

热力学与统计物理

王延颢

2020年10月29日

八、晶格统计模型

8.1. 伊辛 (Ising) 模型

伊辛模型是最简单的铁磁—顺磁相变的离散模型, 每个格点的自旋取值 s 只能是+1 或者 -1, 并且只与最临近的格点有相互作用。其哈密顿量为

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - \mu_0 h \sum_{i=1}^N s_i \quad (8.1)$$

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。

8.1.1. 一维伊辛模型的严格解

以下用转移矩阵 (transfer matrix) 法求解一维伊辛模型。应用周期边界条件, 即 $s_{N+1} \equiv s_1$, 哈密顿量可以改写为

$$H = -J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} - \frac{1}{2} \mu_0 h \sum_{i=1}^N (s_i + s_{i+1}) \quad (8.2)$$

配分函数为

$$\begin{aligned} Z_N(\beta, h) &= \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \exp\left(\beta \sum_{i=1}^N \left(J s_i s_{i+1} + \frac{1}{2} \mu_0 h (s_i + s_{i+1}) \right)\right) \\ &= \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N T_{s_i, s_{i+1}} \end{aligned} \quad (8.3)$$

其中 $T_{s_i, s_{i+1}} \equiv \exp\left(\beta J s_i s_{i+1} + \frac{1}{2} \beta \mu_0 h (s_i + s_{i+1})\right)$ 。定义转移矩阵

$$\mathbf{T} \equiv \begin{pmatrix} T_{1,1} & T_{1,-1} \\ T_{-1,1} & T_{-1,-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(\beta J + \beta \mu_0 h) & \exp(-\beta J) \\ \exp(-\beta J) & \exp(\beta J - \beta \mu_0 h) \end{pmatrix} \quad (8.4)$$

配分函数写为

$$Z_N(\beta, h) = \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \langle s_1 | \mathbf{T} | s_2 \rangle \langle s_2 | \mathbf{T} | s_3 \rangle \cdots \langle s_N | \mathbf{T} | s_1 \rangle \quad (8.5)$$

其中 $|s_i\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 或 $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\langle s_i | \mathbf{T} | s_j \rangle = T_{s_i, s_j}$ 。应用完备性条件 $\sum_{s_i} |s_i\rangle \langle s_i| = 1$, 得到

$$\begin{aligned} Z_N(\beta, h) &= \sum_{s_1=\pm 1} \langle s_1 | \mathbf{T} \sum_{s_2=\pm 1} |s_2\rangle \langle s_2 | \mathbf{T} \sum_{s_3=\pm 1} |s_3\rangle \cdots \mathbf{T} \sum_{s_N=\pm 1} |s_N\rangle \langle s_N | \mathbf{T} | s_1 \rangle \\ &= \sum_{s_1=\pm 1} \langle s_1 | \mathbf{T}^N | s_1 \rangle = \text{tr}(\mathbf{T}^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N \end{aligned} \quad (8.6)$$

其中 λ_1 和 λ_2 是转移矩阵 \mathbf{T} 的两个本征值:

$$\begin{aligned} &\begin{vmatrix} \exp(\beta J + \beta \mu_0 h) - \lambda & \exp(-\beta J) \\ \exp(-\beta J) & \exp(\beta J - \beta \mu_0 h) - \lambda \end{vmatrix} = 0 \\ &\Rightarrow \lambda^2 - 2\lambda \exp(\beta J) \cosh(\beta \mu_0 h) + 2 \sinh(2\beta J) = 0 \\ &\Rightarrow \lambda_{1,2} = \exp(\beta J) \cosh(\beta \mu_0 h) \pm (\exp(-2\beta J) + \exp(2\beta J) \sinh^2(\beta \mu_0 h))^{1/2} \end{aligned} \quad (8.7)$$

