

相变与临界现象课程小论文

邱俊斌¹

(1.中山大学物理学院物理系, 广州 510000)

日期: July 20, 2020

1 引入

日常生活中相变现象无处不在, 冰融化成水, 水沸腾变成水蒸汽, 因此, 研究相变的动力学机制是非常重要的一个课题。为了解释相变现象, 前人们发展了许多理论, 最著名的两个方法是Landau平均场理论和重整化理论。平均场理论用一个简单的模型解释了众多不同系统的相变现象。但平均场理论的缺陷在于, 相变临界点附近会有很大的误差。这时候就需要利用重整化理论, 在相变临界点附近计算临界指数, 从而描述相变现象。不仅如此, 重整化理论还告诉我们, 许多不同的系统, 只要他们拥有相同的临界指数, 那么它们就归入同一个普适类中。相同的普适类, 意味着在临界点附近的动力学机制也是类似的, 与具体物质, 相互作用形式是无关的。这一发现, 大大简化了我们对相变研究的复杂度和难度。

本文主要是对本学期学习的相变相关理论进行一些总结, 内容主要是根据钟凡老师的课件, 并参考了Pathria和Beale的*Statistical Mechanics*教材[1], 以及Nishimori和Ortiz的*Elements of Phase Transitions and Critical Phenomena*教材[2]。

2 相与相变

相, 是指系统中物理性质和化学性质完全相同的均匀部分。相变, 是指在特定条件下相的变换。以水为例, 在不同的温度和气压条件下, 常见的物态有固态、液态、气态。如今我们发现水甚至存在十几种物相, 如图1所示。

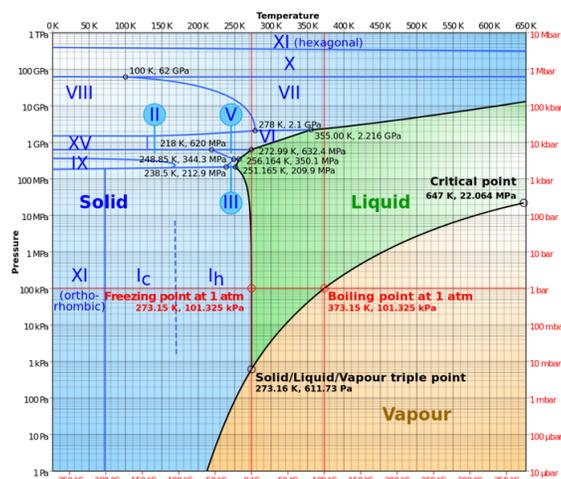


图 1

为了对相变进行分类，若相变临界点处化学势的 $n-1$ 阶导连续，而 n 阶导不连续，我们称这种相变为 n 级相变。当 $n=1$ 时，为一级相变，也称作不连续相变。常见的特性有：熵不连续、有潜热。当 $n \geq 1$ 时，称作连续相变，常见的特性有：没有相界、没有潜热。除此以外，相变还可以根据结构和动力学机制的不同进行分类。后面我们将看到连续相变和一级相变的区别。

3 Landau平均场理论

在Landau提出平均场理论之前，就已经有了许多用来描述相变的理论。最为著名的就是Van der Waals方程 $(p + \frac{a}{v^2})(v - b) = RT$ 。这个方程经过等面积法调整后，可以用来描述气液转变过程。但是，这些理论往往只能描述一种或一类物质，并不具有普遍性。

3.1 理论核心

首先，我们定义一个物理量称为序参量，用来描述系统的对称性程度。序参量是对一个系统的某个物理量的抽象概念，对于不同的系统实际描述的物理量是不同的。以铁磁系统为例，此时序参量就是这个系统的磁矩大小。磁矩是铁磁系统每个格点自旋大小的平均，磁矩(的绝对值)越大，整体而言自旋越有指向性(向上或向下)，也就是系统越有序。对于其它系统序参量的定义，可参考图2中的定义。

表 4-1 几种连续相变的类比

相变名称	序参量	对偶场	破缺的对称	恢复对称的模式
气液临界点	$\rho_{液} - \rho_{气}$	压力 P	反 射	声波
有序-无序、 溶液混合	$\rho_1 - \rho_2$	化学势 μ	反 射	声波
单轴铁磁体	M	H	$M \leftrightarrow -M$	自旋波
单轴反铁磁体	次晶格 M	交错场 H	次晶格 $M \leftrightarrow -M$	自旋波
各向同性铁磁体	M	H	三维转动群	自旋波
铁电体	P	E	晶体对称群	软模
超 导	能隙 Δ	无经典对应	$U(1)$ 规范群	集体激发
超 流	波函数 ψ	无经典对应	$U(1)$ 规范群	集体激发

