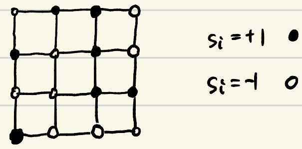
# 第二讲 第三讲

## § Ising model.

考虑一个 $d$ 维晶格，在每个格点 $i$ 上有一个变量 $S_i$，可取 $S_i=\pm 1$.




习惯上称 $S_i$ 为自旋 $S_i$，$S_i=1$ 对应 spin up，$S_i=-1$，spin down，带有磁矩.
但 $S_i$ 不是量子力学意义上的自旋，只是经典的. (小磁铁)

给定每个格点上的 $S_i$，称一个位型(configuration) $\{S_i\}$，其能量为

$$E=-B\sum_i S_i - J\sum_{\langle ij\rangle} S_i S_j$$

• 没有动量，没有动力学

• 第一项：来自自旋在外磁场 $B$ 中的势能.(自旋的磁矩 $\mu_B$ 取为1)　　B 其实是 H：绕在外面的线圈
　容易处理：不同自旋互不影响

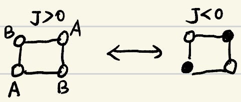
• 第2项　比较有趣(难处理的意思)

　$\langle ij\rangle$ 表示最近邻，数目要看 $d$ 与晶格类型：$2d$ 正方时为 $2N$

　$J>0$ 时，相邻自旋倾向于平行：↑↑ 或 ↓↓ (∵ 能量低)，形成铁磁体 (ferromagnet)

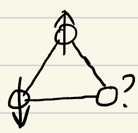
　$J<0$ 时，相邻自旋倾向于反平行：↑↓，形成反铁磁体 (anti-ferromagnet)

一般情况下区别不大，




两分晶格(bipartite)，

但对某些晶格 $J<0$ 时存在阻挫(frustration)现象.




下面我们考虑 $J>0$

• 有限温度 $T$

相互作用、外场和温度不同的趋势：能量与 entropy.

正则系综：系统处于位型 $\{S_i\}$ 的几率为　　(可理解为动量部分不考虑，或易算不重要)

$$P[S_i]=\frac{e^{-\beta E[S_i]}}{Z},\quad 其中\ Z(T,J,B)=\sum_{\{S_i\}} e^{-\beta E[S_i]},\quad \beta=\frac{1}{T}\ (k_B=1)$$

配分函数(partition function)最初引入是作为归一化因子，实际上包含系统的所有信息.

对应自由能：$F_{thermo}(T,B)=\langle E\rangle - TS = -T\ln Z$，或 $Z=e^{-F_{th}/T}$　(注意减号)

对于磁性系统，我们自然关心 磁化强度：(magnetization)：

$\langle m \rangle = \frac{1}{N} \langle \sum_i s_i \rangle$ $\Rightarrow$ 平均自旋(或磁矩, $\because \mu_B = 1$)，$\langle m \rangle \in [-1, 1]$

- 低温，自旋趋于同向，加上 $B>0$，则 $\langle m \rangle \to +1$.
- 高温，自旋们不在乎 $E$，随机排列与整齐排列几率差别不大.

$$\langle m \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\{s_i\}} \left(\sum_i S_i\right) \frac{e^{-\beta E[s_i]}}{Z} = \frac{1}{N\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial B}$$

自然的目标：计算出配分函数（作为 $T$ 与 $B$ 的函数）

但是非常困难：一维不难，二维可以作出 $B=0$ 的情况，Onsager 解，杨振宁解出 $\langle m \rangle(T, B=0)$

三维目前没有解.

- 本课程不去求解配分函数，而是去研究它的变换性质，从而得到系统的性质 $\to$ 重整化群理论

补充：$F_{thermo} = -k_B T \ln Z$

$$U = \langle E \rangle = \frac{\sum_s E_s e^{-\beta E_s}}{Z} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}, \quad 广义力\ Y = \frac{1}{Z} \sum_s \frac{\partial E_s}{\partial y} e^{-\beta E_s} = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial y} \ln Z$$

$y$ 是外参量：$V$，$Y = P$.

