一维伊辛(Ising)模型

相变，对称性破缺与定积热容的临界指数

Yan Zha (查言)

2024.10.17

1 一维Ising模型

1.1 一维Ising模型的平均场近似

一维Ising模型指的是将两个能级系统的量子状态($|0\rangle$和$|1\rangle$)映射为沿着z轴“向上”或“向下”的经典矢量的模型。其中，对于任何一个S_i可以取值为± 1。 一维Ising模型的哈密顿量$\mathcal{H}$为:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_{i}^{N} S_i \tag{1}$$

其中，J表示自旋间的相互作用(交换积分)。当自旋呈现平行排列时，为保证系统的能量较低，J为正值(铁磁)；当自旋呈现反平行排列时，J为负值(反铁磁)。此处我们讨论的J表示铁磁相互作用(ferromagnetic interactions)，指相邻自旋沿同一方向排列的“交换相互作用”。

每个自旋可以表示为其平均值和相对于平均值的偏差。因此，式(1)可以写为:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\langle S_i \rangle + \delta S_i \right) \left(\langle S_j \rangle + \delta S_j \right) - h \sum_{i}^{N} S_i \tag{2}$$

展开上式可得:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle + \delta S_i \langle S_j \rangle + \delta S_j \langle S_i \rangle + \delta S_i \delta S_j \right\} - h \sum_{i}^{N} S_i. \tag{3}$$

可以忽略δS_i的二次项$\delta S_i \delta S_j$。由于根据平均值的定义，有$\langle S_i \rangle = \langle S_j \rangle = \langle S \rangle$，因此式(3)可以写为:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &\approx -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ \langle S \rangle^2 + (\delta S_i + \delta S_j) \langle S \rangle \right\} - h \sum_{i}^{N} S_i \\
&= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ \langle S \rangle^2 + (S_i - \langle S \rangle + S_j - \langle S \rangle) \langle S \rangle \right\} - h \sum_{i}^{N} S_i \\
&= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ \langle S \rangle^2 + (S_i + S_j) \langle S \rangle - 2 \langle S \rangle^2 \right\} - h \sum_{i}^{N} S_i \\
&= J \sum_{\langle i,j \rangle} \langle S \rangle^2 - J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i + S_j) \langle S \rangle - h \sum_{i}^{N} S_i.
\end{aligned} \tag{4}$$

此外，由于在$\sum_{\langle i,j \rangle}$中，每个自旋的相互作用仅与它的第一近邻有关，因此总和的上限由键(bond)的数量决定。键的数量N_B定义为:

$$N_B = \frac{zN}{2} \tag{5}$$

其中，N是自旋的数量，z称为配位数(即一个格点与其相邻的格点之间的键的数量)。

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H} &= J\frac{zN}{2}\langle S\rangle^2 - J\frac{z}{2}2\sum_i^N S_i\langle S\rangle - h\sum_i^N S_i \\
&= \frac{JzN}{2}\langle S\rangle^2 - Jz\langle S\rangle\sum_i^N S_i - h\sum_i^N S_i \\
&= \frac{JzN}{2}\langle S\rangle^2 - \left(Jz\langle S\rangle + h\right)\sum_i^N S_i \\
&= \frac{JzN}{2}\langle S\rangle^2 + \mathcal{H}_{\mathrm{MF}}.
\end{aligned}
\tag{6}
$$

蓝色部分被称为“有效磁场(effective magnetic field)”，其中$Jz\langle S\rangle$表示由周围自旋平均化后的“平均场”，h则表示外部磁场。

将平均自旋$\langle S\rangle$替换为磁化强度(magnetization)m，并忽略原哈密顿量中的常数部分，平均场近似后的哈密顿量$\mathcal{H}_{\mathrm{MF}}$为：

$$
\mathcal{H}_{\mathrm{MF}} = -Jmz\sum_i^N S_i - h\sum_i^N S_i \tag{7}
$$

该式与原哈密顿量$\mathcal{H}$去掉常数部分后相同。某个自旋S_i通过与周围自旋的相互作用受到的影响，可以视作等效于强度为Jmz的外部磁场。

当不施加外部磁场时($h=0$)，

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\mathrm{MF}} &= -Jmz\sum_i^N S_i \\
&= -JmzS_1 - JmzS_2 - JmzS_3\cdots - JmzS_N \\
&= \mathcal{H}_{\mathrm{MF}_1} + \mathcal{H}_{\mathrm{MF}_2} + \mathcal{H}_{\mathrm{MF}_3} + \cdots + \mathcal{H}_{\mathrm{MF}_N} \\
&= \sum_i^N \mathcal{H}_{\mathrm{MF}_i}.
\end{aligned}
\tag{8}
$$