图 2

我们把自由能写作与序参量相关的形式 $G(T, P, M)$ ，并关于 M 作Taylor展开：

$$G(T, P, M) = G_0(T, P) + \frac{1}{2}rM^2 + \frac{1}{3}AM^3 + \frac{1}{4}uM^4 + \frac{1}{5}BM^5 + \frac{1}{6}vM^6 + \dots - HM$$

其中， H 是外场大小。在热平衡的条件下，自由能为极小值，要求满足 $\frac{\partial G}{\partial M} = 0$ ， $\frac{\partial^2 G}{\partial M^2} > 0$ 。

这里，Landau作了两个重要的假设。一是无外场，即 $H = 0$ ；二是自由能有反演对称性，即 $G(M) = G(-M)$ ，容易得到所有奇次项系数为0。

3.2 M 的四次项——连续相变

下面我们考虑一个具有反演对称性的、无外场、保留到 M 四次项的模型，自由能为：

$$G(T, P, M) = G_0(T, P) + \frac{1}{2}rM^2 + \frac{1}{4}uM^4$$

由于热力学稳定性要求 $\frac{\partial^2 G}{\partial M^2} > 0$ ，可得 $u > 0$ ，并假设 u 在临界点附近缓变，可以看作一个常数。定义约化温度 $t \equiv (T - T_c)/T_c$ ， T_c 为临界温度，此时系数 r 可以写作 $r = r(t) = \sum_{k=0}^{\infty} r_k t^k$ 。当 $t \rightarrow 0$ 时，我们忽略二阶及更高阶项，为了后面计算的磁化率是有物理意义的结果，因此 $r_0 = 0$ 。因此， $r = r_1 t = a(T - T_c)$ ，其中 $a \equiv r_1/T_c$ 。

根据 $\frac{\partial G}{\partial M} = 0$ ，可以解出 $M = 0$ 和 $M = \pm\sqrt{-r/u} \propto \pm|T - T_c|^{1/2}$ 。对于第一个解 $M = 0$ ，要求 $r > 0$ ，此时温度大于临界温度，为无序解。对于第二个解 $M \propto \pm|T - T_c|^{1/2}$ ，要求 $r < 0$ ，此时温度小于临界温度，为有序解。图3为序参量 M 关于温度 T 的曲线，可以看到序参量是连续变化的，因此这种相变是连续相变。

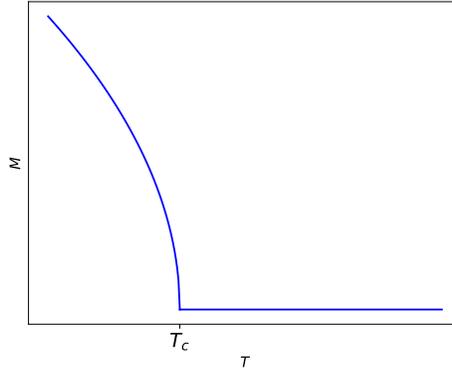


图 3

利用 M 的显式表达式容易得到熵 S ，热容 c_p 和磁化率 χ 的表达式：

$$S = -\frac{\partial G}{\partial T} = S_0 - \frac{\partial}{\partial T} \left[-rM^2 + \frac{1}{4}uM^4 \right] = \begin{cases} S_0 + \frac{a^2}{2u}(T - T_c) & , T < T_c \\ S_0 & , T > T_c \end{cases}$$

$$c_p = T \frac{\partial S}{\partial T} = \begin{cases} C_p + \frac{a^2}{2u}T & , T < T_c \\ C_0 & , T > T_c \end{cases}$$

$$\chi = \left(\frac{\partial^2 G}{\partial M^2} \right)^{-1} = \frac{1}{r + 3uM^2} = \begin{cases} \frac{1}{a(T - T_c)} & , T > T_c \\ \frac{1}{2a(T_c - T)} & , T < T_c \end{cases}$$

