量子统计

王延颋

2015 年 6 月 20 日

16. 重整化群

重整化群（Renormalization Group）方法可以用来准确地求出临界指数和标度律。

16.1. 卡丹诺夫变换

在临界点附近，可以对系统进行粗粒化处理，即把一个大块中的位点在粗粒化层面平均成一个位点。因为特征长度 ξ 趋于无穷，所以粗粒化后新的系统应该和原系统具有同样的性质。这一粗粒化的变换称为**卡丹诺夫变换**。

以伊辛模型为例，原系统哈密顿量为

$$H=-J\sum_{\langle i,j\rangle}s_i s_j-\mu_0 h\sum_{i=1}^{N}s_i \tag{16.1}$$

其中 $\langle\ \rangle$ 表示只有当 i 和 j 为临近格点时才进行求和运算（只计算一次），J 是相互作用能，h 是外磁场，μ_0 是磁矩。把该系统粗粒化成 b^d 大小的单元块（b 是一维上的位点数，d 是空间维数），第 I 块的自旋取值仍然是 ±1。忽略非近邻块间的相互作用，粗粒化系统的哈密顿量写成

$$H=-J'\sum_{<I,J>}s'_I s'_J-\mu_0 h'\sum_{I=1}^{N'}s'_I \tag{16.2}$$

经过变换后，系统的自旋数目 $N'=Nb^{-d}$，长度单位增加了 b 倍，新系统的关联长度为 $\xi'=\xi/b$。系统的自由能在临界点附近的奇异部分存在关系：

$$Nf\left(t,h\right)=N'f\left(t',h'\right)=\frac{N}{b^d}f\left(t',h'\right) \tag{16.3}$$

其中约化温度 $t=\dfrac{T-T_{\mathrm{c}}}{T_{\mathrm{c}}}$。$t'$ 和 h' 应该满足标度关系

$$t' = b^{y_t} t$$
$$h' = b^{y_h} h \tag{16.4}$$

其中 y_t 和 y_h 是待定的正常数，式(16.3)写为

$$f\left(t,h\right) = b^{-d} f\left(b^{y_t} t, b^{y_h} h\right) \tag{16.5}$$

令 $b = \left|t\right|^{-1/y_t}$ ， $\Delta \equiv y_h / y_t$， $2-\alpha \equiv d / y_t$ ，上式改写为

$$f\left(t,h\right) = \left|t\right|^{2-\alpha} AY_{\pm}\left(D\frac{h}{\left|t\right|^{\Delta}}\right) \tag{16.6}$$

其中普适函数 Y 对于 $\pm t$ 各有一个分支，这就是标度理论曾经给出的临界自由能奇异部分的表达式。由此可以得到热力学量相关的四个临界指数关于 y_t 和 y_h 的表达式：

$$\begin{aligned}
&\alpha = 2 - d / y_t \\
&\beta = 2 - \alpha - \Delta = \left(d - y_h\right) / y_t \\
&\gamma = -\left(2 - \alpha - 2\Delta\right) = \left(2y_h - d\right) / y_t \\
&\delta = \Delta / \beta = y_h / \left(d - y_h\right)
\end{aligned} \tag{16.7}$$

考虑粗粒化系统的关联长度

$$\xi' = b^{-1}\xi \tag{16.8}$$

要满足

$$\xi' \sim \left|t'\right|^{-\nu} \tag{16.9}$$

有

$$\left(\frac{\xi'}{\xi}\right) = \left(\frac{t'}{t}\right)^{-\nu} = b^{-\nu y_t} \tag{16.10}$$

