第6讲

§4.1 The LG Free energy

下一步，怎样计算 $F[m(\vec{x})]$？ 朗道理论是利用平均场近似.

我们换一个问法，$F[m(\vec{x})]$ 的可能形式是怎样的？

来自微观模型的一些约束对 $F[m(\vec{x})]$ 的要求：

- Locality（局域性） Ising model 没有远程作用，只能通过中间的自旋与远处自旋作用.

  $m(\vec{x})$ 场也应如此，因此 $F[m(\vec{x})]$ 必须有如下形式.

$$F[m(\vec{x})] = \int d^d\vec{x}\, f[m(\vec{x})]$$

$f[m(\vec{x})]$ 是个局域函数 (local function)，依赖 $m(\vec{x})$，$\nabla m(\vec{x})$，可能依赖更高的导数。 梯度项决定 $m(\vec{x})$ 对近邻的影响.

- 平移与旋转不变： $m(\vec{x}) \to m(\vec{x}+\Delta x)$，$F[m(\vec{x})]$ 不变， $m(\vec{x}) \longrightarrow m(\hat{R}(\vec{x}))$，$F$ 不变.

  原始模型在晶格上. 晶格有离散的平移与转动对称性. 从远大于晶格常数 a 的尺度上看来，

  以上对称性变成连续的.（称为涌现 emerges），$F[m(\vec{x})]$ 满足这些对称性.

- Z_2 symmetry.

  $B=0$ 时，Ising model 的 E 在 $S_i \to -S_i$（i 为所有格点）下不变. $F[m(\vec{x})]$ 继承这一对称性

  在 $m(\vec{x}) \longrightarrow -m(\vec{x})$ 下，$F[m(\vec{x})]$ 不变.

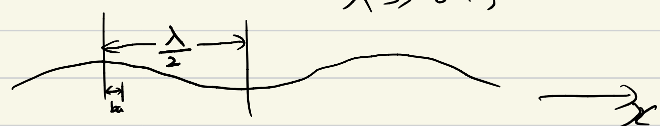
  $B \neq 0$，Ising model 的 E 在 $S_i \to -S_i$，且 $B \to -B$ 下不变 $\Longrightarrow$ $F[m(\vec{x})]$ 在 $m(\vec{x}) \to -m(\vec{x})$，$B \to -B$ 不变

- Analyticity：（解析性）

  自由能密度 f 是 $m(x)$ 与其导数的解析函数. 例：$f(m(x)) = f(0) + a_1 m(x) + a_2 m^2(x) + b_1 \frac{dm}{dx} + b_2 \left(\frac{dm}{dx}\right)^2 + \cdots$

  即使在相变点也可以对 f 作 Taylor 展开. 例：$m(x) = m_0 \cos\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right)$ $\lambda \gg ba$，

除以上几条之外，我们还要求：



$m(\vec{x})$ 在空间的变化"缓慢"：在远大于粗粒化 block 尺度 ba 以上才明显变化

因此可对 $f(m(x))$ 作梯度展开. $ba \cdot \nabla m$ 是小量，$\nabla m \gg ba \cdot \nabla^2 m$

$$\nabla m \sim m_0 \cdot \frac{2\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right), \quad \nabla^2 m \sim m_0 \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \cos\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right)$$

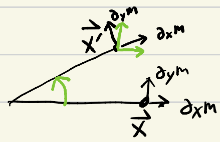
基于以上考虑：我们可写下 general 形式 of $F[m]$. 首先在 $B=0$ 时.

$$F[m(\vec{x})] = \int d^d\vec{x} \left[\frac{1}{2}\alpha_2(T) m^2 + \frac{1}{4}\alpha_4(T) m^4 + \frac{1}{2}\gamma(T)(\nabla m)^2 + \cdots \right]$$

也可以加上 $F_0(T)$. 类似 $T\lg 2$. 与 m 无关. 多数情况下不重要.