3.3 M 的六次项——一级相变

具有反演对称性的、无外场、保留到 M 六次项的模型，也称作 Landau-Devonshire 理论。与上一小节类似，我们先写出自由能：

$$G(T, P, M) = G_0(T, P) + \frac{1}{2}rM^2 + \frac{1}{4}uM^4 + \frac{1}{6}vM^6$$

热力学稳定性要求 $\frac{\partial^2 G}{\partial M^2} > 0$ ，因此 $v > 0$ ，并假设 v 在临界点附近缓变，可以看作一个常数。此时 r 和 u 的符号并不能确定。若 $u > 0$ ，此时将回到上一小节连续相变的形式，序参量的 M 大小取决于 r 的符号。 $u = 0$ 也是类似的情况，只需对上一小节的结果中 M 的指数作一些修改即可。因此，我们本节讨论的是 $u > 0$ 情况，并假设为一个常数。

令 $\frac{\partial G}{\partial M} = 0$ ，可以得到 $M = 0$ ，和 $M_{\pm}^2 = \frac{-u \pm \sqrt{u^2 - 4vr}}{2v}$ 两组解。图4是自由能与序参量，随着温度上升的变化曲线。

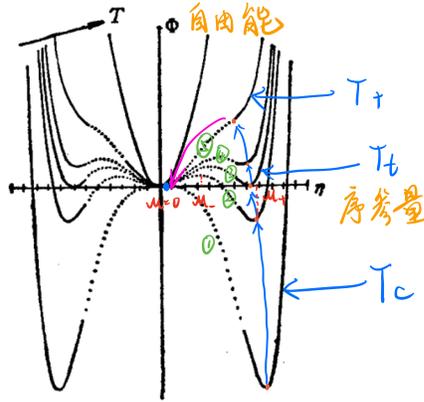


图 4

可以看到，当温度 T 较低时， M_- 的解可能并不存在，如曲线①所示。当温度上升到临界值时，开始出现 M_- 的解。临界值要求 $M_- = 0$ ，可以解得 $T = T_c$ 。

当温度继续上升，同时有 M_0 、 M_- 、 M_+ 三个解。根据自由能最小和稳定性原则，此时系统会倾向于处于 M_+ 解的状态，如曲线②所示。

当 M_0 解和 M_+ 解的自由能相等时，即 $G(M = 0) = G(M = M_+) = 0$ ，此时来到了第二个临界温度，可以解得 $T = T_l \equiv T_c + 3u^2/16av$ ，如曲线③所示。如果温度继续上升，此时仍有 M_0 、 M_- 、 M_+ 三个解，但是 $G(M = 0) < G(M = M_+)$ ，系统将从 M_+ 跃变到 M_0 ，之后会倾向于处于 M_0 解的状态，因此此时为相变点。

如果温度继续上升，如曲线④所示，系统将从 M_+ 跃变到 M_0 ，序参量跃变量 $\Delta M \equiv M_+ - M_0 = \sqrt{-3u/4v}$ 。同时也能计算得到 $T = T_l$ 时的势垒 $G(M_- = \sqrt{-u/4v}) - G(0) = -u^3/96v$ 。由于势垒的存在，系统仍有一定的概率处于 M_+ 的状态。

当温度上升到第三个临界点，此时 M_- 、 M_+ 解同时消失，如曲线⑤所示。数学上当 M_+ 解的根号内 $u^2 - 4vr = 0$ ，可得 $T = T_+ \equiv T_c + \frac{u^2}{4av}$ 。此时系统一定处于 M_0 的状态，因此 $T = T_+$ 也称为 M_+ 相的稳定极限。

可以看到，在相变点 $T = T_l$ 前后，序参量会发生跃变，因此此时描述的是一级相变。

3.4 局限性

平均场理论无需考虑具体的物质，用一个简单的框架统一了连续相变和一级相变，这一切看上去都非常完美。但是，由于涨落和关联的原因，平均场理论在临界点附近反而会出现很大的误差，此时平均场理论就有了很大的局限性。

为了说明这一点，我们先假设临界点附近的涨落不大，根据平均场理论，我们对自由能 F 关于 M 作 Taylor 展开：

$$F(T, V, M) = \frac{1}{2} \int d\vec{x} [rM(\vec{x})^2 + K(\nabla M(\vec{x}))^2], (K > 0)$$

与前一小节不同的是，前面我们假设 M 是一个标量，这里我们认为 $M = M(\vec{x})$ 与具体位置有关。为了处理积分中梯度的麻烦，我们对 $M(\vec{x})$ 作 Fourier 变换：

$$M(\vec{x}) = \sum_{\vec{k}} M_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$$

