

第九章 几种典型的晶格统计模型

9.1 Ising模型 平均场近似

Ising模型是单轴离散自旋模型，它是最简单的铁磁-顺磁相变模型，自旋只能取+1或-1，哈密顿量为：

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i \quad (s_i = \pm 1)$$

或写为：

$$-\beta H = -\frac{H}{k_B T} = K \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j + h \sum_i s_i$$

这里我们只考虑最近邻相互作用及 $J > 0$ 的情形。系统在正则系综里的配分函数为：

$$Z(K, h) = \text{Tr} e^{-\beta H} = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta H}$$

下面来求配分函数。引入变量晶格配位数 Z_g (每个自旋的最近邻数) 和：

- N_+ : 自旋取+1 (向上) 的自旋数目；
- N_- : 自旋取-1 (向下) 的自旋数目；
- N_{++} : 两自旋取+1的近邻自旋对数目；
- N_{--} : 两自旋取-1的近邻自旋对数目；
- N_{+-} : 自旋取+1与自旋取-1的近邻对数目。

我们有：

$$N_+ + N_- = N$$

$$Z_g N_+ = 2N_{++} + N_{+-}$$

$$Z_g N_- = 2N_{--} + N_{+-}$$

上面的“2”由于每个 N_{++} (N_{--})被记了两次。因此五个变量里只有两个是独立的，选取 N_{++} 和 N_+ 为独立变量，我们有：

$$\sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j = N_{++} + N_{--} - N_{+-} = 4N_{++} - 2Z_g N_+ + Z_g \frac{N}{2}$$

$$\sum_i s_i = N_+ - N_- = 2N_+ - N$$

故哈密顿量可写为：

$$-\beta H = K \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j + h \sum_i s_i = K(4N_{++} - 2Z_g N_+ + Z_g \frac{N}{2}) + h(2N_+ - N) = -\beta H(N_+, N_{++})$$

配分函数为：

$$Z = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta H} = \sum_{N_+, N_{++}} g(N_+, N_{++}) e^{-\beta H(N_+, N_{++})}$$

$$= e^{N(Z_g \frac{K}{2} - h)} \sum_{N_+=0}^N e^{-2(Z_g K - h)N_+} \sum_{N_{++}} g(N_+, N_{++}) e^{4KN_{++}}$$

这里 g 为有相同 N_{++} 和 N_+ 的自旋哈密顿量的简并度。

此时仍难以求解。下面介绍两种近似方法（均为平均场近似方法）：

1) Bragg-Williams方法：

为方便定义一个量 l ：

$$\frac{N_+}{N} \equiv \frac{1}{2}(I + 1) \quad (-1 \leq I \leq 1)$$

$l=1$ 时所有自旋取+1值； $l=-1$ 时所有自旋取-1值。于是磁化强度可写为：

$$M = (\bar{N}_+ - \bar{N}_-) = N\bar{I}$$

再定义 I' 为: $\frac{N_{++}}{Z_g N/2} \equiv \frac{1}{2}(I' + 1) \quad (-1 \leq I' \leq 1)$

类似易知 $I'=1$ 时所有自旋取+1值; $I'=-1$ 时所有自旋取-1值。故哈密顿量为

$$-\beta H = \frac{N}{2} Z_g K \left(\frac{4N_{++}}{Z_g N/2} - 2I - 1 \right) + hNI \equiv \frac{N}{2} Z_g K (2I' - 2I - 1) + hNI$$

Bragg-Williams假定 (忽略自旋间的短程关联): $\frac{N_{++}}{Z_g N/2} \approx \left(\frac{N_+}{N} \right)^2$

于是哈密顿量: $-\beta H = \frac{N}{2} Z_g K I^2 + hNI \equiv -\beta H(I)$

配分函数为: $Z = \sum_I g(I) e^{-\beta H(I)}$

对 $g(I)$ 我们有: $g(I) = \frac{N!}{N_+!(N-N_+)!} = \frac{N!}{[\frac{1}{2}N(1+I)]! [\frac{1}{2}N(1-I)]!}$

带入 Z 的表达式有: $Z = \sum_{I=-1}^{+1} \frac{N! \exp\{\frac{N}{2} Z_g K I^2 + hNI\}}{[\frac{1}{2}N(1+I)]! [\frac{1}{2}N(1-I)]!}$

当 $N \rightarrow \infty$ 时, $\ln Z$ 可用其中最大的一项的对数来代替, 故由斯特林公式有:

$$\frac{1}{N} \ln Z = \frac{1}{2} Z_g K \bar{I}^2 + h\bar{I} - \frac{1+\bar{I}}{2} \ln \frac{1+\bar{I}}{2} - \frac{1-\bar{I}}{2} \ln \frac{1-\bar{I}}{2}$$

上式由 $\partial \ln Z / \partial \bar{I} = 0$ 可解得 \bar{I} , 结果为(磁化强度方程):

$$\bar{I} = \tanh \left(\frac{B}{k_B T} + \frac{Z_g J}{k_B T} \bar{I} \right), \tanh(x) = x - \frac{x^3}{3} + \dots, -\frac{\pi}{2} < x < \frac{\pi}{2}.$$

$B=0$ 时用图解法解这个方程, 可得 $\bar{I} = 0 \quad \left(\frac{Z_g J}{k_B T} < 1 \right)$

$$\bar{I} = \begin{cases} \pm \bar{I}_0 & \left(\frac{Z_g J}{k_B T} > 1 \right) \\ 0 & \left(\frac{Z_g J}{k_B T} < 1 \right) \end{cases}$$

其中第二式 $\bar{I} = 0$ 不对应于自由能极小值。
由这两式可得临界温度为:

$$T_c = \frac{Z_g J}{k_B}$$

并且 $\bar{I} = \begin{cases} 0 & (\text{for } T > T_c) \\ \pm \bar{I}_0 & (\text{for } T < T_c) \end{cases}$

在两种情形下, 我们还有:

$$\bar{I}_0 \approx 1 - 2e^{-\frac{2T_c}{T}} \quad (\text{when } T \rightarrow 0)$$

$$\bar{I}_0 \approx \left[3 \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) \right]^{1/2} \quad \left[\text{when } 0 < \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) \ll 1 \right]$$

对序参量 M 我们有:

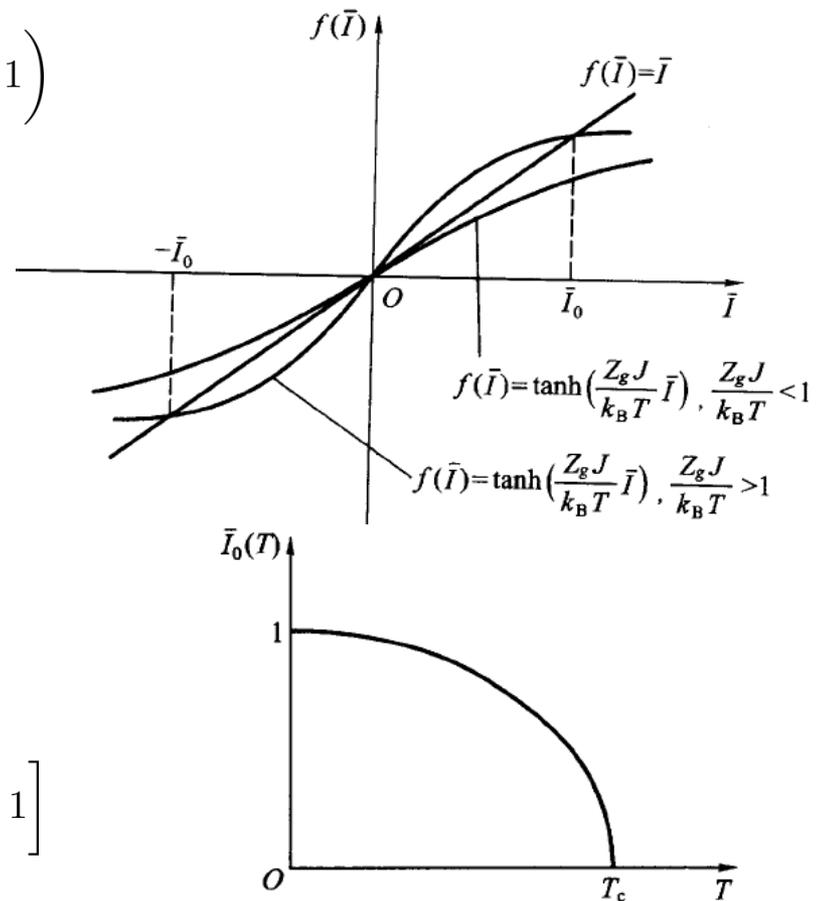
$$M = N\bar{I}_0 \sim \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{1/2} = t^{1/2}$$

因此其对应的临界指数 $\beta=1/2$ 。

内能和比热为:

$$\frac{1}{N}U(T) = \begin{cases} 0 & (\text{for } T > T_c) \\ -\frac{Z_g J}{2} \bar{I}_0^2 & (\text{for } T < T_c) \end{cases}$$

$$\frac{1}{Nk_B}C(T) = \begin{cases} 0 & (\text{for } T > T_c) \\ -\frac{Z_g J}{2} \frac{d}{dT} \bar{I}_0^2 & (\text{for } T < T_c) \end{cases}$$



当 $B \rightarrow 0$ 时, $\bar{I} \ll 1$, 故我们有

$$\bar{I} \approx \frac{1}{k_B} \frac{B}{T - T_c}$$

$$M = N\bar{I} \approx \frac{N}{k_B} \frac{B}{T - T_c}$$

磁化率: $\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial B} \right)_T = \frac{N}{k_B(T - T_c)} \propto (T - T_c)^{-1}$

故临界指数 $\gamma=1$ 。再利用 $\tanh(x) = x - \frac{1}{3}x^3 + \dots$, 我们发现在 $T = T_c$ 时,

$$M(T_c, 0) = N\bar{I} \propto B^{1/3}$$

因此临界指数 $\delta=3$ 。这些临界指数与维数无关, 且与朗道平均场理论结果完全一致。

2) Bethe-Peierls方法 (考虑了最近邻相互作用):

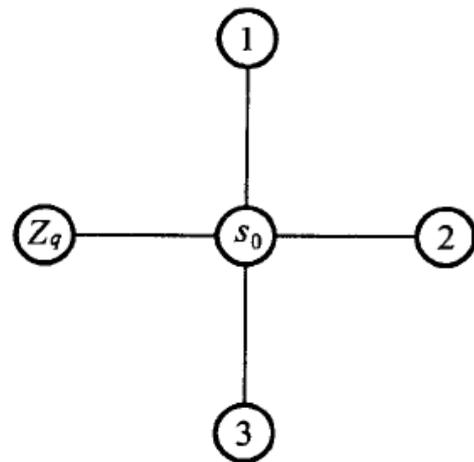
考虑“浸没”在晶格里的自旋集团, 它由中心自旋 s_0 和 Z_q 个最近邻组成, 它们间的相互作用为 $-J \sum_{j=1}^{Z_q} s_0 s_j$, 最近邻自旋和系统中其

它自旋间的相互作用只通过一个**平均场** m' 来计入, 因此这样一个含 $Z_q + 1$ 个自旋的哈密顿量可写为:

$$H_{Z_q+1} = -B s_0 - (B + m') \sum_{j=1}^{Z_q} s_j - J \sum_{j=1}^{Z_q} s_0 s_j$$

该自旋集团的配分函数为 (这里 $\alpha' = m'\beta$):

$$Z = \sum_{s_0 = \pm 1} \sum_{s_j = \pm 1} \exp \left[h s_0 + (h + \alpha') \sum_{j=1}^{Z_q} s_j + K \sum_{j=1}^{Z_q} s_0 s_j \right]$$



对第一个求和号求和后得: $Z = Z_+ + Z_-$

$$Z_+ = \sum_{s_j=\pm 1} \exp \left[h + (h + \alpha' + K) \sum_{j=1}^{Z_q} s_j \right] \quad Z_- = \sum_{s_j=\pm 1} \exp \left[-h + (h + \alpha' - K) \sum_{j=1}^{Z_q} s_j \right]$$

$$= e^h [2 \cosh(h + \alpha' + K)]^{Z_q} \quad = e^{-h} [2 \cosh(h + \alpha' - K)]^{Z_q}$$

$$s_0 \text{ 的平均值为: } \langle s_0 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{s_0, s_j\}} s_0 e^{-\beta H} = \frac{Z_+ - Z_-}{Z} = \frac{Z_+ - Z_-}{Z_+ + Z_-}$$

s_j 的平均值为:

$$\langle s_j \rangle = \frac{1}{Z_q} \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \alpha'} \right) = \frac{1}{Z} \{ Z_+ \tanh(h + \alpha' + K) + Z_- \tanh(h + \alpha' - K) \}$$

这些平均值在物理上应相等, 故由 $\langle s_0 \rangle = \langle s_j \rangle$ 可得

$$e^{2\alpha'} = \left\{ \frac{\cosh(h + \alpha' + K)}{\cosh(h + \alpha' - K)} \right\}^{Z_q - 1}$$

由此方程可确定平均场 m' 的大小。

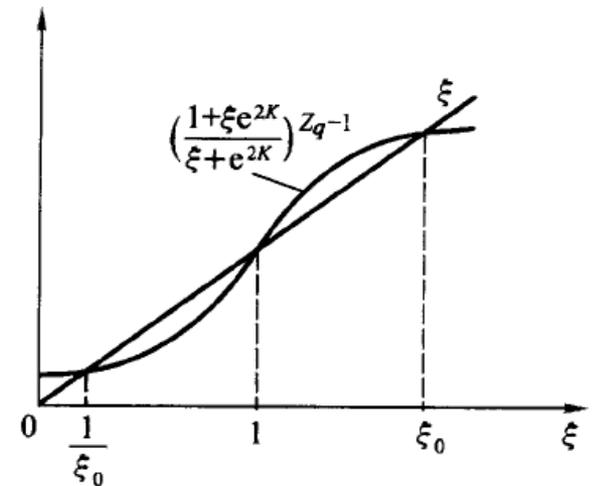
$$\text{自发磁化}(h=0): \alpha' = \frac{1}{2} (Z_q - 1) \ln \left\{ \frac{\cosh(\alpha' + K)}{\cosh(\alpha' - K)} \right\}$$

$$\text{或: } e^{2\alpha'} = \left(\frac{1 + e^{2\alpha'} e^{2K}}{e^{2\alpha'} + e^{2K}} \right)^{Z_q - 1}$$

$$\text{若令: } \xi \equiv e^{2\alpha'}, \text{ 则 } \xi = \left(\frac{1 + \xi e^{2K}}{\xi + e^{2K}} \right)^{Z_q - 1} \quad (*)$$

$$\text{其解为: } \xi = \begin{cases} 1 & (\text{for } c < 1) \\ 1, \xi_0, \xi_0^{-1} & (\text{for } c > 1) \end{cases} \quad c \equiv \frac{(Z_q - 1)(e^{4K} - 1)}{(1 + e^{2K})^2}$$

