

量子统计

王延颢

2015 年 6 月 14 日

15. KT 相变和渗流相变

15.1. XY 模型和 KT 相变

无外场的海森堡模型中，把单位自旋约束在二维空间中连续变化，即每个自旋矢量 $\mathbf{s} \equiv (\mathbf{s}_x, \mathbf{s}_y) = (\cos \theta, \sin \theta)$ （序参量分量个数 $n=2$ ），并且格点空间为二维（ $d=2$ ），就成为 XY 模型。其哈密顿量为

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos \theta_{ij} \quad (15.1)$$

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，

$\theta_{ij} \equiv \theta_i - \theta_j = \theta(\mathbf{r}_i) - \theta(\mathbf{r}_j)$ ，其中 $\mathbf{r}_i$ 和 $\mathbf{r}_j$ 分别是 i 和 j 的二维空间坐标。

15.1.1. XY 模型的低温自旋波行为

假设系统的自旋角度随空间位置缓慢变化，即相邻自旋间的夹角很小，则可以把哈密顿量式(15.1)按小角度展开并略去高阶项，得到

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(1 - \frac{1}{2} \theta_{ij}^2 + \dots \right) \approx H_0 + \frac{1}{2} J \sum_{\langle i,j \rangle} \theta_{ij}^2 \quad (15.2)$$

其中 H_0 与自旋无关。把晶格位点坐标看作连续变量，有

$$\nabla \theta(\mathbf{r}) = \frac{\partial \theta}{\partial x} \hat{\mathbf{x}} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \hat{\mathbf{y}} \quad (15.3)$$

当 $\mathbf{r}_{ij} \equiv |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \rightarrow 0$ 时，有

$$\theta_{ij}^2 = (\nabla \theta)^2 r_{ij}^2 \quad (15.4)$$

因此哈密顿量可以写为

$$H = H_0 + \frac{1}{2} J \int (\nabla \theta(r))^2 d^2 r \quad (15.5)$$

可以证明任意两个位点 m 和 n 的自旋的空间关联函数为

$$\langle \mathbf{s}_m \cdot \mathbf{s}_n \rangle = \langle \cos(\theta_{mn}) \rangle = \exp(\langle \theta_m \theta_n \rangle - \langle \theta_m^2 \rangle) \quad (15.6)$$

因此只要求得了关联函数 $C(\mathbf{r}) = \langle \theta_m \theta_n \rangle$, 就可以得到空间关联函数。把 θ_m 作傅里叶展开:

$$\begin{aligned} \theta(\mathbf{r}) &= \frac{1}{V} \sum_k \theta_k \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \xrightarrow{V \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2k \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \theta_k \\ \theta_k &= \int d^2r \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \theta(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (15.7)$$

其中 V 是 $d = 2$ 维中的体积, 由此得

$$\nabla \theta(\mathbf{r}) = \sum_k i(k_x + k_y) \theta_k \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (15.8)$$

代入哈密顿量表达式(15.5), 得

$$H = H_0 + \frac{1}{2} J \int (\nabla \theta(r))^2 d^2r = H_0 + \frac{J}{2} \sum_k k^2 |\theta_k|^2 \quad (15.9)$$

把关联函数作傅里叶变换, 得到

$$C(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_k C(k) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \xrightarrow{V \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2k \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) C(k) \quad (15.10)$$

可以证明

$$C(k) = \langle |\theta_k|^2 \rangle = \frac{\int \prod d\theta_{k'} |\theta_{k'}|^2 \exp\left(-\frac{\beta J}{2} \sum_{k'} k'^2 |\theta_{k'}|^2\right)}{\int \prod d\theta_{k'} \exp\left(-\frac{\beta J}{2} \sum_{k'} k'^2 |\theta_{k'}|^2\right)} = \frac{2}{\beta J k^2} \quad (15.11)$$

代入(15.10), 可以证明

$$C(r) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int C(k) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d^2k = C(0) - \frac{1}{\pi \beta J} \int_0^\Lambda \frac{1 - J_0(kr)}{k} dk \quad (15.12)$$

其中 $\Lambda = \frac{2\pi}{a}$, a 是晶格常数; $J_0(kr)$ 是零级贝塞尔函数。因为当 kr 是实数时, $|J_0(kr)| \leq 1$,

为了考察 $r \rightarrow \infty$ 时上述积分的渐近行为, 只需考虑 $\int_0^\Lambda \frac{1}{k} dk$ 。用 $\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{1}{r}$ 代替下积分限, 可得当 $r \rightarrow \infty$ 时, 有

$$C(r) - C(0) \propto -\frac{1}{2\pi \beta J} \ln\left(\frac{r}{a}\right) + \dots \quad (15.13)$$

所以根据式(15.6), 有

$$\langle \mathbf{s}_m \cdot \mathbf{s}_n \rangle = \exp(C(r) - C(0)) \sim r^{-\frac{1}{2\pi\beta J}} \quad (15.14)$$

上式表明两点自旋涨落关联函数呈幂律衰减，但是幂指数不是普适常数，而是随温度连续变化。另外式(15.13)还表明角度之间的偏离随距离 r 的增加而增加，因此不可能有长程序。以上讨论只适用于低温，通常把这种低温下关联函数呈幂律衰减，但又没有长程序的相称为具有准长程序的相。

