

## 第七章费米系统练习：

说明低温下理想费米气体的亥姆霍茨自由能( $A=U-TS$ )可表达为：

$$\frac{A}{N} = \frac{3}{5}\varepsilon_f \left[ 1 - \frac{5\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{\varepsilon_f} \right)^2 + \dots \right],$$

这里 $N$ 是粒子数。

# 第八章 相变与临界现象的基本概念

## 8.1 相变与相变分类

常见的一些相变：如气—液相变，顺磁—铁磁相变，金属正常态—超导态相变等。

何种情况下会发生相变？

相变是物质内部粒子间相互作用（倾向于使系统有序）与粒子自身热运动（使系统无序）相互竞争的结果：

1. 如无相互作用不可能有相变，如理想气体无气—液相变；自旋磁距间如无相互作用，就不可能产生铁磁态；
2. 如无热运动干扰，系统内部形成有序态，也不会有相变。
3. 相变时的平衡条件：各相温度，压强和化学势相等。特别地，如系统由一种组元组成，由于吉布斯自由能 $G=n\mu$ ，故各相（相同摩尔数的）吉布斯自由能也相等。

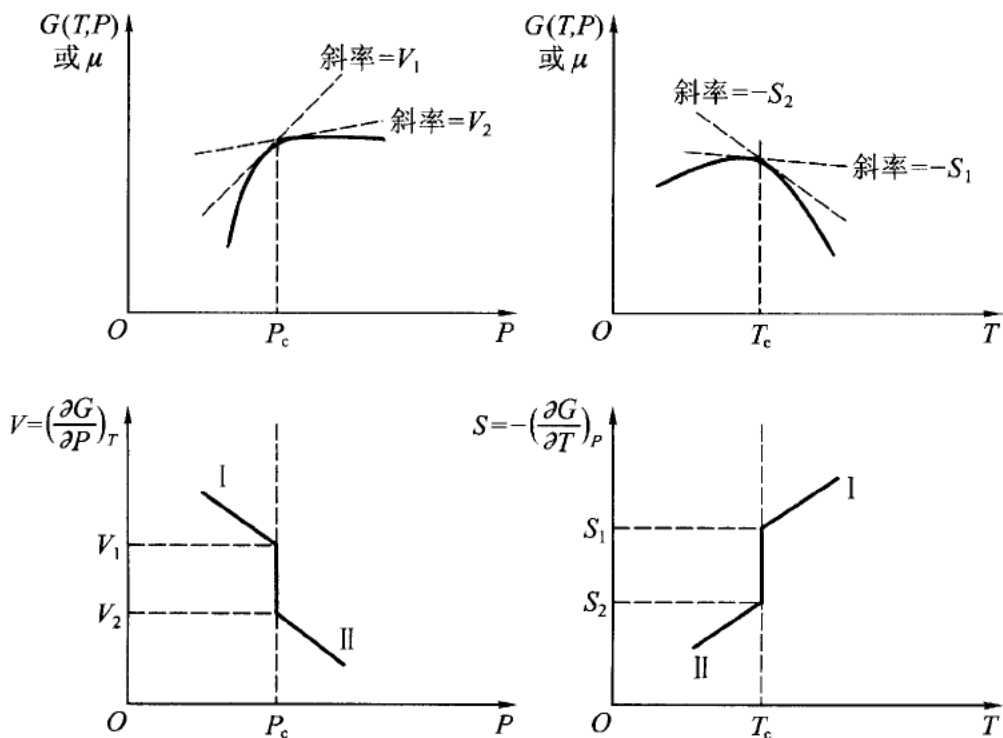
相变分类：

1. 如化学势的一阶导数在相变点不连续，相变为一级相变；
2. 如化学势的一阶导数在相变点连续，但二阶导数不连续，相变为二级相变；以此类推。

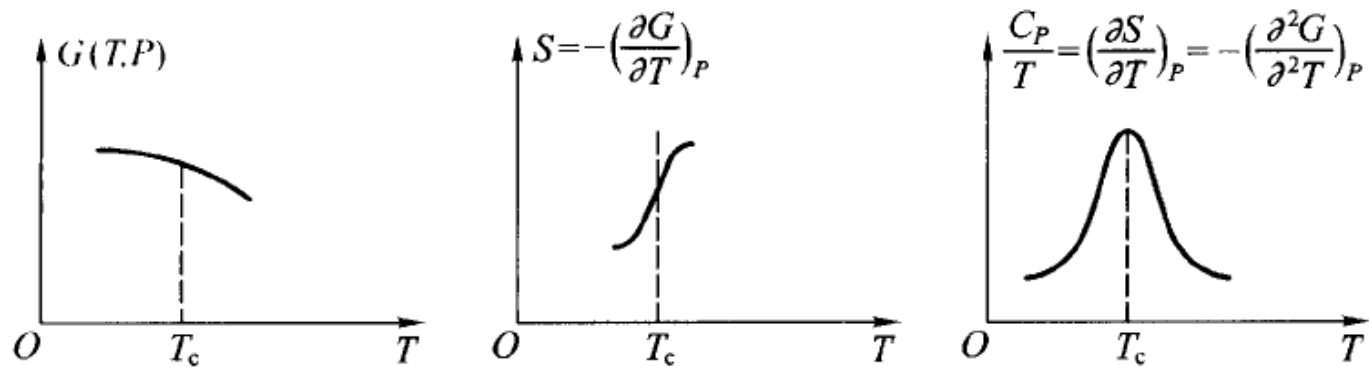
二级及以上相变（二级以上的相变极少见到）也称为连续相变，其最本质特征是发生自发对称破缺，即系统自发地由较高对称性的态变为较低对称性的态，这可用序参量来描写。序参量的结构和含义随相变系统的不同而不同，可以为标量或矢量，实数或复数等等。对连续相变，序参量在临界点附近连续地趋于零（在临界点为零）。

两个例子:

一级相变:



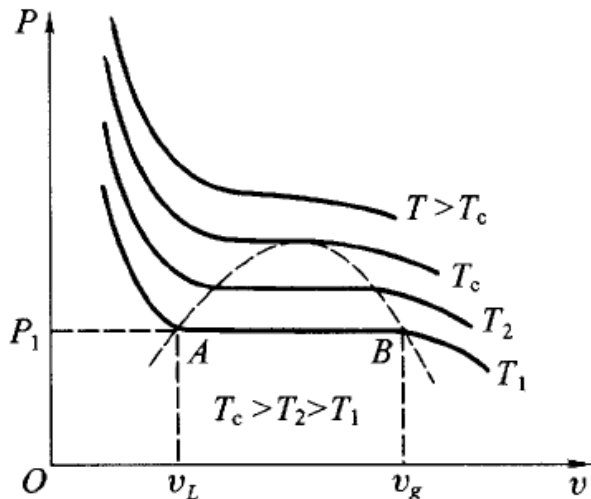
二级相变:



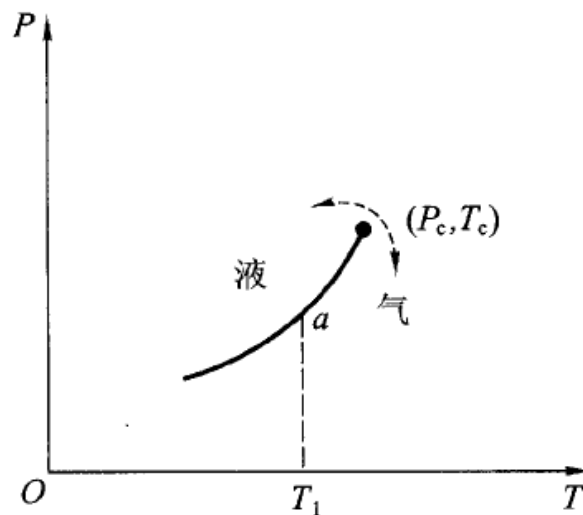
两个典型的存在一级和二级相变的系统：

### 1. 气—液相变：

AB线之间为两相共存区， $v_L \neq v_g$  时相变为一  
级相变；在  $T = T_c$  时  $v_L = v_g$ ，  
相变为二级相变。由  $T = T_c$  降到  $T < T_c$   
时，对称性降低（对称性发生破缺）。 $\Delta v = v_g - v_L$   
为序参量。



P-V图

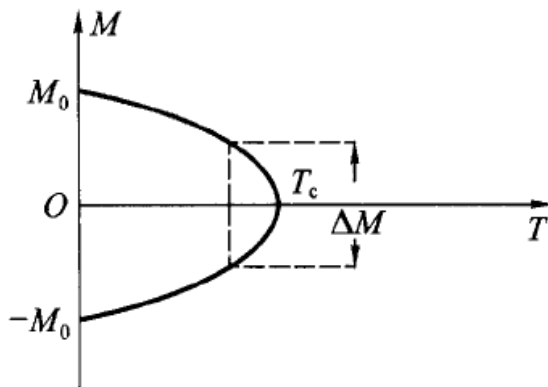


两相共存平衡曲线

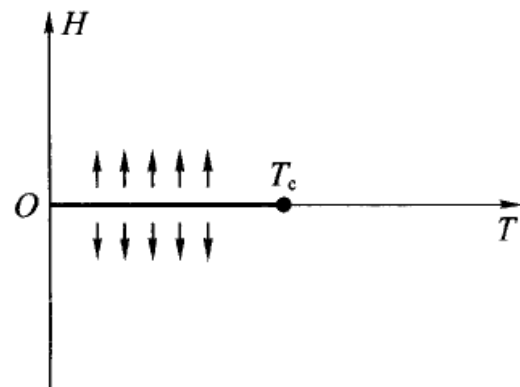
### 2. 顺磁—铁磁相变：

右图为Ising自旋系统，自旋只能平行或反平行与某个轴。

温度低于某个临界温度 $T_c$ 时系统处于铁磁相（低对称性）； $T > T_c$ 时热运动使自旋无序取向，系统处于顺磁态（高对称性）。相变为二级相变， $M$ 为序参量。



$M_0$ 为最大磁化强度



如把磁化强度朝上和朝下各视为一个假想的“相”，则这两个“相”的转变（如通过加外磁场实现）为一级相变，因磁化强度  $M = -\left(\frac{\partial G}{\partial H}\right)_{T,p}$ 。