不失一般性, 令 $\lambda_1 > \lambda_2$, 则在热力学极限下 $N \rightarrow \infty$ 时有 $\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^N \rightarrow 0$, 因此配分函数

$$Z_N(\beta, h) \approx \lambda_1^N = \left(\exp(\beta J) \cosh(\beta \mu_0 h) + (\exp(-2\beta J) + \exp(2\beta J) \sinh^2(\beta \mu_0 h))^{1/2} \right)^N \quad (8.8)$$

零外场时成为

$$Z_N(\beta, 0) = (2 \cosh(\beta J))^N \quad (8.9)$$

亥姆霍兹自由能

$$\begin{aligned} F(\beta, h) &= -\frac{1}{\beta} \ln Z_N(\beta, h) \\ &= -NJ - \frac{1}{\beta} N \ln \left(\cosh(\beta \mu_0 h) + (\exp(-4\beta J) + \sinh^2(\beta \mu_0 h))^{1/2} \right) \end{aligned} \quad (8.10)$$

因为在 $T > 0$ 时自由能都是解析函数, 所以一维伊辛模型在有限温度下没有相变, 或者说相变温度为零。这是因为一维时每个格点反转自旋所需克服的能垒都很小。

内能等于

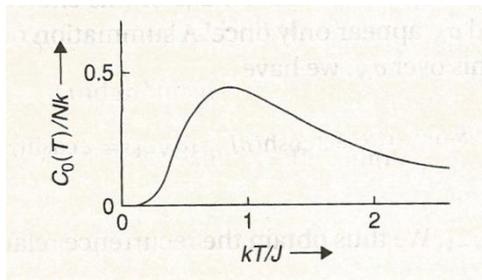
$$\begin{aligned} U(\beta, h) &= \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta F)_h = -NJ - \frac{N \mu_0 h \sinh(\beta \mu_0 h)}{(\exp(-4\beta J) + \sinh^2(\beta \mu_0 h))^{1/2}} \\ &\quad + \frac{2NJ \exp(-4\beta J)}{\left(\cosh(\beta \mu_0 h) + (\exp(-4\beta J) + \sinh^2(\beta \mu_0 h))^{1/2} \right) (\exp(-4\beta J) + \sinh^2(\beta \mu_0 h))^{1/2}} \end{aligned} \quad (8.11)$$

当外场为零时,

$$U(\beta, h=0) = -NJ \tanh(\beta J) \quad (8.12)$$

热容

$$C_0(\beta, h=0) = Nk_B (\beta J)^2 \operatorname{sech}^2(\beta J) \quad (8.13)$$



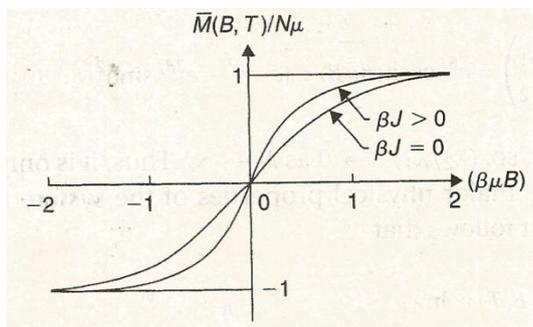
磁化强度 $M = \sum_{i=1}^N s_i$ 等于

$$M(\beta, h) = -\left(\frac{\partial F}{\partial h}\right)_\beta = \frac{N\mu \sinh(\beta\mu_0 h)}{(\exp(-4\beta J) + \sinh^2(\beta\mu_0 h))^{1/2}} \quad (8.14)$$

当 $\beta J \rightarrow \infty$ 时，磁化强度成为阶跃函数，说明在 $T=0$ 处有奇点。外场为零时的磁化率为

$$\chi(\beta, h=0) = \beta N \mu_0^2 \exp(2\beta J) \quad (8.15)$$

在 $T \rightarrow 0$ 时发散。



以下求 $h=0$ 时自旋的关联函数。先把 J 看作对每个位点都不同，外场为零时的哈密顿量为

$$H = -\sum_{i=1}^N J_i s_i s_{i+1} \quad (8.16)$$

配分函数为

$$\begin{aligned} Z_N(\beta, h=0) &= \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \exp\left(\sum_{i=1}^N \beta J_i s_i s_{i+1}\right) \\ &= \sum_{\{s_i=\pm 1\}} \prod_{i=1}^N \exp(\beta J_i s_i s_{i+1}) \end{aligned} \quad (8.17)$$