容易得到：

$$F(T, V, M) = \frac{V}{2} \sum_{\vec{k}} |M_{\vec{k}}|^2 r (1 + k^2 \xi_c^2)$$

其中 $\xi_c \equiv \sqrt{K/r} = \sqrt{K/a}(T - T_c)^{-1/2}$ 称作关联长度。显然，当 $T \rightarrow T_c$ 时，将 ξ_c 趋近于 ∞ 。但是，此时 ξ_c 的物理意义仍不明确。

我们知道一个状态出现的几率 $\propto e^{-\beta F}$ ，这里我们不妨假设 $\langle M(\vec{x}) \rangle = 0$ ，此时平衡时 $F = 0$ ，因此 F 的大小将表示为涨落能量的大小，涨落几率 $\propto e^{-\beta F}$ 。此时均方几率为：

$$\langle |M_{\vec{k}}|^2 \rangle = \frac{k_B T}{V r (1 + k^2 \xi_c^2)}$$

当 $k \rightarrow 0$ （长波）且当 $T \rightarrow T_c$ 时，均方几率趋近于 ∞ ，意味着临界点附近的长波涨落将非常大。这与我们前面涨落不大的假设相矛盾，因此第一步 Taylor 展开的低阶项不能够被忽略，否则在临界点附近会出现很大的误差。

我们引入关联函数：

$$G(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) := \langle M(\vec{r}_1) M(\vec{r}_2) \rangle = \sum_{\vec{k}} \langle |M_{\vec{k}}|^2 \rangle e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} = \frac{k_B T}{8\pi K |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} e^{-|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/\xi_c}$$

可以看到，关联长度处于关联函数的指数的分母处，相当于一个特征量的地位。这个物理量具有长度的量纲，因此称作特征长度，可以衡量系统关联程度大小。

为了判断平均场理论的使用范围，我们还可以引入 Ginzburg 判据，它包含两个物理量：

$$t_G := \frac{|T_G - T_c|}{T_c} = \left(\Delta c_p \xi_0^d \right)^{2/(4-d)}$$

$$\xi_G := \xi_0 \left(\Delta c_p \xi_0^d \right)^{1/(4-d)}$$

t_G 称作约化 Ginzburg 温度， ξ_G 称作 Ginzburg 长度。当空间维度 $d > 4$ 时， $|t| \rightarrow 0$ ， $|t|^{(4-d)/2} \rightarrow \infty$ ，因此平均场理论一定成立。当 $d < 4$ 时，平均场理论则不一定成立了。此时只有 $t \gg t_G$ 或 $\xi \ll \xi_G$ ，平均场理论才有效。

4 微观模型

Landau 平均场理论是将所有微观模型抽象成一个系统进行研究。除此以外，如果给定一个具体的微观模型，我们还可以通过写出 Hamilton 量，得到配分函数，进一步求得自由能，熵，热容，磁化率等我们感兴趣的物理量。比较著名的微观模型有 Ising 模型、Potts 模型、Heisenberg 模型等等，如果涉及量子效应，还有横场 Ising 模型、Bose-Hubbard 模型等等。下面以 Ising 模型为例探讨如何直接求解一些特定的微观模型。

4.1 例子：Ising 模型

Ising 模型可以看作由一群格点组成的系统，每个格点只有朝上朝下 (+1/-1) 两种自旋状态，系统的 Hamilton 量可以写作：

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i$$

其中, $\langle i, j \rangle$ 表示只有相邻的格点才会求和。

一般来说, Ising模型有三种可能的相, 分别为顺磁相、铁磁相和反铁磁相。当格点自旋的取向随机分布, 宏观上磁矩 $M = 0$, 此时为顺磁相; 当格点自旋的取向全部平行排列 (同上同下), 此时宏观上磁矩 $M \neq 0$, 为铁磁相; 当格点自旋的取向反平行地排列, 即相邻格点取向尽可能地相反, 此时宏观上磁矩 $M = 0$, 为反铁磁相。

当 $J < 0$ 时, 为使自由能最小, 此时相邻格点取向尽可能地相反, 为反铁磁相。当 $J > 0$ 时, 格点会尽可能地取向相同, 为铁磁相。

配分函数为:

$$Z = \text{Tr} e^{-H/k_B T} = \sum_{S_1=\pm 1, S_2=\pm 1, \dots, S_N=\pm 1} e^{[J(S_1 S_2 + S_2 S_3 + \dots) + h(S_1 + S_2 + \dots)]/k_B T}$$

