

Notes of spin glass

Q. X. Fang 

fangqixuan23@mails.ucas.ac.cn

KITS, UCAS

2025-07-29

ABSTRACT

I 平均场

I.1 为什么要平均场

在统计物理学中，精确求解一个由大量相互作用的粒子组成的系统的热力学性质，是理论物理的核心挑战之一，通常被称为“多体问题”。由于粒子间相互作用的复杂性，直接求解几乎是不可能的。为了克服这一障碍，物理学家们发展了多种近似方法，其中，平均场理论 (Mean-Field Theory, MFT) 是历史上第一个，也是概念上最为基础和影响深远的一种。它通过一种核心的简化思想，为理解物质的相变现象提供了最初的、有效的理论框架。

平均场思想的早期体现可追溯至 19 世纪 70 年代。约翰内斯·范德华在修正理想气体状态方程时，为了解释真实气体的行为，引入了分子间相互作用的效应。其中，用于修正压强的 $\frac{a}{V^2}$ 项，其物理根源即为平均场思想。该模型假设，气体中的任一分子所感受到的长程吸引力，并非来自邻近分子的瞬时作用，而是源于体系中所有其他分子共同构成的一个均一化、有吸引力的“背景”力场，该力场的强度正比于系统的平均粒子数密度。基于此，范德华方程成功地从微观相互作用出发，理论性地预言了气-液相变和临界点的存在。

平均场理论作为一种系统性的方法论，其正式确立通常归功于皮埃尔·外斯在 1907 年为解释铁磁性而提出的“分子场”理论。为阐明铁磁体在居里温度 (T_c) 以下能够产生自发磁化的机制，外斯假设，材料中的每一个磁矩除了受外磁场作用外，还受到一个极强的内场——即分子场的作用。此分子场并非真实的电磁场，而是该磁矩周围所有其他磁矩对其施加的交换相互作用的等效结果。外斯理论的关键简化在于，用一个正比于系统宏观总磁化

强度 \overline{M} 的平均场 $\vec{H}_{mf} = \lambda \overline{M}$ ，来替代单个磁矩所受到的极其复杂的、随时间涨落的真实相互作用。通过这种处理，复杂的多体问题被简化为一个可解的单体问题：即单个磁矩在一个有效磁场（外场与分子场的矢量和）中的统计取向问题。该理论取得了显著成功，它不仅解释了自发磁化的起源，还通过一个自洽方程预言了居里温度的存在——只有当温度低于 T_c 时，自发磁化才存在非零解。此外，它还导出了在高温顺磁相中被实验验证的居里-外斯定律。

外斯理论的成功启发了后续研究，平均场思想很快被赋予了更严格的统计力学形式。1934年，布拉格与威廉姆斯在研究二元合金的有序-无序相变时提出了布拉格-威廉姆斯近似。在AB二元合金中，低温下A、B原子倾向于分别占据不同的子格点形成有序结构，而在高温下则随机混合。该近似的核心假设是，任一格点上的原子所感受到的相互作用能，仅取决于其近邻格点上出现A或B原子的平均概率，而此概率由晶体的整体组分和用于描述有序程度的“长程有序度”参数决定。这同样忽略了原子排布的局域关联和构型涨落，将每个原子置于一个由体系整体决定的“平均”环境中。通过构造系统的自由能并对其进行极小化，该理论成功描述了有序-无序相变，并引入了“长程有序度”这一关键物理量。这证明了平均场方法作为一种处理合作现象的普适性近似手段的有效性。

然而，这些早期平均场理论的共同局限性也十分明确。由于其核心思想是忽略局域涨落与关联，它们在临界点附近的定量预测上均出现了系统性偏差。例如，理论预言的临界指数（描述物理量在临界点附近如何发散或趋于零的幂指数）与精确解和实验值不符。其根本原因在于，当系统趋近临界点时，涨落的关联长度趋于无穷大，系统的行为由所有空间尺度上的涨落共同决定，此时用一个“平均值”来替代瞬息万变的局域环境，其假设前提已然失效。

理论的真正升华来自于列夫·朗道在1937年提出的普适相变理论。朗道理论不依赖于任何具体的微观模型哈密顿量，而是从物理系统在相变过程中对称性的变化出发，构建了一个适用于所有二级相变的唯象框架。其核心是引入“序参数”(η)的概念，该物理量在对称性较高的相中为零，在对称性较低的相中为非零值。朗道假设，在临界点附近，系统的吉布斯自由能 $G(T, P, \eta)$ 可以按序参数的幂次进行解析展开。例如，对于磁系统，其形式为

$$G \approx G_0 + a(T - T_c)\eta^2 + B\eta^4 \quad (1)$$

系统的平衡态对应于自由能对序参数取极小值的状态。朗道理论的本质即是平均场理论，因为它假设自由能密度在空间上是均匀的，仅依赖于序参数的宏观平均值，从而完全忽略了序参数在空间上的局域涨落 $\delta\eta(\vec{r})$ 。朗道理论的提出意义重大，它通过“对称性破缺”和“序参数”这两个核心概念，将各种二级相变现象统一在了一个简洁优美的数学框架之下，并系统性地导出了一套普适的“经典”临界指数。