- ∇m 的线性没有 rotation symmetry: $\hat{R}(\nabla m(\vec{x})) = \hat{R}(\partial_x m(\vec{x}), \partial_y m(\vec{x})) \neq (\partial_x m(\vec{x}), \partial_y m(\vec{x}))_{at\ \vec{x}'}$

$$\vec{x}' = \hat{R}(\vec{x})$$



$[\hat{R}(\nabla m)]^2 = (\nabla m)^2 \Leftarrow$ 转动不改变矢量大小

- ∇m 也违背了 Z_2 symmetry: $m(\vec{x}) \to -m(\vec{x})$ 后 $\nabla m(\vec{x}) \to -\nabla m(\vec{x})$

$B \neq 0$ 时. 可加 m 的奇次, 同时 B 的奇次.

比如: Bm, Bm^3. 其系数是 T 的函数

导致以上 $F[m(x)]$ 形式的论证非常 general 而强大! 广泛应用!

不好的地方是: $\alpha_2(T)$, $\alpha_4(T)$, $\gamma(T)$ 都是不知道的. 不太可能从第一原理计算.

对比朗道平均场: 如果取 $m(\vec{x}) = m$, 上面的 $F[m(\vec{x})]$ 与之前 MF 一致, with

$$\alpha_2(T) \sim (T - T_c) \quad 以及 \quad \alpha_4(T) \sim \frac{1}{3}T.$$

开心的是 这些 $\alpha_2, \alpha_4, \gamma$ 的具体形式并不重要, 只要求它们是 T 的解析函数 (可展开) 且 $\alpha_4(T) > 0$, $\gamma(T) > 0$, 在 T_c $\alpha_2(T)$ 变号, 如果相变是连续相变的话.

将看到: Landau-Ginzburg 自由能可以很好描述临界现象, 只要你处理好配分函数 Z (它是一个路径积分). 但是这不容易.

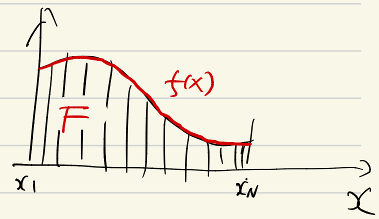
我们回顾一下经典力学：质点动力学

p, q 动量与坐标

Lagrangian: $L = p\cdot\dot{q} - H(q,p)$ ①（以单粒子为例） 另一种表示：$L = T - V = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$ ②

Action: $S = \int dt\, L(q, \dot{q}, p)$ ③

最小作用量原理：$\delta S = 0$ 可导出运动方程.



S 是 L 的泛函 (functional): $F: f(x) \in H \longrightarrow F \in R.$ $\quad f(x)\downarrow L,\ F \downarrow S$

可理解为 $F(f(x_1), f(x_2), \cdots, f(x_N))$ 多元函数. 那么 $\delta F = \sum_i \frac{\partial F}{\partial f(x_i)} \Delta f(x_i)$

③ $\rightarrow S = \sum_{t_i} L(q(t_i), \dot{q}(t_i), p(t_i))$ 3个函数.

$$\delta S = \sum_{t_i}\left[\frac{\partial L}{\partial q(t_i)}\Delta q(t_i) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}(t_i)}\Delta\dot{q}(t_i) + \frac{\partial L}{\partial p(t_i)}\Delta p(t_i)\right]$$

$$= \int dt\left(\delta q(t)\frac{\partial L}{\partial q} + \delta\dot{q}(t)\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} + \delta p(t)\frac{\partial L}{\partial p}\right)$$

$\delta\dot{x}(t) = \frac{d}{dt}\delta x(t)$

$$\overset{\text{分P}}{=} \int dt\left\{\delta q(t)\underbrace{\left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right)}_{\frac{\delta S}{\delta q}} + \delta p(t)\underbrace{\frac{\partial L}{\partial p}}_{\frac{\delta S}{\delta p}}\right\}$$