比较式(16.8)和(16.10)，得到

$$\nu = 1 / y_t \tag{16.11}$$

由标度关系 $\gamma = \left(2-\eta\right)\nu$ 得到

$$\eta = d + 2 - 2y_h \tag{16.12}$$

再考虑关联函数

$$\begin{aligned} C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \langle s(\mathbf{r}_1) s(\mathbf{r}_2) \rangle \sim (r)^{-(d-2+\eta)} \\ C(\mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2') &= \langle s'(\mathbf{r}_1') s'(\mathbf{r}_2') \rangle \sim (r')^{-(d-2+\eta)} \end{aligned} \tag{16.13}$$

为使上两式一致，必须有

$$s'(\mathbf{r}') = b^{(d-2+\eta)/2} s(\mathbf{r}) \tag{16.14}$$

卡丹诺夫变换依然不能直接计算出临界指数，并且忽略了粗粒化层面出现的非近邻和多体相互作用。

16.2. 重整化群

以伊辛模型为例。为了计入非近邻及多体相互作用，把伊辛模型的配分函数扩展为

$$Z = \exp(-\beta F) = \sum_{\{s_i\}} \exp\left(-\beta H_{\{s_i\}}(\{K_\alpha\})\right) \tag{16.15}$$

其中 $\mathbf{K} = \{K_\alpha, \alpha = 0,1,2,\cdots\}$ 是决定哈密顿量的参数集合。相应的粗粒化系统的粒子数和关联长度分别为

$$N' = b^{-d} N \quad \xi' = b^{-1} \xi \tag{16.16}$$

在粗粒化层面上，该哈密顿量写为

$$Z = \exp(-\beta F) = \exp(N' K_0') \sum_{\{s_i'\}} \exp\left(-\beta H_{\{s_i'\}}(\{K_\alpha'\})\right) \tag{16.17}$$

定义**重整化群算符** $\mathbf{R}_b$，使得

$$\mathbf{K}' = \mathbf{R}_b \mathbf{K} \tag{16.18}$$

多次使用该算符得到

$$\mathbf{K}^{(n)} = \mathbf{R}_b\left(\mathbf{K}^{(n-1)}\right) = \cdots = \mathbf{R}_b^n\left(\mathbf{K}^{(0)}\right) \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{16.19}$$

其中$\mathbf{K}^{(0)} \equiv \mathbf{K}, \quad \mathbf{K}^{(1)} \equiv \mathbf{K}'$。第$n$次变换后的关联长度和单位位点自由能的奇异部分为

$$\xi^{(n)} = b^{-n}\xi^{(0)}, \quad f^{(n)} = b^{nd} f^{(0)} \tag{16.20}$$

假设上述变换有一个不动点$\mathbf{K}^*$满足

$$\mathbf{K}^* = \mathbf{R}_b \mathbf{K}^* \tag{16.21}$$

则由式(16.16)，有

$$\xi\left(\mathbf{K}^*\right) = b^{-1}\xi\left(\mathbf{K}^*\right) \tag{16.22}$$

因此$\xi\left(\mathbf{K}^*\right)$必须是零或者无穷大。在**临界面**上的点经过多次重整化变换后，最终将收敛到$\mathbf{K}^*$；而不在临界面上的点多次重整化变换后将远离$\mathbf{K}^*$。

令不动点附近的某点

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}^* + \mathbf{k} \tag{16.23}$$

则对粗粒化系统，有

$$\mathbf{K}' = \mathbf{K}^* + \mathbf{k}' = \mathbf{R}_b\left(\mathbf{K}^* + \mathbf{k}\right) \tag{16.24}$$

从而得到

$$\mathbf{k}' = \mathbf{R}_b\left(\mathbf{K}^* + \mathbf{k}\right) - \mathbf{K}^* \tag{16.25}$$

当$\mathbf{k}$为小量时，有

$$\mathbf{k}' \approx \mathbf{\Lambda}_b^* \mathbf{k} \tag{16.26}$$

其中$\mathbf{\Lambda}_b^*$是$\mathbf{R}_b$在$\mathbf{K}^*$处的线性近似。令矩阵$\mathbf{\Lambda}_b^*$的本征值为$\{\lambda_i\}$，对应的本征函数为$\{\phi_i\}$，则

$$\mathbf{k} = \sum_i u_i \phi_i \quad \mathbf{k}' = \sum_i u_i' \phi_i \tag{16.27}$$