因为 $T > 0$ 时一维伊辛模型不存在自发磁化强度，所以对于任意 j ，有 $\langle s_j \rangle = 0$ 。相邻位点的

关联函数

$$\begin{aligned}
C(j, j+1) &= \langle (s_j - \langle s_j \rangle)(s_{j+1} - \langle s_{j+1} \rangle) \rangle = \langle s_j s_{j+1} \rangle \\
&= \frac{1}{Z_N} \sum_{\{s_i = \pm 1\}} s_j s_{j+1} \prod_{i=1}^N \exp(\beta J_i s_i s_{i+1}) \\
&= \frac{\partial}{\partial(\beta J_j)} \ln Z_N(\beta) = \frac{\sinh(\beta J_j)}{\cosh(\beta J_j)} \\
&= \tanh(\beta J_j)
\end{aligned} \tag{8.18}$$

因为对于任意的 j 有 $s_j^2 = 1$ ，两个间隔为 m 的位点间关联函数为

$$\begin{aligned}
C_j(m) &= \langle s_j s_{j+m} \rangle = \frac{1}{Z_N} \frac{\partial}{\partial(\beta J_j)} \frac{\partial}{\partial(\beta J_{j+1})} \cdots \frac{\partial}{\partial(\beta J_{j+m-1})} Z_N \\
&= \langle s_j s_{j+1} \rangle \langle s_{j+1} s_{j+2} \rangle \cdots \langle s_{j+m-1} s_{j+m} \rangle \\
&= \prod_{k=j}^{j+m-1} \tanh(\beta J_k)
\end{aligned} \tag{8.19}$$

此时再令所有的 $J_k \equiv J$ ，得到

$$C(m) = \tanh^m(\beta J) \tag{8.20}$$

当 $T = 0$ 时， $C(m) = 1$ ，说明所有的自旋方向完全相同，系统处于完全有序的状态；当 $T > 0$ 时，关联函数可以写为

$$C(m) = \exp(-m \ln(\coth(\beta J))) = \exp(-m / \xi) \tag{8.21}$$

其中关联长度 $\xi \equiv \frac{1}{\ln \coth(\beta J)}$ 。当 $T \rightarrow 0$ 时， $\beta J \gg 1$ ，因此

$$\xi \approx \frac{1}{\ln(1 + 2\exp(-2\beta J))} \approx \frac{1}{2} \exp(2\beta J) \tag{8.22}$$

关联长度随温度呈指数衰减，显示系统无长程序。

8.1.2. 无外场二维伊辛模型

8.1.2.1. 昂萨格严格解

以下介绍昂萨格对无外场二维伊辛模型的严格求解。考虑 $N = n \times n$ 的带周期边界条件的二维立方格点上的伊辛模型。没有外磁场 ($h = 0$) 时，其哈密顿量写为

$$H = \sum_{\mu=1}^n (H(\mu, \mu+1) + H(\mu)) \tag{8.23}$$

其中 μ 代表一整列自旋的集合，临近两列的相互作用项

$$H(\mu, \mu+1) = -J \sum_{i=1}^n s_i^\mu s_i^{\mu+1} \quad (8.24)$$

而同一列中的相互作用

$$H(\mu) = -J \sum_{i=1}^n s_i^\mu s_{i+1}^\mu \quad (8.25)$$

参考一维伊辛模型的转移矩阵求解，定义 $2^n \times 2^n$ 的转移矩阵 \mathbf{T} ，矩阵元为

$$T_{\mu, \mu'} = \langle \mu | \mathbf{T} | \mu' \rangle \equiv \exp(-\beta(H(\mu, \mu') + H(\mu))) \quad (8.26)$$