（利用 δq 在 t_i 与 t_f 为零）

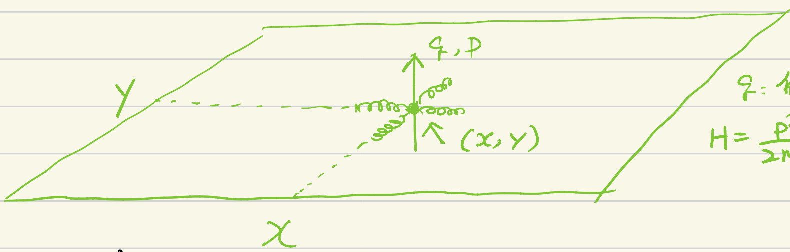
泛函导数 $\frac{\delta S}{\delta q}$

任意 $\delta q(t)$ 与 $\delta p(t)$，都有 $\delta S = 0$. $\Rightarrow$ ① $\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 0$ 此为拉格朗日方程.

② $\frac{\partial L}{\partial p} = 0$

①与② 可改写为 $\begin{cases} -\frac{\partial H}{\partial q} = \frac{dp}{dt} \\ \frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}\end{cases}$ 此为 Hamilton Eq.

例子：一维谐振子



q: 偏离平衡位置

$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$

牛顿力学：设 $V(q) = \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$. $m\ddot{q} = -\frac{\partial V}{\partial q} = -m\omega^2 q$ 拉氏量 $L = p\dot{q} - \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$. 作用量 $S = \int dt\, L$

$\delta S = 0 \Rightarrow$ 拉氏方程：$\frac{\partial L}{\partial p} = 0 \Rightarrow \dot{q} = \frac{p}{m}$；$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 0 \Rightarrow -m\omega^2 q = \frac{dp}{dt} = m\ddot{q}$

哈密顿方程：$\frac{dp}{dt} = -m\omega^2 q$；$\dot{q} = \frac{p}{m}$ 将 $\dot{q} = \frac{p}{m}$ 代入 L，得 $L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = T - V$

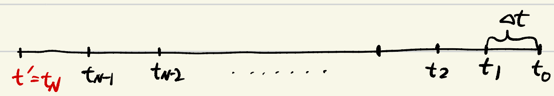
量子力学的路径积分形式：

$$i\hbar\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = H|\psi\rangle \Rightarrow |\psi(t')\rangle = \hat{U}(t',t_0)|\psi(t_0)\rangle, \quad \hat{U} = e^{-iH(t'-t_0)} \qquad (\hbar=1)$$

$$\psi(q',t') = \langle q'|\psi(t')\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\langle q'|\hat{U}(t',t_0)|q\rangle\langle q|\psi(t_0)\rangle dq = \int\langle q'|\hat{U}(t',t_0)|q\rangle\,\psi(q,t_0)\,dq$$

我们记 $\boxed{\langle q'|\hat{U}(t',t_0)|q\rangle = U(q',t';q,t_0)}$，称其为传播子：

将 $t'-t$ 这段时间分成 N 分： $t'-t = N\Delta t$.



$$\hat{U} = e^{-iH(t'-t_0)} = e^{-iH(t'-t_{N-1})}\cdot e^{-iH(t_{N-1}-t_{N-2})}\cdots e^{-iH(t_1-t_0)}$$

$$\langle q'|\hat{U}|q\rangle = \int\langle q'|e^{-iH\Delta t}|q_{N-1}\rangle\langle q_{N-1}|e^{-iH\Delta t}|q_{N-2}\rangle\langle q_{N-2}|\cdots|q_1\rangle\langle q_1|e^{-iH\Delta t}|q\rangle\,dq_{N-1}\cdot dq_{N-2}\cdots dq_1$$

考虑 $\langle q_{k+1}|e^{-iH\Delta t}|q_k\rangle \approx \langle q_{k+1}|(1-iH\Delta t)|q_k\rangle \quad (\because \Delta t\to 0)$ 这里 k 对应时刻 $t_k = t_0 + k\cdot\Delta t$