并且有

$$u_i' = \lambda_i u_i \quad i = 1, 2, \cdots \tag{16.28}$$

其中系数$\{u_i\}$称为**标度场（scaling fields）**。经过n次变换后有

$$u_i^{(n)} = \lambda_i^n u_i^{(0)} \tag{16.29}$$

（1）$|\lambda_i| > 1$对应的变量u_i被称为**相关变量（relevant variable）**，经过多次变换后会远离不动点，因此该变量在临界点必须趋于零。因为约化温度$t = \dfrac{T - T_c}{T_c}$和磁场h在临界点趋于零且与临界行为相关，所以求解时必须有两个相关变量满足

$$u_1 = at + O\left(t^2\right) \quad u_2 = bh + O\left(h^2\right) \tag{16.30}$$

（2）$|\lambda_i| < 1$对应的变量u_i被称为**无关变量（irrelevant variable）**，当所有相关变量都为零时，对无关变量进行多次变换使得系统在临界面上向不动点靠近。

（3）$|\lambda_i| = 1$对应的变量u_i被称为**边际变量（marginal variable）**，在线性区域进行变换时保持不变。边际变量不明显影响系统的临界行为，但是会影响到幂律标度关系。

以下考察变换式(16.29)对关联长度ξ和自由能的奇异部分f的影响。由式(16.20)可得

$$\xi\left(u_1, u_2, \cdots\right) = b^n \xi\left(\lambda_1^n u_1, \lambda_2^n u_2, \cdots\right) \tag{16.31}$$

和

$$f\left(u_1, u_2, \cdots\right) = b^{-nd} f\left(\lambda_1^n u_1, \lambda_2^n u_2, \cdots\right) \tag{16.32}$$

因为连续做两次尺度为b_1和b_2变换应该和做一次尺度为$b_1 b_2$的变换相同：

$$\mathbf{\Lambda}_{b_1}^* \mathbf{\Lambda}_{b_2}^* = \mathbf{\Lambda}_{b_1 b_2}^* \tag{16.33}$$

为了满足上式，必须有

$$\lambda_i = b^{y_i} \tag{16.34}$$

代入式(16.32)，并令$\lambda_1 = t$，$\lambda_2 = h$，得到

$$f\left(t, h, \cdots\right) = b^{-nd} f\left(b^{ny_t} t, b^{ny_h} h, \cdots\right) \tag{16.35}$$

令$b = |t|^{-1/ny_t}$，得到与式(16.6)相同的表达式。但是现在通过引入不动点的概念，可以**把重整化群算符$\mathbf{R}_b$在不动点$\mathbf{K}^*$附近线性化以求得其本征值$\lambda_t = b^{y_t}$和$\lambda_h = b^{y_h}$，再由式(16.7)，(16.11)和(16.12)求得所有的临界指数。**

16.3. 一维伊辛模型的重整化群解

把一维伊辛模型的配分函数写为

$$Z_N=\sum_{\{s_i\}}\exp\left(\sum_{i=1}^{N}K_0+K_1s_is_{i+1}+\frac{1}{2}K_2\left(s_i+s_{i+1}\right)\right) \tag{16.36}$$

其中 $K_0=0$， $K_1=\beta J$， $K_2=\beta\mu_0 h$，运用周期边界条件，并且假设 N 是偶数。对所有偶数项求和，有

$$\begin{aligned}Z_N&=\sum_{\{s_{2j-1}\}}\sum_{\{s_{2j}\}}\prod_{j=1}^{N/2}\exp\left(2K_0+K_1\left(s_{2j-1}s_{2j}+s_{2j}s_{2j+1}\right)+\frac{1}{2}K_2\left(s_{2j-1}+2s_{2j}+s_{2j+1}\right)\right)\\&=\sum_{\{s_{2j-1}\}}\prod_{j=1}^{N/2}\exp\left(2K_0\right)2\cosh\left(K_1\left(s_{2j-1}+s_{2j+1}\right)+K_2\right)\exp\left(\frac{1}{2}K_2\left(s_{2j-1}+s_{2j+1}\right)\right)\end{aligned} \tag{16.37}$$