则配分函数

$$\begin{aligned} Z_N(\beta) &= \sum_{\mu_1} \cdots \sum_{\mu_n} \langle \mu_1 | \mathbf{T} | \mu_2 \rangle \langle \mu_2 | \mathbf{T} | \mu_3 \rangle \cdots \langle \mu_n | \mathbf{T} | \mu_1 \rangle \\ &= \sum_{\mu_1} \langle \mu_1 | \mathbf{T}^n | \mu_1 \rangle = \text{tr}(\mathbf{T}^n) \\ &= \sum_{\alpha=1}^{2^n} (\lambda_\alpha)^n \end{aligned} \quad (8.27)$$

定义两个 $2^n \times 2^n$ 的矩阵 \mathbf{W} 和 $\mathbf{V}^{(2)}$ ，其矩阵元分别为

$$\mathbf{W}_{\mu, \mu'} = \langle s_1^\mu, s_2^\mu, \dots, s_n^\mu | \mathbf{W} | s_1^{\mu'}, s_2^{\mu'}, \dots, s_n^{\mu'} \rangle \equiv \prod_{i=1}^n \exp(\beta J s_i^\mu s_i^{\mu'}) \quad (8.28)$$

和

$$\mathbf{V}_\mu^{(2)} = \langle s_1^\mu, s_2^\mu, \dots, s_n^\mu | \mathbf{V}^{(2)} | s_1^\mu, s_2^\mu, \dots, s_n^\mu \rangle \equiv \prod_{i=1}^n \exp(\beta J s_i^\mu s_{i+1}^\mu) \quad (8.29)$$

再定义

$$\mathbf{V}^{(1)} = (2 \sinh(2\beta J))^{-n/2} \mathbf{W} \quad (8.30)$$

可以证明

$$\mathbf{V}^{(1)} = \prod_{\alpha=1}^n \exp(\theta \mathbf{X}_\alpha) \quad (8.31)$$

其中 $\theta \equiv \text{arctanh}(\exp(-2\beta J))$ ， $\mathbf{X}_\alpha = 1 \otimes 1 \otimes \cdots \otimes \mathbf{X} \otimes \cdots \otimes 1$ 共 n 个因子直乘且 $\mathbf{X} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ 是

第 α 个因子。同时还可以得到

$$\mathbf{V}^{(2)} = \prod_{\alpha=1}^n \exp(\beta J \mathbf{Z}_\alpha \mathbf{Z}_{\alpha+1}) \quad (8.32)$$

其中 $\mathbf{Z}_\alpha = 1 \otimes 1 \otimes \cdots \otimes \mathbf{Z} \otimes \cdots \otimes 1$ 共 n 个因子直乘且 $\mathbf{Z} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ 是第 α 个因子。可以证明转

移矩阵

$$\mathbf{T} = (2 \sinh(2\beta J))^{n/2} \mathbf{V}^{(1)} \mathbf{V}^{(2)} \quad (8.33)$$

可以证明转移矩阵 \mathbf{T} 的所有本征值都是正值，则由式(8.27)有

$$\lambda_{\max}^n \leq Z_N(\beta) \leq 2^n \lambda_{\max}^n \quad (8.34)$$

两边取对数并除以 $N = n^2$ 得到

$$\frac{1}{n} \ln \lambda_{\max} \leq \frac{1}{n^2} \ln Z_N(\beta) \leq \frac{1}{n} \ln \lambda_{\max} + \frac{1}{n} \ln 2 \quad (8.35)$$

因此有

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_N(\beta) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \lambda_{\max} = \frac{1}{2} \ln(2 \sinh(2\beta J)) + \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \Lambda_{\max} \quad (8.36)$$

其中 Λ_{\max} 是矩阵 $\mathbf{V} \equiv \mathbf{V}^{(1)} \mathbf{V}^{(2)}$ 的最大本征值。经过一系列复杂的计算，最终得到

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_N(\beta) = \ln(2 \cosh(2\beta J)) + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\varphi \ln \left(\frac{1}{2} (1 + \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \varphi}) \right) \quad (8.37)$$

