

Chapter 1: Mean-field theory of phase transitions

本章介绍mean-field theory 在传统的ferromagnetic Ising model中的应用，为后续spin glasses 的讨论做准备。

Sec. 1: Ising model

- 从1到N的整数集合 $V = i_{i=1,\dots,N}$ 称为 **lattice**, 它的元素 i 是 **site**. (第一部分)
- 每个site会分配一个变量 S_i , *Ising spin* 是被描述为 $S_i = \pm 1$, 表示磁矩指向上或向下。
- bond**是指一个sites pair (ij) , 一组适当的bond集合为 $B = \{(ij)\}$, 一个bond的 **interaction energy** 为 $-JS_iS_j$.

根据问题的不同, B的选择也不同。

- 对于二维crystal lattice, V 是二维空间有规则间隔的一组点, B 中的bond (ij) 为nearest neighbour sites 的pair.(FIG.1.1)
- 在 infinite-range model中, B 中 bonds为 V 中所有可能site pairs.

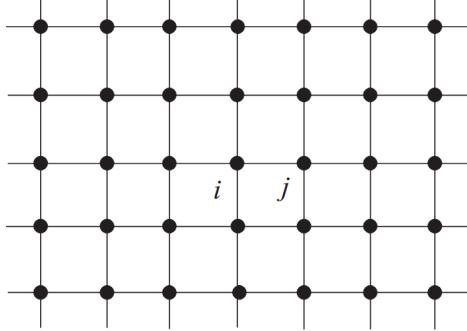


FIG. 1.1. Square lattice and nearest neighbour sites $\langle ij \rangle$ on it

- 当 $J > 0$ 时, 所有自旋同项会使得能量更低从而更稳定, 成为 **ferromagnetic interaction**, 反之, 当 $J < 0$ 时, 使得自旋会处于反向平衡, 称之为 **antiferromagnetic interaction**。
- 当每个site有自身的能量 $-hS_i$ 时, 总能量为

$$H = -J \sum_{(ij) \in B} S_i S_j - h \sum_{i=1}^N S_i,$$

又称为Ising model 的**Hamiltonian**.

- 当给定上面Hamiltonian后, 对于各个物理量的**thermal average**是基于分布

$$P(\mathbf{S}) = \frac{e^{-\beta H}}{Z},$$

得到的，其中 $\mathbf{S} = \{S_i\}$ 表示 spin 集合的状态，称为 **spin configuration**。这里取温度的单位使得 Boltzmann's constant $k_B = 1$ ，并且 β 为温度的倒数， $\beta = 1/T$ 。正则化因子 Z 为 **partition function**，

$$Z = \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} e^{-\beta H} = \sum_{\mathbf{S}} e^{-\beta H},$$

有时使用记号 Tr 表示所有可能的 spin configurations 的和，因此又有

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H}.$$

$P(\mathbf{S})$ 称为 **Gibbs-Boltzmann distribution**， $e^{-\beta H}$ 称为 **Boltzmann factor**，使用尖括号 $\langle \dots \rangle$ 表示 Gibbs-Boltzmann distribution 的期望。

Sec.2: Order parameter and phase transition

对于有 ferromagnetic interactions 的 Ising model 的一描述宏观性质的量 **magnetization**，

$$m = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N S_i \right\rangle = \frac{1}{N} \text{Tr} \left[\left(\sum_{i=1}^N S_i \right) P(\mathbf{S}) \right], \quad (\text{Mag})$$

在 **thermodynamic limit** $N \rightarrow \infty$ 下，刻画了宏观系统的整体有序性。

在适当意义下衡量宏观系统是否处于有序状态的量，称之为 **order parameter**。

在低温条件下， $\beta \gg 1$ ，根据 Gibbs-Boltzmann distribution 可知，低能态比高能态实现的概率更高，因此在无外场时 ($h = 0$)，几乎所有自旋都在同一方向，magnetization 接近 1 或 -1。

随着温度升高， β 降低，各种能态有相似的概率，自旋 S_i 从 1 变到 -1（或反过来），系统变为无序，magnetization 变为 0。

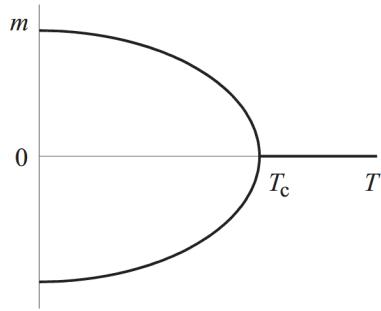


FIG. 1.2. Temperature dependence of magnetization

因此 magnetization m 是温度 T 的函数。存在临界温度 T_c ，对于 $T < T_c$ 有 $m \neq 0$ ，而 $T > T_c$ 有 $m = 0$ 。（图 FIG. 1.2）

在宏观系统中的这种现象称为 **phase transition**，并且通过 order parameter 在 = 0 和 $\neq 0$ 之间发生 sharp 和 singular 改变来刻画。

在 magnetic 系统中，对于 $T < T_c$ 有 $m \neq 0$ 称为 **ferromagnetic phase**，而 $T > T_c$ 有 $m = 0$ 称为 **paramagnetic phase**，温度 T_c 称为 **critical point** 或 **transition point**。

Sec.3: Mean-field theory

原则上，通过Gibbs-Boltzmann distribution, 可以计算任意物理量的期望值。然而当计算partition function时要计算 2^N 项求和，这几乎是不可能的，因此需要做适当的近似。*Mean-field theory (or the mean-field approximation)* 广泛应用于该情况。