## 8.2 热力学函数的临界指数

在临界点附近，所有热力学函数可分为有有限大小的正规部分和奇异部分（其本身或导数是发散的），奇异部分可表示成以下形式：

$$f(t) = at^\lambda(1 + Bt^\gamma + \dots)$$

这里  $t \equiv \frac{T-T_c}{T_c}$  是约化温度，并且  $\gamma > 0$ 。函数  $f(t)$  的临界指数定义为：

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln f(t)}{\ln t}$$

如  $\lambda < 0$ ，则  $f(t)$  在临界点发散；如  $\lambda > 0$ ，则  $f(t)$  在临界点趋于零；如  $\lambda = 0$ ，则可把  $f(t)$  视为对数发散，由于  $t^{-\lambda} = e^{-\lambda \ln t} = 1 + (-\lambda \ln t) + (-\lambda \ln t)^2/2! + \dots$

我们容易发现  $\ln t = \lim_{\lambda \rightarrow 0} -\frac{t^{-\lambda} - 1}{\lambda}$ 。它相当于  $f(t)$  函数中有含很小  $\lambda > 0$  的  $t^{-\lambda}$  项，但该项的比例系数  $-1/\lambda$  很大。

对不同的热力学函数可以定义不同的临界指数。以铁磁系统为例，

序参量:  $M = -\left(\frac{\partial G}{\partial H}\right)_{T,P} \sim |t|^\beta,$

热容:  $C_P = -T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_{P,H} \sim \begin{cases} t^{-\alpha} & (T > T_c) \\ (-t)^{-\alpha'} & (T < T_c) \end{cases}$ ，实验发现对连续相变  $\alpha = \alpha'$

磁化率:  $\chi = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{T,P} \sim \begin{cases} t^{-\gamma} & (T > T_c) \\ (-t)^{-\gamma'} & (T < T_c) \end{cases}$ ，实验发现对连续相变  $\gamma = \gamma'$

态方程:  $M \sim H^{1/\delta}.$

### 8.3 关联函数和标度律

以铁磁系统为例，我们定义其关联函数。系统的序参量是 $\mathbf{M}$ ，设其密度函数为 $m(\mathbf{r})$ ，则序参量为：

$$M = \langle \int d^3r m(\mathbf{r}) \rangle$$

这里 $\langle \dots \rangle$ 表示系综平均。关联函数可写为： $\Gamma(\mathbf{r}) = \Gamma(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) = \langle (m(\mathbf{r}_1) - \bar{m})(m(\mathbf{r}_2) - \bar{m}) \rangle$ 。

在动量空间里，我们有 $\tilde{m}(\mathbf{k}) = \int d^3x e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (m(\mathbf{r}) - \bar{m})$ 。考虑到 $m(\mathbf{r})$ 是实的，所以有 $\tilde{m}^*(\mathbf{k}) = \tilde{m}(-\mathbf{k})$ ，于是

$$\langle |\tilde{m}(\mathbf{k})|^2 \rangle = \left\langle \int d^3x_1 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} (m(\mathbf{r}_1) - \bar{m}) \int d^3x_2 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2} (m(\mathbf{r}_2) - \bar{m}) \right\rangle \sim \int d^3(x_2 - x_1) e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)} \Gamma(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) = \tilde{\Gamma}(\mathbf{k}).$$

$\langle |\tilde{m}(\mathbf{k})|^2 \rangle$ 可通过下面的考虑获得：首先涨落应该是各向同性的，因此在序参量密度函数的最低阶近似下，自由能 $G$ 有如下形式：

$$G = \int d^3r [c_1 |\nabla m(\mathbf{r})|^2 + c_2 m^2(\mathbf{r})] = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} (c_1 k^2 + c_2) |\tilde{m}(\mathbf{k})|^2$$

故在动量空间里

$$G(\mathbf{k}) = (c_1 k^2 + c_2) |\tilde{m}(\mathbf{k})|^2.$$

它的平均值在 $k_B T$ 的量级，因此有

$$\langle |\tilde{m}(\mathbf{k})|^2 \rangle = \frac{k_B T}{c_1 k^2 + c_2}.$$

这称为关联函数的Ornstein-Zernike形式，代入到上面的式子并求反傅立叶变换，我们得

$$\Gamma(\mathbf{r}) = \frac{e^{-r/\xi}}{r},$$

其中 $\xi = \sqrt{c_1/c_2}$ 是关联长度，它一般在临界点发散。

在**临界点**附近，我们假定关联函数有着Ornstein-Zernike形式，即  $\Gamma(\mathbf{r}) \xrightarrow{t \rightarrow 0} r^{-p} e^{-r/\xi}$ 。我们引入两个临界指数来描述关联长度和关联函数在临界点附近的行为：

$$\xi \sim |t|^{-\nu}; \quad \Gamma(\mathbf{r}) \sim \frac{1}{r^p} \equiv \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \quad (\text{for } t = 0)$$

这里 $d$ 为空间维数。

由上节和本节我们得到了六个临界指数，它们并不是完全独立的，我们有以下四个关系式：

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (\text{Fisher})$$

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (\text{Rushbrooke})$$

$$\gamma = \beta(\delta - 1) \quad (\text{Widom})$$

$$\nu d = 2 - \alpha \quad (\text{Josephson})$$

这称为标度律。我们稍后将由标度理论基础上推导出标度律。

下面我们列出了一些系统的临界指数：

临界指数	二维 Ising 模型	三维 Ising 模型	三维 Heisenberg 模型	平均场
$\alpha$	0	0.12	-0.14	0
$\beta$	$\frac{1}{8}$	0.31	0.3	$\frac{1}{2}$
$\gamma$	$\frac{7}{4}$	1.25	1.4	1
$\delta$	15	5		3
$\nu$	1	0.64	0.7	$\frac{1}{2}$
$\eta$	$\frac{1}{4}$	0.05	0.04	0

## 8.4 涨落—耗散定理(fluctuation-dissipation theorem)

对铁磁系统我们可以把序参量 $M$ 显式地写出：

$$\frac{M}{V} = \frac{1}{V} \int d^3r \frac{\text{Tr} [m(\mathbf{r}) e^{-\hat{H}/k_B T}]}{\text{Tr} e^{-\hat{H}/k_B T}} = \frac{\text{Tr} [m(0) e^{-\hat{H}/k_B T}]}{\text{Tr} e^{-\hat{H}/k_B T}}.$$

上面最后一式我们已经假定了系统有**平移不变性**。假定外场 $H$ 线性地与序参量耦合，哈密顿量可写为：

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - H \int d^3r' m(\mathbf{r}'),$$

这里 $\hat{H}_0$ 是无外场时的哈密顿量。把第一个等式对 $H$ 求偏导可得到磁化率 $\chi$ ：

$$\chi(\mathbf{r}) = \frac{1}{k_B T} \int d^3r' [\langle m(\mathbf{r}) m(0) \rangle - \langle m(0) \rangle^2].$$

对比前节的公式我们发现了关联函数和磁化率之间的关系：

$$\chi(\mathbf{r}) = \frac{1}{k_B T} \int d^3r' \Gamma(\mathbf{r})$$

这是涨落—耗散定理(fluctuation-dissipation theorem)的一个特殊情形。

### 一般情形：

● 量子系统对外场的响应（假设为线性响应）[取自帕斯里亚《统计力学》第三版15.6.A节]：

为此考察系统某可观测量 $A$ 随时间的变化，这一变化由一**小的**、依赖于**时间**的外场 $h(t)$ 引起，

该场与系统另一可观测量 $B$ **线性**耦合。于是系统哈密顿量变为：

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 - h(t)B,$$

这里 $\hat{H}_0$ 是平衡态下的无扰动哈密顿量。



用正则系综。平衡态密度矩阵为： $\hat{\rho}_{\text{eq}} = \frac{\exp(-\beta\hat{H}_0)}{\text{Tr}(\exp(-\beta\hat{H}_0))}$ ， $\mathbf{A}$  的平均值为： $\langle A \rangle_{\text{eq}} = \text{Tr}(A\hat{\rho}_{\text{eq}})$ 。

在遥远的过去无外场，于是系统处在由哈密顿量  $\hat{H}_0$  所定义的平衡态上。

某时刻外场加上后， $\mathbf{A}$  对其平衡值的偏差可通过密度矩阵来计算。此时密度矩阵为：

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_{\text{eq}} + \delta\hat{\rho}(t).$$

其运动方程为： $\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} = \frac{\partial\delta\hat{\rho}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{H}, \hat{\rho}(t)] \approx \frac{1}{i\hbar}([\hat{H}_0, \delta\hat{\rho}] - h(t)[B, \hat{\rho}_{\text{eq}}])$ ， (\*)

上面我们注意到外场  $h(t)$  和  $\delta\hat{\rho}(t)$  均为小量，因此可以忽略正比于  $h(t)[B, \delta\hat{\rho}]$  的高阶项。

求解此方程(\*)我们得：

$$\delta\hat{\rho}(t) = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t h(t') \exp\left(\frac{-i\hat{H}_0(t-t')}{\hbar}\right) [B, \hat{\rho}_{\text{eq}}] \exp\left(\frac{i\hat{H}_0(t-t')}{\hbar}\right) dt'.$$

对可观测测量  $\mathbf{A}$ ，其相对于平衡值的变化为：

$$\langle \delta A(t) \rangle = \langle A(t) \rangle - \langle A \rangle_{\text{eq}} = \text{Tr}(A\hat{\rho}(t)) - \text{Tr}(A\hat{\rho}_{\text{eq}}) = \text{Tr}(A\delta\hat{\rho}(t)).$$

再利用迹的循环性质  $\text{Tr}(QRS) = \text{Tr}(SQR)$  可发现  $\langle \delta A(t) \rangle$  是响应函数和外场的卷积：

$$\langle \delta A(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \langle [A(t), B(t')] \rangle_{\text{eq}} h(t') dt'.$$