$B$，$Y = \langle m \rangle$

$$d\left(\ln Z - \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z\right) = \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z\right) d\beta + \left(\frac{\partial}{\partial y} \ln Z\right) dy - \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z\right) d\beta - d\left(\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z\right)$$

对比 $\beta (dU - Y dy) = -\beta d\left(\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z\right) + \left(\frac{\partial}{\partial y} \ln Z\right) dy$

$\Rightarrow \beta(dU - Y dy) = d\left(\ln Z - \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z\right)$

由于 $\frac{1}{T}(dU - Y dy) = dS \Rightarrow S = k_B\left(\ln Z - \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z\right)$

$F = U - TS$

$\Rightarrow F = -k_B T \ln Z$.

## §1. The effective Free energy

放弃追求求解 $Z$，改写 $Z$ 为

$$Z=\sum_m \sum_{\{S_i\}|m} e^{-\beta E[S_i]} := \sum_m e^{-\beta F(m)}$$

*. $\{S_i\}|m$ 表示 $\frac{1}{N}\sum_i S_i = m$ 的所有位型. （此 $m=\frac{1}{N}\sum_i S_i$，← 一个位型的平均，不同于 $\langle m\rangle = \frac{1}{N}\sum_i \langle S_i\rangle$ ← 系综平均）

即 先对固定 $m$ 的位型求和，再对可能的 $m$ 求和.

* $-1\leq m\leq 1$，间隔为 $\frac{2}{N}$，当 $N\to\infty$

$$Z=\frac{N}{2}\int_{-1}^{1} dm \; e^{-\beta F(m)}, \qquad \left(\tfrac{N}{2}\text{ 不重要，常数}\right)$$

- $F(m)$ 是我们定义的 有效自由能 (effective free energy)

  除了 $T$、$B$ 之外，还依赖于 $m\left(=\frac{1}{N}\sum_i S_i\right)$，不同于 $F_{thermo}(T,B)$ （给出 $m=\frac{1}{N}\langle\sum_i S_i\rangle$

- $F(m)$ 与温度有关.

$$f(m)=\frac{F(m)}{N}, \qquad Z=\int dm \; e^{-\beta N f(m)}$$

$N\sim 10^{23}$，$\beta f(m)\sim 1$，很好的近似 $\Rightarrow$ $f(m)$ 的 minimum $\to m$.

known as saddle point or steepest descent.

$$\left.\frac{\partial f}{\partial m}\right|_{m=m_{min}}=0. \qquad \text{即 } m_{min}=\langle m\rangle.$$

代回 $Z$：

$$Z\approx e^{-\beta N f(m_{min})} \Rightarrow F_{thermo}\approx F(m_{min})$$

## §2 Mean Field Theory 平均场理论

我们怎么计算 $F(m)$？也不容易，需要对 $\sum_i S_i = m$ 的位型求和。

$\{S_i\}|m$ 位型的能量 $E=?$ 　估计：设每个 $S_i = m$。

$$E = -B\sum_i m - J\sum_{\langle ij\rangle} m\cdot m \Rightarrow \frac{E}{N} = -Bm - \frac{1}{2}Jqm^2.$$

$q$ 为每个 spin 的最近邻数。 $q=2$ for 1D； $q=4$ 正方晶格， $q=2d$ $d$维正方

这个能量计算并不正确，但假设差不多（错的不多）。

计算 $$e^{-\beta F(m)} = \sum_{\{S_i\}|m} e^{-\beta E[S_i]} = \Omega(m)\, e^{-\beta E(m)} = e^{-\beta N f(m)}$$

设位型中有 $N_\uparrow$ spins up， $N_\downarrow = N - N_\uparrow$ down spins. 　$m = \frac{N_\uparrow - N_\downarrow}{N} = \frac{2N_\uparrow - N}{N}$.