Mean-field Hamiltonian

mean-field 的核心在于忽略微观变量在其均值(mean)附近的涨落(fluctuation)。 将spin变量 S_i 分解为其均值 $m = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle = \langle S_i \rangle$ 和涨落 $\delta S_i = S_i - m$, 并假设在interaction energy中涨落的二阶项可忽略。

$$\begin{aligned} H &= -J \sum_{(ij) \in B} (m + \delta S_i)(m + \delta S_j) - h \sum_i S_i \\ &\approx -Jm^2 N_B - Jm \sum_{(ij) \in B} (\delta S_i + \delta S_j) - h \sum_i S_i \quad (N_B = |B|, \text{忽略二阶 } -J \sum_{(ij) \in B} \delta S_i \delta S_j) \\ &= -Jm^2 N_B - Jmz \sum_i \delta S_i - h \sum_i S_i \quad (\text{假设每个节点度为 } z) \\ &= Jm^2 N_B - (Jmz + h) \sum_i S_i \quad (\text{把 } \delta S_i = S_i - m \text{ 带入, 且有 } N_B = zN/2) \end{aligned}$$

期望 $\langle S_i \rangle$ 被假定与*i*无关, 根据Eq.(Mag)知 $\langle S_i \rangle = m$, 在传统的的ferromagnetic Ising model中, 相互作用 J 是常数, 所以spins的平均序在空间中均匀。在spin glasses 和后续的其他情形下, 这一假设并不成立。

从上面mean-field Hamiltonian发现相互作用的影响被暗含在magnetization m 中, 并且该问题表面上看属于非相互作用的情形 (总的Hamiltonian可以被解耦为各个site的Hamiltonian, 后续变分方法中更能体现)。

Equation of state

基于mean-field Hamiltonian, 可以对各种量进行计算。如partition function,

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \exp \left[\beta \left\{ -N_B Jm^2 + (Jmz + h) \sum_i S_i \right\} \right], \\ &= e^{-\beta N_B Jm^2} \text{Tr} \prod_i \exp [\beta(Jmz + h)S_i], \\ &= e^{-\beta N_B Jm^2} \left(\sum_i C_N^i \exp [\beta(Jmz + h)]^i \exp [-\beta(Jmz + h)]^{N-i} \right), \\ &= e^{-\beta N_B Jm^2} \{ \exp [\beta(Jmz + h)] + \exp [-\beta(Jmz + h)] \}^N, \\ &= e^{-\beta N_B Jm^2} \{ 2 \cosh [\beta(Jmz + h)] \}^N. \end{aligned}$$

类似地, 可以得到magnetization m ,

$$\begin{aligned}
m &= \frac{\text{Tr} S_i \exp(-\beta H)}{Z}, \\
&= \frac{e^{-\beta N_B J m^2} \{2 \cosh [\beta(Jmz + h)]\}^{N-1} \{2 \sinh [\beta(Jmz + h)]\}}{e^{-\beta N_B J m^2} \{2 \cosh [\beta(Jmz + h)]\}^N}, \\
&= \tanh [\beta(Jmz + h)].
\end{aligned}$$

$m = \tanh [\beta(Jmz + h)]$ 决定了order parameter m , 称为 **equation of state**.

当无外场时 ($h = 0$) 时, magnetization称为 *spontaneous magnetization*.

从FIG. 1.3 知, $m \neq 0$ 是有 $y = \tanh(\beta Jmz)$ 在 $m = 0$ 处的斜率是否大于 1 所决定。对 $y = \tanh(\beta Jmz)$ 在 $m = 0$ 处一阶展开得 $y = \beta Jmz$, 所以当 $\beta Jz > 1$ 时, $m \neq 0$. 因此 critical point 可由 $\beta Jz = Jz/T = 1$ 得到 $T_c = Jz$. 从图中知, m 具有相同绝对值的两个正负解, 这是因为所有 spins 反转 ($S_i \rightarrow -S_i, \forall i$) 所得到的, 不失一般性, 此后只讨论 $m > 0$.

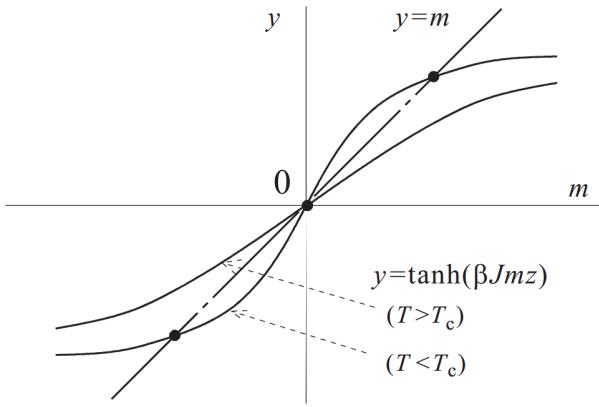


FIG. 1.3. Solution of the mean-field equation of state

Free energy and the Landau theory

在此部分基于 free energy 出发来论证, 通过上面计算的 partition function, 可以得到 free energy,

$$F = -T \log Z = -NT \log \{2 \cosh \beta(Jmz + h)\} + N_B J m^2.$$

当无外场时 ($h=0$), 温度 T 接近 critical point T_c 时, $m \rightarrow 0$. 所以对 free energy 在 $m = 0$ 处进行幂级数展开得到,

$$F = -NT \log 2 + \frac{JzN}{2} (1 - \beta Jz) m^2 + \frac{N}{12} (Jzm)^4 \beta^3.$$

注意在 T_c 时, m^2 的系数应当改变符号 (极小值改变)。正如 FIG. 1.4 中, 当 $T < T_c$ 时, free energy 的最小值落在 $m \neq 0$, 当 $T > T_c$ 时, 落在 $m = 0$.