- 我们于是研究两个随机变量（可观测量）**A**和**B**的时间关联函数  $\langle A(t)B(0) \rangle_{\text{eq}}$  的涨落谱。系统哈密顿量为  $\hat{H}_0$ ，其本征态的完全集为  $|n\rangle$ ，利用完全性条件和  $A(t) = e^{i\hat{H}_0 t} A e^{-i\hat{H}_0 t}$ ，系综平均值为：

$$\begin{aligned} \langle A(t)B(0) \rangle_{\text{eq}} &= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_0} e^{i\hat{H}_0 t} A e^{-i\hat{H}_0 t} B \right\} = \frac{1}{Z} \sum_m \langle m | e^{-\beta \hat{H}_0} e^{i\hat{H}_0 t} A e^{-i\hat{H}_0 t} B | m \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_m} e^{i(E_m - E_n)t} \langle n | B | m \rangle \langle m | A | n \rangle. \end{aligned}$$

其傅立叶变换即为涨落谱：

$$J_1(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle A(t)B(0) \rangle_{\text{eq}} e^{i\omega t} dt = \frac{2\pi}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_m} \langle n | B | m \rangle \langle m | A | n \rangle \delta(E_m - E_n + \omega)$$

类似我们有：

$$J_2(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle B(0)A(t) \rangle_{\text{eq}} e^{i\omega t} dt = \frac{2\pi}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle n | B | m \rangle \langle m | A | n \rangle \delta(E_m - E_n + \omega) = e^{-\beta\omega} J_1(\omega)$$

我们再考察**推迟格林函数**，其定义为：

$$G^R(t) = -i\theta(t) \langle [A(t), B(0)] \rangle_{\text{eq}}, \quad \text{其中} \quad \theta(t) = \begin{cases} 1 & (t > 0) \\ 0 & (t < 0) \end{cases}$$

由上面的结果得：

$$G^R(t) = -i\theta(t) \int_{-\infty}^{+\infty} [J_1(\omega') - J_2(\omega')] e^{-i\omega' t} \frac{d\omega'}{2\pi} = -i\theta(t) \int_{-\infty}^{+\infty} (1 - e^{-\beta\omega'}) J_1(\omega') e^{-i\omega' t} \frac{d\omega'}{2\pi}.$$

利用:  $\theta(t) = \frac{-1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{e^{-i\varepsilon t}}{\varepsilon + i0},$

可得:  $G^R(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} G^R(t)e^{i\omega t} dt = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} (1 - e^{-\beta\omega'}) J_1(\omega') \frac{1}{\omega - \omega' + i0}.$

再利用  $\frac{1}{x \pm i0} = P\frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x)$ , 这里  $P$  表示主值, 可得

$$\text{Im } G^R(\omega) = -\frac{1}{2}(1 - e^{-\beta\omega})J_1(\omega).$$

即对  $\omega \neq 0$ , 有:

$$J_1(\omega) = \frac{-2}{1 - e^{-\beta\omega}} \text{Im } G^R(\omega).$$

这就是**涨落—耗散定理(fluctuation-dissipation theorem)**

● **外力的响应函数（广义磁化率）的实部和虚部的关系:**

考虑线性响应(linear response theory)。由因果律, 在外场  $V(t)$  作用下, 在时刻  $t'$  的系统的某一力学量  $A(t')$  的响应只与  $t'$  以前的扰动有关。因此

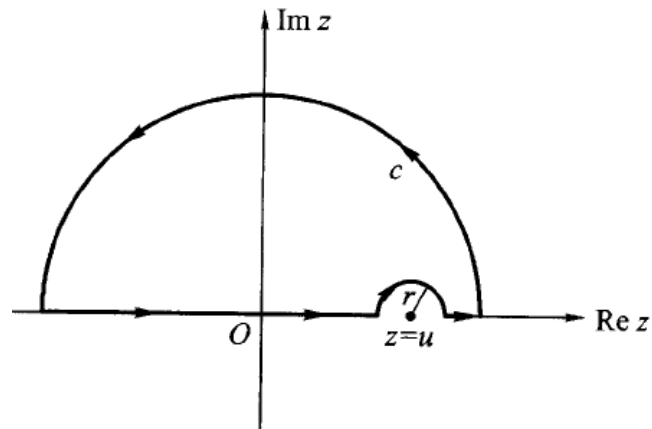
$$A(t') = \int_{-\infty}^{t'} K(t' - t)V(t)dt = \int_0^{\infty} K(\tau)V(t' - \tau)d\tau,$$

这里  $K(\tau)$  是响应函数。在频域里, 我们有:  $\chi(\omega) = \int_0^{\infty} K(\tau)e^{i\omega\tau}d\tau = A(\omega)/V(\omega).$

响应函数 $K(\tau)$ 是实的，因此 $\chi^*(\omega) = \chi(-\omega)$ 。由因果律 $\tau > 0$ 可以导出 $\chi(z)$ 的实部和虚部的关系。

注意  $\chi(z) = \int_0^{\infty} K(\tau)e^{iz\tau} d\tau$  只对复数  $z$  的上半平面适用（详见朗道统计物理学I卷123节）

为此，我们在如图所示的区域内计算函数  $f(z) = \frac{\chi(z)}{z-u}$



的积分。由于区域内无奇点积分为零。设 $|z|$ 趋于无限时 $\chi(z)$ 趋于零，并定义主值积分

$$P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\chi(\omega)}{\omega - u} d\omega = \int_{-\infty}^{u-r} \frac{\chi(\omega)}{\omega - u} d\omega + \int_{u+r}^{+\infty} \frac{\chi(\omega)}{\omega - u} d\omega,$$

则有

$$\oint_c \frac{\chi(z)}{z-u} dz = P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\chi(\omega)}{\omega - u} d\omega + \int_{\pi}^0 ire^{i\phi} d\phi \frac{\chi(u + re^{i\phi})}{(u + re^{i\phi}) - u} = 0$$

$$\stackrel{r \rightarrow 0}{\equiv} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\chi(\omega)}{\omega - u} d\omega - i\pi\chi(u)$$

于是有： $\chi(u) = \frac{1}{i\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\chi(\omega)}{\omega - u} d\omega$ .

记  $\chi(\omega) = \chi'(\omega) + i\chi''(\omega)$ ，则有

$$\begin{cases} \chi'(u) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\chi''(\omega)}{\omega - u} d\omega \\ \chi''(u) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\chi'(\omega)}{\omega - u} d\omega \end{cases}$$

这称为Kramers-Kronig relation。推迟格林函数也有类似上面的表达式。

## 8.5 平均场理论

我们先引入一个粗粒（coarse-grained）序参量密度函数  $m(\mathbf{x})$ ，我们可以把它看作原子大小尺度  $a$  范围内的平均磁距密度，因此  $m(\mathbf{x})$  在比  $a$  更小的尺度里没有涨落。

我们考虑临界点附近的系统，这时序参量或  $m(\mathbf{x})$  很小。定义朗道自由能：

$$\psi(m(\mathbf{x}), h(\mathbf{x})) = \frac{1}{2} |\nabla m(\mathbf{x})|^2 - m(\mathbf{x}) h(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} r_0 m^2(\mathbf{x}) + s_0 m^3(\mathbf{x}) + u_0 m^4(\mathbf{x}) + \dots$$

假设外场  $h(\mathbf{x}) \equiv H/(k_B T)$  很弱，因此只考虑线性项。由  $m(\mathbf{x})$  的空间反演不变性（ $H=0$  时）， $m$  的所有奇次项的系数应为零。假设  $u_0$  和温度无关，令

$$\begin{cases} r_0 = a_0 t & (a_0 > 0) \\ u_0 > 0 \end{cases}$$

这里  $t$  是约化温度。而系统哈密顿量可写为： $E[m, H] = \int d^3x \psi(m(\mathbf{x}), h(\mathbf{x}))$  它是  $m(\mathbf{x})$  及其共轭场  $H(\mathbf{x})$  的泛函。

在**平均场理论**里，朗道假定临界点附近朗道自由能可写为

$$\psi(m, h) = \frac{1}{2} r_0 m^2 + u_0 m^4 - m h,$$

这里  **$m$  是均匀序参量密度**，即  $m(\mathbf{x})$  各处相等，外磁场也为**均匀外场**。这样，哈密顿量为

$$E[m, H] = \int d^3x \left( \frac{1}{2} r_0 m^2 + u_0 m^4 - m h \right).$$

因而配分函数为： $Z = \int (Dm) e^{-E[m, H]}.$

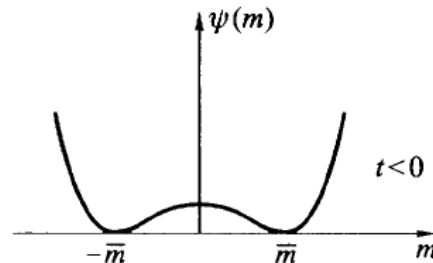
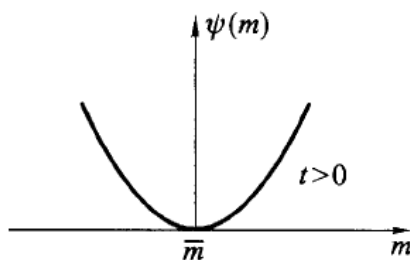
上面的(Dm)代表对m的泛函积分。我们可以用**z中最大的一项代替泛函积分**来作近似。一般来说，这项需满足：

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi(m, h)}{\partial m} \Big|_{\bar{m}} = 0 \\ \frac{\partial^2 \psi(m, h)}{\partial m^2} \Big|_{\bar{m}} > 0 \end{cases}$$

把朗道自由能代入上式，可得(\*)式：
$$\begin{cases} r_0 \bar{m} + 4u_0 \bar{m}^3 - h = 0 \\ r_0 + 12u_0 \bar{m}^2 > 0 \end{cases}$$

解之，当h=0时我们有（下式及右图）

$$\bar{m} = \begin{cases} 0 & (\text{for } t > 0) \\ \pm \left( \frac{a_0}{4u_0} \right)^{\frac{1}{2}} |t|^{\frac{1}{2}} & (\text{for } t < 0) \end{cases}$$



由此可得临界指数 $\beta=1/2$ 。

在(\*)式中对磁场求微分，可得磁化率：

$$\chi_T = \frac{1}{r_0 + 12u_0 \bar{m}^2} = \begin{cases} (a_0)^{-1} |t|^{-1} & (\text{for } t > 0) \\ \frac{1}{4} (a_0)^{-1} |t|^{-1} & (\text{for } t < 0) \end{cases}$$

