第二讲

回顾：量子：$\langle A\rangle = \mathrm{Tr}(\rho A)$，$\rho = \sum_i P_i |\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}|$，平衡态 $[\rho, H]=0$ 给定 $\langle H\rangle$，$\rho = \sum_k P_k |E_k\rangle\langle E_k|$，$P_k = \frac{e^{-\beta E_k}}{Z}$

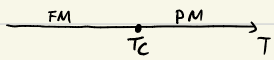
$\frac{\Delta A}{\langle A\rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$ 宏观系统涨落 $\to 0$，$F = -k_B T \ln Z$，经典系统 $|E_k\rangle \to \Gamma$，是经典力学量

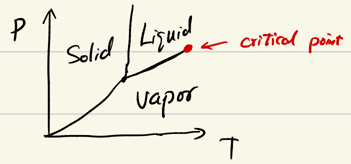
A的"本征态"：$A(\Gamma)$，$P(\Gamma) = \frac{e^{-\beta E(\Gamma)}}{Z}$．$\langle A\rangle = \sum_\Gamma P(\Gamma) A(\Gamma)$

我们知道 物质分"相"：气、液、固，有些物质在低温下铁磁态，高温下顺磁态．

金属有超导态．Helium 在低温有超流态，甚至超固态

这些 phases 被 phase transitions 分开，通过调节压强温度、磁场．

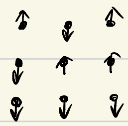




相变又分：
- 一级，自由能的一阶导数，如熵，不连续，两相在相变点共存．
- 连续相变：自由能的一阶导数连续，二阶或以上导数发散，(通常按幂律)，相变点通常称为临界点 (critical point)，<u>伴随大尺度的涨落</u>

• 统计物理（我们上节发展的平衡态系综理论）能不能描述相变？

这个问题依赖对Ising model的研究：$H = -J \sum_{\langle i,j\rangle} s_i s_j$，$s_i = \pm 1$．



这里 s_i 可理解为经典变量，那么 $\Gamma = (s_1, s_2, \cdots, s_N)$ 记录微观状态

按经典统计力学．$P(\Gamma) = \frac{e^{-\beta E(\Gamma)}}{Z}$，$Z = \sum_\Gamma e^{-\beta E(\Gamma)}$，$E(\Gamma)$ 由 Γ 根据 H 算出．

$\langle A\rangle = \sum_\Gamma A(\Gamma) P(\Gamma)$，$\Gamma$是经典A的本征态

• 也可以把 s_i 理解为泡利算符 σ_i^z，H 的本征态为 $|\sigma_1^z, \sigma_2^z, \cdots, \sigma_N^z\rangle$，这里 $\hat{\sigma}_i^z |\sigma_i^z\rangle = \sigma_i^z |\sigma_i^z\rangle$

Ising 发现 1D，No phase transition（用统计物理方法计算）；推广到高维，也没有，错误的结论！

★李-杨定理，

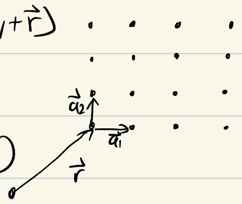
★二维 Ising model 严格解 } 能，但是要在热力学极限才能发生．

- 理解相与相变需要新概念：

- 对称性的自发破缺.

液态水与固态水的区别在哪里？ 冰是硬的.(rigid)，深入：冰中水分子周期排列.

这种周期排列破缺了空间的平移对称性：$H(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N)=H(\vec{r}_1+\vec{r},\vec{r}_2+\vec{r},\cdots,\vec{r}_N+\vec{r})$



一旦第一个水分子的位置给定，其余所有水分子的位置都确定了.

但是第一个分子呆在哪里？仍然有无穷多的选择，因为所有点是等价的（平移 $\vec{r}$ 不变）

对称性的自发破缺：这个分子会在空间"选一个位置"安顿下来！

这种对称性的自发破缺是我们理解大多数相变的核心概念：大多数情况下在一个相(高温)没有对称性的破缺，另一个相(低温)有对称性的破缺.

