高等统计物理

王延颋

2017 年 2 月 24 日

9. KT 相变和渗流相变

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

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j = -J\sum_{\langle i,j\rangle} \cos\theta_{ij} \tag{9.1}$$

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

9.1.1. 连续 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(9.1)按小角度展开并略去高阶项，得到

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\left(1 - \frac{1}{2}\theta_{ij}^2 + \cdots\right) \approx H_0 + \frac{1}{2}J\sum_{\langle i,j\rangle}\theta_{ij}^2 \tag{9.2}$$

其中H_0与自旋无关。把晶格位点坐标看作连续变量，有

$$\nabla\theta\left(\mathbf{r}\right) = \frac{\partial\theta}{\partial x}\hat{\mathbf{x}} + \frac{\partial\theta}{\partial y}\hat{\mathbf{y}} \tag{9.3}$$

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

$$\theta_{ij}^2 = \left(\nabla\theta\right)^2 r_{ij}^2 \tag{9.4}$$

因此哈密顿量可以写为

$$H = H_0 + \frac{1}{2}J\int\left(\nabla\theta\left(r\right)\right)^2 \mathrm{d}^2 r \tag{9.5}$$

可以证明任意两个位点 m 和 n 的自旋的空间关联函数为

$$\left\langle \mathbf{s}_m \cdot \mathbf{s}_n \right\rangle = \left\langle \cos\left(\theta_{mn}\right) \right\rangle = \exp\left(\left\langle \theta_m \theta_n \right\rangle - \left\langle \theta_m^2 \right\rangle \right) \tag{9.6}$$

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

$$\begin{aligned} \theta(\mathbf{r}) &= \frac{1}{V}\sum_k \theta_k \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \xrightarrow{V\to\infty} \frac{1}{(2\pi)^2}\int \mathrm{d}^2 k \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\theta_k \\ \theta_k &= \int \mathrm{d}^2 r \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\theta(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{9.7}$$

其中 V 是 $d=2$ 维中的体积，由此得

$$\nabla\theta(\mathbf{r}) = \sum_k i\left(k_x + k_y\right)\theta_k \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \tag{9.8}$$

代入哈密顿量表达式(9.5)，得

$$H = H_0 + \frac{1}{2}J\int\left(\nabla\theta(r)\right)^2 \mathrm{d}^2 r = H_0 + \frac{J}{2}\sum_k k^2 \left|\theta_k\right|^2 \tag{9.9}$$

把关联函数作傅里叶变换，得到

$$C(\mathbf{r}) = \frac{1}{V}\sum_k C(k)\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \xrightarrow{V\to\infty} \frac{1}{(2\pi)^2}\int \mathrm{d}^2 k \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) C(k) \tag{9.10}$$

可以证明

$$C(k) = \left\langle \left|\theta_k\right|^2 \right\rangle = \frac{\int\prod \mathrm{d}\theta_{k'} \left|\theta_k\right|^2 \exp\left(-\frac{\beta J}{2}\sum_{k'} k'^2 \left|\theta_{k'}\right|^2\right)}{\int\prod \mathrm{d}\theta_{k'} \exp\left(-\frac{\beta J}{2}\sum_{k'} k'^2 \left|\theta_{k'}\right|^2\right)} = \frac{2}{\beta J k^2} \tag{9.11}$$

代入(9.10)，可以证明

$$C(r) = \frac{1}{(2\pi)^2}\int C(k)\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\mathrm{d}^2 k = C(0) - \frac{1}{2\pi\beta J}\int_0^{\Lambda} \frac{1 - J_0(kr)}{k}\mathrm{d}k \tag{9.12}$$

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，$\left|J_0(kr)\right| \le 1$，为了考察 $r\to\infty$ 时上述积分的渐近行为，只需考虑 $\int_0^{\Lambda}\frac{1}{k}\mathrm{d}k$ 。用 $\lim\limits_{r\to\infty}\frac{1}{r}$ 代替下积分限，可得当 $r\to\infty$ 时，有

$$C(r) - C(0) \propto -\frac{1}{2\pi\beta J}\ln\left(\frac{r}{a}\right) + \cdots \tag{9.13}$$