令 $s'_j=s_{2j-1}$，上式成为

$$Z_N=\sum_{\{s'_j\}}\prod_{j=1}^{N/2}\exp\left(2K_0\right)2\cosh\left(K_1\left(s'_j+s'_{j+1}\right)+K_2\right)\exp\left(\frac{1}{2}K_2\left(s'_j+s'_{j+1}\right)\right) \tag{16.38}$$

为了把上式写成与原系统相同的函数形式

$$Z_{N'}=\sum_{\{s'_j\}}\exp\left(\sum_{j=1}^{N'}\left(K'_0+K'_1s'_js'_{j+1}+\frac{1}{2}K'_2\left(s'_j+s'_{j+1}\right)\right)\right) \tag{16.39}$$

必须有关系

$$\begin{aligned}\exp\left(K'_0+K'_1+K'_2\right)&=\exp\left(2K_0+K_2\right)2\cosh\left(2K_1+K_2\right)\\\exp\left(K'_0+K'_1-K'_2\right)&=\exp\left(2K_0-K_2\right)2\cosh\left(2K_1-K_2\right)\\\exp\left(K'_0-K'_1\right)&=\exp\left(2K_0\right)2\cosh\left(K_2\right)\end{aligned} \tag{16.40}$$

求解上式，得到

$$\begin{aligned}\exp\left(K'_0\right)&=2\exp\left(2K_0\right)\left(\cosh\left(2K_1+K_2\right)\cosh\left(2K_1-K_2\right)\cosh^2\left(K_2\right)\right)^{1/4}\\\exp\left(K'_1\right)&=\left(\cosh\left(2K_1+K_2\right)\cosh\left(2K_1-K_2\right)/\cosh^2\left(K_2\right)\right)^{1/4}\\\exp\left(K'_2\right)&=\exp\left(K_2\right)\left(\cosh\left(2K_1+K_2\right)/\cosh\left(2K_1-K_2\right)\right)^{1/2}\end{aligned} \tag{16.41}$$

以上最后两式取对数后得到

$$K_1' = \frac{1}{4}\ln\left(\cosh\left(2K_1 + K_2\right)\cosh\left(2K_1 - K_2\right)\right) - \frac{1}{2}\ln\cosh\left(K_2\right)$$
$$K_2' = K_2 + \frac{1}{2}\ln\left(\cosh\left(2K_1 + K_2\right)/\cosh\left(2K_1 - K_2\right)\right) \tag{16.42}$$

一个不动点是 $K_1 = 0$ 且 K_2 为任意值，此时 $J = 0$ 或者 $T = \infty$，关联长度为零；另一个不动点是 $K_1 = \infty$ 且 $K_2 = 0$，此时 $h = 0$ 且 $T \to 0$，关联长度发散。第二个不动点对应于临界点。

在第二个不动点附近有关系

$$K_1' \approx K_1 - \frac{1}{2}\ln 2 \quad K_2' \approx 2K_2 \tag{16.43}$$

因为 $b = 2$，所以 $y_h = 1$。因为 $K_1^* = \infty$，不能用 K_1 作展开。因此定义新变量

$$x = \exp\left(-pK_1\right) \tag{16.44}$$

其中 $p > 0$，从而定出 $y_t = p/2$。把 y_t 和 y_h 代入式(16.7)、(16.11)和(16.12)得到临界指数

$$\alpha = 2 - 2/p \quad \beta = 0 \quad \gamma = 2/p \quad \nu = 2/p \quad \delta = \infty \quad \eta = 1 \tag{16.45}$$