$$\Omega(m) = \frac{N!}{N_\uparrow!\,(N-N_\uparrow)!}$$

$1+m = \frac{2N_\uparrow}{N}$， $1-m = \frac{2N-2N_\uparrow}{N} = \frac{2N_\downarrow}{N}$

利用 Stirlings formula： $\ln N! = N(\ln N - 1)$

$$\ln\Omega \approx N\ln N - N_\uparrow \ln N_\uparrow - (N-N_\uparrow)\ln(N-N_\uparrow)$$

$$\frac{\ln\Omega}{N} \approx \ln N - \frac{N_\uparrow}{N}\ln\left(\frac{N_\uparrow}{N}\right) - \frac{N_\downarrow}{N}\ln\left(\frac{N_\downarrow}{N}\right) - \frac{N_\uparrow}{N}\ln N - \frac{N_\downarrow}{N}\ln N$$

$$= -\frac{1}{2}(1+m)\ln\frac{(1+m)}{2} - \frac{1}{2}(1-m)\ln\frac{1-m}{2}$$

$$= \ln 2 - \frac{1}{2}(1+m)\ln(1+m) - \frac{1}{2}(1-m)\ln(1-m)$$

$$f(m) \approx -Bm - \frac{J}{2}qm^2 - T\left[\ln 2 - \frac{1}{2}(1+m)\ln(1+m) - \frac{1}{2}(1-m)\ln(1-m)\right]$$

利用这个 $f(m)$，我们可以算出平衡态 $m$ 的期望值。

$$\frac{\partial f(m)}{\partial m} = 0 \quad\Rightarrow\quad \beta(B + Jqm) = \frac{1}{2}\log\left(\frac{1+m}{1-m}\right)$$

即

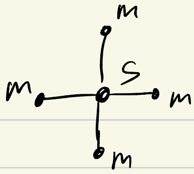
$$m = \tanh(\beta B + \beta Jqm)$$

$e^{2x} = \frac{1+m}{1-m}$

$e^{2x} - me^{2x} = 1+m$

$e^{2x} - 1 = m(1+e^{2x})$

$m = \frac{e^{2x}-1}{1+e^{2x}} = \frac{e^{x}-e^{-x}}{e^{x}+e^{-x}}$



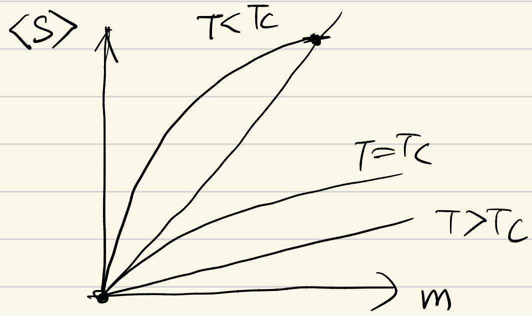

以上公式还可以更直观地导出：

每个 spin 感受到全部周围的有效磁场 $B_{eff} = B + Jqm$ ← Mean field 名字的来源

$$P(S) = \frac{e^{-\beta E(S)}}{Z_1}, \qquad E(S) = -(B+Jqm)S$$

$$Z_1 = \sum_{S=\pm1} e^{-\beta E(S)}$$

$$\langle S\rangle = \sum_{S=\pm1} S\,P(S) = \frac{-e^{-\beta(B+Jqm)} + e^{\beta(B+Jqm)}}{e^{-\beta(B+Jqm)} + e^{\beta(B+Jqm)}} = \tanh(\beta B + \beta Jqm)$$




B=0 时，

$$T_c = Jq.$$

$$\frac{\partial\, th(\beta Jqm)}{\partial m} = 1 \Rightarrow \left.\frac{\partial\, th(x)}{\partial x}\right|_{x=0} = \frac{1}{\beta Jq} \Rightarrow \frac{e^{x}+e^{-x}}{e^{x}+e^{-x}} + \frac{(e^{x}-e^{-x})^2}{(e^{x}+e^{-x})^2} = 1$$

$$\Rightarrow T_c = Jq$$