp(\beta T) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} + \exp(-\beta T) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \exp(2\beta T) & 1 - \exp(2\beta T) \\ 1 - \exp(2\beta T) & 1 + \exp(2\beta T) \end{pmatrix}$$

$$\text{从而现在可以计算上面的递推式 } \frac{1}{N} \text{Tr} T^{(1)}(T) = 2^{-N} [\text{Tr} T \cosh(\beta T) + \text{Tr} T \sinh(\beta T)]. \quad \text{利用关系 } \sigma_i \sigma_j = (\sigma_i \sigma_{i+1})(\sigma_{i+1} \sigma_{i+2}) \dots (\sigma_{j-1} \sigma_j).$$

$$\text{此时可发现, 每个链中的因子可通过对相应变量求导得到. } \Rightarrow C_{ij} = \frac{1}{\beta^2 2^N} \frac{\partial^2 \ln Z(\beta T_1, \dots, \beta T_N)}{\partial T_1 \dots \partial T_{j-1}} \Big|_{T_i=J} = \frac{\tanh^{j-1}(\beta T) + \tanh^{N-j+1}(\beta T)}{1 + \tanh^N(\beta T)}.$$

$$\text{由于 } \tanh(\beta T) < 1, (N-j+1) \gg 1 \Rightarrow N \text{ 次方项占优} \Rightarrow C_{ij} \propto \exp(-j/g), \quad g = -1/\ln(\tanh(\beta T)).$$

下面讨论二维 Ising 模型。简便起见，只考虑无外场的情况。\$\Rightarrow H = -J \sum\_{\langle ij \rangle} \sigma\_i \sigma\_j, \quad Z = \sum\_{\{\sigma\_i\}} \sum\_{\{\sigma\_j\}} \exp(\beta J \sum\_{\langle ij \rangle} \sigma\_i \sigma\_j)\$. 由于 \$\cosh(\cdot)\$ 偶, \$\sinh(\cdot)\$ 奇, 所以我们可以.

$$\exp(\beta \sigma_i \sigma_j) = \cosh(\beta T) + \sigma_i \sigma_j \sinh(\beta T), \quad \Rightarrow Z = [\cosh(\beta T)]^{2N} \sum_{\{\sigma_i\}} \sum_{\{\sigma_j\}} [1 + \sigma_i \sigma_j \tanh(\beta T \sigma_i \sigma_j)],$$

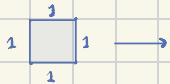
在高温时, \$\tanh(\beta T \sigma\_i \sigma\_j) \ll 1\$, 故取级数第一项 \$\rightarrow\$ 全为 1 贡献. 之后, 应尽可能多取 1, 少取 \$\tanh(\cdot)\$. 另外, 在一个格点上, 由于 \$\sigma\_i = \pm 1\$, 故一个 \$\sigma\_i\$ 因连续取值为 1 才有贡献.

在这个情形下, 可以用图论问题: 将参与作用的 \$\sigma\_i \sigma\_j\$ 看作一根“键”, 由于链上连续取值为 1, 故这些“键”成为闭合回路.

$$\Rightarrow Z = [\cosh(\beta T)]^{2N} \sum_{\{\sigma_i\}} [\tanh(\beta T)]^{L(T)}, \quad (\text{由于 } \sigma_i^2 = 1, \text{ 故自变量的变化有限}).$$

$$\text{还有一个写法: 在每个格点上定义一个值 } n_i = 0/1, \text{ 从而将图论函数写为: } Z = [\cosh(\beta T)]^{2N} \sum_{\{n_i\}} [\tanh(\beta T)]^{\sum n_i}.$$

对偶品格: 在原品格上定义一组新对偶变量. 若两格之间有键 \$\Rightarrow\$ 格子值取异号, 否则反之.



$$\text{此时有: } \sum n_i = \sum_{\langle ab \rangle} (1 - T_a T_b) / 2. \quad \text{现在定义一个所谓“对偶格变量”. } \exp(-2\beta T) = \tanh(\beta T)$$

$$\begin{aligned} \text{可以利用这一等价形式, 重写即为: } Z &= [\cosh(\beta T)]^{2N} \sum_{\{n_i\}} [\tanh(\beta T)]^{\sum n_i} = [\cosh(\beta T)]^{2N} \sum_{\{T_a\}} [\exp(-\beta T)]^{\sum_{\langle ab \rangle} \frac{1 - T_a T_b}{2}} \\ &= [\cosh(\beta T)]^{2N} \sum_{\{T_a\}} \exp\left(-\beta T \sum_{\langle ab \rangle} (1 - T_a T_b)\right) = [\cosh(\beta T)]^{2N} \exp(-N\beta T) \sum_{\{T_a\}} \exp\left(\sum_{\langle ab \rangle} \beta T T_a T_b\right). \end{aligned}$$

$\Rightarrow Z(\beta) = [\cosh(\beta J)]^{2N} \exp(-N\beta J) Z(\tilde{\beta})$ . 从而, 相对涨落时系统的部分函数可以使用极值估计给出.