这里 c 是(*)式右边在 $\xi = 1$ 处的斜率。



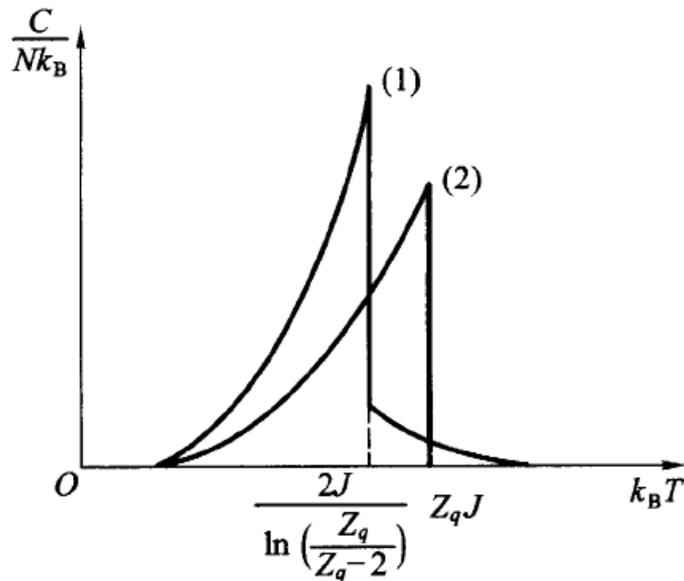
由这些式子可得 ($h=0$ 时) : $\langle s_0 \rangle = \frac{\xi^{Z_q/(Z_q-1)} - 1}{\xi^{Z_q/(Z_q-1)} + 1}$

因此若 $\xi=1$, 则 $\langle s_0 \rangle = 0$; 其它情形则 $\langle s_0 \rangle \neq 0$; 另有 $\langle s_0(\xi_0) \rangle = -\langle s_0(\frac{1}{\xi_0}) \rangle$

取 $c=1$ 可求得临界温度满足的方程: $\frac{(Z_q - 1)(e^{4J/k_B T_c} - 1)}{(1 + e^{2J/k_B T_c})^2} = 1$

解为: $k_B T_c = \frac{2J}{\ln\left(\frac{Z_q}{Z_q-2}\right)}$

两种近似下的热容:



(1) Bethe - Peierls 近似; (2) Bragg - Williams 近似

9.2 一维Ising模型的严格解

含外场B的Ising哈密顿量为：
$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i$$

或写为约化形式：
$$-\beta H = K \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j + h \sum_i s_i$$

介绍两种求解方法：

1) 变数变换法(仅对h=0情形)：

• 自由边界条件：
系统配分函数为：
$$Z = \sum_{\{s_i\}} \exp \left(K \sum_i^{N-1} s_i s_{i+1} \right)$$

引入新变数：
$$\eta_i = s_i s_{i+1} \quad (i = 1, 2, \dots, N-1) \quad \eta_i = \begin{cases} +1 & (\text{for } s_i = s_{i+1}) \\ -1 & (\text{for } s_i = -s_{i+1}) \end{cases}$$

配分函数为：
$$Z = 2 \sum_{\{\eta_i\}} e^{K(\eta_1 + \eta_2 + \dots + \eta_{N-1})} = 2(2 \cosh K)^{N-1}$$

上面的因子“2”来源于每个 η 的取值对应于自旋的两种位型。

• 周期性边界条件： $s_{N+1} = s_1$ ，于是

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{s_i\}} \exp \left(K \sum_i^{N-1} s_i s_{i+1} + K s_N s_1 \right) = 2 \sum_{\{\eta_i\}} e^{K(\eta_1 + \eta_2 + \dots + \eta_{N-1}) + K \eta_1 \eta_2 \dots \eta_{N-1}} \\ &= 2 \sum_{\{\eta_i\}} e^{K(\eta_1 + \eta_2 + \dots + \eta_{N-1})} \sum_{\alpha=0}^{\infty} \frac{(K \eta_1 \eta_2 \dots \eta_{N-1})^\alpha}{\alpha!} \\ &= 2 \sum_{\alpha=0}^{\infty} \frac{K^\alpha}{\alpha!} \left[\sum_{\eta} \eta^\alpha e^{K\eta} \right]^{N-1} = 2 \sum_{\alpha=0}^{\infty} \frac{K^\alpha}{\alpha!} [e^K + (-1)^\alpha e^{-K}]^{N-1} \\ &= (2 \cosh K)^N + (2 \sinh K)^N \end{aligned}$$

2) 转移矩阵法:

设外场 $h \neq 0$, 周期性边界条件。配分函数为:

$$Z(h, K) = \text{Tr} e^{K \sum_i s_i s_{i+1} + h \sum_i s_i} = \sum_{\{s_i\}} \left[e^{\frac{h}{2}(s_1+s_2) + K s_1 s_2} \right] \left[e^{\frac{h}{2}(s_2+s_3) + K s_2 s_3} \right] \cdots \left[e^{\frac{h}{2}(s_N+s_1) + K s_N s_1} \right]$$

定义矩阵: $T_{s_i s_j} = \left[e^{\frac{h}{2}(s_i+s_j) + K s_i s_j} \right]$

具体为: $T = \begin{bmatrix} T_{1,1} & T_{1,-1} \\ T_{-1,1} & T_{-1,-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{h+K} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{-h+K} \end{bmatrix}$

由此配分函数写为

$$Z(h, K) = \sum_{\{s_i\}} T_{s_1 s_2} T_{s_2 s_3} \cdots T_{s_N s_1} = \sum_{s_1} T_{s_1 s_1}^N = \text{Tr}(T^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N$$

其中 $\lambda_1 > \lambda_2$ 是矩阵 T 的两个本征值, 具体为:

$$\lambda_{1,2} = e^K \left[\cosh h \pm \sqrt{\sinh^2 h + e^{-4K}} \right]$$

$N \rightarrow \infty$ 时, 配分函数变为:

$$Z(h, K) = \lambda_1^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right] \approx \lambda_1^N$$

由此可得亥姆霍茨自由能:

$$\frac{F(h, K)}{N} = -k_B T \ln \left\{ e^K \left[\cosh h + \sqrt{\sinh^2 h + e^{-4K}} \right] \right\}$$

上式中根号恒为正, 对所有实 h 和 $T > 0$ 自由能为 h 和 T 的解析函数。故一维 Ising 模型不存在非零温相变。那么, 温度 $T=0$ 时是否会出现相变呢?