由一维伊辛模型的磁化率 χ 的表达式可以得到 $\gamma = 1$，所以 $p = 2$，从而得到

$$\alpha = 1 \quad \beta = 0 \quad \gamma = 1 \quad \nu = 1 \quad \delta = \infty \quad \eta = 1 \tag{16.46}$$

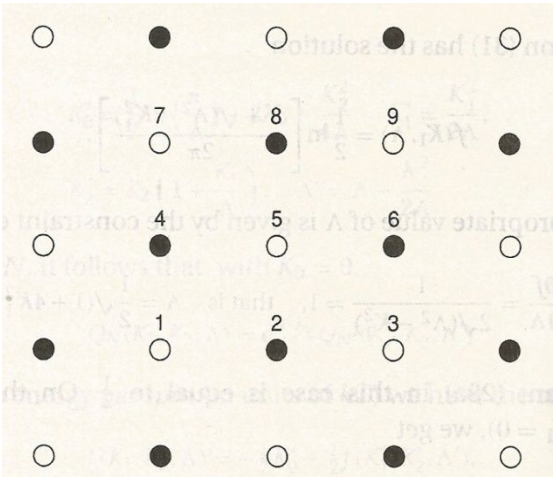
16.4. 无外场二维伊辛模型的重整化群近似解

为了数学上简单，以下求二维立方晶格上无外场伊辛模型的重整化群近似解。配分函数为

$$Z_N = \sum_{\{s_i\}} \exp\left\{\sum_{<i,j>} K s_i s_j\right\} \tag{16.47}$$

其中 $K = \beta J$。对下图中白点进行求和，以 5 为例，相应的部分写为

$$\begin{aligned}
&\sum_{s_5 = \pm 1} \exp\left(K s_2 s_5\right)\exp\left(K s_4 s_5\right)\exp\left(K s_6 s_5\right)\exp\left(K s_8 s_5\right) \\
&= 2\cosh K\left(s_2 + s_4 + s_6 + s_8\right) \\
&= \exp\left(K_0' + \frac{1}{2}K'\left(s_2 s_4 + s_2 s_6 + s_4 s_8 + s_6 s_8\right) + L'\left(s_2 s_8 + s_4 s_6\right) + M' s_2 s_4 s_6 s_8\right)
\end{aligned} \tag{16.48}$$



从而可以把配分函数写为

$$Z_N = \exp\left(N'K_0'\right)\sum_{\{s_i'\}}\exp\left(K'\sum_{n.n.}s_j's_k' + L'\sum_{n.n.n.}s_j's_k' + M'\sum_{sq.}s_j's_k's_l's_m'\right) \tag{16.49}$$

其中 $N' = \frac{1}{2}N$，求和号下的 *n.n.*表示最临近点，*n.n.n.*表示次临近点，*sq.*表示方格的四个角上的点。注意 K' 相关的项在前后相继的两次求和中各出现一次，所以对单个格点求和时写为 $\frac{1}{2}K'$，而在总的配分函数中成为 K'。

由式(16.48)可得

$$\begin{aligned}
2\cosh 4K &= \exp\left(K_0' + 2K' + 2L' + M'\right)\\
2\cos 2K &= \exp\left(K_0' - M'\right)\\
2 &= \exp\left(K_0' - 2L' + M'\right)\\
2 &= \exp\left(K_0' - 2K' + 2L' + M'\right)
\end{aligned} \tag{16.50}$$

变换后得到

$$\begin{aligned}
K_0' &= \ln 2 + \frac{1}{2}\ln\cosh 2K + \frac{1}{8}\ln\cosh 4K\\
K' &= \frac{1}{4}\ln\cosh 4K\\
L' &= \frac{1}{8}\ln\cosh 4K\\
M' &= \frac{1}{8}\ln\cosh 4K - \frac{1}{2}\ln\cosh 2K
\end{aligned} \tag{16.51}$$