将每个自旋视作一个系统，并写出该系统的配分函数Z_1：

$$
\begin{aligned}
Z_1 &= \sum_{S_i=\pm1}\exp\left(-\beta\mathcal{H}_{\mathrm{MF}_i}\right) \\
&= \sum_{S_i=\pm1}\exp\left(\beta JmzS_i\right) \\
&= \exp(\beta Jmz) + \exp(-\beta Jmz).
\end{aligned}
\tag{9}
$$

某个自旋S_i的平均值为：

$$
\begin{aligned}
\langle S_i\rangle &= \frac{\sum_{S_i=\pm1} S_i\exp\left(-\beta\mathcal{H}_{\mathrm{MF}_i}\right)}{Z_1} \\
&= \frac{\exp(\beta Jmz) - \exp(-\beta Jmz)}{\exp(\beta Jmz) + \exp(-\beta Jmz)} \\
&= \frac{\sinh\left(\beta Jmz\right)}{\cosh\left(\beta Jmz\right)} \\
&= \tanh\left(\beta Jmz\right).
\end{aligned}
\tag{10}
$$

由于系统的空间均匀性(即性质不随位置变化)，S_i的平均值$\langle S_i\rangle$与该系统中任意自旋的平均值相同，因此可以用磁化强度m来表示。整理上述式子后，可以得到：

$$
m = \tanh\left(\beta Jmz\right). \tag{11}
$$

这个方程被称为“自洽方程”，通过数值求解该方程，可以得到磁化强度m的值(见图1)。

1.2 相变(phase transition)

β是温度的倒数，因此温度T可以表示为$\frac{1}{\beta}$(取Boltzmann常数k为1)。当系统温度低于Jz时，m与$\tanh(\beta Jzm)$的交点有三个，如图1所示。换句话说，当系统温度高于Jz时，平均自旋只能为0。理论上，当系统温度低于Jz时，m有两个非零解，需要从中选择一个，这意味着处于两种状态的叠加。

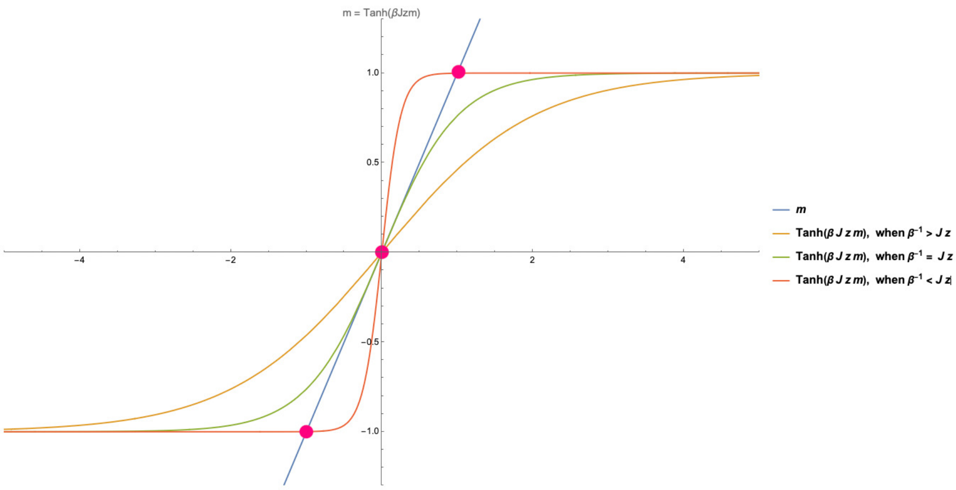

Figure 1: 自洽方程($m = \tanh(\beta Jzm)$)的温度依赖性。当$T = \beta^{-1} < Jz$时，$f(m) = m$的交点有三个。