检查T=0K时是否有相变：从涨落或关联函数的角度

关联函数： $G(i, j) = \langle (s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle) \rangle = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle = \langle s_i s_j \rangle$

这里已利用了T>0时， $\langle s_i \rangle = \langle s_j \rangle = 0$

故对一个“推广”的自由边界条件下的一维Ising模型，我们考察：

$$G(i, j) = \langle s_i s_j \rangle = \frac{1}{Z(\{K_i\})} \sum_{\{s_i\}} s_i s_j e^{K_1 s_1 s_2 + K_2 s_2 s_3 + \dots + K_{N-1} s_{N-1} s_N}, \left(Z(\{K_i\}) = 2 \prod_{i=1}^{N-1} (2 \cosh K_i) \right)$$

$$\begin{aligned} \text{令 } j=i+n, \text{ 容易发现: } G(i, i+n) &= \langle s_i s_{i+n} \rangle = \frac{1}{Z(\{K_i\})} \frac{\partial}{\partial K_i} \frac{\partial}{\partial K_{i+1}} \dots \frac{\partial}{\partial K_{i+n-1}} Z(\{K_i\}) \\ &= (\tanh K_i)(\tanh K_{i+1}) \dots (\tanh K_{i+n-1}) \end{aligned}$$

令所有 K_i 相等得 $G(i, i+n) = (\tanh K)^n$

故

• T=0时，有 $G(i, i+n) = 1$ (for any n)，系统处于完全有序态。

• T>0时，有 $G(i, i+n) = e^{n \ln(\tanh K)} = e^{-n \ln(\coth K)} = e^{-n/\xi}$

因此关联长度为 $\xi \equiv \frac{1}{\ln(\coth K)}$

当T→0时， $K \gg 1$ ， $\coth K = \frac{e^K + e^{-K}}{e^K - e^{-K}} \simeq 1 + 2e^{-2K} + O(e^{-4K})$

于是关联长度：

$$\xi \equiv \frac{1}{\ln(\coth K)} \approx \frac{1}{\ln(1 + 2e^{-2K})} \approx \frac{1}{2} e^{2K} = \frac{1}{2} e^{2J/k_B T}$$

9.3 格气模型

具体模型：分布在 d 维晶格上（总格点数为 N ）的一堆原子的集合。每个格点的配位数为 Z_q ，可能被原子占据或空着。设原子占据第 i 个格点的数目为 $n_i (= 1, 0)$ ，则系统原子总数为：

$$N_a = \sum_i^N n_i$$

系统哈密顿量：

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N U(i,j)n_i n_j$$

因粒子数目不定，更合适的应为“巨正则”的哈密顿量即：

$$H - \mu N_a = - \sum_i^N \mu n_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^N U(i,j)n_i n_j$$

这个模型可以和Ising模型联系起来，具体如下：

先做变量代换： $n_i = \frac{1}{2}(1 + s_i)$ ，由此易知 $s_i = \pm 1$ 。于是有：

$$- \sum_i^N \mu n_i = - \sum_i^N \mu \frac{1}{2}(1 + s_i) = -\frac{1}{2}\mu N - \frac{1}{2}\mu \sum_i^N s_i,$$

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j}^N U(i,j)n_i n_j = \frac{1}{8} \sum_{i,j}^N U(i,j)(1 + s_i)(1 + s_j) = \frac{1}{8} \sum_{i,j}^N U(i,j) + \frac{1}{4} \sum_{i,j}^N s_i U(i,j) + \frac{1}{8} \sum_{i,j}^N U(i,j)s_i s_j.$$

这里我们仅考虑最近邻相互作用的情形，这只需令 $U(i, j) = \begin{cases} U, & \text{if } i, j \text{ are nearest neighbor;} \\ 0, & \text{Otherwise.} \end{cases}$

于是我们有：
$$\frac{1}{2} \sum_{i,j}^N U(i, j) n_i n_j = \frac{1}{8} U N Z_q + \frac{1}{4} U Z_q \sum_i^N s_i + \frac{U}{4} \sum_{\langle i,j \rangle}^N s_i s_j.$$

把上面的结果代入哈密顿量，我们有：

$$H - \mu N_a = E_0 - B \sum_i^N s_i - J \sum_{\langle i,j \rangle}^N s_i s_j, \quad \text{where } \begin{cases} E_0 = -\frac{1}{2} N (\mu - \frac{1}{4} U Z_q), \\ B = \frac{1}{2} (\mu - \frac{1}{2} U Z_q), \\ J = -\frac{1}{4} U, \end{cases}$$

于是格子模型的巨配分函数为：

$$\Xi = \text{Tr} e^{-\beta(H - \mu N_a)} = e^{-\beta E_0} Z_{\text{Ising}}.$$

我们只需求解Ising模型即可。

9.4 XY模型 KT相变

在上章里，我们通过系统对涨落的稳定性和自由能极小(是否有利于形成domain wall而破坏长程序)的观点分析了连续自旋系统何时会有相变，并证明其下临界维数是2，即 $d \leq 2$ 维不可能发生相变。

这里我们讨论一种连续自旋系统---XY模型（对这个系统取维数 $d=2$ ）---发生的一种特殊的相变，称为KT相变(Kosterlitz-Thouless 相变)。XY模型的自旋为 $\mathbf{s} = (s_x, s_y)$ ，即在自旋空间里是二维的，我们在坐标空间也取维数为2，即 $d=2$ 。

• 哈密顿量:

设XY模型里自旋写为 $\mathbf{s}(\mathbf{r}) = e^{i\theta(\mathbf{r})}$ ，即自旋的振幅为1，相角为 $\theta(\mathbf{r})$ 。在二维晶格上，系统的约化

$$\begin{aligned} \text{哈密顿量为: } -\beta H &= \frac{1}{2}\beta \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{s}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{s}(\mathbf{r}') = \frac{1}{2}\beta \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{i(\theta(\mathbf{r}) - \theta(\mathbf{r}'))} \\ &= \frac{1}{2}\beta \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cos[\theta(\mathbf{r}) - \theta(\mathbf{r}')] \end{aligned}$$

上面的求和只对相邻晶格格点进行。我们仅考虑 $J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') > 0$ 即**铁磁相互作用**，这时在低温下系统中所有自旋倾向于一致排列，故任意两个相邻自旋的夹角都很小，所以我们可以做展开：

$$\cos[\theta(\mathbf{r}) - \theta(\mathbf{r}')] = 1 - \frac{1}{2!}[\theta(\mathbf{r}) - \theta(\mathbf{r}')]^2 + \dots$$

把晶格格点坐标看作连续变量，我们有：

$$\lim_{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow 0} \frac{\theta(\mathbf{r}) - \theta(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \nabla\theta = \frac{\partial\theta}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial\theta}{\partial y} \mathbf{j}$$

于是：

$$[\theta(\mathbf{r}) - \theta(\mathbf{r}')]^2 = (\nabla\theta)^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 \quad (\text{when } |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow 0)$$

由此我们可以把哈密顿量写为：

$$-\beta H = \frac{1}{2}\beta \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \frac{1}{4}\beta \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\theta(\mathbf{r}) - \theta(\mathbf{r}')]^2 + \dots$$

上面第一项与自旋无关，可视为常量，因此可以略去。所以哈密顿量可写为：

$$-\beta H = -\frac{1}{2}K \int (\nabla\theta(\mathbf{r}))^2 d^2r \quad (K \equiv \beta K')$$

这里 $JR^2 \equiv \frac{1}{2} \int J(\mathbf{r}'') r''^2 d^2r'' = K'$ (a constant)

下面我们针对XY模型来考察系统对涨落的稳定性（通过关联函数）和自由能的情况。

• **两点关联函数**：考察系统在低温下是否有长程（有）序。

1) 两点的自旋关联函数为： $\langle \mathbf{s}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{s}(\mathbf{r}') \rangle = \text{Re}\langle e^{i(\theta(\mathbf{r}) - \theta(\mathbf{r}'))} \rangle$

我们首先证明对任意的两点 \mathbf{r} and \mathbf{r}' ，上式可写为： $\langle \mathbf{s}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{s}(\mathbf{r}') \rangle = e^{-\langle \theta^2(\mathbf{r}) \rangle + \langle \theta(\mathbf{r})\theta(\mathbf{r}') \rangle}$