由此得临界指数 $\gamma=1$ 。

在临界点有t=0，由(\*)式可得态方程： $\bar{m}(t=0, h) = (4u_0)^{-1/3} h^{1/3}$ 。

因此临界指数 $\delta=3$ 。

由(\*)可得朗道自由能：
$$\psi(\bar{m}, 0) = \begin{cases} 0 & (\text{for } t > 0) \\ \frac{3a_0^2}{16u_0} |t|^2 & (\text{for } t < 0) \end{cases}$$

对t微分可得热容：

$$C = -T \frac{\partial^2 \psi}{\partial T^2} = \begin{cases} 0 & (\text{for } t > 0) \\ \frac{3a_0^2}{8u_0} \frac{T}{T_c^2} & (\text{for } t < 0) \end{cases}$$

得临界指数 $\alpha=0$ 。

再考虑与关联函数和关联长度相关的临界指数，为此我们需考虑 $m(\mathbf{x})$  [有空间涨落]。哈密顿量写为：

$$E[m(\mathbf{x}), H] = \beta \hat{\mathcal{H}} = \int d^d x \psi(m(\mathbf{x}), h(\mathbf{x})) = \int d^d x \left[ \frac{1}{2} r_0 m^2(\mathbf{x}) + u_0 m^4(\mathbf{x}) - m(\mathbf{x}) h(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} |\nabla m(\mathbf{x})|^2 \right]$$

极值条件为：

$$\frac{\delta E[m(\mathbf{x}), H(\mathbf{x})]}{\delta m(\mathbf{x})} = 0.$$

利用  $\frac{\delta}{\delta m(\mathbf{x})} \int d^d x' m(\mathbf{x}') = 1$ ,  $\frac{\delta}{\delta m(\mathbf{x})} m(\mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ ,

和  $\frac{\delta}{\delta m(\mathbf{x})} \int d^d x' \frac{1}{2} |\nabla m(\mathbf{x}')|^2 = -\nabla^2 m(\mathbf{x})$ ,

我们有： $(\nabla^2 - r_0) m(\mathbf{x}) - 4 u_0 m^3(\mathbf{x}) = -h(\mathbf{x})$ .

上式对 $h(\mathbf{x}')$ 求导可得响应函数 $\chi_T(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ 的方程：

$$[(\nabla^2 - r_0) - 12 u_0 m^2(\mathbf{x})] \chi_T(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}').$$

把前面所得的 $m$ 的值代入，解方程得 $\chi_T(\mathbf{k}) = \frac{1}{k^2 + \xi_{\pm}^{-2}}$ ，其中  $\begin{cases} \xi_+ = (a_0 t)^{-\frac{1}{2}} & (\text{for } t > 0) \\ \xi_- = (-2 a_0 t)^{-\frac{1}{2}} & (\text{for } t < 0) \end{cases}$

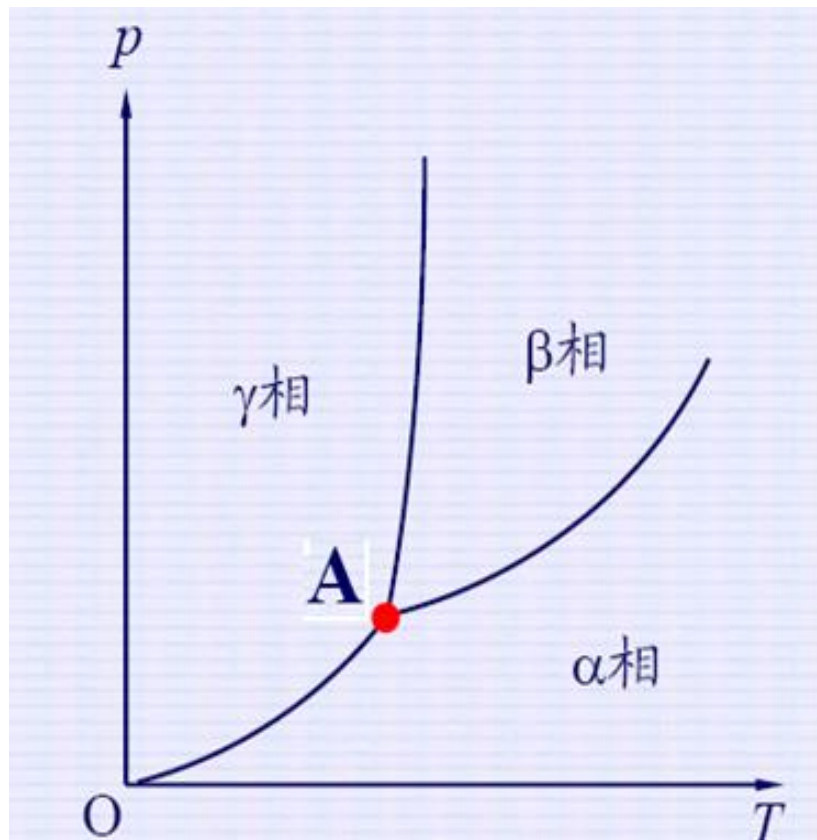
因此关联长度临界指数  $\nu = 1/2$ 。转到 $x$ 空间，有

$$\chi_T(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d k \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{k^2 + \xi^{-2}} \xrightarrow{x \rightarrow \infty} x^{2-d} e^{-x/\xi}$$

由涨落耗散定理，有  $\Gamma(\mathbf{x}) \sim \chi_T(\mathbf{x})/\beta \sim x^{2-d} e^{-x/\xi}/\beta \sim \frac{e^{-x/\xi}}{x^{d-2+\eta}}$ .

因此关联函数临界指数  $\eta = 0$ .

三相点示意图：





## 平均场的三相点理论

这里我们考虑更复杂一点的情形，即自由能到 $m$ 的6次：

$$\psi(m, h) = \frac{1}{2}am^2 + \frac{1}{4}bm^4 + \frac{1}{6}cm^6 - mh.$$

这时我们假定 $c$ 是正的，但 $a$ 和 $b$ 可随温度变化变号。我们来考察一下外场 $h=0$ 时的相变的特性。我们有：

$$\psi'(m) = am + bm^3 + cm^5, \quad \psi''(m) = a + 3bm^2 + 5cm^4.$$

对应于 $\psi' = 0$  的五个根为： $\bar{m} = 0, \pm m_+, \pm m_-$ , where  $m_{\pm}^2 = \frac{1}{2c} (-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac})$ .

现在我们看一下 $\psi$ 的最小值随 $a, b$ 取值的变化情况。注意到 $\psi''(0) = a$ ，因此当 $a < 0$ 时最小值必然在 $\pm m_{\pm}$ ，把值代入我们有：

$$\psi''(m_{\pm}) = \pm \frac{1}{c} \sqrt{b^2 - 4ac} m_{\pm}^2.$$

由此可见只有  $m_+$  对应于极小值。

若 $a > 0$ ：这时 $\bar{m} = 0$  是一个极小值，但并不见得是最小值：

- 1) 若 $b > 0$ ，由上易知  $m_{\pm}$  是复数，因此唯一的极小值是 $\bar{m} = 0$ ；
- 2) 若 $b < 0$ ，我们三个极小值： $\bar{m} = 0, \pm m_+$ 。当 $\psi(m_+) = 0$  时三个极小取值相同。这时有：

$$m_+^2 = -\frac{4a}{b}.$$

再利用  $m_+^2$  的定义式我们发现： $b = -4\sqrt{ca/3}$ 。这是一阶相变线。在线上 $\bar{m}$  可以有一个跳跃（注意 $\bar{m}$ 是自由能对广义力 $h$ 的一阶导数）： $0 \iff \pm m_+$ 。

$$\Delta m = \left(-\frac{4a}{b}\right)^{1/2} = \left(\frac{3a}{c}\right)^{1/4}.$$