其中 $\langle q_{k+1}|H|q_k\rangle = \int\langle q_{k+1}|p_k\rangle\langle p_k|H|q_k\rangle\,dp_k$

由于 $\hat{H}(\hat{q},\hat{p})$ 是 $\hat{q}$ 与 $\hat{p}$ 的函数. $\hat{p}|p_k\rangle = p_k|p_k\rangle \Rightarrow \boxed{\langle p_k|\hat{H}|q_k\rangle = H(q_k,p_k)\langle p_k|q_k\rangle}$

又: $\boxed{\langle q_k|p_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ip_kq_k},\quad \langle p_k|q_k\rangle = \langle q_k|p_k\rangle^*}$

例：$\langle p_k|(\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2)|q_k\rangle = (\frac{p_k^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2q_k^2)\langle p_k|q_k\rangle$

我们有: $\langle q_{k+1}|e^{-iH\Delta t}|q_k\rangle = \langle q_{k+1}|q_k\rangle - i\Delta t\langle q_{k+1}|H|q_k\rangle = \int dp_k\,\langle q_{k+1}|p_k\rangle\langle p_k|q_k\rangle\,(1-i\Delta t\,H(q_k,p_k))$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp_k}{2\pi}\,e^{ip_k(q_{k+1}-q_k)-i\Delta t\,H(q_k,p_k)}$$

最后: $\langle q'|\hat{U}|q\rangle = \int\frac{dp_{N-1}\cdots dp_0}{(2\pi)^N}\int dq_{N-1}\cdots dq_1\; e^{i\sum_{k=0}^{N-1}[p_k(q_{k+1}-q_k) - H(q_k,p_k)]}$,

取极限 $N\to\infty$, $\Delta t\to 0$, $q_{k+1}-q_k = \dot{q}(t)dt$

$$\boxed{\langle q'|\hat{U}|q\rangle = \int_{q(t_0)=q}^{q(t')=q'}\mathcal{D}p(t)\mathcal{D}q(t)\;e^{\frac{i}{\hbar}S},\qquad S = \int_{t_0}^{t'}dt\left[p(t)\dot{q}(t) - H(q(t),p(t))\right]}$$

经典作用量
与拉氏量

量子力学：从(q,t_0)到(q',t')有无穷多条可能的路径(path). 每条路径的几率幅(或"权重")为 $e^{iS/\hbar}$

由于$\hbar$非常小，S的微小变化可导致 $e^{\frac{iS}{\hbar}}$ 的剧烈变化.

但在$\delta S=0$的路径附近，$e^{\frac{iS}{\hbar}}$不变. 因此，这样的路径对积分贡献大，也就是经典力学给出的路径. $\Rightarrow$ 拉格朗日方程.

- 动量的积分往往可以求出：

利用 $\int_{-\infty}^{\infty} dp\, e^{-\frac{p^2}{2(\frac{m\hbar}{i dt})}} = \sqrt{2\pi}\left(\frac{m\hbar}{i dt}\right)^{\frac12}$， 配方 $p(t)\dot q(t) - \frac{p^2(t)}{2m} = -\frac{(p-m\dot q)^2}{2m} + \frac{m}{2}\dot q^2$

$$\boxed{\langle q'|\hat U|q\rangle = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{\frac N2}\int \mathcal{D}q\, e^{\frac{i}{\hbar}S}, \quad S=\int_{t_0}^{t'} dt\left[\frac12 m\dot q^2(t) - V(q(t))\right]}$$

，即通常的 $L=T-V$

重新定义 $\boxed{\int_q^{q'}\mathcal{D}q = \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{\frac N2}\int dq_{N-1}\cdots dq_1}$

$$\langle q'|\hat U|q\rangle = \int \mathcal{D}q\, e^{iS/\hbar}$$