如果 $J = 0$, 我们可以得到以下结果:

$$\begin{aligned} Z &= 2^N \cosh\left(\frac{h}{k_B T}\right)^N \\ \langle S_i \rangle &= \tanh\left(\frac{h}{k_B T}\right) \approx h/k_B T \\ M &= n g \mu_B \langle S_i \rangle = n g \mu_B \tanh\left(\frac{h g \mu_B \mu_0}{k_B T}\right) \approx n \frac{(g \mu_B)^2 \mu_0}{k_B T} h \\ \chi &= \frac{M}{h} = n \frac{(g \mu_B)^2 \mu_0}{k_B T} \end{aligned}$$

可以看到, $\chi \propto C/T$, 与平均场理论结果一致。

若 $J \neq 0$, 此时自旋的耦合项就比较难以解决, 这时我们可以作如下近似:

$$H \approx -J \sum_i S_i \sum_j \langle S_j \rangle - h \sum_i S_i$$

即为假设每个格点, 受到相邻格点的作用力的大小都相同, 等于相邻格点的平均作用力, 这种近似称为平均场近似。忽略计算过程, 我们可以得到如下结论:

$$\begin{aligned} \langle S_i \rangle &= \tanh\left(\frac{h + J z \langle S_i \rangle}{k_B T}\right) \\ M &= M_0 \tanh\left[\frac{g \mu_B \mu_0 (h + \frac{J z M}{M_0})}{k_B T}\right] \end{aligned}$$

对上面二式的 \tanh 展开可得:

$$\frac{M}{M_0} \approx \frac{g \mu_B \mu_0}{k_B T} h + \frac{J z g \mu_B \mu_0}{k_B T} \left(\frac{M}{M_0}\right) - \frac{1}{3} \left[\frac{J z g \mu_B \mu_0}{k_B T} \left(\frac{M}{M_0}\right) \right]^3$$

这与平均场理论的形式是一致的, M/M_0 就是其中的序参量。由于前面计算用到了平均场近似, 这也是 Landau 理论称为平均场理论的原因。

相变临界点为:

$$T_c = \frac{J g \mu_B \mu_0}{k_B} z$$

临界点与空间维数 d 没有直接关系, 只与配位数 z 有关, 但 z 与 d 在几何上有一定的关系, 因此临界点与 d 有间接关系。

平均场近似得到的只是近似解，一维Ising模型的严格解表明一维Ising模型没有相变，二维、三维及以上才会有相变。而且低维的Ising模型平均场解和数值解相差很大，但高维的时候相差很小，这是因为高维的时候 z 也会较大，格点受到平均力才更加接近附近格点的作用力（类似大数定理），平均场解才会更加准确。这也侧面验证了平均场理论只有在 $d > 4$ 条件下才成立，若 $d < 4$ 会由于涨落导致较大误差。

Ising模型在一维情况下没有相变现象（或者说临界温度为绝对零度 $T_c = 0$ ），但在二维以及更高维下有相变现象。因此 $d = 1$ 称为下临界维度，表示存在相变的最小维度。Ising模型是一个离散对称模型，格点只能取 $+1/-1$ 两个分立的值。对于连续对称模型，格点自旋可以取连续的值，可以证明二维情况下仍没有相变，只有在三维及以上才有相变，此时连续对称模型的下临界维度为 $d = 2$ 。

4.2 自发对称性破缺

有的系统具有高对称性，例如同时满足空间平移对称、空间旋转对称，而有的系统具有低对称性，例如只满足空间平移对称性。当系统从高对称性演变到低对称性，有些对称性就会被隐藏，这样的过程称为自发对称性破缺。以Ising模型为例，高温时系统处于无序相，磁矩 $M = 0$ ，系统有 Z_2 (反演)对称性，即将所有格点自旋翻转过来，系统保持不变。低温时系统属于有序相，磁矩 $M \neq 0$ ，此时将系统所有格点自旋翻转过来，磁矩会反向，也就是说，此时系统失去了 Z_2 对称性。因此，相变意味着系统发生了某种对称性的破缺。