相变随 $a, b$ 变化图(右: 2D, 下: 3D, 包括  $\bar{m}$ )。

**三相点:**  $a=0, b=0$ 。在三相点的临界指数为:

$$\alpha = 1/2, \beta = 1/4, \gamma = 1, \delta = 5.$$

**Crossover区** ( $a < 0, b > 0$ ):

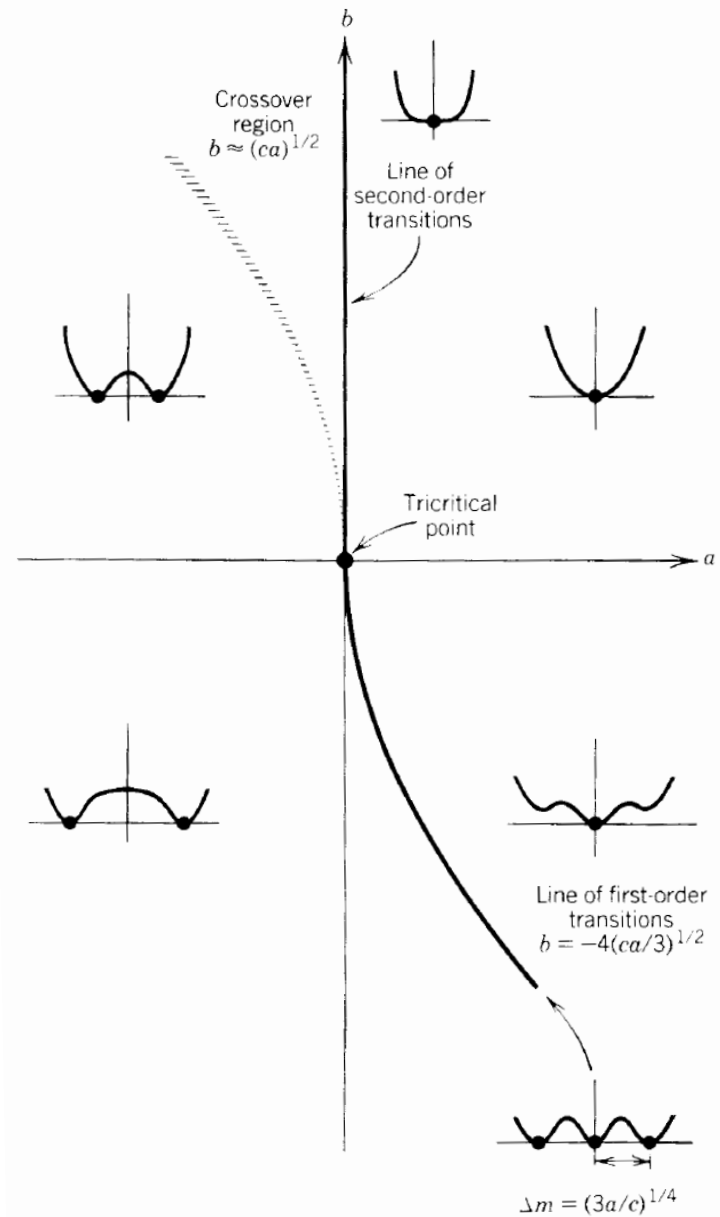
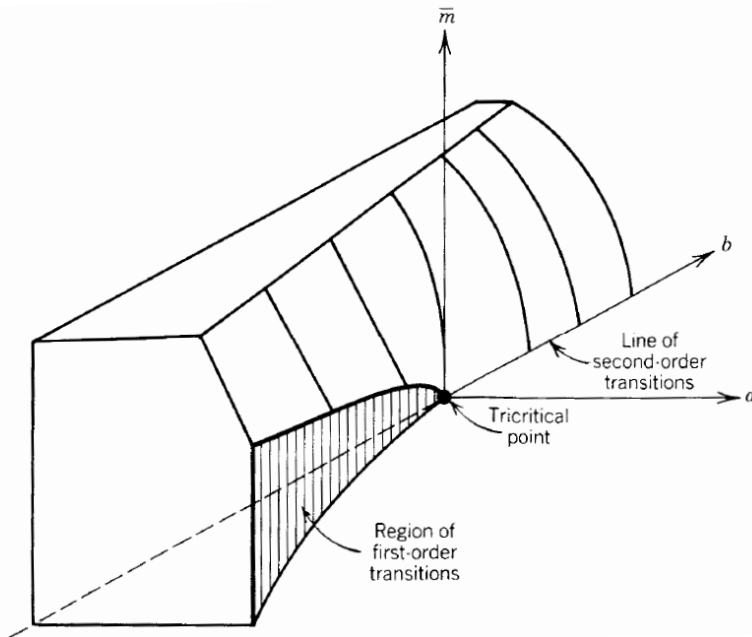
$\bar{m}$  由下式定义:

$$\psi'(\bar{m})/\bar{m} = a + b\bar{m}^2 + c\bar{m}^4 = 0$$

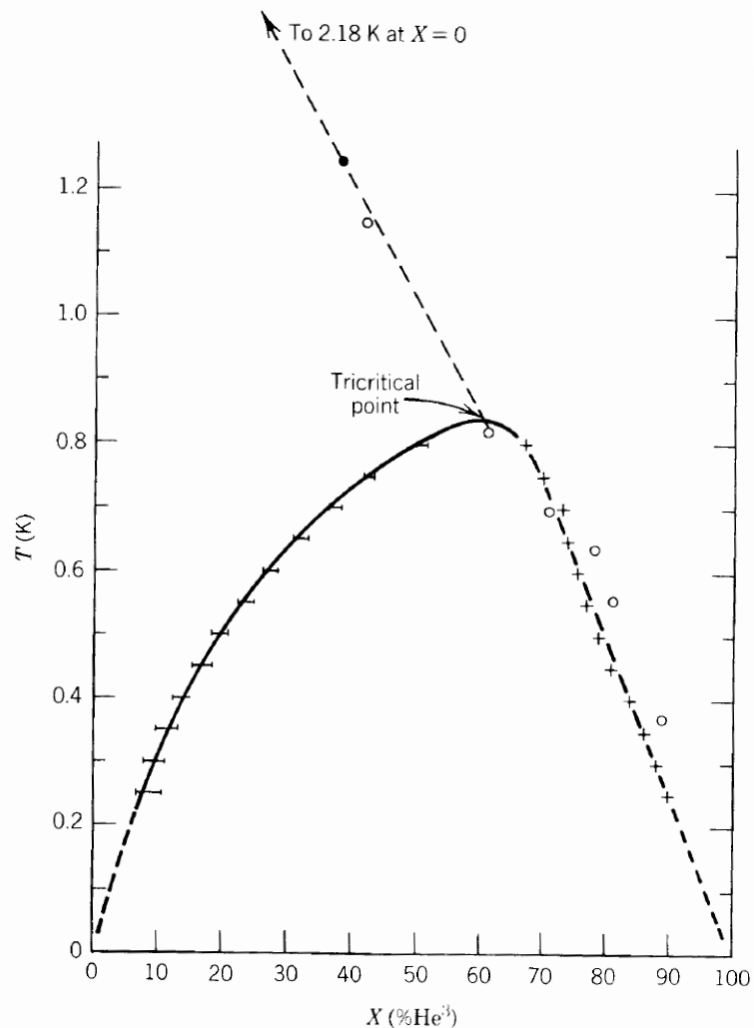
当2次项重要时,是经典的二阶相变,反之则为三相行为。二次项重要时有:

$$b\bar{m}^2 \gg c\bar{m}^4 \implies b \gg \sqrt{|a|c}.$$

因此  $b \approx \sqrt{|a|c}$  为两种行为分界线。



## 三相点的一个例子



**Fig. 17.5** Experimental phase diagram of the liquid  $\text{He}^4$ - $\text{He}^3$  mixture.

这里  $\text{He}^3$  混杂度  $x$  看起来也像是一个序参量 (对比第一节的气液相变中虚线)!

更进一步，除了(m,h)这一套序参量和广义力组合外我们可以再引入辅助序参量x和对应的广义力Δ，于是我们可写自由能为(这里已令h=0)：

$$G(m, \Delta, T)/N = a(T, \Delta) + \frac{1}{2}b(T, \Delta)m^2 + \frac{1}{4}c(T, \Delta)m^4 + \frac{1}{6}d(T, \Delta)m^6.$$

二阶临界线由 $b(T, \Delta) = 0$ 给出。三相点由 $b(T, \Delta) = c(T, \Delta) = 0$ 给出，这是一个点 $(T_t, \Delta_t)$ 。

• 在二阶临界线上(右图虚线),我们有:

$$\left. \frac{d\Delta}{dT} \right|_{crit} = - \frac{\frac{\partial b}{\partial T} \Big|_{\Delta}}{\frac{\partial b}{\partial \Delta} \Big|_T} \equiv - \frac{b_T}{b_{\Delta}}.$$

右图实线为一阶相变线,由  $b(\Delta, T) - \frac{3c^2(\Delta, T)}{16d(\Delta, T)} = 0$ .  
我们发现:

$$\left. \frac{d\Delta}{dT} \right|_{first\ order} = - \frac{b_T d + d_T b - \frac{3}{8} c c_T}{b_{\Delta} d + d_{\Delta} b - \frac{3}{8} c c_{\Delta}}.$$

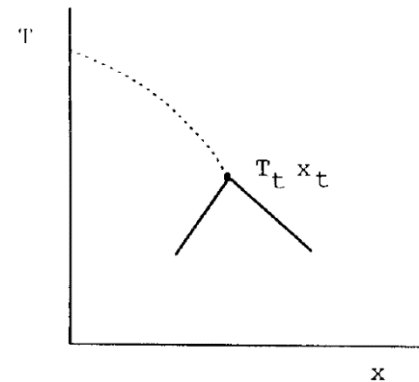
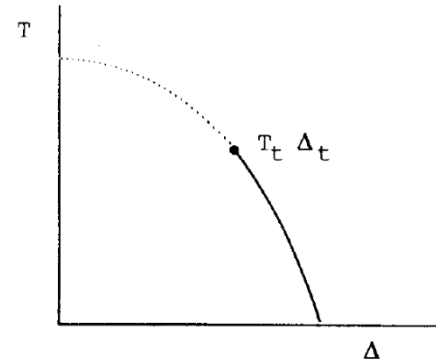
由此容易发现当 $(T, \Delta) \rightarrow (T_t, \Delta_t), c \rightarrow 0, b \rightarrow 0$ 时两个微分结果相同。

• 此外,与磁系统类似,我们可写  $x = - \frac{1}{N} \frac{\partial G}{\partial \Delta} \Big|_T$ ,

一阶相变发生条件为:  $G(m, T, \Delta) = G(0, T, \Delta)$  和  $\frac{\partial G}{\partial m} \Big|_{T, \Delta} = 0$ .

我们发现沿一阶相变线临近三相点时, x的值有一个跳变(作为练习):

$$\delta x = - \frac{3}{8d} (b_{\Delta} c + c_{\Delta} b) + O(c^2).$$



## 8.6 平均场理论的失效，Ginzburg判据

这里我们考虑朗道平均场理论适用的范围，这要求  $m(\mathbf{x})$  的（在关联长度内的）涨落要足够小。即要求无量纲误差量：

$$E_{LG} = \frac{\Gamma(\xi)}{\bar{m}^2} \sim \frac{\xi^{2-d}}{[a_0/(4u_0)|t|]} \ll 1$$

由于  $\xi \sim (a_0|t|)^{-1/2}$ ，这导致  $u_0[a_0|t|]^{(d-4)/2} \ll 1$

在（二阶相变）临界点附近  $t \rightarrow 0$  时只有  $d > d_c = 4$  这一条件才满足，这就是Ginzburg判据。对三相点，Ginzburg判据变为  $d > d_t = 3$ 。 $d_c, d_t$  也称为上临界维度（upper critical dimension）。

## 8.7 标度理论

准备知识：

- 齐次函数：其定义为： $f(\lambda x, \lambda y) = \lambda^p f(x, y)$ ，这里 $\lambda$ 是任意的， $p$ 为幂指数。易知

$$f(x, y) = y^p f(x/y, 1) = y^p F_1(x/y) = x^p f(1, y/x) = x^p F_2(y/x).$$

- 广义齐次函数：定义为： $f(\lambda^a x, \lambda^b y) = \lambda f(x, y)$ ，这里 $a$ 和 $b$ 是任意的定值。于是

$$f(x, y) = y^{1/b} f(y^{-a/b} x, 1) = y^{1/b} F_1(y^{-a/b} x) = x^{1/a} f(1, x^{-b/a} y) = x^{1/a} F_2(x^{-b/a} y).$$