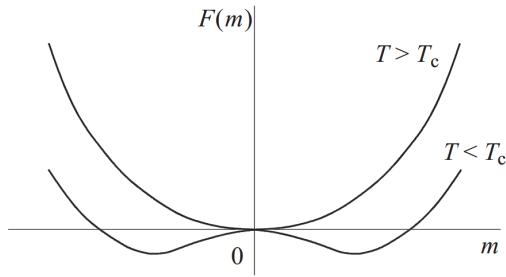


FIG. 1.4. Free energy as a function of the order parameter

> 根据Gibbs-Boltzmann distribution得到的物理量的统计平均值，对应于该物理量在free energy取极小值的状态(thermal equilibrium state)下的取值。

因此当 $T > T_c$ 时，magnetization在thermal equilibrium下为0， $T < T_c$ 时不为0。

从free energy关于order parameter泰勒展开出发的理论称为 **Landau theory of phase transitions**.

Sec.4: Infinite-range model

在infinite-range model (所有可能的sites pairs都有相互作用) 下，mean-field theory给出了exact solution. infinite-range model 的Hamiltonian为，

$$H = -\frac{J}{2N} \sum_{i \neq j} S_i S_j - h \sum_i S_i.$$

对第一项的系数 $-\frac{J}{2N}$ ，进行一些注解。因子2是由于重复计算了 $S_i S_j$ 和 $S_j S_i$ 。因子N是因为求和 $\sum_{i \neq j}$ 有 $N(N-1)$ 项，为了使Hamiltonian是extensive variable(广延量, $\mathcal{O}(N)$)。

进一步得到partition function,

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \exp \left(\frac{\beta J}{2N} \left(\sum_i S_i \right)^2 - \frac{\beta J}{2} + \beta h \sum_i S_i \right), \\ &= \text{Tr} \exp \left(\frac{\beta J}{2N} \left(\sum_i S_i \right)^2 + \beta h \sum_i S_i \right), \quad \left(-\frac{\beta J}{2} \text{是 } \mathcal{O}(N^0 = 1) \right) (N \rightarrow \infty) \end{aligned}$$

为了使算子Tr对整体的作用化简为作用在每一个spin上，那么要保证所作用的项关于 S_i 是线性的。当作用项含有 $(\sum_i S_i)^2$ 时，可以使用**Gaussian integral**，

$$\exp(ax^2/2) = \sqrt{\frac{aN}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dm \exp(-Nam^2/2 + \sqrt{N}amx). \quad (\text{Gaussian})$$

对其解耦，Gaussian integral的技巧是**极其重要的**。为了使得被积分的指数函数里面是 $\mathcal{O}(N)$ ，那么 $a \sim \mathcal{O}(1)$, $x \sim \mathcal{O}(\sqrt{N})$ 。

这里取 $a = \beta J$, $x = \sum_i S_i / \sqrt{N}$ 带入上面partition function, 得到

$$\begin{aligned}
Z &= \text{Tr} \sqrt{\frac{\beta J N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dm \exp \left(-\frac{N\beta J m^2}{2} + \beta J m \sum_i S_i + \beta h \sum_i S_i \right) \\
&= \sqrt{\frac{\beta J N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dm \exp \left(-\frac{N\beta J m^2}{2} \right) \text{Tr} \exp \left(\beta(Jm + h) \sum_i S_i \right), \\
&= \sqrt{\frac{\beta J N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dm \exp \left(-\frac{N\beta J m^2}{2} \right) [2 \cosh \beta(Jm + h)]^N, \\
&= \sqrt{\frac{\beta J N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dm \exp \left(-\frac{N\beta J m^2}{2} + N \log [2 \cosh \beta(Jm + h)] \right)
\end{aligned} \tag{IR-Z}$$

因此该问题，简化为单变量积分问题。

用 *steepest descent* 在thermodynamic limit $N \rightarrow \infty$ 下，可以估算该积分：积分在thermodynamic limit 下为被积函数的最大值。使被积函数取最大值的 m 由 *saddle-point condition* 所决定，即对指数部分进行最大化求解。

$$\frac{\partial}{\partial m} \left(-\frac{\beta J m^2}{2} + \log [2 \cosh \beta(Jm + h)] \right) = 0$$

or

$$m = \tanh \beta(Jm + h).$$

注意该式可以由equation of state 替换 $J \rightarrow J/N$, 替换 $z \rightarrow N$ 得到, 所以mean-field theory 可以得到 infinite-range model 的精确解。

对应到mean-field theory, 积分变量 m 的物理解释为magnetization. 另一方面, 从对(IR-Z)的第一个式子直接使用saddle-point condition, 得到对给定spin configuration,

$$\hat{m} = \frac{1}{N} \sum_i S_i,$$

则对所有构型满足saddle-point condition可用

$$m = \langle \hat{m} \rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i S_i \right\rangle,$$

近似。 (原文: thermodynamic limit $N \rightarrow \infty$, large numbers applies, 得到相等。) 换句话说, 在infinite-range model中 magnetization 的涨落在thermodynamic limit 下消失, 因此mean-field theory 给出了精确结果。

Infinite-range model 可视为具有nearest neighbour interactions in infinit-dimensional space. 这是因为 d -dimensional hypercubic lattice 上的 coordination number z 与 d 成正比, 更准确说 $z = 2d$ (如 $d = 1, z = 2$; $d = 2, z = 4$; $d = 3, z = 6$)。因此, 对于较大 d , 一个 site 与之相连的 sites 极多, 使得涨落在大 d 的极限下, 逐渐减弱, 从而表现出与 infinite-range model 相同的行为。

Sec. 5: Variational approach

各种物理量计算的困难来源是于 Hamiltonian 中存在相互作用项造成了 Gibbs-Boltzmann distribution 的复杂性。下面通过 single-site distribution,

$$P_i(\sigma_i) = \text{Tr} P(\mathbf{S}) \delta(S_i, \sigma_i),$$

的乘积来近似 Gibbs-Boltzmann distribution,

$$P(\mathbf{S}) \approx Q(\mathbf{S}) = \prod_{i=1}^N P_i(S_i).$$

通过最小化自由能 $F = E - TS$, 其中 $E = \langle H \rangle$ 为系统的平均能量, $S = -\text{Tr}Q(\mathbf{S}) \log Q(\mathbf{S})$ 为熵, 可以得到最佳的近似分布 $Q(\mathbf{S})$. 该方法称为 **variational method**.