当 $[\theta(\mathbf{r}) - \theta(\mathbf{r}')]^2$ 很小时，我们通过把 $\cos[\theta(\mathbf{r}) - \theta(\mathbf{r}')]^2$ 展开到二阶项再求平均，或把上面的指数函数展开到二阶可发现二者相等。严格一些的证明，可以先考察哈密顿量（近似到二阶，并把第一项略去）： $-\beta H = -\frac{1}{4}\beta \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\theta^2(\mathbf{r}) - 2\theta(\mathbf{r})\theta(\mathbf{r}') + \theta^2(\mathbf{r}')]^2$

这个哈密顿量有二次型的形式： $-\sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \phi_{\mathbf{r}} A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \phi_{\mathbf{r}'}/2$ ，对这种形式的哈密顿量，根据杨展如书第一章的(1.10.6)-(1.10.12)式（可以通过把实对称矩阵A对角化获得），我们有

$$\langle e^{i \sum_{\mathbf{r}} J_{\mathbf{r}} \phi_{\mathbf{r}}} \rangle = \frac{\int d\phi \left(e^{i \sum_{\mathbf{r}} J_{\mathbf{r}} \phi_{\mathbf{r}}} \right) e^{-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \phi_{\mathbf{r}} A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \phi_{\mathbf{r}'}}}{\int d\phi e^{-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \phi_{\mathbf{r}} A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \phi_{\mathbf{r}'}}} = e^{-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J_{\mathbf{r}} A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{-1} J_{\mathbf{r}'}}$$

上式两边对 $J_{\mathbf{r}}$ 和 $J_{\mathbf{r}'}$ 求导，然后令 $J_{\mathbf{r}} = J_{\mathbf{r}'} = 0$ ，可得 $\langle \phi_{\mathbf{r}} \phi_{\mathbf{r}'} \rangle = A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{-1}$ ，
 于是由这两式我们有：

$$\langle e^{i[J_{\mathbf{r}}\theta(\mathbf{r}) + J_{\mathbf{r}'}\theta(\mathbf{r}')]} \rangle = e^{-\frac{1}{2}[J_{\mathbf{r}}\langle\theta^2(\mathbf{r})\rangle J_{\mathbf{r}} + 2J_{\mathbf{r}}\langle\theta(\mathbf{r})\theta(\mathbf{r}')\rangle J_{\mathbf{r}'} + J_{\mathbf{r}'}\langle\theta^2(\mathbf{r}')\rangle J_{\mathbf{r}'}]}$$

令 $J_{\mathbf{r}} = 1, J_{\mathbf{r}'} = -1$ 即得

$$\langle e^{i[\theta(\mathbf{r}) - \theta(\mathbf{r}')]} \rangle = e^{-\frac{1}{2}[2\langle\theta^2(\mathbf{r})\rangle - 2\langle\theta(\mathbf{r})\theta(\mathbf{r}')\rangle]} = e^{-\langle\theta^2(\mathbf{r})\rangle + \langle\theta(\mathbf{r})\theta(\mathbf{r}')\rangle}$$

因此只要求出了 $\langle\theta(\mathbf{r})\theta(\mathbf{r}')\rangle$ ，就可以获得 $\langle \mathbf{s}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{s}(\mathbf{r}') \rangle$ ，下面我们来求 $\langle\theta(\mathbf{r})\theta(\mathbf{r}')\rangle$ 。

2) 求 $\langle\theta(\mathbf{r})\theta(\mathbf{r}')\rangle$ ：

转到傅里叶空间里求，为此把 $\theta(\mathbf{r})$ 展开为：

$$\theta(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \theta_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \xrightarrow{V \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \theta_{\mathbf{k}}$$

$$\theta_{\mathbf{k}} = \int_V d^d r e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \theta(\mathbf{r})$$

于是约化哈密顿量可写为：

$$-\beta H = -\frac{K}{2} \int d^d r (\nabla \theta(\mathbf{r}))^2 = -\frac{K}{2} \int dx dy \left[\left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \theta}{\partial y} \right)^2 \right] = -\frac{K}{2} \sum_{\mathbf{k}} k^2 |\theta_{\mathbf{k}}|^2 \quad (\theta_{-\mathbf{k}} = \theta_{\mathbf{k}}^*)$$

现在把 $g(r) = g(|\mathbf{r}|) = g(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \equiv \langle \theta(\mathbf{r}_1) \theta(\mathbf{r}_2) \rangle$ 作傅里叶变换：

$$g(r) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \xrightarrow{V \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^d} \int g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^d k$$

通过与8.10节类似的讨论我们有： $g(\mathbf{k}) = \langle |\theta_{\mathbf{k}}|^2 \rangle$ ，利用上面得到的哈密顿量我们有：

$$g(\mathbf{k}) = \langle |\theta_{\mathbf{k}}|^2 \rangle = \frac{\int \prod d\theta_{\mathbf{k}'} |\theta_{\mathbf{k}}|^2 e^{-\frac{K}{2} \sum_{\mathbf{k}'} k'^2 |\theta_{\mathbf{k}'}|^2}}{\int \prod d\theta_{\mathbf{k}'} e^{-\frac{K}{2} \sum_{\mathbf{k}'} k'^2 |\theta_{\mathbf{k}'}|^2}} = \frac{2}{K k^2}$$

转到坐标空间有：

$$g(r) = \langle \theta(\mathbf{r}_1)\theta(\mathbf{r}_2) \rangle = \frac{1}{(2\pi)^2} \int g(k) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^2k = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{2}{K} \int_0^\infty dk \int_0^{2\pi} d\theta \frac{e^{ikr \cos \theta}}{k}$$

注意到展开式： $e^{iz \cos \theta} = J_0(z) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} i^n J_n(z) \cos n\theta$ ($z \equiv kr$)

其中 J_n 是贝塞尔函数。把上式对 θ 求积分，我们有

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{iz \cos \theta} d\theta = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} J_0(z) d\theta + \frac{2}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} i^n J_n(z) \int_0^{2\pi} \cos n\theta d\theta = J_0(z)$$

再考虑到在低温下对 k 的积分实际上只限于小于 $\Lambda \sim 1/a$ 的 $|k|$ 值，这里 a 为晶格常数，于是有

$$g(r) = \frac{2}{2\pi K} \int_0^\Lambda dk \frac{J_0(kr)}{k}$$

由此得：

$$g(r) - g(0) = -\frac{2}{2\pi K} \int_0^\Lambda \frac{1 - J_0(kr)}{k} dk$$

下面我们讨论 r 趋于无限时的渐进行为，由于对所有实数 z 有 $|J_0(z)| \leq 1$ ，上述积分可近似写为：

$$g(r) - g(0) \propto -\frac{2}{2\pi K} \int_{1/r}^{1/a} \frac{1}{k} dk = -\frac{2}{2\pi K(T)} \ln\left(\frac{r}{a}\right) + \dots \quad (\text{when } r \rightarrow \infty)$$

即 $\langle \theta(\mathbf{r}_1)\theta(\mathbf{r}_2) \rangle - \langle \theta^2(\mathbf{r}_1) \rangle = -\frac{1}{2} \langle (\theta(\mathbf{r}_1) - \theta(\mathbf{r}_2))^2 \rangle \propto -\ln(r)$