下面在自旋方向可以连续变化的情形, 海森堡模型,  $H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \vec{S}_i \cdot \vec{h} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot (\sum_{j \in \langle i \rangle} \vec{J}_{ij} + \vec{h})$

\* 这里, 我们认为在加磁场后, 一个粒子周围的粒子对它的平均影响在z方向. 因此我们加一个z方向内场.

$\Rightarrow H(\vec{M}) = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_{iz} (h_{eff} + h)$ . 从而  $P(S_{iz}) = \frac{1}{2} \exp[\beta J (S_{iz} (h_{eff} + h))]$ . 对于N个粒子iid  $\Rightarrow P(S_{iz}) = \frac{1}{2} [\exp(S_{iz} (h_{eff} + h))]^N$

由于我们只关心  $S_{iz} \Rightarrow Z = \int_{-1}^{+1} [\exp(\beta S_{iz} (h + h_{eff}))]^N dS_{iz} = (\int_{-1}^{+1} \exp(\beta S_{iz} (h + h_{eff})) dS_{iz})^N \propto [\sinh(\beta S_{iz} (h + h_{eff}))]^N$ .

从而可以由自旋条件求得平衡温度.

下面讨论更复杂, 互斥的 Ising Model. 有所谓  $Z(2)$  对称性, 令  $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$ , 其能量不变. 换言之, 将自旋反转,  $m \rightarrow -m$ .  $N$  自由能不变.

之前, 我们将调直自由能只作为解, 而实际上, 实际上修改了这一对称性, 而认为只有  $O(2)$  对称性. 对系统每个位置上的自旋进行连续变换  $m \rightarrow m' = R_{\theta} m$ .

自由能不变则: 自由能可写成  $F(m(\vec{r})) = \int d^3r [\frac{1}{2} (m^a(\vec{r}) m^a(\vec{r})) + \frac{1}{2} (\nabla m^a(\vec{r})) \cdot (\nabla m^a(\vec{r})) + \frac{1}{2} (m^a(\vec{r}) \cdot m^a(\vec{r}))^2]$

下面我们求所有破缺相中计算, 取使自由能极大的均匀解  $\vec{m} = \vec{m}^*$ . 其中  $\vec{m}^* = \begin{cases} -a(T)/b(T), & T < T_c \\ 0, & T > T_c \end{cases}$

注意:  $\vec{r}$  的方向并不重要, 其方向不影响自由能. 展开  $\vec{m}(\vec{r}) = \vec{m}^* + \vec{\phi}(\vec{r})$ .  $\begin{cases} \nabla m^a(\vec{r}) \cdot \nabla m^a(\vec{r}) = \nabla \phi^a(\vec{r}) \cdot \nabla \phi^a(\vec{r}) \\ m^a(\vec{r}) \cdot m^a(\vec{r}) = \vec{m}^* \cdot 2\vec{m}^* \cdot \vec{\phi} + \vec{\phi} \cdot \vec{\phi} \end{cases}$

代入后, 可以求得一个自由能. (只写第II=IV项).

$$F^{(2)}[\phi] = \int d^3r \cdot [ \frac{1}{2} \nabla \phi^a \cdot \nabla \phi^a + |a| (\vec{n} \cdot \vec{\phi})^2 ]$$

将  $\vec{\phi}(\vec{r})$  进一步分解成与  $\vec{n}$  平行, 垂直  $\Rightarrow \phi(\vec{r}) = \vec{n} \cdot \phi(\vec{r}) + \vec{\phi}_T(\vec{r})$ .  $\vec{\phi}_T(\vec{r}) \cdot \vec{n} = 0$ .  $\phi(\vec{r})$ ,  $\phi_T(\vec{r})$  称为纵模分量.

$$\Rightarrow \nabla \phi^a \cdot \nabla \phi^a = \nabla \phi \cdot \nabla \phi + \nabla \phi_T^a \cdot \nabla \phi_T^a$$

$$\Rightarrow F^{(2)}[\phi, \phi_T] = \int d^3r \cdot [ \frac{1}{2} \nabla \phi \cdot \nabla \phi + \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + |a| \phi^2 ]$$
 这与前面情形类似, 将  $\phi$  与  $\phi_T$  做 Fourier 分解, 可给出具体结果:

(1). 平行于自发磁化的模式不满足一与后者 Ising 类似.

$$C(r) = \frac{k_B T}{4\pi d(r)} \frac{\exp(-r/\xi)}{r}. \quad \xi = \left[ \frac{d(r)}{2|a(r)|} \right]^{-1/2} \text{ 称为关联长度, 当 } r \rightarrow \infty \text{ 发散. 或 } C(r) \propto \frac{\exp(-r/\xi)}{r} \quad M \text{ 解除, 任何 } r \text{ 均处 } M \rightarrow 0.$$

(2). 垂直于自发磁化,  $\rightarrow$  类似  $a(T) = 0$  的 Ising Model.  $\Rightarrow$  处处无长程关联,  $\rightarrow$  即这种关联已足以阻止破缺有序的形成.

\* 对称性自发破缺: 指的头序参数. e.g. Ising 的  $m = \langle \sum \sigma_i \rangle$ . 有破缺相有  $Z_2$  对称性, 即破缺相无

长程有序性. 关联长度发散, 用不同的"大小"来描述, 其统计都相似.