所以根据式(9.6)，有

$$\langle \mathbf{s}_m \cdot \mathbf{s}_n \rangle = \exp\left(C(r) - C(0)\right) \sim r^{-\frac{1}{2\pi\beta J}} \tag{9.14}$$

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(9.13)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**。

9.1.2. 有拓扑缺陷的 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。如果系统出现拓扑缺陷的涡旋态，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 $\theta(\mathbf{r})$ 扩展为连续变化的自旋波 $\psi(\mathbf{r})$ 和拓扑缺陷的涡旋态 $\bar{\theta}(\mathbf{r})$ 两部分：

$$\theta(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) + \bar{\theta}(\mathbf{r}) \tag{9.15}$$

有

$$\begin{aligned} &\oint \nabla \psi(\mathbf{r}) \cdot \mathrm{d}\mathbf{s} = 0 \\ &\oint \nabla \bar{\theta}(\mathbf{r}) \cdot \mathrm{d}\mathbf{s} = 2\pi q \end{aligned} \tag{9.16}$$

因而有

$$\oint \nabla \theta(\mathbf{r}) \cdot \mathrm{d}\mathbf{s} = 2\pi q \tag{9.17}$$

满足以上三式的选择可以是

$$\bar{\theta} = q\phi, \quad \nabla \theta = \frac{q}{r} \tag{9.18}$$

其中 ϕ 是相对于某个坐标轴的平面极角。此时哈密顿量(9.5)可以写为

$$\begin{aligned} H &= H_0 + \frac{J}{2}\int \left(\nabla \theta(r)\right)^2 \mathrm{d}^2 r \\ &= H_0 + \frac{J}{2}\int_0^L \left(\frac{q}{r}\right)^2 r\mathrm{d}r\mathrm{d}\varphi = H_0 + \pi q^2 J \ln\left(\frac{L}{a}\right) \end{aligned} \tag{9.19}$$

其中 L 为涡旋的特征线长度。当 $L/a \to \infty$ 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，系统处于高能态**。

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

$$S = k_{\mathrm{B}} \ln\left(L/a\right)^2 \tag{9.20}$$

所以存在单个涡旋的系统的自由能为

$$F = U - TS = \left(\pi q^2 J - 2k_{\mathrm{B}}T\right)\ln\left(L/a\right) \tag{9.21}$$

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$T > \dfrac{\pi J}{2k_{\mathrm{B}}}$，自由能为负，有利于自由单涡旋的存在；而$T < \dfrac{\pi J}{2k_{\mathrm{B}}}$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。

9.1.3. KT（Kosterlitz-Thouless）相变

二维 XY 模型中没有长程序，所以没有二级相变。但是二维连续 XY 模型在$T < T_{\mathrm{c}}$时系统处于自旋波态，有遵从幂律的准长程序，而在$T > T_{\mathrm{c}}$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$T < T_{\mathrm{c}}$时系统中存在绑定的涡旋对，当$T > T_{\mathrm{c}}$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。

9.2. Potts 模型和渗流相变

9.2.1. 渗流（Percolation）相变

考虑包含N个格点和M条边的晶格体系，且$Z = \lim\limits_{M,N\to\infty} M/N$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 $P\left(p\right)=0$；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，$P\left(p\right)=1$，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**。$P\left(p\right)$ 在 p_{c} 附近有行为

$$P\left(p\right)\sim\left(p-p_{\mathrm{c}}\right)^{\beta}\quad p\to p_{\mathrm{c}}^{+} \tag{9.22}$$

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 $P\left(p\right)$ 是渗流问题的序参量，p_{c} 称为渗流阈值或者临界值。

9.2.2. 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

$$H=-J\sum_{\langle i,j\rangle}\delta_{s_i,s_j}-\mu_0 h\sum_{i}\delta_{s_i,\alpha} \tag{9.23}$$

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。