自由能为,

$$\begin{aligned} F &= \text{Tr}Q(\mathbf{S})H(\mathbf{S}) + T\text{Tr}Q(\mathbf{S}) \log Q(\mathbf{S}), \\ &= -J \sum_{(ij) \in B} \text{Tr}Q(\mathbf{S})S_i S_j - h \sum_i \text{Tr}Q(\mathbf{S})S_i + T \sum_i \text{Tr}Q(\mathbf{S}) \log P_i(S_i), \\ &= -J \sum_{(ij) \in B} \text{Tr}P_i(S_i)P_j(S_j)S_i S_j - h \sum_i \text{Tr}P_i(S_i)S_i + T \sum_i \text{Tr}P_i(S_i) \log P_i(S_i), \end{aligned}$$

其中使用了 $\text{Tr}P_i(S_i) = 1$ 的归一化条件。

► 变分导数例子

那么对 $P_i(S_i)$ 进行变分, 得到

$$\begin{aligned} &\frac{\delta \{F + \sum_i \lambda_i (\text{Tr}P_i(S_i) - 1)\}}{\delta P_i(S_i)} \\ &= -J \sum_{j \in \partial i} \text{Tr}P_j(S_j)S_i S_j - hS_i + T(\log P_i(S_i) + 1) + \lambda_i, \\ &= -J \sum_{j \in \partial i} m_j S_i - hS_i + T \log P_i(S_i) + T + \lambda_i, \quad (m_j = \text{Tr}P_j(S_j)S_j) \end{aligned}$$

其中 λ_i 为拉格朗日乘子。令上式为 0, 得到

$$\begin{aligned}
P_i(S_i) &= \exp \left\{ \beta \left(J \sum_{j \in \partial i} m_j + h \right) S_i - 1 - \frac{\lambda_i}{T} \right\}, \\
&= \frac{\exp \left\{ \beta \left(J \sum_{j \in \partial i} m_j + h \right) S_i \right\}}{2 \cosh \left\{ \beta \left(J \sum_{j \in \partial i} m_j + h \right) \right\}},
\end{aligned}$$

其中使用了归一化条件 $\text{Tr} P_i(S_i) = 1$.

若假设所有site的magnetization相同 $m_i = m$,

$$Q(\mathbf{S}) \propto \exp \left\{ \beta (Jzm + h) \sum_{i=1}^N S_i \right\},$$

所对应的解耦的Hamiltonian, $H = -\beta (Jzm + h) \sum_{i=1}^N S_i$ 与前面得到的mean-field Hamiltonian只差一个常数。注意: 至此未使用 $S_i = \pm 1$, 因此结论是普遍的。若使用该条件到上面 $P_i(S_i)$, 得到的equation of state 为,

$$m = \tanh [\beta (Jzm + h)].$$

与mean-field theory的equation of state相同。

另一方面考虑 $S_i = \pm 1$ 时, 可以使用 m_i 表示 $P_i(S_i)$, 即

$$P_i(S_i) = \frac{1 + m_i S_i}{2},$$

这与 $m_i = \text{Tr} S_i P_i(S_i)$ 封闭。将其带入上面的自由能表达式, 得到

$$F = -J \sum_{(ij) \in B} m_i m_j - h \sum_i m_i + T \sum_i \left\{ \frac{1 + m_i}{2} \log \frac{1 + m_i}{2} + \frac{1 - m_i}{2} \log \frac{1 - m_i}{2} \right\}.$$

对 m_i 进行变分, 得到

$$m_i = \tanh \left[\beta \left(J \sum_{j \in \partial i} m_j + h \right) \right],$$

若假设所有site的magnetization相同 $m_i = m$, 则得到与mean-field theory相同的equation of state.

Chapter 2: Mean-field theory of spin glasses

在本章节讨论spin glasses 的问题，即相互作用 J_{ij} 在不同的bond上是随机分布的情形。在此情景下，会出现frustration现象，即无法使得所有相互作用能量都达到最低。此时出现自旋在空间上随机分布，但时间上冻结的现象，即**spin glass phase**。本节将介绍mean-field theory 在spin glasses 中的应用。探究spin glass phase 存在的条件，并重点阐明“replica-symmetric solution”的特性。

Replica method 是非常重要的分析工具。

Sec. 1: Spin glass and Edwards-Anderson model

为何叫做spin glass? 因为其类似于普通的玻璃材料，原子在空间上随机分布，但时间上冻结。类似地，spin glass 中的自旋在空间上随机分布，但时间上冻结。例如，在金属中掺杂少量的铁原子(Fe)会导致spin glass 行为。铁原子之间的相互作用通过周围的导电电子介导，这种间接相互作用称为RKKY interaction，它是振荡函数，因此不同距离的铁原子之间可能是ferromagnetic interaction 或antiferromagnetic interaction，从而导致frustration现象。

Mean-field theory 已经证实当低温时，当spin之间存在特定类型的随机相互作用时，系统会进入spin glass phase。本章以及下章介绍mean-field theory 在spin glasses 中的应用。

本章将首先引入随机系统模型，并解释分析随机系统的通用方法**replica method**。随后，给出 replica-symmetric solution。

Edwards-Anderson model

该模型(无外场情况)的Hamiltonian为，

$$H = - \sum_{(ij) \in B} J_{ij} S_i S_j, \quad S_i = \pm 1 \text{ (Ising type).} \quad (\text{EA-H})$$

其中 J_{ij} 为随机变量，服从某一概率分布 $P(J_{ij})$ ，

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi J^2}} \exp \left\{ -\frac{(J_{ij} - J_0)^2}{2J^2} \right\}, \quad (\text{Gaussian model}),$$

$$P(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J) + (1-p)\delta(J_{ij} + J), \quad (\pm J \text{ model}).$$