此时引入长程序 long-range-order：区分两个相[illegible]的分子的相对位置是否固定

利用 order parameter 用来刻画对称破缺.LRO：

冰相：质量分布的傅立叶变换中对应 ice 晶格的倒格矢的元素

设所有原子位于晶格 $\vec{R}=\vec{a}_1n_1+\vec{a}_2n_2+\vec{a}_3n_3$

但是原点的位置 $\vec{r}_0$ 可以连续变化. ∴ 原子的位置 $\vec{r}_i=\vec{r}_0+\vec{R}_i$，$\vec{R}_i=\sum_{l=1}^{d}n_l(i)\vec{a}_l$，$\rho(\vec{r})=\sum_{i=1}^{N}\delta(\vec{r}-\vec{r}_i)$，

序参量 $\rho(\vec{G})=\langle\frac{1}{N}\int d^d r\,\rho(\vec{r})e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}\rangle$，　　$\vec{G}=\sum_l m_l\vec{b}_l$，　$\vec{b}_i\cdot\vec{a}_j=2\pi\delta_{ij}$

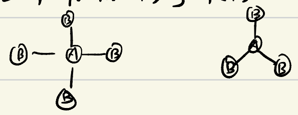
$\Rightarrow\rho(\vec{G})=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\langle e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_i}\rangle$，　　其中：　$\vec{G}\cdot\vec{r}_i=2\pi\cdot k+\vec{G}\cdot\vec{r}_0$，　k 是整数.

平移对称性要求：$\langle e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_0}\rangle=\frac{1}{V}\int d^d r_0\,e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_0}=0$　当 $\vec{G}\neq0$ 时.　$\Rightarrow$ 没有长程序

与物理实际不符：　真实系统会选定一个 $\vec{r}_0$，使得 $\rho(\vec{G})\neq0$.

另一个例子: 反铁磁绝缘体: 由局域化的磁矩构成，磁矩之间相互作用倾向于反向.

但是旋转不变，比如: $\vec S_i\cdot\vec S_j$，考虑磁矩位于"二分格子"上.(bipartite)



在 Low T，磁矩自发选择一个方向 $\vec n$，使得 A 格点自旋指向 $\vec n$，B格点自旋指向 $-\vec n$

自发地破缺了自旋空间的旋转不变对称性: 转动所有 $\vec S_i' = R(\theta,\varphi)\vec S_i$，H 不变

导致自旋的长程序: 两个A格点磁矩(自旋)指向同一方向，即使它们相距很远

描述: 引入 order parameter $\vec m$

$$\boxed{\vec m = \frac{1}{V}\sum_{\vec r} \eta(\vec r)\langle \vec S(\vec r)\rangle}, \quad \eta(\vec r)=\begin{cases}+1, & \vec r\in A\\ -1, & \vec r\in B\end{cases}$$

另一个写法 $\vec m = \frac{1}{V}\sum_{\vec r} e^{i\vec Q\cdot\vec r}\langle\vec S(\vec r)\rangle$，$\vec Q=(\pi,\pi)$ for 2D square lattice

• 问题来了:

$$\vec m = \frac{\mathrm{Tr}\left[\left(\sum_{\vec r}\eta(\vec r)S(\vec r)\right)e^{-\beta H}\right]}{Z}$$

当所有 $\vec S(\vec r)$ 转到 $-\vec S(\vec r)$ 时，没有能量代价，或者说等概率. 但是 $\sum_{\vec r}\eta(\vec r)S(\vec r)$ 变号

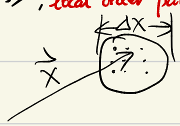
因此: $\vec m=0$

然而，低温时我们知道 $\vec m\neq 0$.

• 水结冰以后又是怎么变硬的?

当一个连续对称性发生破缺，产生长程序，一个"刚度"性质会伴随出现.

• $\vec m$ 可以定义在一个"宏观小 微观大"的尺度: $\vec m(\vec x) = \frac{1}{\Delta x^d}\sum_{\vec r\in\vec x}\eta(\vec r)\langle\vec S(\vec r)\rangle$，local order parameter



• 刚度: $\vec m$ 的梯度会消耗能量(使系统能量升高)

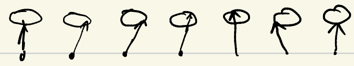
$$\Delta E = \rho_s\int d^dx\,(\nabla\vec m)^2$$

ρ_s 就是自旋刚度(spin stiffness)，是一种 rigidity

连续对称性的破缺总是伴随"gapless elementary excitation": 消耗任意小的能量来产生，

对应的波长可以任意长. "Goldstone modes"

Goldston mode 的机制简单而普适：由于破缺的是连续对称性，因此整体旋转所有自旋不改变系统的能量

这一转动后，我们得到一个新的状态. 