15.1.2. XY 模型的涡旋态行为

上述自旋波的描述建立在 $\theta(\mathbf{r})$ 是光滑函数的基础上，即相邻自旋缓慢变化。如果系统出现涡旋态，则上述描述失效，因为自旋经过一个闭合路径会产生 $2\pi q$ 的突变（ q 是非零整数）。为此将 $\theta(\mathbf{r})$ 扩展为自旋波 $\psi(\mathbf{r})$ 和涡旋态 $\bar{\theta}(\mathbf{r})$ 两部分：

$$\theta(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) + \bar{\theta}(\mathbf{r}) \quad (15.15)$$

有

$$\begin{aligned} \oint \nabla \psi(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{s} &= 0 \\ \oint \nabla \bar{\theta}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{s} &= 2\pi q \end{aligned} \quad (15.16)$$

因而有

$$\oint \nabla \theta(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{s} = 2\pi q \quad (15.17)$$

满足以上三式的选择可以是

$$\bar{\theta} = q\phi, \quad \nabla \theta = \frac{q}{r} \quad (15.18)$$

其中 ϕ 是相对于某个坐标轴的平面极角。此时哈密顿量(15.5)可以写为

$$H = H_0 + \frac{1}{2} J \int (\nabla \theta(r))^2 d^2r = H_0 + \pi q^2 J \ln\left(\frac{L}{a}\right) \quad (15.19)$$

其中 L 为晶格的线长度。当 $L/a \rightarrow \infty$ 时，总能量是发散的，意味着离涡旋中心很远的自旋都不相互平行。

单个涡旋的中心可以存在于晶格的任何格点上，而格点数目为 $(L/a)^2$ ，因此单个涡旋的熵为

$$S = k_B \ln(L/a)^2 \quad (15.20)$$

所以存在单个涡旋的系统的自由能为

$$F = U - TS = (\pi q^2 J - 2k_B T) \ln(L/a) \quad (15.21)$$

当系统中存在正负两个绑定的涡旋中心时，一个涡旋的影响被另一个涡旋阻断，离两涡旋中心较远的自旋可以是平行的，因此系统能量比单涡旋态低。

当 $q = \pm 1$ （最小的绝对值）时，若 $T > \frac{\pi J}{2k_B}$ ，自由能为负，有利于自由单涡旋的存在；

而 $T < \frac{\pi J}{2k_B}$ 时自由能为正，不利于单涡旋的存在，系统处于自旋波态或者有绑定涡旋对的状态。

15.1.3. KT (Kosterlitz-Thouless) 相变

二维 XY 模型中没有长程序，所以没有二级相变。但是在 $T < T_c$ 时系统处于自旋波态，有遵从幂律的准长程序，而在 $T > T_c$ 时处于无序态，会产生自由涡旋。另外一些系统中，在 $T < T_c$ 时系统中存在绑定的涡旋对，当 $T > T_c$ 时这些涡旋不再被绑定，变成自由涡旋。这种二维空间中破坏旋转对称性的相变称为 KT 相变。

15.2. Potts 模型和渗流相变

15.2.1. 渗流 (Percolation) 相变

考虑包含 N 个格点和 M 条边的晶格体系，且 $Z = \lim_{M, N \rightarrow \infty} M/N$ 是有限值，则该体系可能出现两类渗流现象：

- (1) **键渗流**：设每条边有一定的概率 p 被占据，则不被占据的几率为 $1-p$ 。相互连通的键形成一个团簇。当团簇的尺寸趋于无穷大，即相距无穷远的任意两个格点都可以通过团簇中的键连接起来，这个团簇就称为**键渗流团簇**。
- (2) **格点渗流**：设每个格点有一定的概率 p 被占据，则不被占据的几率为 $1-p$ 。如果被占据的格点相邻则认为处在同一个团簇中。当一个团簇的尺寸趋于无穷时，就称为**格点渗流团簇**。

渗流问题目前还无法写出对应的哈密顿量。计算机模拟表明，当 p 较小时，出现渗流的概率 $P(p)=0$ ；当 p 增至某个临界点 p_c 时，出现渗流团簇的概率突然增加；当 $p=1$ 时， $P(p)=1$ ，这一变化类似于顺磁系统的序参量（磁化强度）在临界点附近的连续变化行为，因此称为**渗流相变**。 $P(p)$ 在 p_c 附近有行为

$$P(p) \sim (p - p_c)^\beta \quad p \rightarrow p_c^+ \quad (15.22)$$

其中 β 为正数。这个式子用来确定渗流相变的临界指数 β 。渗流概率 $P(p)$ 是渗流问题的序参量， p_c 称为渗流阈值或者临界值。

15.2.2. Potts 模型

晶格一个位点上的自旋可以取 q 个值，且哈密顿量为

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \delta_{s_i, s_j} - \mu_0 h \sum_i \delta_{s_i, \alpha} \quad (15.23)$$

第一项表示当最临近格点的自旋取向相同时相互作用能为 $-J$ ，否则为 0。第二项表示当自旋取向与外磁场 h 的取向 α 相同时，附加能为 $-\mu_0 h$ ，否则为 0。

Potts 模型可以与渗流问题建立对应关系。