因为多次粗粒化之后会有越来越多的次临近项进入从而导致数学上无法处理，所以假设只有 K 和 L 相关的项重要，其它次临近项都可以忽略不计。进一步假设 K 和 L 在不动点附

近很小，式(16.51)的中间两式展开到二阶项，近似为

$$K' \approx 2K^2 \quad L' \approx K^2 \tag{16.52}$$

把上式扩展为

$$K' = 2K^2 + L \quad L' = K^2 \tag{16.53}$$

并假设这是正确的变换公式，则存在一个不平庸的不动点

$$K^* = \frac{1}{3} \quad L^* = \frac{1}{9} \tag{16.54}$$

令 $k_1 \equiv K - K^*$ $k_2 \equiv L - L^*$，代入上式并只取线性项，得到

$$k_1' = \frac{4}{3}k_1 + k_2 \quad k_2' = \frac{2}{3}k_1 \tag{16.55}$$

式(16.26)中定义的线性变换矩阵成为

$$\mathbf{\Lambda}^*_{b=\sqrt{2}} = \begin{pmatrix} 4/3 & 1 \\ 2/3 & 0 \end{pmatrix} \tag{16.56}$$

本征值为

$$\lambda_1 = \frac{1}{3}\left(2+\sqrt{10}\right) \quad \lambda_2 = \frac{1}{3}\left(2-\sqrt{10}\right) \tag{16.57}$$

相应的本征函数为

$$\phi_1 \sim \begin{pmatrix} 2+\sqrt{10} \\ 2 \end{pmatrix} \quad \phi_2 \sim \begin{pmatrix} 2-\sqrt{10} \\ 2 \end{pmatrix} \tag{16.58}$$

由式(16.27)得到标度场

$$u_1 \sim 2k_1 + \left(\sqrt{10}-2\right)k_2 \quad u_2 \sim 2k_1 - \left(\sqrt{10}+2\right)k_2 \tag{16.59}$$

因为 $\lambda_1 > 1$，所以 u_1 是相关变量，“临界曲线”（不动点的集合）必须满足条件 $u_1 = 0$，从而得到

$$k_2 = -\frac{2}{\sqrt{10}-2}k_1 = -\frac{\sqrt{10}+2}{3}k_1 \tag{16.60}$$

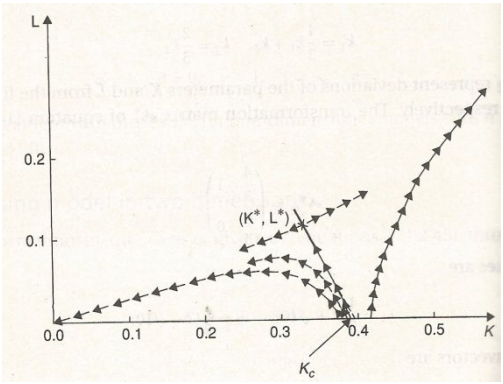
因为原系统有 $L_c = 0$，所以具有物理意义的临界点为

$$L_c - L^* = -\frac{\sqrt{10}+2}{3}\left(K_c - K*\right) \Rightarrow K_c = \frac{4+\sqrt{10}}{18} \doteq 0.3979 \tag{16.61}$$

而严格解为 0.4407。由式(16.11)和式(16.34)可以求得

$$\nu = \frac{\ln b}{\ln \lambda_1} = \frac{\ln \sqrt{2}}{\ln\left(\left(2+\sqrt{10}\right)/3\right)} \doteq 0.6385 \tag{16.62}$$