现在考虑一个"小而空间依赖的"转动：使得 $\vec{m}(\vec{x})$ 缓慢空间变化. 但不改变大小

$\vec{m}(\vec{x})$ 的平均值为 $\vec{m}$，设为 $(0,0,m)$. 转动可记为 x 与 y 方向的波 $\sum_{\vec{k}} m_1(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ 与 $\sum_{\vec{k}} m_2(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$，$\Delta E$ 正比于 $|k|^2$.

消耗的能量会随着变化的"波长"增长而趋于零 $\longrightarrow$ 存在随着波长 $\to\infty$，激发能 $\to 0$ 的 modes

Goldston modes 的存在更表明长程序是脆弱的.

怎么解决统计物理理论与实际现象的矛盾？

我们可以这样理解：一个宏观系统如果处于 $\vec{m}\neq 0$ 的状态，需要非常长的时间"转动"到其它方向。

因此无法用概率来计算 $\vec{m}$ 的期望值.

（或者说实现概率分布需要各态历经，但有时无法在实验室时间尺度达到）

- 考虑晶体的例子：空间平移(连续)对称性破缺到离散对称性. 所有原子位于晶格 $\vec{R}=\vec{a}_1 n_1+\vec{a}_2 n_2+\vec{a}_3 n_3$
  但是原点的位置 $\vec{r}_0$ 可以连续变化. ∴ 原子的位置 $\vec{r}_i=\vec{r}_0+\vec{R}_i$，$\vec{R}_i=\vec{a}\cdot\vec{n}(i)$.

序参量 $\rho(\vec{G})=\langle\frac{1}{N}\int d^d r\,\rho(\vec{r})e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}\rangle$，$\rho(\vec{r})=\sum_{i=1}^{N}\delta(\vec{r}-\vec{r}_i)$，

$$\Rightarrow \rho(\vec{G})=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\langle e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_i}\rangle = \int d^d r_0\; p(\vec{r}_0)\, e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_0}$$

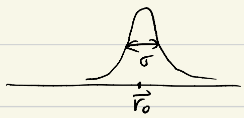
盯着系综里的某一个系统看

晶体的质心: $\vec{r}_c = \frac{\sum_i \vec{r}_i}{N} = \vec{r}_0$, 总动量 $\vec{P}_{tot} = M\cdot\dot{\vec{r}}_c$, $M = \sum_i m_i = N\cdot m$

质心的运动. $H_{eff} = \frac{P_{tot}^2}{2M}$ 对应 低能态 Low energy states

Ground state: $P_{tot} = 0$. 对应 $\psi(\vec{r}_c) = \frac{1}{\sqrt{V}}$, 等概率全空间. 这是平衡态的率分布

然而 破缺态 $\psi(\vec{r}_c) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\right)^{3/2} e^{-\frac{(\vec{r}_c-\vec{r}_0)^2}{2\sigma^2}}$



$\vec{r}_0$ 是空间某点, σ 是分布宽度. Δx

此波包对应动量分布宽度 $\Delta p \sim \frac{\hbar}{\sigma}$, 对应扩散速度 $v = \frac{\Delta P}{M} = \frac{\hbar}{M\sigma}$

对应能量不确定度 $\Delta E \sim \frac{\Delta P^2}{2M}$, 给出此状态的寿命: $\Delta t = \frac{\hbar}{\Delta E} \sim \frac{2M\sigma^2}{\hbar}$

也可看作以 v 移动 2σ 的时间: $\frac{2\sigma}{v} = \frac{2M\sigma^2}{\hbar}$.

- 这个时间以内, 可认为质心仍在 $\vec{r}_0$, 序参量没有被"抹平",

- 此时间正比于总质量 M, 在热力学极限下发散!

- 普遍地, 有限大小系统, 序参量的动力学使其"遍历", 导致对称性的分布, 统计平均 $\to 0$
  随着 $V\to\infty$. 相应的自由度变"重", 变慢, 类似于 $M\to\infty$, 使得对称破缺态的寿命 $\to\infty$.

- $[M, H]=0$ 的情况. 本征态本身对称破缺, 永远处在该状态, 永远无法热平衡? 也许模型过于理想?