通常来讲sites 的无序性相比于bonds 的无序性对系统的影响较小，因此 J_{ij} 假定是独立同分布的随机变量。

Quenched system and configurational average

对于一组给定的 (quenched) 满足分布 $P(J_{ij})$ 的相互作用 $\{J_{ij}\}$ ，对 (EA-H) 中的spin 变量 $\mathbf{S} = \{S_i\}$ 上使用trace operation，能计算各种物理量的thermal average。例如 free energy，

$$F(\mathbf{J}) = -T \log \text{Tr} \exp(-\beta H),$$

其中 $\mathbf{J} \equiv \{J_{ij}\}$ 。然后对 \mathbf{J} 进行平均，得到 **configurational average** ($[\cdots]$ 表示对相互作用的 configurational average) ，

$$[F] = -T[\log Z] = -T \int \prod_{(ij) \in B} dJ_{ij} P(J_{ij}) \log Z.$$

- $F(\mathbf{J})$ 得到的时候是对 spin configuration 求和的结果，而 $[F]$ 是对相互作用 configurations 求平均的结果。
- $[F]$ 称为 averaged free energy，其对外场 h 或温度 T 的微分可以得到 magnetization 或 internal energy 等物理量的 configurational average。
- 这里之所以先固定相互作用 \mathbf{J} ，对 spin configuration 求和，是因为携带 spin 的原子在空间中的位置是随机分布的，但在 spin 快速热运动的时间尺度上的固定的。因此称之为 **quenched system**。
- 在 thermodynamic limit $N \rightarrow \infty$ 下， $f(\mathbf{J}) = F(\mathbf{J})/N$ 的涨落消失，因此 $f(\mathbf{J})$ 的值以概率 1 等于其 configurational average $[f] = [F]/N$ ，称为 **self-averaging property**。因此实际上我们选择计算不显式依赖 \mathbf{J} 的 $[f]$ 。

Replica method

为了解决上面计算 $[\log Z]$ 的问题，利用以下恒等式，

$$[\log Z] = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{[Z^n] - 1}{n}. \quad (\text{Replica})$$

这种制备原始系统的 n 个副本 (replica)，计算其 partition function 的 configurational average $[Z^n]$ ，然后对 n 做解析延拓到 0 的极限，称为 **replica method**。（这里解析延拓的合理性尚无严格证明，但在许多情况下得到了与数值模拟一致的结果，因此被广泛使用。）

Sec. 2: Sherrington-Kirkpatrick model

Sherrington-Kirkpatrick model

对于 infinite-range model 的 Edwards-Anderson model，即 Sherrington-Kirkpatrick (SK) model，Hamiltonian 为，

$$H = - \sum_{i < j} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i, \quad (\text{SK-H})$$

其中 J_{ij} 是一个 quenched variable 服从 Gaussian distribution，

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{J} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{N}{2J^2} \left(J_{ij} - \frac{J_0}{N} \right)^2 \right\},$$

其中

$$[J_{ij}] = \frac{J_0}{N}, \quad [(\Delta J_{ij})^2] = \frac{J^2}{N},$$

这里的normalization是为了使得extensive quantities (如energy)与 N 成正比。

Replica average of the partition function

基于(replica)式, 需要计算 $[Z^n]$. 对于 n 个replicas, Hamiltonian为,

$$H^n = - \sum_{a=1}^n \left(\sum_{i < j} J_{ij} S_i^\alpha S_j^\alpha + h \sum_i S_i^\alpha \right),$$

其中 $\alpha = 1, 2, \dots, n$ 为replica index. 因此 n 次幂 partition function的the configuration average ,

$$[Z^n] = \int \left(\prod_{i < j} dJ_{ij} P(J_{ij}) \right) \text{Tr} \exp \left(\beta \sum_{a=1}^n \sum_{i < j} J_{ij} S_i^\alpha S_j^\alpha + \beta h \sum_{a=1}^n \sum_i S_i^\alpha \right).$$

► 计算细节

因此得到,

$$[Z^n] = \exp \left(\frac{\beta^2 J^2 n N}{4} \right) \text{Tr} \exp \left\{ \frac{\beta^2 J^2}{2N} \sum_{\alpha < \beta} \left(\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta \right)^2 + \frac{\beta J_0}{2N} \sum_\alpha \left(\sum_i S_i^\alpha \right)^2 + \beta h \sum_\alpha \sum_i S_i^\alpha \right\}.$$

Linearization of the interaction terms

如果指数中的量是spin 的线性组合, 那么trace operation 可以简化为作用在每一个spin 上的乘积。但目前指数中含有 $(\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta)^2$ 和 $(\sum_i S_i^\alpha)^2$, 因此需要使用**Gaussian integral** (Gaussian)对其进行解耦(linearization)。

这里取 $a_{\alpha\beta} = \beta^2 J^2$, $x_{\alpha\beta} = \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta / \sqrt{N}$, $a_\alpha = \beta J_0$, $x_\alpha = \sum_i S_i^\alpha / \sqrt{N}$ 带入Gaussian integral, 对每一对 (α, β) 和 (α) 进行解耦, 得到