我们常用群来描述对称性。例如描述Ising模型的就是 Z_2 群，其它的系统可以参考图1。Ising模型中格点自旋的取值是分立的，描述对称性的 Z_2 群也是离散群。如果格点自旋的取值是连续的，例如Heisenberg模型，那么描述对称性的群也会是一个连续群（李群），两者是一一对应的。

5 重整化理论

Landau平均场理论在临界点附近有很大的误差，这是因为它假设自由能是序参量的解析函数，但临界点附近热力学量的奇异性与之矛盾，另一方面平均场理论忽略了涨落。因此，临界点附近的相变动力学机制，往往用重整化理论来进行描述。

5.1 临界指数与标度律

临界点附近的行为，或临界现象，无论是连续相变还是一级相变，往往都是发散的。为了处理临界点附近的发散行为，我们引入了临界指数 ε ，其定义如下：

$$\varepsilon = \lim_{x \rightarrow 0^+} \frac{\ln \varphi(x)}{\ln x}$$

这里我们假设临界点为 $x = 0$ ， φ 是我们关心的物理量。此时 $\varphi(x > 0) \sim x^\varepsilon$ 。

当 φ 取为热容 c ，磁矩 M ，磁化率 χ ，关联函数 $G(r)$ ，关联长度 ξ_c ，可以得到我们比较关心的有六个临界指数 $\alpha, \beta, \gamma, \eta, \nu, \delta$ ，它们的定义如下：

$$\begin{aligned}
c &\propto \begin{cases} (T - T_C)^{-\alpha}, (T > T_C) \\ (T_C - T)^{-\alpha'}, (T < T_C) \end{cases} \\
M &\propto (T - T_C)^\beta, (T < T_C) \\
\chi &\propto \begin{cases} (T - T_C)^{-\gamma}, (T > T_C) \\ (T_C - T)^{-\gamma'}, (T < T_C) \end{cases} \\
G(r) &\propto r^{-(d+\eta-2)}, (r \rightarrow \infty, T = T_C^\pm) \\
\xi_c &\propto \begin{cases} (T - T_C)^{-\nu}, (T > T_C) \\ (T_C - T)^{-\nu'}, (T < T_C) \end{cases} \\
H &\propto M^\delta, (T = T_C)
\end{aligned}$$

其中， d 为空间维度。可以证明， $\alpha = \alpha'$ ， $\gamma = \gamma'$ ， $\nu = \nu'$ 。

除此以外，这些标度指数并不是完全独立的，他们满足以下的标度律：

$$\begin{aligned}
\alpha + 2\beta + \gamma &= 2 \\
\gamma &= \nu(2 - \eta) \\
\beta\delta &= \beta + \gamma \\
\alpha &= 2 - d\nu, (d \leq 4)
\end{aligned}$$

也就是说，六个标度指数只有两个是独立的。这些标度律的不等式形式可以从热力学中得到，但在数值上实际是相等的（也就是说不等号实际是等号）。

得到这些临界指数最简单的方法就是用平均场理论求解，除此以外我们还可以用重整化理论得到。

5.2 重整化

标度变换，就是对系统尺寸进行放大缩小的操作。而标度不变性，是指在标度变换下保持不变的物理性质。图5就是一个典型例子，如果我们把每四个自旋格点看作是一个大自旋块，这些大自旋块的自旋取决于块内小自旋的方向，这相当于一种缩小操作。如果小自旋格点数量为 N ，大自旋块数量为 N' ，他们满足 $N' = L^{-d}N$ 。其中 d 是空间维度， L 是缩放的比例因子，这个例子中 $d = 2$ ， $L = 2$ 。经过这样的“缩小”变换后，由大自旋块组成的系统和小自旋组成的系统，在宏观上并没有什么不同，这就是标度不变性。

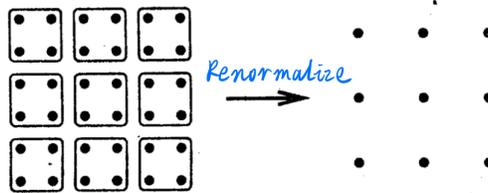


图 5

而重整化理论的核心思想是，在临界点附近，涨落非常大，关联长度 ξ_c 趋于 ∞ ，因此即使在临界点附近进行标度变换，关联长度的变化 $\xi'_c = L^{-1}\xi_c$ ，与我们所观测的尺度相比，几乎可以忽略不计。也就是说，在临界点附近，系统有标度不变性。