这说明**角度之间的偏离随着距离的增加而增加**，因此**不可能**有长程序。而两点关联函数最终可写为：

$$\langle \mathbf{s}(\mathbf{r}_1) \cdot \mathbf{s}(\mathbf{r}_2) \rangle = e^{-g(0)+g(r)} \sim r^{-1/2\pi K(T)} \equiv r^{-\eta(T)}$$

即在低温下关联函数呈幂率衰减。

由此我们可以对比低温下XY模型与通常的离散自旋系统在临界点的性质和高温顺磁态的性质：

低温下的XY模型：关联函数呈幂率衰减（幂指数和温度有关），但无长程序；
通常的离散自旋系统(如Ising模型)在临界点：关联函数呈幂率衰减，有长程序；
高温顺磁态：关联函数呈指数衰减，无长程序。

因此低温下的XY模型介于离散自旋系统在低温下的铁磁态和高温顺磁态之间，我们把这种低温下关联函数呈幂率衰减，但无长程序称为有“**准长程序**”的相。

• 自旋波和涡旋态：

上面我们讨论了涨落的后果，下面我们讨论自由能极小产生的后果。

我们上面的讨论假设了 $\theta(\mathbf{r})$ 是一个光滑函数，即相邻自旋缓慢地变化，这是一种自旋波式的描述。但如果系统中出现涡旋态，上面的描述是不准确的，因为对涡旋态而言，自旋经过一个闭合路径将产生 $2\pi q$ 的突变(q 为整数，称为涡旋的绕数或涡旋量子数)。为此我们把 $\theta(\mathbf{r})$ 分为两部分：涡旋态部分为 $\bar{\theta}(\mathbf{r})$ ，自旋波部分为 $\psi(\mathbf{r})$ ，即有

$$\theta(\mathbf{r}) = \bar{\theta}(\mathbf{r}) + \psi(\mathbf{r})$$

$$\oint \nabla \bar{\theta}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{s} = 2\pi q \quad (q \neq 0, \text{取正负整数值}) \quad \oint \nabla \psi(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{s} = 0$$

包含涡旋中心
的闭合路径

不含涡旋中心
的任意闭合路径

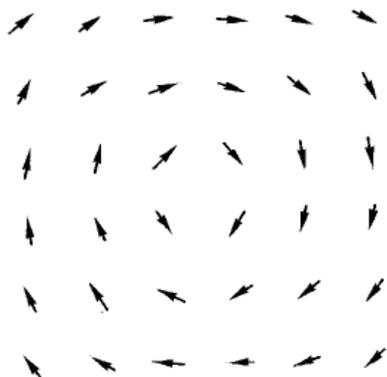
易知有：

$$\oint \nabla \theta \cdot d\mathbf{s} = \oint \nabla \bar{\theta} \cdot d\mathbf{s} = 2\pi q$$

为方便可令 $\nabla \theta = \frac{q}{r}$ ，这里 r 是平面极坐标矢径的长度(注意 $d\mathbf{s} = r d\phi$)。

一些例子:

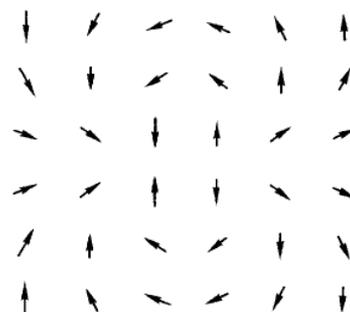
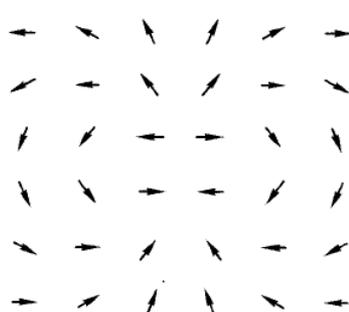
$q=1$ 的自旋涡旋态位形:



, $q=-1$ 的自旋涡旋态位形:



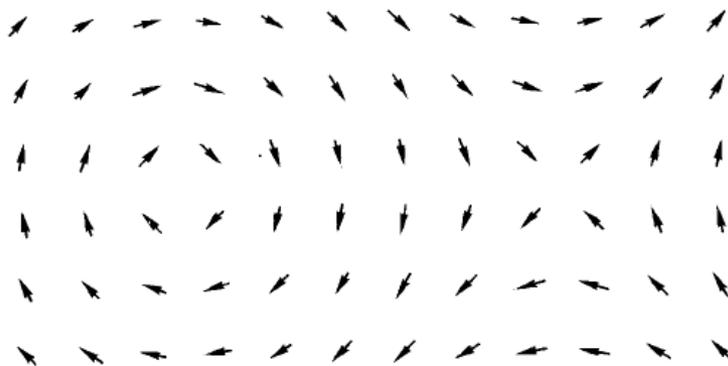
$q=2$ 的自旋涡旋态位形:



(a)

(b)

正反涡旋还可形成涡旋束缚对, 下面的例子一个中心 $q=1$, 另一个 $q=-1$:



单个涡旋态和涡旋束缚对的能量:

$$1) \text{ 单个涡旋态的能量: } H = \frac{K'}{2} \int (\nabla\theta)^2 d^2r = \frac{K'}{2} \int_a^L \left(\frac{q}{r}\right)^2 r dr d\phi = \pi q^2 K' \ln\left(\frac{L}{a}\right)$$

这里L是晶格的线性长度。L/a趋于无穷大时, 能量也发散, 说明离涡旋中心很远的自旋不相互平行, 系统处于高能态。

2) 涡旋束缚对的能量: 把两个涡旋的能量相加即可, 但注意涡旋只能延伸到 $r_0 =$ 两涡旋中心的距离:

$$E_{\text{coup}} = 2\pi q^2 K' \ln\left(\frac{r_0}{a}\right)$$

这个能量是有限的, 比仅存在单个涡旋态的能量更小。离涡旋中心很远的自旋几乎平行。

自由能:

单个涡旋态: 我们来看加入一个涡旋是否会减小自由能, 如果是的话这是有利于单个涡旋的存在:

单个涡旋可在任一个格点出现, 因此熵为 $S = k_B \ln \Omega = k_B \ln\left(\frac{L}{a}\right)^2$

于是自由能为:

$$F = E - TS = \pi q^2 K' \ln\left(\frac{L}{a}\right) - k_B T \ln\left(\frac{L}{a}\right)^2 = (\pi q^2 K' - 2k_B T) \ln\left(\frac{L}{a}\right)$$

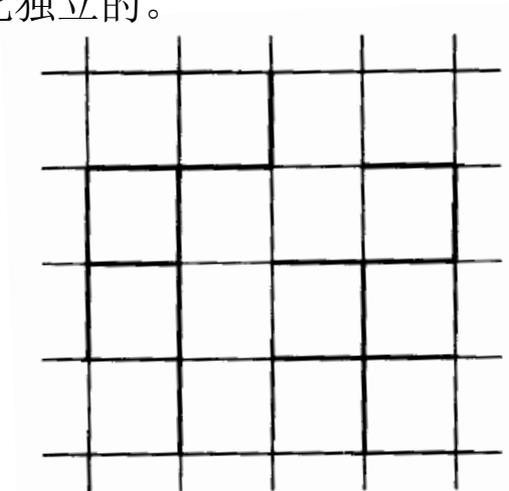
转变温度: $T_{KT} \equiv \frac{\pi K'}{2k_B}$

在 $q = \pm 1$ 的情况下, 当 $T > \frac{\pi K'}{2k_B}$ 时, 自由能减小, 单个涡旋可以稳定存在;