$$\begin{aligned}
[Z^n] &= \exp\left(\frac{\beta^2 J^2 n N}{4}\right) \text{Tr} \prod_{\alpha < \beta} \sqrt{\frac{N\beta^2 J^2}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dq_{\alpha\beta} \exp\left(-\frac{N\beta^2 J^2 q_{\alpha\beta}^2}{2} + \beta^2 J^2 q_{\alpha\beta} \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta\right) \\
&\quad \times \prod_\alpha \sqrt{\frac{N\beta J_0}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dm_\alpha \exp\left(-\frac{N\beta J_0 m_\alpha^2}{2} + \beta J_0 m_\alpha \sum_i S_i^\alpha\right) \exp\left(\beta h \sum_\alpha \sum_i S_i^\alpha\right), \\
\text{由于 } &\sqrt{\frac{N\beta^2 J^2}{2\pi}} \text{ 和 } \sqrt{\frac{N\beta J_0}{2\pi}} \text{ 相对指数项可以忽略, 所以} \\
&= \exp\left(\frac{\beta^2 J^2 n N}{4}\right) \text{Tr} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha < \beta} dq_{\alpha\beta} \exp\left(-\frac{N\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta}^2 + \beta^2 J^2 \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta} \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta\right) \\
&\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_\alpha dm_\alpha \exp\left(-\frac{N\beta J_0}{2} \sum_\alpha m_\alpha^2 + \beta J_0 \sum_\alpha m_\alpha \sum_i S_i^\alpha\right) \exp\left(\beta h \sum_\alpha \sum_i S_i^\alpha\right), \\
&= \exp\left(\frac{\beta^2 J^2 n N}{4}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{\alpha < \beta} dq_{\alpha\beta} \right) \left(\prod_\alpha dm_\alpha \right) \exp\left(-\frac{N\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta}^2 - \frac{N\beta J_0}{2} \sum_\alpha m_\alpha^2\right) \\
&\quad \times \text{Tr} \exp\left(\beta^2 J^2 \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta} \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta + \beta J_0 \sum_\alpha m_\alpha \sum_i S_i^\alpha\right) \exp\left(\beta h \sum_\alpha \sum_i S_i^\alpha\right), \\
&= \exp\left(\frac{\beta^2 J^2 n N}{4}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{\alpha < \beta} dq_{\alpha\beta} \right) \left(\prod_\alpha dm_\alpha \right) \exp\left(-\frac{N\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta}^2 - \frac{N\beta J_0}{2} \sum_\alpha m_\alpha^2\right) \\
&\quad \times \text{Tr} \exp\left(\beta^2 J^2 \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta} \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta + \beta \sum_\alpha (J_0 m_\alpha + h) \sum_i S_i^\alpha\right),
\end{aligned}$$

因为取对*i*的trace,且每一项都是*i*的线性组合, 因此可以写成乘积形式,

$$\begin{aligned}
&\text{Tr} \exp\left(\beta^2 J^2 \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta} \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta + \beta \sum_\alpha (J_0 m_\alpha + h) \sum_i S_i^\alpha\right) \\
&= \left(\text{Tr} \exp\left(\beta^2 J^2 \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta} S^\alpha S^\beta + \beta \sum_\alpha (J_0 m_\alpha + h) S^\alpha\right) \right)^N \\
&\equiv \exp(N \log \text{Tr e}^L).
\end{aligned}$$

$$\text{其中 } L = \beta^2 J^2 \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta} S^\alpha S^\beta + \beta \sum_\alpha (J_0 m_\alpha + h) S^\alpha.$$

所以

$$[Z^n] = \exp\left(\frac{\beta^2 J^2 n N}{4}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{\alpha < \beta} dq_{\alpha\beta} \right) \left(\prod_{\alpha} dm_{\alpha} \right) \exp\left(-\frac{N\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta}^2 - \frac{N\beta J_0}{2} \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 + N \log \text{Tr } e^L\right), \quad (\text{PF-Zn})$$

Steepest descent method

由于上面被积函数的指数部分与 N 成正比，因此在 thermodynamic limit $N \rightarrow \infty$ 下，可以使用 steepest descent method 估算该积分。使得指数部分取最大值的 $q_{\alpha\beta}$, ($\alpha \neq \beta$) 和 m_{α} 由 saddle-point condition 决定，即对 $q_{\alpha\beta}$ 和 m_{α} 分别求导数并令其为 0。

$$\frac{\partial}{\partial q_{\alpha\beta}} \left(-\frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta}^2 + \log \text{Tr } e^L \right) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial m_{\alpha}} \left(-\frac{\beta J_0}{2} \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 + \log \text{Tr } e^L \right) = 0.$$

计算得到，

$$q_{\alpha\beta} = \frac{1}{\beta^2 J^2} \frac{\partial}{\partial q_{\alpha\beta}} \log \text{Tr } e^L = \frac{\text{Tr } S^{\alpha} S^{\beta} e^L}{\text{Tr } e^L} = \langle S^{\alpha} S^{\beta} \rangle_L, \quad (\text{Saddle-q})$$

$$m_{\alpha} = \frac{1}{\beta J_0} \frac{\partial}{\partial m_{\alpha}} \log \text{Tr } e^L = \frac{\text{Tr } S^{\alpha} e^L}{\text{Tr } e^L} = \langle S^{\alpha} \rangle_L, \quad (\text{Saddle-m})$$

进一步使用 steepest descent method，得到

$$\begin{aligned} [Z^n] &\approx \exp\left(-\frac{N\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta}^2 - \frac{N\beta J_0}{2} \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 + N \log \text{Tr } e^L + \frac{\beta^2 J^2 n N}{4}\right), \quad (\text{利用了 } N \rightarrow \infty) \\ &\approx 1 + Nn \left(-\frac{\beta^2 J^2}{2n} \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta}^2 - \frac{\beta J_0}{2n} \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 + \frac{1}{n} \log \text{Tr } e^L + \frac{\beta^2 J^2}{4} \right), \quad (\text{利用了 } n \rightarrow 0) \\ &= 1 + Nn \left\{ -\frac{\beta^2 J^2}{4n} \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^2 - \frac{\beta J_0}{2n} \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 + \frac{1}{n} \log \text{Tr } e^L + \frac{\beta^2 J^2}{4} \right\}, \end{aligned}$$