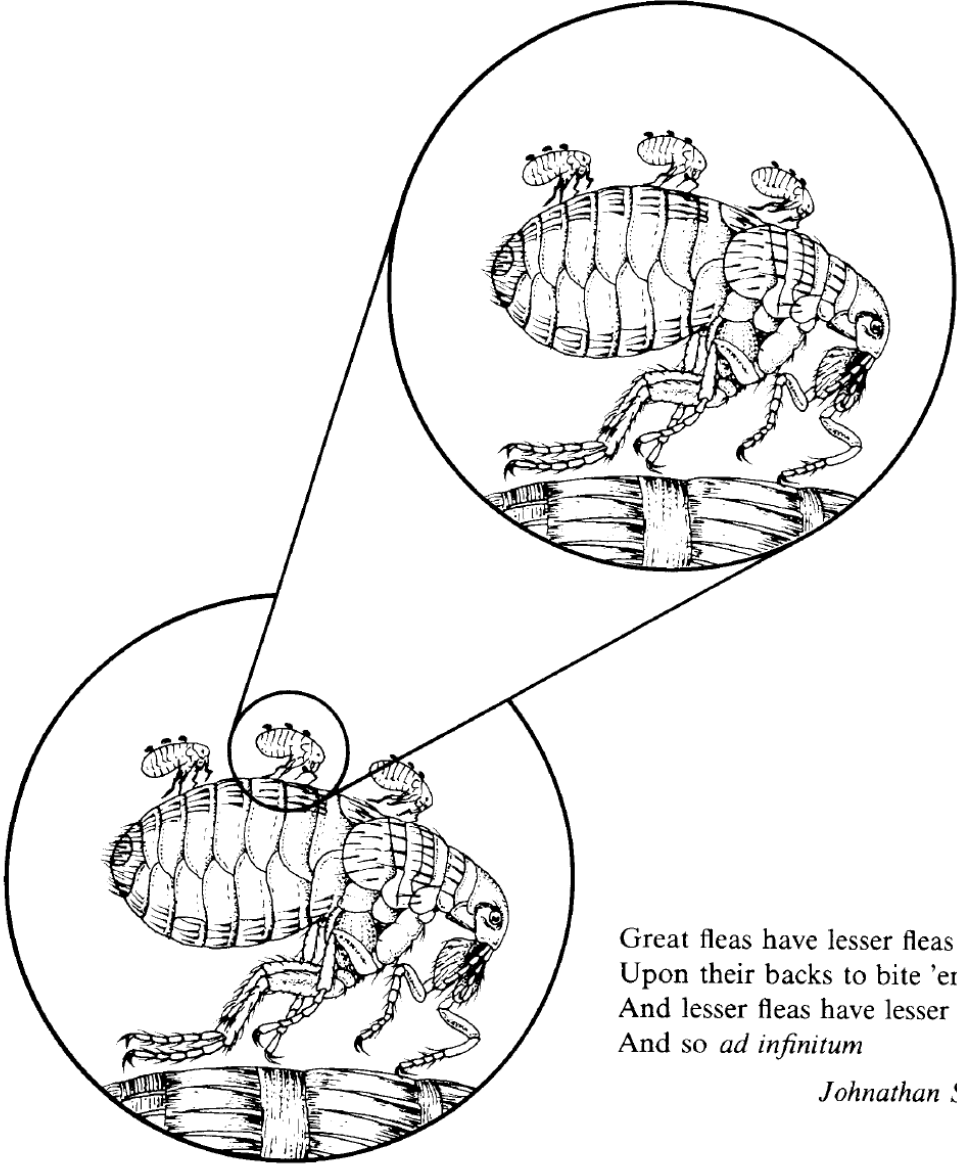
标度假说认为在相变点附近，吉布斯自由能 $G$ 的奇异部分是约化温度 $t$ 和 $h=H/(k_B T)$ 的广义齐次函数，即

$$G(\lambda^{y_t} t, \lambda^{y_h} h) = \lambda G(t, h)$$

于是有：

$$G(t, h) = \begin{cases} t^{\frac{1}{y_t}} G_+(t^{-\frac{y_h}{y_t}} h) & (\text{for } t > 0) \\ (-t)^{\frac{1}{y_t}} G_-((-t)^{-\frac{y_h}{y_t}} h) & (\text{for } t < 0) \end{cases} \quad \text{and } G(t, h) = h^{\frac{1}{y_h}} G_{\pm}^2(h^{-\frac{y_t}{y_h}} t).$$

标度不变性



Great fleas have lesser fleas  
Upon their backs to bite 'em.  
And lesser fleas have lesser still.  
And so *ad infinitum*

*Johnathan Swift*

**Fig. 16.3** Scale invariance.

- 对  $h$  微分可得磁化强度  $M = -\frac{\partial G}{\partial h} = |t|^{\frac{1-y_h}{y_t}} G'_{\pm}(|t|^{-\frac{y_h}{y_t}} h)$   
 $h=0$  时, 有  $M = |t|^{\frac{1-y_h}{y_t}} G'_{\pm}(0) \propto |t|^{\frac{1-y_h}{y_t}}$

比较  $M \propto |t|^{\beta}$  得  $\beta = \frac{1-y_h}{y_t}$

- 磁化强度对  $h$  微分得等温磁化率:

$$\chi_T = \left. \frac{\partial M}{\partial h} \right|_{h=0} = -\left. \frac{\partial^2 G}{\partial h^2} \right|_{h=0} = |t|^{\frac{1-2y_h}{y_t}} G''_{\pm}(0) \propto |t|^{\frac{1-2y_h}{y_t}}$$

与  $\chi_T \propto |t|^{-\gamma}$  对比后得  $\gamma = \frac{2y_h - 1}{y_t}$

- 吉布斯自由能对  $t$  微分两次, 可得热容:  $C \sim -T \left. \frac{\partial^2 G}{\partial t^2} \right|_{h=0} = |t|^{\frac{1}{y_t}-2} G_{\pm}(0) \propto |t|^{\frac{1}{y_t}-2}$   
 与  $C \propto |t|^{-\alpha}$  对比后得  $\alpha = 2 - \frac{1}{y_t}$

- 吉布斯自由能对  $h$  微分, 并取  $t=0$ , 可得  $M(0, h) = -\left. \frac{\partial G}{\partial h} \right|_{t=0} = h^{\frac{1}{y_h}-1} G_{\pm}^2(0) \propto |h|^{\frac{1-y_h}{y_h}}$

与  $M \propto h^{1/\delta}$  对比后得  $\delta = \frac{y_h}{1-y_h}$

由以上四式可得两个标度律:

$$\gamma = \beta(\delta - 1) \quad (\text{Widom})$$

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (\text{Rushbrooke})$$

对关联长度有  $\xi \sim t^{-\nu}$ 。由于关联长度是临界点附近唯一有关的特征长度, 我们可以假设在空间线度为  $\xi$  的体积元内的吉布斯自由能为  $k_B T$  的量级。于是总自由能的量级为  $k_B T V / \xi^d$ , 因此我们有当  $t \rightarrow 0$  时,  $G \sim \xi^{-d} \sim |t|^{\nu d}$ , 对比前面的结果有

$$\nu d = 2 - \alpha \quad (\text{Josephson})$$

下面考虑关联函数 $\Gamma$ ，我们有： $\Gamma\left(\frac{r}{\lambda}, \lambda^y t\right) = \lambda^{2(d-x)} \Gamma(r, t)$  (for all  $\lambda$ )

这里 $y = y_t d, x = y_h d$ ，这个标度形式可在特殊情况下从Ising系统的哈密顿量得出

$$\Gamma(r, t) = t^{\frac{2(d-x)}{y}} \Gamma\left(r t^{\frac{1}{y}}, 1\right)$$

又令 $\lambda=r$ ，有  $\Gamma(1, r^y t) = r^{2(d-x)} \Gamma(r, t)$

把前面的等式代入有

$$\Gamma(r, t) = r^{-\frac{2d}{1+\delta}} \Gamma\left(1, r^{\frac{d}{\beta(1+\delta)}} t\right)$$

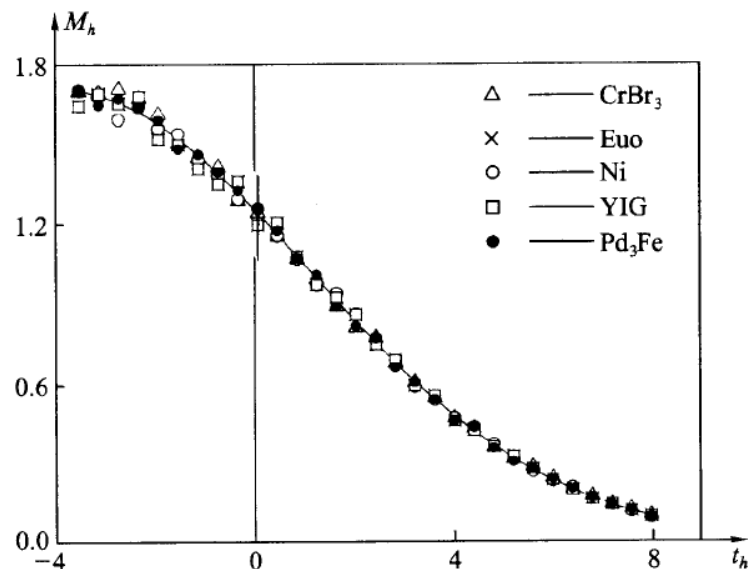
在临界点， $\Gamma(r, 0) = r^{-\frac{2d}{1+\delta}} \Gamma(1, 0) \sim r^{-\frac{2d}{1+\delta}}$

对比 $\Gamma(r, 0) = 1/r^{d-2+\eta}$ ，得标度律： $\gamma = \nu(2 - \eta)$  (Fisher)

此标度律也可由涨落耗散定理（磁化率和关联函数关系）推出。

## 8.8 普适性

人们发现很多不同系统的连续相变有普适性：可以把相变分为有限的几大类，同一类的各系统相变时的临界指数相同（如右图例子）。可在重整化群基础上得到解释。





## 8.9 自发对称破缺

### • 哈密顿量的对称性（几个例子）：

#### 1. 陷阱中的有弱相互作用的玻色气体：

$$\hat{H} = \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{x}) \right] \hat{\psi}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \int d^3x \int d^3x' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}') U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\psi}(\mathbf{x}') \hat{\psi}(\mathbf{x}).$$