其中

$$\kappa \equiv \frac{\exp(2\beta J) - \exp(-2\beta J)}{(\exp(2\beta J) + \exp(-2\beta J))^2} = \frac{2 \sinh(2\beta J)}{\cosh^2(2\beta J)} \quad (8.38)$$

8.1.2.2. 热力学量

平均每个位点的亥姆霍兹自由能

$$\begin{aligned} f(\beta) &= -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_N \\ &= -\frac{1}{\beta} \ln(2 \cosh(2\beta J)) - \frac{1}{2\pi\beta} \int_0^\pi d\varphi \ln \left(\frac{1}{2} (1 + \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \varphi}) \right) \end{aligned} \quad (8.39)$$

平均每个位点的内能

$$u(\beta) = \frac{d}{d\beta} (\beta f) = -J \coth(2\beta J) \left(1 + \frac{2}{\pi} \kappa' K_1(\kappa) \right) \quad (8.40)$$

其中 $\kappa' \equiv 2 \tanh^2(2\beta J) - 1$ ，且有 $\kappa^2 + \kappa'^2 = 1$ 。 $K_1(\kappa)$ 是第一类全椭圆积分

$$K_1(\kappa) \equiv \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi}{\sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \varphi}} \quad (8.41)$$

平均每个位点的比热

$$\begin{aligned} c_0(\beta) &= \frac{\partial u(\beta)}{\partial T} \\ &= \frac{2}{\pi} (\beta J \coth(2\beta J))^2 \left(2\kappa K_1(\kappa) - 2\kappa E_1(\kappa) - \kappa(1 - \kappa') \left(\frac{\pi}{2} + \kappa' K_1(\kappa) \right) \right) \end{aligned} \quad (8.42)$$

其中 $E_1(\kappa)$ 是第二类全椭圆积分

$$E_1(\kappa) \equiv \int_0^{\pi/2} d\varphi \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \varphi} \quad (8.43)$$

比热在 $\kappa^2 = 1$ 处发散，即

$$\begin{aligned} \kappa'_c = 0 &\Rightarrow 2 \tanh^2 \left(\frac{2J}{k_B T_c} \right) = 1 \\ &\Rightarrow \frac{J}{k_B T_c} = 0.4406868 \\ &\Rightarrow k_B T_c = 2.269185J \end{aligned} \quad (8.44)$$

同时有

$$\exp\left(-\frac{2J}{k_B T_c}\right) = \sqrt{2} - 1, \quad \cosh\left(\frac{2J}{k_B T_c}\right) = \sqrt{2}, \quad \sinh\left(\frac{2J}{k_B T_c}\right) = 1 \quad (8.45)$$

在临界点附近，比热可近似表示为

$$c_0(\beta) \approx \frac{2\kappa}{\pi} \left(\frac{2J}{k_B T_c} \right)^2 \left(-\ln \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right| + \ln \left(\frac{k_B T_c}{2J} \right) - \left(1 + \frac{\pi}{4} \right) \right) \quad (8.46)$$

在临界点附近对数发散。自发磁化强度（即序参量）为

$$m = \left(1 - (\sinh(2\beta J))^{-4} \right)^{1/8} \quad (8.47)$$

8.1.2.3. 临界指数

由比热的表达式可知 $\alpha = 0$ ，磁化强度的表达式可知 $\beta = 1/8$ 。

零外场的磁化率为

$$\chi_0 \approx \frac{N\mu_0^2}{k_B T_c} \times \begin{cases} 0.96258t^{-7/4} & t \geq 0 \\ 0.02554|t|^{-7/4} & t \leq 0 \end{cases} \quad (8.48)$$