所以上面是对充分大且有限的 N 和充分小的 n 进行近似。

因此根据(replica)式，得到averaged free energy为，

$$\begin{aligned} -\beta[f] &= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{[Z^n] - 1}{nN} \\ &= \lim_{n \rightarrow 0} \left\{ -\frac{\beta^2 J^2}{4n} \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^2 - \frac{\beta J_0}{2n} \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 + \frac{1}{n} \log \text{Tr } e^L + \frac{\beta^2 J^2}{4} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{R-FE})$$

Order parameters

上一节中引入的 $q_{\alpha\beta}$ 和 m_{α} 最初是为了线性化interaction term 而引入的辅助变量，但通过saddle-point condition 可以看出它们实际上是系统的物理量，分别为不同replica 之间的overlap和每个replica 的magnetization。 (类似Ising模型中的处理。)

为了说明物理意义,首先定义

$$H_{\gamma} = - \sum_{i < j} J_{ij} S_i^{\gamma} S_j^{\gamma} - h \sum_i S_i^{\gamma}.$$

我们要计算，在 $n \rightarrow 0$ 下，

$$q_{\alpha\beta} = [\langle S_i^{\alpha} S_i^{\beta} \rangle] = \left[\frac{\text{Tr} S_i^{\alpha} S_i^{\beta} \exp(-\beta \sum_{\gamma} H_{\gamma})}{\text{Tr} \exp(-\beta \sum_{\gamma} H_{\gamma})} \right] \quad (\text{R-overlap})$$

$$m_{\alpha} = [\langle S_i^{\alpha} \rangle] = \left[\frac{\text{Tr} S_i^{\alpha} \exp(-\beta \sum_{\gamma} H_{\gamma})}{\text{Tr} \exp(-\beta \sum_{\gamma} H_{\gamma})} \right], \quad (\text{R-magnet})$$

► 计算细节

在此，如果 m_{α} 独立于 α 时，这与常规的ferromagnetic magnetization相对应。参数 $q_{\alpha\beta}$ 是spin glass order parameter, 这是对除去 α, β 副本之外其他所有副本取trace 后式(R-overlap)分子分母相抵消。因此当无法区分各个replica时，

$$q_{\alpha\beta} = \left[\frac{\text{Tr} S_i^{\alpha} e^{-\beta H_{\alpha}}}{\text{Tr } e^{-\beta H_{\alpha}}} \frac{\text{Tr} S_i^{\beta} e^{-\beta H_{\beta}}}{\text{Tr } e^{-\beta H_{\beta}}} \right] = [\langle S_i^{\alpha} \rangle \langle S_i^{\beta} \rangle] = [\langle S_i \rangle^2] \equiv q.$$

- 在 **paramagnetic phase at high temperature**, 在任意的replica, 每个site i , 有 $\langle S_i \rangle = 0$, 因此 $m = q = 0$.
- 在 **ferromagnetic phase**, 具有几乎空间均匀的序, 若选择序的方向为正项, 则在大多数site有 $\langle S_i \rangle > 0$, 因此 $m > 0$ 和 $q > 0$.
- 在 **spin glass phase at low temperature**, spin在空间上随机分布, 但时间上冻结, 因此在每个site i , 有 $\langle S_i \rangle \neq 0$, 但其符号随机分布, 因此有可能 $m = [\langle S_i \rangle] = 0$, 但 $q = [\langle S_i \rangle^2] > 0$. 因此 q 可以作为spin glass phase 的order parameter.

Sec. 3: Replica-symmetric solution

Equation of state

为了求解(R-FE), 且 $q_{\alpha\beta}$ 和 m_α 的值, 有saddle-point conditions (Saddle-q)和(Saddle-m). 在此式子中, replica index是需要被明确处理的。但直观上, 系统的物理性质不应依赖于replica index 的标号, 因此假设**replica symmetry**,

$$q_{\alpha\beta} = q, \quad (\alpha \neq \beta), \quad m_\alpha = m.$$

所以从(R-FE)和 L 的定义, 可以得到

$$-\beta[f] = \frac{\beta^2 J^2}{4}(1 - q)^2 - \frac{\beta J_0}{2}m^2 + \int Dz \log [2 \cosh \beta \tilde{H}(z)]. \quad (\text{RS-FE})$$

其中 Dz 为Gaussian measure, 有 $Dz = dz \exp(-z^2/2)/\sqrt{2\pi}$, 以及 $\tilde{H}(z) = J\sqrt{q}z + J_0m + h$.

▶ 计算细节

根据(RS-FE)分别对 q 和 m 求导数并令其为0, 可以得到equation of state,

$$m = \int Dz \tanh \beta \tilde{H}(z). \quad (\text{RS-m})$$

$$q = \int Dz \tanh^2 \beta \tilde{H}(z), \quad (\text{RS-q})$$

▶ 计算细节

这里的equation of state 也可通过(saddle-q)和(saddle-m)与\$L\$的定义结合replica symmetry 假设直接得到。式子(RS-m)相比较只有外场的时的 $m = \tanh \beta h$, 由于随机性 internal field具有Gaussian分布。

Phase diagram

Equation of state (RS-m)和(RS-q) 的解被参数 β 和 J_0 所决定。为了简单起见, 考虑无外场 $h = 0$ 的情况。

- 如果 J_{ij} 分布是symmetric的, 即 $J_0 = 0$, 则 $\tilde{H}(z)$ 是奇函数, 因此 $m = 0$ 总是成立。此时系统只有两种相态, paramagnetic phase ($q = 0$)和spin glass phase ($q > 0$). free energy 为:

$$-\beta[f] = \frac{\beta^2 J^2}{4}(1 - q)^2 + \int Dz \log [2 \cosh(\beta J \sqrt{q}z)].$$

在 $q = 0$ 附近幂级数展开, 可以得到

$$\beta[f] = -\frac{\beta^2 J^2}{4} - \log 2 - \frac{\beta^2 J^2}{4} (1 - \beta^2 J^2) q^2 + \mathcal{O}(q^3).$$

所以根据Landau theory, critical point 由 $1 - \beta^2 J^2 = 0$ 决定, 因此 spin glass transition 发生在 $T = J \equiv T_f$.