这里  $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})$  和  $\hat{\psi}(\mathbf{x})$  分别为坐标表象中的玻色粒子的产生和湮灭算符。哈密顿量在下列规范变换下不变： $\hat{\psi}(\mathbf{x}) \rightarrow e^{i\alpha} \hat{\psi}(\mathbf{x})$

#### 2. 海森堡铁磁系统（连续自旋系统）： $\hat{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j$

其中自旋可在自旋空间任意取向。哈密顿量在三维自旋空间的转动下不变，因此有O(3)变换下的不变性。

#### 3. 单轴Ising铁磁系统（离散自旋系统）： $\hat{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j$

其中自旋  $s_i = \pm 1$  且ij代表两个最近邻。哈密顿量在所有自旋  $s \rightarrow -s$  的变换下不变，因此有序参量  $M \rightarrow -M$  的不变性。

若我们看  $\hat{\psi}(\mathbf{x})$  和s的统计平均值：

$$\langle \hat{\psi}(\mathbf{x}) \rangle = \frac{\text{Tr} [e^{-\beta \hat{H}(\hat{\psi})} \hat{\psi}(\mathbf{x})]}{\text{Tr} [e^{-\beta \hat{H}(\hat{\psi})}]}, \quad \langle s \rangle = \frac{\text{Tr} [e^{-\beta \hat{H}(s)} s]}{\text{Tr} [e^{-\beta \hat{H}(s)}]}$$

由于哈密顿量的对称性，上面两式应为零，且这与温度(高温或低温)无关。但在实验里，我们知道低温( $T < T_c$ )下会出现  $\langle \psi \rangle \neq 0$  和  $\langle M \rangle / N = \langle S \rangle \neq 0$ ，即系统从高对称性态变为低对称性态。**如何解释**？----自发对称破缺，即系统的对称性可能自发地发生破缺。

• **自发对称破缺**: 对**宏观系统** (即**热力学极限**下), 如**内部存在简并基态**, 系统在低温下由于某种因素可处于某一个基态上, 而转到其它基态的概率为零。

考虑一个宏观连续对称自旋系统加上一个小磁场 (指向任意一个确定的方向), 在极限  $B \rightarrow 0$  条件下  $M$  的系统平均有两种作法。虽然 (不正确作法): 
$$\lim_{V \rightarrow \infty} \lim_{B \rightarrow 0} \frac{1}{V} \frac{\text{Tr}[e^{-\beta(\hat{H}-MB)} M]}{\text{Tr}[e^{-\beta(\hat{H}-MB)}]} = 0$$

但 (正确作法): 
$$\frac{\langle M \rangle}{V} \equiv \lim_{B \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \frac{\text{Tr}[e^{-\beta(\hat{H}-MB)} M]}{\text{Tr}[e^{-\beta(\hat{H}-MB)}]} \neq 0$$

极限次序是非常重要的。以Ising系统为例, 我们研究有限和无限系统的吉布斯自由能密度  $G$  和序参量磁化强度  $M$ :

**有限体积**下, 由哈密顿量的对称性有:

$$\hat{H}(J, \{s_i\}, B) = \hat{H}(J, \{-s_i\}, -B)$$

于是  $G$  有如下对称性:

$$G(K, h) = G(K, -h)$$

这里

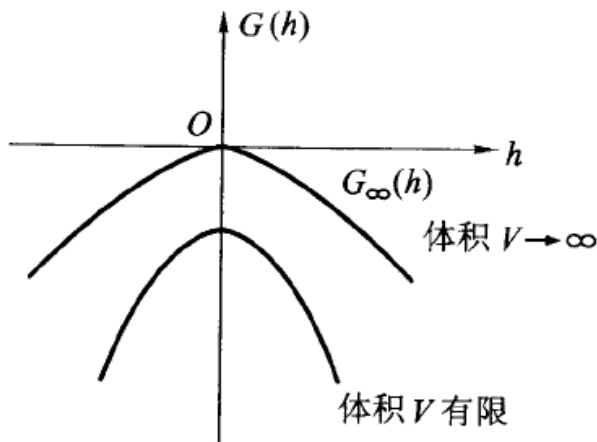
$$K = J/(k_B T), h = B/(k_B T)$$

因此对任何  $h$ , 有

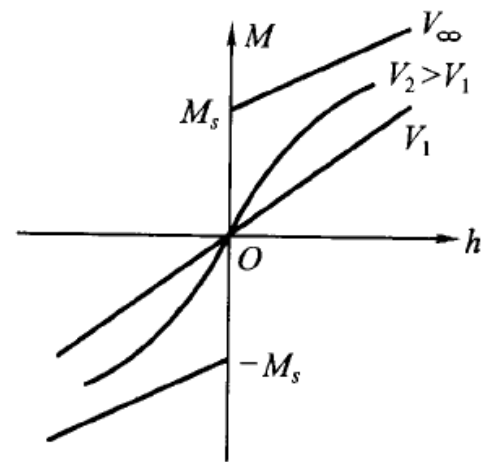
$$M(h) = -\frac{\partial G(K, h)}{\partial h} = -\frac{\partial G(K, -h)}{\partial h} = \frac{\partial G(K, -h)}{\partial(-h)} = -M(-h).$$

因此当  $h=0$  时, 也有  $M(0) = -M(0) = 0$ 。

但**无限体积**的吉布斯自由能  $G_\infty(h)$  和有限体积的情形不一样 (见上图),  $G_\infty(h)$  在  $h=0$  处是不光滑的, 由于一阶导数的不连续使得:  $M_s = -\lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{G_\infty(h)}{\partial h} \neq 0$  和  $-M_s = -\lim_{h \rightarrow 0^-} \frac{G_\infty(h)}{\partial h} \neq 0$  即**热力学极限**下会出现非零自发磁化强度。书上p.227页对Ising系统给出了一个例子。



(a)



(b)

## 8.10 连续对称系统的Goldstone定理

上节我们举了离散对称系统自发对称破缺的一个例子（Ising系统）。现在我们要来看一个有连续对称系统的自发对称破缺。该系统中存在无数个简并基态，这些基态彼此正交而系统只取其中一个。

我们在本节将证明（Goldstone定理）：自发对称破缺时系统中会出现由局域基态在空间逐渐变化而形成的激发态（Goldstone激发），这样的激发态是波长很长的波，（波长趋于无穷大时）其激发能几乎为零。这使处于对称破缺的低对称态可能恢复到高对称态。在铁磁体中这种激发的模式（Goldstone模）是在系统中形成的自旋波。

考虑有O(n)对称的自旋系统（如海森堡模型），自旋有n个分量  $\mathbf{s} = (s_1, s_2, \dots, s_n)$ ，系统的朗道自由能  $\psi(\mathbf{s}, h)$  及相应的哈密顿量为

$$-H = \int d^d r \psi(\mathbf{s}, h) = \int d^d r \left[ \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{s})^2 + \frac{1}{2} r_0 s^2 + \frac{1}{4} u_0 s^4 - h s \right]$$

这里我们用  $u_0/4$  代替了  $u_0$ ，哈密顿量已包括了因子  $(-\beta)$ ，上面各项的具体形式为：

$$(\nabla \mathbf{s})^2 \equiv \sum_{i=1}^d \sum_{\alpha=1}^n \left[ \frac{\partial s_\alpha(r)}{\partial x_i} \right]^2, s^2 \equiv \sum_{\alpha=1}^n [s_\alpha(r)]^2, s^4 \equiv (s^2)^2$$

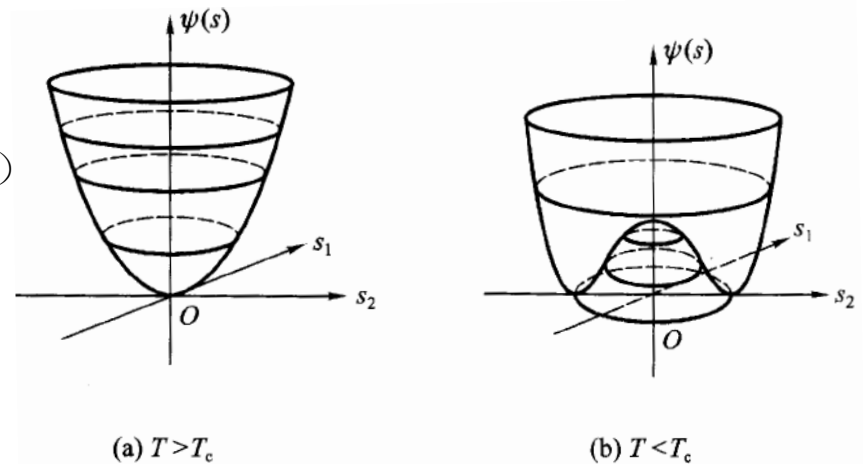
配分函数是泛函积分： $Z \equiv \int \prod_{\alpha=1}^n Ds_\alpha e^H$

我们先考虑  $\mathbf{s}$  在坐标空间均匀的情形（即  $\nabla \mathbf{s} = 0$ ），同时令  $\mathbf{h} = 0$ ，这时朗道自由能为（注意  $r_0 = at$ ）

$$\psi(\mathbf{s}) = \frac{1}{2} r_0 s^2 + \frac{1}{4} u_0 s^4$$

因此有（见右图，显示O(2)对称性）：

- $t > 0$  ( $T > T_c$ )，在  $\mathbf{s} = 0$  处有极小值
- $t < 0$  ( $T < T_c$ )，极小值在以  $s = \sqrt{-r_0/u_0}$  为半径的圆上，为无穷简并，圆上各点为不同的简并态。