假设系统的Hamilton量与参数矢量 \mathbf{K} 相关（其基矢可能是温度 t ，外场 h 或其它参数），经过一次格点自旋 \rightarrow 大块自旋的变换后，有：

$$\mathbf{K}' = T(\mathbf{K})$$

这称作重整化变换，或粗粒化。这就可能存在一种情况， $\mathbf{K}^* = T(\mathbf{K}^*)$ ，即使经过无数次的变换，参数 \mathbf{K}^* 仍保持不变，此时 \mathbf{K}^* 称作不动点。在不动点上，每经过一次变换，关联长度 ξ_c 都会变小，除非在参数 \mathbf{K}^* 下，系统处于临界点， $\xi_c \rightarrow \infty$ ，也就是说，不动点一定是临界点。除此以外，也可能有一些点 \mathbf{K} 在经过这样的变换后，到达点 \mathbf{K}^* ，这就要求关联函数在点 \mathbf{K} 同样是趋于 ∞ 。所有的点 \mathbf{K} 组成一个曲面，曲面上 $\xi_c \rightarrow \infty$ ，这个曲面称作为临界面。面上的每一个点，对应不同系统的临界点，而且在连续的重整化变换下，会不断地流向不动点 \mathbf{K}^* 。

为了探究不动点 \mathbf{K}^* 的性质，我们可以考虑不动点附近的无穷小偏离，重整化变换前： $\mathbf{K} = \mathbf{K}^* + \delta\mathbf{K}$ ，重整化变换后： $\mathbf{K}' = \mathbf{K}^* + \delta\mathbf{K}'$ ，满足 $\mathbf{K}^* = T(\mathbf{K}^*)$ ， $\mathbf{K}' = T(\mathbf{K})$ 。容易得到， $\delta\mathbf{K}' = A\delta\mathbf{K}$ ， A 是Jacobi矩阵，其本征值和本征矢满足 $A\vec{e}_1 = \lambda_1\vec{e}_1$ ， $A\vec{e}_2 = \lambda_2\vec{e}_2$ 。不妨对 $\delta\mathbf{K}$ 关于 $\{\vec{e}_i\}$ 展开，即： $\delta\mathbf{K} = \delta u_1\vec{e}_1 + \delta u_2\vec{e}_2$ 。有：

$$\delta\mathbf{K}'^{(n)} = A^{(n)}\delta\mathbf{K} = \lambda_1^n\delta u_1\vec{e}_1 + \lambda_2^n\delta u_2\vec{e}_2$$

显然 λ_i 的大小不同，就有可能存在不同的情况。如果 $\lambda_i > 1$ ， δu_i 将会不断变大，驱使系统远离这个不动点，这会导致这个不动点是不稳定的，因此被称作为相关量。如果 $\lambda_i < 1$ ， δu_i 会不断变小，显得越来越不重要，因此被称作为无关量。在不断的重整化变换下，此时系统将会趋于不动点。而前面介绍说临界面上的所有点都是趋于不动点的，说明临界面上所有点的相关量都等于零，均由无关量组成。如果 $\lambda_i = 0$ ，在变换下 δu_i 保持不变，对系统没有影响，因此被称作边引量。

有时， λ_i 也常写作 $\lambda_i = L^{\gamma_i}$ ， L 是系统的尺度大小。

5.3 标度理论

历史上标度理论的提出要早于重整化理论，在标度假设下可以导出标度律。后来重整化理论进一步完善了标度理论。

标度理论中有一个重要的假设，即在临界点附近，标度变换前后的自由能保持一致，即 $N'F(t', h') = NF(t, h)$ ，因此有：

$$F(t, h) = L^{-d}F(t', h') = L^{-d}F(L^x t, L^y h)$$

上式也可以通过重整化理论中，配分函数在标度变换前后保持不变的性质，推导出来。注意，这里的自由能默认是指代其奇异的部分，因此省略了下标 s 。 t' 和 h' 是标度变换后的温度和外场，此时 x 和 y 仍是未知的。

磁矩 $M = -\frac{\partial F}{\partial h} \propto L^{-d+\gamma} F_h(L^x t, L^y h)$ ，令 $L = t^{-1/x}$ ， $h = 0$ ，这一步相当于将系统趋近于临界点，容易得到 $M = t^{(d-\gamma)/x} F_h(1, 0) \propto t^{(d-\gamma)/x}$ 。对比前面临界指数可以得到： $\beta = (d - \gamma)/x$ 。