注意地, 当 $T > T_f$ 时, free energy 关于 q 的二次项系数为负, 因此 $q = 0$ 是 free energy 的极大值, 而非极小值, 这是因为在推导(RS-FE)时

$$-\beta[f] = -\frac{\beta^2 J^2}{4} (n - 1) q^2 - \frac{\beta J_0}{2} m^2 + \frac{1}{n} \log \text{Tr } e^L + \frac{\beta^2 J^2}{4} \quad (n \rightarrow 0).$$

在 $n = 1$ 时改变了 q 的二次项系数的符号, 所以当 $n \rightarrow 0$ 时, 相对于 n 取正整数时的 free energy 极值性质相反。因此在 $T > T_f$ 时, $q = 0$ 是 free energy 的极小值, 而在 $T < T_f$ 时, $q > 0$ 的解是 free energy 的极小值。

- 如果 $J_0 > 0$, 则系统可能存在 ferromagnetic phase ($m > 0$)。将 equation of state (RS-q) 的右侧关于 q, m 在 $q = 0, m = 0$ 附近展开且仅保留 q 和 m 的最低阶项, 得到

$$q = \beta^2 J^2 q + \beta^2 J_0^2 m^2.$$

(如果 $J_0 = 0$, 类似第一章章节的处理, 在此依然有 critical point $T_f = J$.)

通过上面式子可以得到 $q = \mathcal{O}(m^2)$ 。因此在对式(RS-m)对时, q 也是很小的, 可以忽略不计。因此从(RS-m)中可以得到

$$m = \beta J_0 m + \mathcal{O}(q).$$

所以 critical point 由 $\beta J_0 = 1$ 决定, 因此 ferromagnetic transition 发生在 $T = J_0 \equiv T_c$.

从上面已经给出了 paramagnetic (P) & spin glass (SG) phases (在 $J_0 = 0$ 情况下); paramagnetic & ferromagnetic (F) phases 之间的边界, 而 spin glass & ferromagnetic phases 之间的边界。可以通过上面的(RS-m)和(RS-q)数值求解得到 (图中虚线)。最终的 phase diagram 如下 FIG. 2.1

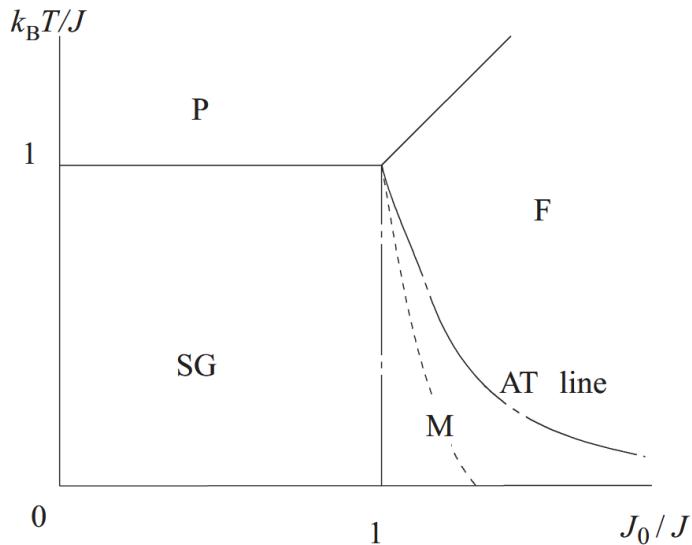


FIG. 2.1. Phase diagram of the SK model. The dashed line is the boundary between the ferromagnetic (F) and spin glass (SG) phases and exists only under the ansatz of replica symmetry. The dash-dotted lines will be explained in detail in the next chapter: the replica-symmetric solution is unstable below the AT line, and a mixed phase (M) emerges between the spin glass and ferromagnetic phases. The system is in the paramagnetic phase (P) in the high-temperature region.

在区分SG和F时，只要 $J_0 < J$ ，就是SG phase,当 $J_0 > J$ 时，SG phase 延申至 F phase 的下方，这种现象称之为 **re-entrance transition**. 图中的虚线表示了SG phase 和 F phase 之间的边界，表示了re-entrance transition.

下一章节将考虑replica symmetry breaking 对phase diagram 的影响, 进而虚线会消失, 进而出现垂直的点画线 (区分SG phase 和 Mixed phase) 和“AT”点画线 (区分F phase 和 Mixed phase) 。

Negative entropy

对于 $J_0 = 0$, 低温下, replica symmetry 的假设失效, 表现为 ground-state entropy 变为负值。ground-state entropy 可借助

$$q = 1 - \int Dz \operatorname{sech}^2(\beta J \sqrt{q} z) = \int Dz \tanh^2(\beta J \sqrt{q} z)$$

和自由能表达式

$$-\beta[f] = \frac{\beta^2 J^2}{4} (1 - q)^2 + \int Dz \log [2 \cosh (\beta J \sqrt{q} z)] ,$$

分析得到

$$[f] \approx -\sqrt{\frac{2}{\pi}} J + \frac{T}{2\pi}, \quad (T \rightarrow 0).$$

因此

$$\text{ground-state entropy} = -\frac{1}{2\pi} < 0$$

$$\text{ground-state energy} = -\sqrt{\frac{2}{\pi}} J < 0$$

► 计算细节

最初，怀疑这种 negative entropy 是在推导(R-FE)时错误的计算了 $n \rightarrow 0$ 和 $N \rightarrow \infty$ 的极限顺序。正确顺序是先取 $n \rightarrow 0$ ，再取 $N \rightarrow \infty$ ，事实上为了使用steepest descent method，先取了 $N \rightarrow \infty$ 。但事实证明replica symmetry 的假设才是导致negative entropy 的根本原因。下一章节将介绍replica symmetry breaking 的方法，进而修正这个问题。