由此可得临界指数 $\gamma = 7/4$ 。

计算表明关联函数为

$$C(r) \approx \begin{cases} \frac{(4(K_c - K))^{1/4}}{2^{3/8} (\pi r / \xi)^{1/2}} \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right) & \xi = (4(K_c - K))^{-1} \quad T > T_c \\ \frac{(4(K - K_c))^{1/4}}{2^{21/8} \pi (r / \xi)^2} \exp\left(-\frac{2r}{\xi}\right) & \xi = (4(K - K_c))^{-1} \quad T < T_c \\ \frac{2^{1/12} \exp(3\zeta'(-1))}{r^{1/4}} & T = T_c \end{cases} \quad (8.49)$$

其中 $K \equiv \beta J$ ， $\zeta'(x)$ 是黎曼 zeta 函数的导数。由此可得临界指数 $\nu = 1, \eta = 1/4$ 。根据标度率可以求得 $\delta = 15$ 。这些临界指数与平均场的结果差别很大。

到目前为止还没有得到三维伊辛模型的解析解。数值模拟表明三维的临界温度 T_c 大致是二维的两倍，在临界温度附近，有单位热容

$$c_0 \sim |T - T_c|^{-\alpha} \quad (8.50)$$

和单位磁化强度

$$m \sim (T_c - T)^\beta \quad T < T_c \quad (8.51)$$

其中临界指数 $\alpha \approx 0.125$, $\beta \approx 0.313$ 。

8.2. 其他格点模型

8.2.1. 格气模型

在 d 维晶格上，第 i 个位点可以空着或被一个粒子占据，即 $n_i = 1$ 或 0 ，则系统中总粒子数

$$N_a = \sum_{i=1}^N n_i \quad (8.52)$$

其中 N 是总位点数。系统的巨正则哈密顿量为

$$H - \mu N_a = -\sum_{i=1}^N \mu n_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} U_{ij} n_i n_j \quad (8.53)$$

其中 μ 是化学势， U_{ij} 是 i 和 j 位点上粒子的相互作用，不一定是相邻的粒子。

如果只有临近粒子间有相互作用，且相互作用完全相同，则作代换

$$n_i = \frac{1}{2}(1 + s_i) \quad s_i = \pm 1 \quad (8.54)$$

有

$$\begin{aligned} n_i = 0 &\leftrightarrow s_i = -1 \\ n_i = 1 &\leftrightarrow s_i = +1 \end{aligned} \quad (8.55)$$

代入式(8.53)，得到

$$\begin{aligned} H - \mu N_a &= -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \mu(1 + s_i) + \frac{1}{4} U \sum_{\langle i,j \rangle} (1 + s_i)(1 + s_j) \\ &= -\frac{1}{2} \mu N - \frac{1}{2} \mu \sum_{i=1}^N s_i + \frac{1}{8} UNz + \frac{1}{4} Uz \sum_{i=1}^N s_i + \frac{1}{4} U \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \\ &= U_0 - \mu_0 h \sum_{i=1}^N s_i - J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \end{aligned} \quad (8.56)$$

其中

$$\begin{aligned}
 U_0 &= -\frac{1}{2}\mu N + \frac{1}{8}UNz \\
 \mu_0 h &= \frac{1}{2}\mu - \frac{1}{4}Uz \\
 J &= -\frac{1}{4}U
 \end{aligned}
 \tag{8.57}$$

z 是临近位点的数目， μ_0 是磁矩。巨正则配分函数为

$$\Xi = \text{tr} \left(\exp(-\beta(H - \mu N_a)) \right) = \exp(-\beta U_0) Z_{\text{Ising}}
 \tag{8.58}$$

因此格子模型的热力学性质可以由伊辛模型的热力学性质推导出来。

8.2.2. 外斯模型 (Weiss Model)

外斯模型中，所有位点上的自旋相互作用的强度完全相同，而不只是最临近点之间有相互作用。相应的哈密顿量为

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{i,j=1}^N s_i s_j - \mu_0 h \sum_{i=1}^N s_i
 \tag{8.59}$$

可以证明外斯模型的严格解就是分子平均场理论的结果。

8.2.3. 海森堡模型 (Heisenberg Model)

海森堡模型对伊辛模型进行了推广，认为自旋的方向可以任意，其哈密顿量为

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - \mu_0 \sum_{i=1}^N \mathbf{h} \cdot \mathbf{s}_i
 \tag{8.60}$$