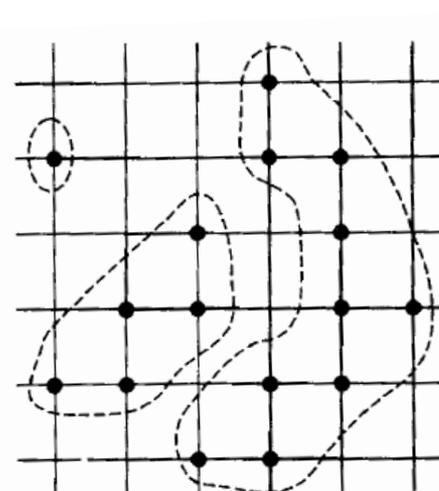
反之当 $T < \frac{\pi K'}{2k_B}$ 时不利于单个涡旋的存在, 系统处于自旋波态, 但可能存在涡旋束缚对。

9.5 渗流（percolation）相变

考虑格子G，可以定义两类渗流，分别为**键渗流**（左下图）和**格点渗流**（右下图），它们是彼此独立的。



键渗流：每条棱以一定的概率 p 被占据，占据则以**粗键**表示。

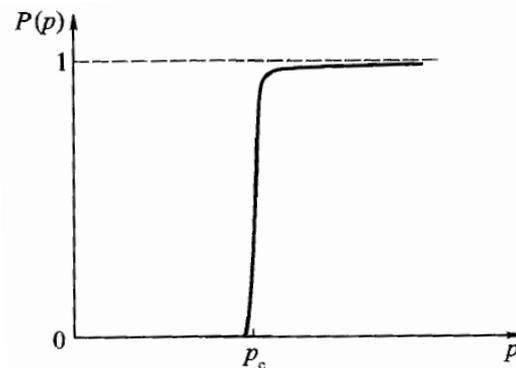


格点渗流：每个格点以一定的概率 p 被占据，占据则以**实心点**表示。

相连的粗键（**相邻的被占格点**）形成了**集团**（见上图）。显然 p 越大形成较大集团的可能性也越高。考虑一个**无限大格子**，设出现**无限大集团**的概率为 $P(p)$ 。实验显示，当 p 很小时， $P(p)=0$ ；当 p 到一阈值时， $P(p)$ 突然增加到接近1（右图）。这与磁性系统中序参量（磁化强度）在临界点的变化类似，因此称为**渗流**（percolation）**相变**。

在渗流阈值 p_c 附近，我们有临界行为：

$$P(p) \sim (p - p_c)^\beta \quad (p \sim p_c^+)$$



为研究其临界行为，我们引入几个参数。设格子 \mathbf{G} 有 N 个格点和 M 条棱，任一个被占位形可用 \mathbf{G} 的一个子图 \mathbf{G}' 表示，定义：

$e=e(\mathbf{G}')$: \mathbf{G}' 里被占棱的数目（键数目）；

$n=n(\mathbf{G}')$: \mathbf{G}' 里所含集团的数目；

$s=s(\mathbf{G}')$: \mathbf{G}' 里所含被占格点的数目。

出现 \mathbf{G}' 位形的概率则为： $\pi(G') = p^e(1-p)^{M-e}$ （键渗流）； $\pi(G') = p^s(1-p)^{N-s}$ （格点渗流）

任一个量 \mathbf{A} 在各种 \mathbf{G}' 位形上的平均值为： $\langle A \rangle = \sum_{G'} \pi(G') A(G')$ ； $\sum_{G'} \pi(G') = 1$ 。

如 \mathbf{A} 是广延量，我们则计算单个格点上的平均值： $\langle A \rangle_0 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \langle A \rangle$

记 $A_c \equiv A_c(G')$ 表示 \mathbf{G}' 中所含集团 \mathbf{c} 的某种性质的物理量， $A_0 \equiv A_0(G')$ 表示包含原点的集团的某种性质的物理量， $A(i, G')$ 是子图 \mathbf{G}' 中格点 i 的某个物理量，且当 \mathbf{G}' 含格点 i 的无限大集团时为零。则由平移不变性有

$$\langle A(0, G') \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i \in G'} \langle A(i, G') \rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i \in G'} A(i, G') \right\rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{c \in G'_c} s_c A_c(G') \right\rangle \equiv \left\langle \sum_c s_c A_c(G') \right\rangle_0$$

由上式，引入 $r_0 = 1$ （如包含原点的集团中的格点数目有限，即 s_0 有限）或 $r_0 = 0$ （如 $s_0 = \infty$ ）我们有：

1.（令 $A_c = r_c$ ）： $P(p) = 1 - \langle r_0 \rangle = 1 - \left\langle \sum_c r_c s_c \right\rangle_0 = 1 - \left\langle \sum'_c s_c \right\rangle_0$ ，撇号表示对有限集团求和；

2.（令 $A_c = s_c$ ）：包含原点的有限集团的平均大小 $\mathbf{S}(p)$ 为：

$$S(p) = \langle s_0 r_0 \rangle = \left\langle \sum'_c s_c s_c \right\rangle_0 = \left\langle \sum'_c s_c^2 \right\rangle_0$$

对键渗流，还可用键容量来表示有限键集团大小，平均值为：

$$S^{(B)}(p) = \frac{N}{Mp} \left\langle \sum_c' b_c^2 \right\rangle_0 = \frac{N}{Mp} \left(\frac{1}{N} \left\langle \sum_c' b_c^2 \right\rangle \right) = \frac{\left\langle \sum_c' b_c^2 \right\rangle}{Mp}$$

对格点和键渗流， $S(p)$ 在临界阈值处都发散，可用幂率表示为：

$$S(p) \sim \begin{cases} |p - p_c|^{-\gamma} & (\text{for } p \sim p_c^-) \\ (p - p_c)^{-\gamma'} & (\text{for } p \sim p_c^+) \end{cases}$$

3. 每个格点上的平均集团数（无限大的集团数很少，故可用平均有限集团数代替）：

$$G(p) = \left\langle \sum_c' 1 \right\rangle_0 = \langle n \rangle_0$$

在临界阈值处有：

$$G(p) \sim \begin{cases} |p - p_c|^{2-\alpha} & (\text{for } p \sim p_c^-) \\ (p - p_c)^{2-\alpha'} & (\text{for } p \sim p_c^+) \end{cases}$$

4. 关联函数定义为：位于原点的格点与距它为 r 的格点同属同一集团的概率。

$$C(r, p) = \langle R_0(r) \rangle, \quad \text{where } R_0(r) \sim \begin{cases} 1 & (\text{if they belong to the same cluster}) \\ 0 & (\text{if they belong to different clusters}) \end{cases}$$

在临界阈值处，关联函数呈幂率衰减，即

$$C(r, p_c) \sim r^{-(d-2+\eta)} \quad (r \rightarrow \infty)$$

渗流模型可与Potts模型（一种晶格自旋模型）联系起来，详情见下。

键渗流与Potts模型的联系

Potts模型是Ising模型的推广，其哈密顿量可写为：

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} - B \sum_i \delta_{\sigma_i, \alpha} \quad (J > 0), \quad \text{or} \quad -\beta H = K \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} + L \sum_i \delta_{\sigma_i, \alpha}$$