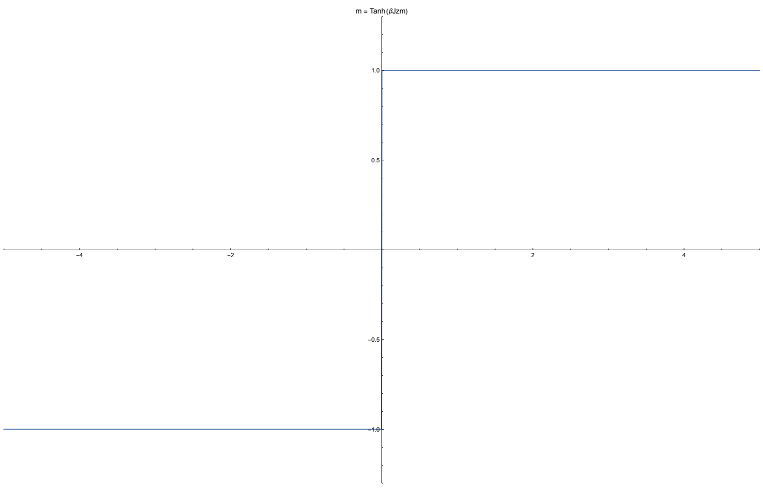

Figure 2: 当$T \to 0$时的自洽方程($m = \tanh(\beta Jzm)$)。

然而，在现实世界中，由于地球的磁场等微小的外部扰动(微扰)，会发生自发对称性破缺(spontaneous symmetry breaking)，导致自旋沿着扰动方向排列。这个Jz被称为“转变温度/临界温度(critical temperature)”，通常记作T_c或温度的倒数β_c。

$$T_c = Jz, \ \beta_c = \frac{1}{Jz} \tag{12}$$

此外，当转变温度被称为“居里温度(Curie temperature)”时，T_c或β_c中的小写字母c也可以表示居里温度。

接下来讨论系统温度无限接近绝对零度(即温度的倒数β无限接近无穷大∞)时会发生什么。

如图2所示，当系统温度无限接近绝对零度时，函数会发生不连续的变化，而非平滑地变化。在$m \neq 0$的区域，磁化强度值为常数，且平行于横轴，这表明在绝对零度时，如果不施加外部磁场，系统的磁化强度始终为最大值。

1.3 朗道的自由能现象论(朗道自由能)与自发性对称性破缺

在讨论二级相变点附近系统的定容比热C_V之前，让我们首先讨论朗道的自由能现象论，并从中推导出定容比热和临界指数等。

首先，考虑像Ising模型这样只有两个能级系统(即能量只能取正或负值的系统)的熵(entropy)。假设系统中自旋的数量为N，向上自旋的数量为$N_\uparrow$，向下自旋的数量为$N_\downarrow$。那么系统可能的状态数W为:

$$W = \frac{N!}{N_\uparrow! N_\downarrow!} \tag{13}$$

根据Boltzmann的熵公式(Boltzmann's entropy formula)

$$S = k_B \log W \tag{14}$$

以及Stirling公式

$$\log N! \approx N \log N - N \tag{15}$$

进行计算得到:

$$S = k_B \left\{ N \log N - N_\uparrow \log N_\uparrow - N_\downarrow \log N_\downarrow \right\}. \tag{16}$$

此外，将平均自旋$\langle S\rangle$用全自旋数N、向上自旋数$N_\uparrow$、向下自旋数$N_\downarrow$表示，则有:

$$\langle S\rangle = \frac{1}{N}\sum_i^N S_i = \frac{1}{N}\left\{(+1)N_\uparrow + (-1)N_\downarrow\right\} = \frac{N_\uparrow - N_\downarrow}{N} \tag{17}$$

因此有:

$$N_\uparrow - N_\downarrow = N\langle S\rangle \tag{18}$$

由于$N = N_\uparrow + N_\downarrow$，因此可以将$N_\uparrow$和$N_\downarrow$表示为全自旋数$N$和平均自旋$\langle S\rangle$:

$$\begin{aligned} N_\uparrow &= \frac{N}{2}(1+\langle S\rangle) \\ N_\downarrow &= \frac{N}{2}(1-\langle S\rangle). \end{aligned} \tag{19}$$