而严格解为$\nu = 1$。



为了用重整化群求得精确解，需要对以上步骤进行以下修正：

（1） 以上只考虑了K和L，而忽略了M和更高阶关联，为了求得精确解，至少要把M项考虑进来；

（2） K和L为小量的假设不准确，因此需要用数值方法进行线性化求解；

（3） 没有考虑自旋的重整化(16.14)。

16.6. 普适性的解释

因为在临界面上的所有点在重整化群变换下都会趋近于不动点，所以如果两个系统的临界哈密顿量处在同一临界面上，则它们的临界行为都由同一个不动点决定。这样的两个系统就属于同一个普适类。

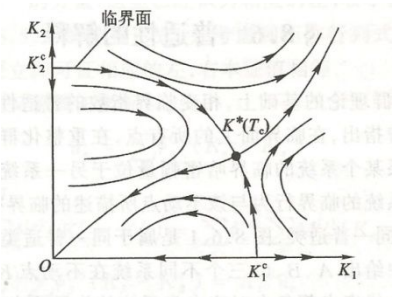


图 8.6.2 临界面(实际为临界线)上三个不同系统的临界行为都由不动点 K^* 决定

16.6. 有限尺寸标度（finite-size scaling）

以前关于临界现象的讨论都是在热力学极限条件下，即所有维数的尺寸都趋于无穷。现

在来研究当尺寸有限时，临界现象会有怎样的标度行为。

考虑一个 d 维系统，每一维的尺寸为 L，则系统体积为 L^d，自由能的奇异部分(16.35)（$n=1$）写成

$$f\left(t,h,\cdots,L^{-1}\right)=b^{-d}f\left(tb^{y_t},hb^{y_h},\cdots,L^{-1}b\right) \tag{16.63}$$

即认为 L^{-1} 也是一个标度场，其本征值为 $b>1$，所以是一个相关变量，且 $y_L=1$。在零磁场情况下，略去所有无关变量，并令 $b=|t|^{-1/y_t}$ 且利用(16.7)中的第一式 $\alpha=2-d/y_t$，把上式写成

$$f\left(t,L^{-1}\right)=|t|^{2-\alpha}F_{\pm}\left(L^{-1}|t|^{-y_L/y_t}\right)=|t|^{2-\alpha}F_{\pm}\left(L^{-1}|t|^{-1/y_t}\right) \tag{16.64}$$

因为在热力学极限下的关联长度

$$\xi_{\infty}\sim|t|^{-\nu}=|t|^{-1/y_t} \tag{16.65}$$

所以式(16.64)可以改写成

$$f\left(t,L^{-1}\right)=|t|^{2-\alpha}F_{\pm}\left(L^{-1}\xi_{\infty}\right) \tag{16.66}$$

热力学极限条件对应于 $F_{\pm}(0)$。

（1） 如果当系统温度偏离临界温度较大时有 $L>>\xi_{\infty}=|t|^{-\nu}$，此时 $L^{-1}\xi_{\infty}\to 0$，较小的关联长度使得系统感受不到有限尺寸的边界条件，系统的热力学性质与热力学极限下的系统几乎没有区别；

（2） 当 $t\to L^{-1/\nu}$ 时，$F_{\pm}\left(L^{-1}\xi_{\infty}\right)\to F_{\pm}(1)$，有限尺寸的效应变得明显；

（3） 当 $|t|\approx 0$ 时，$L^{-1}\xi_{\infty}>>1$，此时系统的行为严重偏离临界行为。

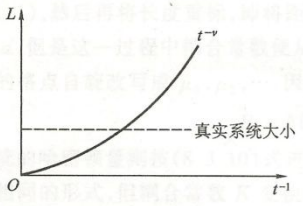


图 8.7.1 有限尺寸标度的交跨行为

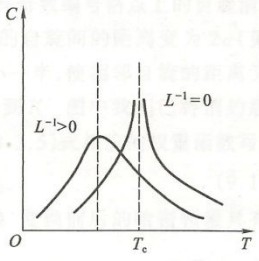


图 8.7.2 无穷大系统与有限系统的比热曲线