这里 σ_i 为晶格格点 $i = 1, \dots, N$ 上的自旋，可以取 q 个值； δ 为 δ 函数。由 δ 函数的性质易知：

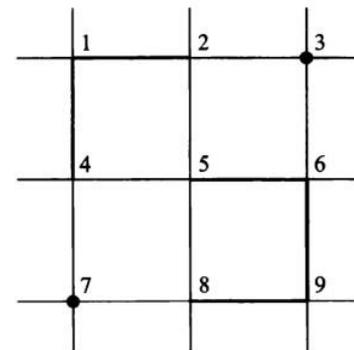
$$e^{K\delta} = 1 + (e^K - 1)\delta \equiv 1 + v\delta, \quad e^{L\delta} = 1 + (e^L - 1)\delta \equiv 1 + u\delta$$

于是Potts模型的配分函数可表示为：

$$Z(q; K, L) = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H} = \sum_{\{\sigma\}} e^{K \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} + L \sum_i \delta_{\sigma_i, \alpha}} = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle ij \rangle} (1 + v\delta_{\sigma_i, \sigma_j}) \prod_i (1 + u\delta_{\sigma_i, \alpha})$$

设 M 为晶格棱的总数，上式第一个连乘为 M 个因子 $(1 + v\delta_{\sigma_i, \sigma_j})$ 的乘积。可以用“1”表示该棱是空的，反之则有一根键在棱上。于是第一个连乘展开的每一项（共 2^M 项）都和—个子图 G' 一一对应。

右图是 G 上的—个子图 G' 的例子。它有9个格点 ($N=9$)，4个集团或连通图 ($n=4: \{1,2,4\}, \{3\}, \{7\}, \{5,6,8,9\}$)，和5根键 ($e=5$)。



容易看到连乘 $\prod_{\langle ij \rangle} (1 + v\delta_{\sigma_i, \sigma_j})$ 的展开项可以按集团拆开，以右图为例：

$$\sum_{\sigma_3} 1 \sum_{\sigma_7} 1 \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_4} v^2 \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \sum_{\sigma_5, \sigma_6, \sigma_8, \sigma_9} v^3 \delta_{\sigma_5 \sigma_6} \delta_{\sigma_6 \sigma_9} \delta_{\sigma_9 \sigma_8} = q \cdot q \cdot q v^2 \cdot q v^3 = q^4 v^5 = q^n v^e$$

第二个连乘 $\prod_i (1 + u\delta_{\sigma_i, \alpha})$ 可以同样按集团拆开，并和第一个连乘的展开项合在一起，

结果将修正为： $v^e \prod_c (e^{Ls_c} + q - 1)$ ，这里 s_c 为该集团中的格点数。比如对3点集团{1,2,4}:

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_4} v^2 \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_4} (1 + u\delta_{\sigma_1, \alpha}) (1 + u\delta_{\sigma_2, \alpha}) (1 + u\delta_{\sigma_4, \alpha}) \\ &= v^2 (q + 3u + 3u^2 + u^3) \\ &= v^2 [(1 + u)^3 + q - 1] \\ &= v^2 [e^{Ls_c} + q - 1] \end{aligned}$$

容易看到把 $\prod_i (1 + u\delta_{\sigma_i, \alpha})$ 和第一个连乘展开项合并并展开后，只有全部含“1”的项有一个求和并贡献因子 q ；其它项无求和，合并同类项后（二项式展开）得 $\binom{s_c}{i} u^i$ ，于是有上式。

总结后我们发现，Potts模型配分函数可写为：

$$Z(q; K, L) = \begin{cases} \sum v^e q^n & (\text{for } L = 0) \\ \sum_{G'} v^e \prod_c (e^{Ls_c} + q - 1) & (\text{for } L \neq 0) \end{cases}$$

● 无外场情形($L=0$)

由渗流平均值计算公式，我们有（对某个量 \mathbf{A} ）：

$$\langle A \rangle = \sum_{G'} \pi(G') A(G') = \frac{\sum_{G'} A p^e (1-p)^{M-e}}{\sum_{G'} p^e (1-p)^{M-e}} = \frac{\sum_{G'} A p^e (1-p)^{-e}}{\sum_{G'} p^e (1-p)^{-e}} = \frac{\sum_{G'} A \left(\frac{p}{1-p}\right)^e}{\sum_{G'} \left(\frac{p}{1-p}\right)^e}$$

现在取 $v = \frac{p}{1-p} = e^K - 1$ ，利用上式我们立即可得平均集团数：

$$\langle n \rangle = \frac{\sum_{G'} n \left(\frac{p}{1-p}\right)^e}{\sum_{G'} \left(\frac{p}{1-p}\right)^e} = \frac{\sum_{G'} n v^e}{\sum_{G'} v^e} = \left[\frac{\partial}{\partial q} \ln \left(\sum_{G'} q^n v^e \right) \right]_{q=1} = \left(\frac{\partial}{\partial q} \ln Z(q; K, L=0) \right)_{q=1}$$

这里我们已经把 q 的值延拓到了整个实数轴。更进一步可获得每个格点的平均集团数为：

$$G(p) = \langle n \rangle_0 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \langle n \rangle = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial}{\partial q} \ln Z(q; K, L=0) \right)_{q=1}$$

● 有外场情形 ($L \neq 0$)

$$\text{利用 } Z(q; K, L) = \sum_{G'} v^e \times \frac{\sum_{G'} v^e \prod_c (e^{Ls_c} + q - 1)}{\sum_{G'} v^e} = \sum_{G'} v^e \times \left\langle \prod_c (e^{Ls_c} + q - 1) \right\rangle_{q=1}$$

这里系综平均的系统为无外场的系统（后同）。再由

$$e^{MK} = (1 + v)^M = 1 + Mv + \dots + v^M = \sum_{G'} v^e$$

$$Z(q; K, L) \text{ 可写为: } Z(q; K, L) = e^{MK} \left\langle \prod_c (e^{Ls_c} + q - 1) \right\rangle_{q=1}$$

再定义 $f(q; K, L) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z(q; K, L)$ ，我们发现：

$$\begin{aligned} h(K, L) &= \left[\frac{\partial}{\partial q} f(q; K, L) \right]_{q=1} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \left[\frac{\partial}{\partial q} \ln Z(q; K, L) \right]_{q=1} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \frac{\sum_{G'} v^e \left[\prod_c e^{Ls_c} \left(\sum_c e^{-Ls_c} \right) \right]}{\sum_{G'} v^e \prod_c (e^{Ls_c})} \quad (\text{注意有 } \prod_c e^{Ls_c} = e^{LN}) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \left\langle \sum_c e^{-Ls_c} \right\rangle = \left\langle \sum_c' e^{-Ls_c} \right\rangle_0 \quad (L > 0) \end{aligned}$$

最后一个等式后的撇号表示仅对有限大集团求和。

利用上式可发现每个格点的平均集团数为： $G(p) = \left\langle \sum'_c 1 \right\rangle_0 = h(K, L = 0^+)$.

定义： $P(p, L) = 1 + \frac{\partial}{\partial L} h(K, L) = 1 - \left\langle \sum'_c s_c e^{-L s_c} \right\rangle_0$

和渗流中的结果对照，我们易知：

出现无限大集团的概率： $P(p) = P(p, 0^+)$, ($L = 0^+$)

包含原点的有限集团的平均大小： $S(p) = \left[\frac{\partial^2}{\partial L^2} h(K, L) \right]_{L=0^+}$

所以，键渗流可以和 $q=1$ 的Potts模型对应起来：

- $G(p) \rightarrow$ 自由能 [$h(K, L = 0^+)$];
- $P(p) \rightarrow$ 序参量 $\rightarrow (p - p_c)^\beta$;
- $S(p) \rightarrow$ 磁化率 $\rightarrow (p - p_c)^{-\gamma, -\gamma'}$.