因此，系统的熵S为:

$$\begin{aligned} S &= k_B\left\{N\log N - \frac{N}{2}(1+\langle S\rangle)\log\frac{N}{2}(1+\langle S\rangle) - \frac{N}{2}(1-\langle S\rangle)\log\frac{N}{2}(1-\langle S\rangle)\right\} \\ &= k_B\left\{N\log N - \frac{N}{2}(1+\langle S\rangle)\left[\log\frac{N}{2}+\log(1+\langle S\rangle)\right] - \frac{N}{2}(1-\langle S\rangle)\left[\log\frac{N}{2}+(1-\langle S\rangle)\right]\right\} \\ &= k_B\left\{N\log N - N\log\frac{N}{2} - \frac{N}{2}(1+\langle S\rangle)\log(1+\langle S\rangle) - \frac{N}{2}(1-\langle S\rangle)\log(1-\langle S\rangle)\right\} \\ &= k_B N\left\{\log 2 - \frac{1}{2}(1+\langle S\rangle)\log(1+\langle S\rangle) - \frac{1}{2}(1-\langle S\rangle)\log(1-\langle S\rangle)\right\} \\ &= \frac{1}{2}k_B N\left\{2\log 2 - (1+\langle S\rangle\Gamma)\log(1+\langle S\rangle) - (1-\langle S\rangle)\log(1-\langle S\rangle)\right\}. \end{aligned} \tag{20}$$

Helmholtz自由能F定义为:

$$F = E - ST \tag{21}$$

因此求出能量E后，可以得到Helmholtz自由能F。

当没有外部磁场时，Ising模型的能量E可以通过每个能级的哈密顿量$\mathcal{H}_{\mathrm{MF}_i}$和配分函数$Z_1$来计算。对于单个自旋，能量$E$为:

$$\begin{aligned} E &= \frac{\sum S_i = \pm 1 \mathcal{H}_{\mathrm{MF}_i}\exp(-\beta\mathcal{H}_{\mathrm{MF}_i})}{Z_1} \\ &= \frac{-Jz\langle S\rangle\exp(\beta Jz\langle S\rangle) + Jz\langle S\rangle\exp(-\beta Jz\langle S\rangle)}{\exp(\beta Jz\langle S\rangle)+\exp(-\beta Jz\langle S\rangle)} \\ &= -Jz\langle S\rangle\frac{\exp(\beta Jz\langle S\rangle)-\exp(-\beta Jz\langle S\rangle)}{\exp(\beta Jz\langle S\rangle)+\exp(-\beta Jz\langle S\rangle)} \\ &= -Jz\langle S\rangle\tanh(\beta Jz\langle S\rangle) \\ &= -Jz\langle S\rangle^2 \end{aligned} \tag{22}$$

对于多个自旋，需要乘以$\frac{N}{2}$(因为在考虑平均场时，会多次计算相同自旋的平均场效应，因此需要乘以$\frac{1}{2}$)，并将$\langle S\rangle$替换为m，得到能量E为:

$$E = -\frac{1}{2}NJzm^2. \tag{23}$$

将式(20)中的平均自旋$\langle S\rangle$也替换为磁化强度m，则Helmholtz自由能F为:

$$\begin{aligned} F &= -\frac{1}{2}NJzm^2 - \frac{1}{2}k_B N\left\{2\log 2 - (1+m)\log(1+m) - (1-m)\log(1-m)\right\} \\ &= -\frac{1}{2}k_B TN(2\log 2) - \frac{1}{2}NJzm^2 + \frac{1}{2}k_B TN\left\{(1+m)\log(1+m) - (1-m)\log(1-m)\right\} \end{aligned} \tag{24}$$

将与磁化强度m无关的项$-\frac{1}{2}k_B TN(2\log 2)$记为$F_0$，则Helmholtz自由能$F$为:

$$F = F_0 - \frac{1}{2}NJzm^2 + \frac{1}{2}k_B TN\left\{(1+m)\log(1+m) - (1-m)\log(1-m)\right\}. \tag{25}$$