现在我们来分析系统发生自发对称破缺时的涨落，为此我们考虑系统的响应函数---磁化率。

• 设在自旋空间里加上沿  $\mathbf{n} = (1, 0, 0, \dots, 0)$  方向的外磁场，自旋沿此方向磁化。磁化强度为

$$m_\alpha = \langle s_\alpha(\mathbf{r}) \rangle \equiv mn_\alpha$$

系统的两点涨落关联函数为：

$$G_{1,1}(\mathbf{r}) = \langle (s_1(\mathbf{r}_1) - \langle s_1(\mathbf{r}_1) \rangle)(s_1(\mathbf{r}_2) - \langle s_1(\mathbf{r}_2) \rangle) \rangle$$

$$G_{\alpha,\beta}(\mathbf{r}) = \langle (s_\alpha(\mathbf{r}_1) - \langle s_\alpha(\mathbf{r}_1) \rangle)(s_\beta(\mathbf{r}_2) - \langle s_\beta(\mathbf{r}_2) \rangle) \rangle$$

$$\begin{aligned} \text{由 } \langle (s_\alpha(\mathbf{k})s_\beta(\mathbf{k}')\delta_{\alpha\beta}) \rangle &= \int d^d r_1 d^d r_2 \delta_{\alpha\beta} \langle s_\alpha(\mathbf{r}_1)s_\beta(\mathbf{r}_2) \rangle e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_2} \\ &= \int d^d r \delta_{\alpha\beta} G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \int d^d r_2 e^{-i(\mathbf{k}'+\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_2} = G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}',0} V \end{aligned}$$

可得在傅里叶空间有：  $VG_{\parallel}(\mathbf{k}) = \langle |s_1(\mathbf{k})|^2 \rangle$

$$VG_{\perp}(\mathbf{k}) = \langle s_\alpha(\mathbf{k})s_\beta(\mathbf{k}') \rangle \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}',0} \quad (\alpha, \beta \geq 2)$$

由涨落耗散定理可得静磁化率：

$$\chi_{\parallel} = \frac{1}{k_B T} G_{\parallel}(0), \quad \chi_{\perp} = \frac{1}{k_B T} G_{\perp}(0)$$

• 对一般情形，我们可以定义磁化率张量：  $\chi_{\alpha\beta} = -\frac{\partial^2 \psi}{\partial h_\alpha \partial h_\beta} \equiv -\frac{\partial m_\alpha}{\partial h_\beta}$

其中  $\psi$  是朗道自由能，这个张量描写由于外场的  $\beta$  分量的改变引起的磁化强度的  $\alpha$  分量的变化。

由于哈密顿量是  $O(n)$  对称的，故  $\psi$  和  $\mathbf{h}$  的方向无关，因此一般有

$$\psi = \psi(h), \quad \mathbf{h} = h\mathbf{n} = (hn_1, hn_2, \dots, hn_n), \quad h = \left[ \sum_{\alpha=1}^n h_\alpha^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

利用  $\frac{\partial}{\partial h_\beta} = \frac{\partial h}{\partial h_\beta} \frac{\partial}{\partial h} = \frac{h_\beta}{h} \frac{\partial}{\partial h}$ ，我们有

$$\begin{aligned} \chi_{\alpha\beta} &= -\frac{\partial}{\partial h_\alpha} \left( \frac{h_\beta}{h} \frac{\partial \psi}{\partial h} \right) = -\delta_{\alpha\beta} \frac{1}{h} \frac{\partial \psi}{\partial h} + \frac{h_\alpha h_\beta}{h^3} \frac{\partial \psi}{\partial h} - \frac{h_\alpha h_\beta}{h^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial h^2} \\ &= -\frac{h_\alpha h_\beta}{h^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial h^2} - \frac{1}{h} \frac{\partial \psi}{\partial h} \left( \delta_{\alpha\beta} - \frac{h_\alpha h_\beta}{h^2} \right) = n_\alpha n_\beta \chi_{\parallel}(h) + \chi_{\perp}(h) (\delta_{\alpha\beta} - n_\alpha n_\beta) \end{aligned}$$

这里  $\chi_{\parallel} = -\frac{\partial^2 \psi}{\partial h^2}$  和  $\chi_{\perp} = -\frac{1}{h} \frac{\partial \psi}{\partial h} = -\frac{m}{h}$

若磁场 $\mathbf{h}$ 和 $\mathbf{m}$ 同向，上式中取 $\alpha=\beta=1$ ，磁化率由 $\chi_{\parallel}$ 给出；若 $\mathbf{h}$ 垂直于 $\mathbf{m}$ ，则可取 $\alpha=1, \beta \neq 1$ 和 $h_{\beta}=0$ ，此时磁化率由 $\chi_{\perp}$ 给出。

从上面的式子可以看出，在 $T < T_c$ 的情况下，当 $\mathbf{h}=\mathbf{0}$ 时，由于系统处于有序相（ $m \neq 0$ ），有

$$[\chi_{\perp}(0)]^{-1} = 0 \text{ 和 } [G_{\perp}(k=0)]^{-1} = 0,$$

因此只要外场增加一个无穷小量就能使磁化强度的方向改变一个有限角度。

总之，我们发现，有 $O(n)$ 对称的系统发生自发破缺时有两类涨落：

- 1) 平行于自发磁化强度方向，即纵涨落，改变 $\mathbf{m}$ 的大小，需要付出有限能量；
- 2) 垂直于自发磁化强度方向，即横涨落，改变 $\mathbf{m}$ 的方向，不需付出能量。每个横涨落都有一个激发能几乎为零的激发模( $\mathbf{k}=\mathbf{0}$ )与之联系。对 $O(n)$ 对称系统，共有 $n-1$ 支这样的模。

为进一步观察这些模我们取磁化强度 $m \neq 0$ 方向为 $\mathbf{n} = (1, 0, 0, \dots, 0)$ ，由涨落 $\phi(\mathbf{r}) = (\mathbf{s}(\mathbf{r}) - \mathbf{m})/m$ 有

$$\mathbf{s} = \langle \mathbf{s} \rangle + m\phi_{\parallel} \mathbf{n} + m\phi_{\perp} = m(\mathbf{n} + \phi_{\parallel} \mathbf{n} + \phi_{\perp}), \quad \phi_{\perp} = (0, \phi_2, \dots, \phi_n)$$

于是在 $T < T_c$ ，系统的哈密顿量一般可写为（令 $\mathbf{h}=\mathbf{0}$ ）

$$-H = \frac{m^2}{2} \int d^d r [(\nabla \phi_{\parallel})^2 + (\nabla \phi_{\perp})^2 + 2|r_0|\phi_{\parallel}^2] + O(\phi_{\parallel}^3, \phi_{\parallel}\phi_{\perp}^2)$$

在傅里叶空间里我们有：

$$\begin{aligned} -H &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \left[ \frac{1}{2} |\phi_{\parallel}(\mathbf{k})|^2 m^2 (2|r_0| + k^2) + \frac{1}{2} |\phi_{\perp}(\mathbf{k})|^2 m^2 k^2 \right] \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \left[ \frac{1}{2} |\phi_{\parallel}(\mathbf{k})|^2 G_{\parallel}^{-1}(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} |\phi_{\perp}(\mathbf{k})|^2 G_{\perp}^{-1}(\mathbf{k}) \right] \end{aligned}$$

这里 $G_{\parallel}$ 和 $G_{\perp}$ 分别为纵和横关联函数：

$$G_{\parallel}(\mathbf{k}) = \langle \phi_{\parallel}(\mathbf{k}) \phi_{\parallel}(-\mathbf{k}) \rangle = \langle |\phi_{\parallel}(\mathbf{k})|^2 \rangle = \frac{m^{-2}}{2|r_0| + k^2}, \quad G_{\perp}(\mathbf{k}) = \langle \phi_{\perp}(\mathbf{k}) \phi_{\perp}(-\mathbf{k}) \rangle = \langle |\phi_{\perp}(\mathbf{k})|^2 \rangle = \frac{m^{-2}}{k^2}$$

变换到坐标表象即有：

$$G_{\parallel}(\mathbf{r}) = \frac{m^{-2}}{(2\pi)^d} \int d^d k \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{2|r_0| + k^2} \propto e^{-r/\xi}, \quad G_{\perp}(\mathbf{r}) = \frac{m^{-2}}{(2\pi)^d} \int d^d k \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{k^2} \propto \int dk k^{d-1} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{k^2} \propto \frac{1}{r^p} \quad (d > 2)$$

## 8.11 空间维数和涨落

空间维数 $d$ 在相变里有很重要的作用。如对Ising模型，只有 $d>1$ 维的系统才能发生相变；理想波色气体只有 $d>2$ 维才能发生波色-爱因斯坦凝聚。

1) 在任何温度（除零温外）系统中都可能发生涨落。如系统由于对称破缺而出现有序态，该有序态必须对涨落是稳定的。

例子：对  $T < T_c$  的连续对称自旋系统（见上节），我们来看横涨落关联函数：

$$G_{\perp}(\mathbf{r}) = \frac{m^{-2}}{(2\pi)^d} \int d^d k \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{k^2} \propto \int dk k^{d-1} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{k^2}$$

若 $d \leq 2$ ，当 $k \rightarrow 0$ 时积分发散，这表明有序态将被长波涨落破坏；但对 $d > 2$ ，有序态对涨落是稳定的。故 $d=2$ 是能否产生相变的分界线，称为下临界维数（lower critical dimension）。

2) domain wall的影响：即低温时的长程序是否对domain wall的形成稳定。这里是从亥姆霍茨自由能 $F=U-TS$ 极小的观点分析。为此我们希望内能小而熵大。

(a) 离散自旋系统如Ising系统：假设系统是完全有序的，若出现了一个线度为 $L$ 的domain（磁畴），内能的增加和磁畴表面的自旋数 $L^{d-1}$ 成正比。若 $d=1$ ，创造 $N$ 个domains需要耗内能的量级为 $N$ ，但此时熵的增加量级为 $\ln N! \approx N \ln N$ ，因此自由能极小将意味着越来越多的domains被创造。因此长程序被破坏，此时相变不存在。

(b) 连续自旋系统：这时磁畴壁有一定厚度，而序参量在磁畴壁内外连续地变化。创造domain对内能的消耗粗略估计为

$$U \approx \int_{\text{wall}} (dx) |\nabla m(x)|^2 \propto \frac{\text{Volume of wall}}{L^2}$$

我们估计 $|\nabla m(x)|^2 \propto 1/L^2$ 是因为 $L$ 是仅有的相关的量。类似，domain wall的体积量级为 $L^d$ ，因此内能的增加 $U \propto L^{d-2}$ ，通过与前面类似的讨论我们发现下临界维数为 $d=2$ 。