其中 $\langle i,j \rangle$ 只对最临近的位点进行计算。海森堡模型中自旋在任何方向都是对称的，即哈密顿量具有空间旋转不变的特性。方向的特殊性由外加磁场方向或者相互作用中微小的不对称显现出来。

8.2.4. 高斯模型 (Gaussian Model)

Kac 提出的高斯模型假设自旋不只是取两个离散的值 ± 1 ，而是可以在 $(-\infty, +\infty)$ 之间连续取值，并且概率密度服从高斯分布

$$f(s_i) ds_i = \left(\frac{A}{\pi} \right)^{1/2} \exp(-As_i^2) ds_i
 \tag{8.61}$$

其中 $i=1, \dots, N$ ， A 是常数，满足 $s_i^2 = 1/2A$ 。相应的配分函数为

$$Z_N = \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{A}{\pi}\right)^{N/2} \exp\left(-A \sum_i s_i^2 + \beta J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + \beta \mu_0 h \sum_i s_i\right) \prod_i ds_i \quad (8.62)$$

计算表明，当 $d > 2$ 时，高斯模型在 $\frac{J}{k_B T_c} = \frac{A}{d}$ (d 是维数) 处有相变。高斯模型的严重问题在于温度低于临界点时， $\beta J > A/d$ ，配分函数式(8.62)发散。

8.2.5. 球状模型 (Spherical Model)

为了解决高斯模型的发散问题，Kac 对所有自旋加了一个约束条件

$$\sum_i s_i^2 = N \quad (8.63)$$

从而使得每个自旋的取值范围为 $[-\sqrt{N}, \sqrt{N}]$ ，而所有自旋的集合 $\{s_i\}$ 处在半径为 \sqrt{N} 的 N 维球面上。该模型需要通过求极小值得到对应的配分函数的解。

8.2.6. 平均球状模型 (Mean Spherical Model)

Lewis 和 Wannier 指出球状模型的哈密顿量是正则的，而对自旋的约束条件式(8.63)是微正则的，因此导致求解时需要求极小值。平均球状模型把约束改为正则条件

$$\left\langle \sum_i s_i^2 \right\rangle = N \quad (8.64)$$

相应的哈密顿量为

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - \mu_0 h \sum_{i=1}^N s_i + \lambda \sum_{i=1}^N s_i^2 \quad (8.65)$$

其中 λ 被称为球状场，满足约束条件

$$\left\langle \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right\rangle = N \quad (8.66)$$

配分函数为

$$Z_N = \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\beta \lambda \sum_i s_i^2 + \beta J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + \beta \mu_0 h \sum_i s_i\right) \prod_i ds_i \quad (8.67)$$

满足约束条件

$$\frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \ln Z_N}{\partial \lambda} \right)_{\beta, J, h} = -N \quad (8.68)$$

8.2.7. XY 模型

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 $\mathbf{s} \equiv (s_x, s_y) = (\cos \theta, \sin \theta)$ (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

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos \theta_{ij} \quad (8.69)$$

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。

二维 XY 模型中没有长程序，所以没有二级相变。但是二维连续 XY 模型在 $T < T_c$ 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。

对于有拓扑缺陷的二维 XY 模型，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。

8.2.8. 空间维数与相变

(1) 当空间维数 $d \geq 3$ 时，无论连续还是离散系统的对称性都会被破坏，因此都会出现相变；

(2) 当 $d = 2$ 时，连续系统的对称性无法破坏，但是离散系统的对称性可以被破坏，因此二维伊辛模型有相变，而海森堡模型和球状模型没有相变；

(3) 当 $d = 1$ 时，任何 $T > 0$ 都没有有序相，因而没有对称性可以破坏，从而没有有限温度下的相变；

(4) 当 $d = 2$ 和序参量维数 $n = 2$ 时，没有长程序，但是有旋转对称性，因此出现 KT 相变。