接下来计算秩序参数(order parameter)m很小时的Helmholtz自由能。

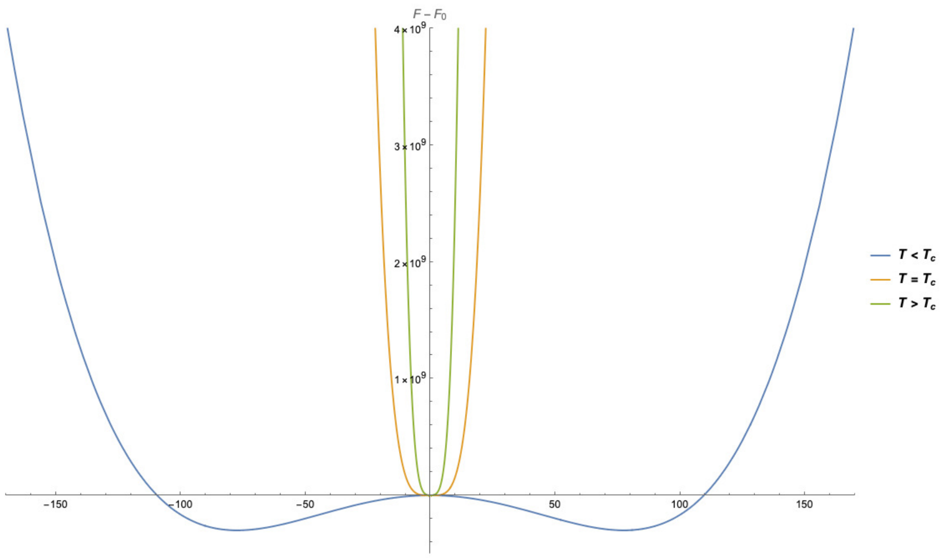

Figure 3: Landau拟自由能$(F-F_0)$的温度依赖性。当$T\geq T_c$时，在$m=0$处自由能F达到最小，系统处于最稳定状态，此时系统无磁性。相反，当$T<T_c$时，在$m=m_s$处自由能F达到最小，系统处于最稳定状态，此时系统具有磁性。

对$\log(1-m)$和$\log(1+m)$进行Taylor展开，分别得到：

$$\begin{aligned}\log(1-m)&\approx -m-\frac{1}{2}m^2-\frac{1}{3}m^3-\frac{1}{4}m^4-\dots\\ \log(1+m)&\approx m-\frac{1}{2}m^2+\frac{1}{3}m^3-\frac{1}{4}m^4+\dots\end{aligned}. \tag{26}$$

取$k_B=1$，将其代入式(25)并计算至四次项(计算过程略去)，得到：

$$F=F_0+\frac{1}{2}N\left(T-T_c\right)m^2+\frac{1}{12}TNm^4. \tag{27}$$

如图(3)所示，当$T\geq T_c$时，在$m=0$处自由能F达到最小，系统处于最稳定状态，此时系统无磁性。相反，当$T<T_c$时，在$m=m_s$处自由能F达到最小，系统处于最稳定状态，此时系统具有磁性。

通过对式(34)对磁化强度m求偏导，可以得到使自由能最小的自发磁化(spontaneous magnetization)m_s。

$$\frac{\partial\left(F-F_0\right)}{\partial m}=0 \tag{28}$$

解得自发磁化m_s为：

$$m_s=\pm\sqrt{3\frac{|T-T_c|}{T}} \tag{29}$$

1.4 二级相变点附近系统的定容比热C_V与临界指数

二级相变(second-order phase transition)指的是体系的自由能的二阶微分呈现不连续性。对于Ising模型，也具有这种性质。

接下来让我们讨论二级相变点附近系统的定容比热C_V时。C_V可以表示为：

$$C_V=\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V=-\frac{1}{2}NJz\frac{\partial m^2}{\partial T} \tag{30}$$

我们可以利用这个公式来讨论二级相变点附近系统的定容比热。

当$T>T_c$时，由于$m_s=0$，定容比热C_V为：

$$C_V=-\frac{1}{2}NJz\frac{\partial 0}{\partial T}=0 \tag{31}$$

另一方面，当$T\lesssim T_c$时，$m_s=\pm\sqrt{3\frac{|T-T_c|}{T_c}}$(将分母中的$T$替换为$T_c$)，代入公式后得到定容比热：

$$C_V=-\frac{1}{2}NJz\frac{\partial\frac{3}{T_c}\left|T-T_c\right|}{\partial T}=\frac{3N}{2} \tag{32}$$