类似地，可以得到 $\alpha = (2x - d)/x$ ， $\gamma = (2y - d)/x$ ， $\delta = y/(d - y)$ 。将临界指数进行简单组合，容易得到标度律： $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ ， $\beta + \gamma = \beta\delta$ 。

5.4 有限尺度标度理论

前面我们所讨论的内容，都是在热力学极限的条件下，系统尺寸远大于关联长度的大小。但实际热力学系统尺寸终究是有限的，因此在实验上只需系统尺寸大于关联长度几倍，我们就可以认为满足热力学极限。

但是，在临界点附近关联长度趋于 ∞ ，此时热力学极限不再成立，系统尺寸不能看作是无穷大，因此上一小节中， $L \rightarrow \infty$ 的操作就不再成立，这时候我们需要探讨在 L 有限的情况下，结果会有什么变化。

这里我们省略了计算步骤，直接给出一些结论。此时磁化率 χ 和热容 c 可以表示为：

$$\chi(t, h) = L^{\gamma/\nu} \chi_L(tL^{1/\nu}) \propto L^{\gamma/\nu}$$

$$c(t, h) = L^{\alpha/\nu} c_L(tL^{1/\nu}) \propto L^{\alpha/\nu}$$

此时，只要在实验上得到磁化率(或热容)与温度的关系曲线，就能够求得系统的临界指数了。

6 标度性与普适性

标度性，或标度不变性，是相变的一个重要的特征，如果我们把前面自由能的表达式简化为： $f(\lambda x) = \lambda^{-\Delta} f(x)$ ，容易得到 $y = f(x) = x^{-\Delta}$ ，或 $\ln y = -\Delta \ln x$ ， Δ 就是临界指数。也就是说，标度性还可以表述成：两个量的对数值呈线性关系。事实上，我们生活中还有许多标度性的例子，例如几何的分形，海岸线的边界等等，当我们对这些图形放大缩小时，形状并没有发生变化，这与相变的标度变换是一样的。

在重整化群理论中还有一个重要的概念——普适类。前面介绍过临界面上的每一个都代表不同的系统，而这些点最终都会流向同一个不动点，因此我们说这些系统都属于同一个普适类。同一个普适类的临界指数都是相同的，因此他们的临界行为也是相似的。图6展示了不同的系统遵守同一个临界行为的情形。而且，在实验的基础上，还有一个普适性假设：只有空间维数 d 和序参量维数 n 决定体系的临界行为。也就是说，只要 d 和 n 相同，那么这些系统均属于同一个普适类，这与具体物质，具体相互作用无关。这将大大简化我们对不同系统的临界行为的研究。我们只需研究普适类中的某一种系统，那么普适类中所有的系统的临界行为都是已知的，这就是所谓普适性。

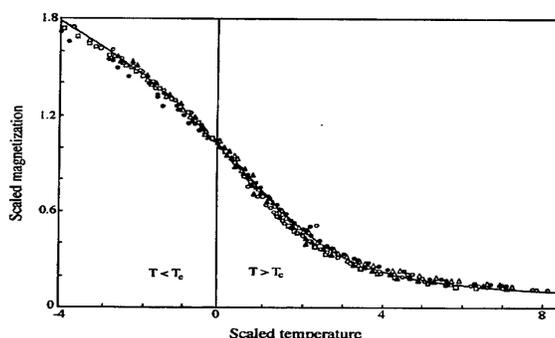


图 6

7 总结

相变与临界现象是上个世纪热门研究方向之一，一方面是因为相变竟然有如此神奇的标度性和普适性，另一方面相变在日常生活中几乎无处不在，研究相变有重要的意义。本学期主要学习了研究相变的两大工具，Landau平均场理论和重整化理论，这两个理论都有其各自的使用范围。如今相变理论也在快速发展中，

例如课堂上介绍的 Φ^3 理论的变温一级相变，等等。而且相变与其他学科也有重要的联系，例如凝聚态物理，材料科学，生物物理，这意味着相变将会在未来科学研究中充当越来越重要的角色。

参考文献

- [1] PATHRIA R K, BEALE P D. Statistical Mechanics, Third Edition[M]. [S.l.: s.n.], 2007.
- [2] NISHIMORI H, ORTIZ G. Elements of Phase Transitions and Critical Phenomena[M]. 2011. DOI: [10.1093/acprof:oso/9780199577224.001.0001](https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780199577224.001.0001).