由此可见，定容比热仅与总自旋数相关。系数$\frac{3}{2}$表明三个方向的平移运动自由度各贡献$\frac{1}{2}$。

更一般地，定容比热C_V可以表示为：

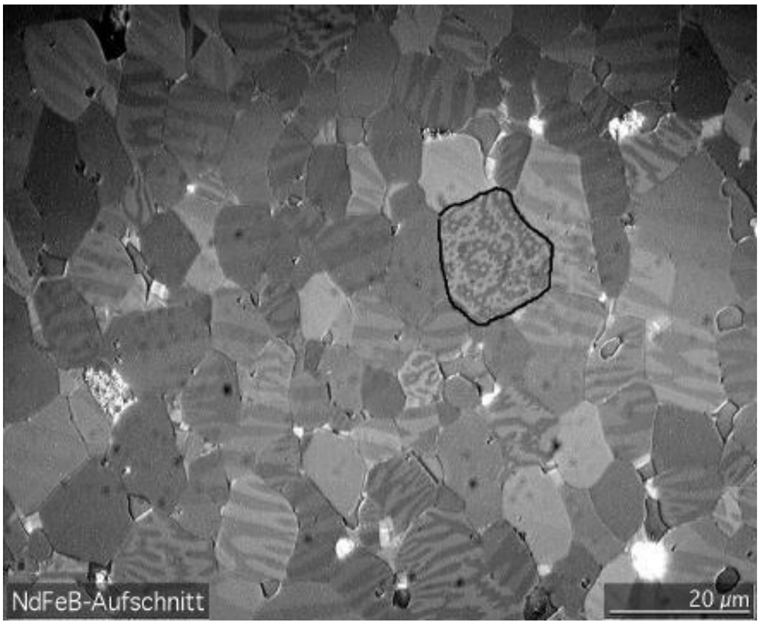

Figure 4: 在Kerr显微镜下观察到的NdFeB晶体中的磁畴，图片来自维基百科。

$$C_V \sim \begin{cases} |T-T_c|^{-\alpha}, & T<T_c \\ (T-T_c)^{-\alpha'}, & T>T_c \end{cases}. \tag{33}$$

α和α'被称为比热的临界指数(critical exponent of heat capacity)。从上式可以看出，$\alpha=\alpha'=0$。

1.5 写在最后

虽然像Ising模型这样的二能级系统(即能量只能取正值或负值的系统)是"玩具模型"，但它们是理解相变和临界现象的强有力工具。在二能级系统的自由能表达式中，磁化强度m作为秩序参数包含其中(简单地说，自由能是磁化强度m的函数)。当研究临界现象时，由于温度接近临界点，因此可以认为磁化强度m足够小。于是，自由能可以在$m=0$附近展开为Taylor级数。二能级系统的自由能表达式中包含$\log(1+m)$和$\log(1-m)$，对这两个项进行Taylor展开后，奇数次幂项在计算中被消去，最终只保留了对称性的偶数次幂项。

$$F-F_0=+\frac{1}{2}N(T-T_c)\,m^2+\frac{1}{12}TNm^4. \tag{34}$$

由于$F-F_0$是偶函数，因此即使将所有自旋变量的符号同时反转，自由能在自旋全反转的情况下仍保持不变。这种现象被称为全局反转对称性(global inversion symmetry)。如图(3)所示，当$T\geq T_c$时，在$m=0$处自由能F达到最小，系统处于最稳定状态，此时系统无磁性。相反，当$T<T_c$时，系统的热平衡态为$m=m_s>0$或$m=m_s<0$，具体实现哪个状态取决于微小外部磁场(扰动)的符号或时间演化的初始条件。

在日常生活中，最常见的自发对称性破缺的例子就是"磁铁"。实际上，铁也是表现出这种现象的材料。然而，尽管受到地球磁场这种微弱外部磁场的影响，铁内部的"小磁铁(自旋)"会排列成一条直线并表现出磁性，但为什么铁并不总是表现出强磁性呢?

原因在于铁内部存在称为"磁畴(magnetic domain)"的微小区域(见图4)。在每个磁畴内，磁矩沿同一方向排列，但不同磁畴的排列方向是随机的，因此整体上不表现出磁性。为了使铁表现出磁性，需要施加比地球磁场更强的磁场。然而，铁和磁铁本质上都是强磁性材料。

References

[1] 新物理学系列35『相变与临界现象的统计物理学』，西森秀稔，2020年9月23日初版第13刷发行，培风馆.

[2] 新物理学系列7『磁性』，金森顺次郎，1969，培风馆.