朗道理论的成功及其作为平均场理论的内在局限性，直接推动了后朗道时代理论物理学的发展。第一步重要的拓展是金兹堡-朗道理论。该理论在朗道自由能中增加了一个描述序参数空间变化的梯度项 $|\nabla\eta|^2$ 。这一项使得理论能够描述非均匀的物理状态，如超导体中的磁通涡旋或铁磁体中的畴壁。更重要的是，通过分析涨落项对自由能的贡献，该理论导出了著名的金兹堡判据。该判据定量地指出了经典平均场理论失效的范围：当系统非常接近临界点，以至于热涨落的能量与序参数本身的能量相当时，平均场近似便不再成立。金兹堡判据明确了空间维度和相互作用程等因素对涨落重要性的影响，为平均场理论的局限性提供了深刻的物理洞察。

尽管金兹堡-朗道理论揭示了涨落的重要性，但它本身仍无法正确处理临界点上所有尺度涨落同时存在的问题。对这一问题的最终解决，标志着现代相变理论的诞生，即肯尼斯·威尔逊在20世纪70年代创立的重正化群(Renormalization Group, RG)理论。重正化群理论提供了一套强大的数学工具，通过对系统进行尺度变换，系统地处理临界点附近从微观到宏观所有尺度的涨落效应。它解释了临界指数为何具有普适性，并能够精确地计算出其数值，与实验结果完美吻合。重正化群理论的成功，正是建立在对平均场理论为何失效的深刻理解之上。

综上所述，平均场理论的引入是为了将物理上难以处理的多体相互作用问题，简化为可以在一个自洽有效场中求解的单体问题。它成功地提供了相变的第一个定性、甚至半定量的物理图像，引入了序参数和对称性破缺等至今仍在使用的核心物理概念。其根本局限性在于系统性地忽略了涨落与关联，导致其在临界区域的定量预测失败。然而，正是对这一“失败”的深入研究，最终催生了金兹堡-朗道理论以及更深刻的重正化群理论，从而构成了我们今天对临界现象的完整理解。因此，平均场理论不仅是分析复杂系统时不可或缺的初始近似方法，更在物理学的发展史上扮演了关键的铺垫角色。

I.2 从 Ising model 谈起

伊辛模型 (Ising model) 是统计物理学中研究相变和临界现象的一个基本模型。它描述了一个由自旋 (spin) 组成的系统, 这些自旋可以取两个值 (通常表示为+1和-1), 并且相互之间通过最近邻相互作用耦合。尽管伊辛模型的定义非常简单, 但它却能够捕捉到许多复杂系统的关键特性, 尤其是在二级相变 (如铁磁性相变) 方面。

在平均场理论的框架下, 伊辛模型的研究得到了极大的推动。通过将每个自旋视为在一个平均场中运动, 物理学家们能够简化模型的复杂性, 从而获得关于相变的定性和定量结果。例如, 平均场理论成功地预测了伊辛模型的临界温度和临界行为, 这些结果与后来的精确解和实验结果相符。

我们先从描述这个模型开始。对于一个最近邻相互作用的 Ising model, 我们可以写成直接写出其哈密顿量:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} s_i s_j \quad (2)$$

求和是对 $\langle ij \rangle$ 表示最临近的格点对, 后面我们也叫这个做配位数。比如, 如果系统的 spin 成一个一维链排列, 那么配位数就是 2. 同理, 二维方格上这个配位数是 4. 耦合常数 J_{ij} 决定了自旋之间的相互作用强度, 而 s_i 和 s_j 是一个经典的 spin 变量, 也就是二值的变量。当然, spin 的取值完全可以推广到任意整数值 n , 当 $n = 3$ 时, 这叫做 Potts 模型。自旋也可以是半整数的, 比如 $\frac{1}{2}$, 这时我们就可以用量子力学的语言来描述它们。

回到这样的经典模型上, 很容易看出来, 一个 N 粒子体系对应了 2^N 个微观构型, 因此微观态空间十分庞大。如果耦合强度 J_{ij} 也各不相同, 其能量景观相当复杂。通常我们会考虑一个更简单的模型:

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \quad (3)$$

其中 J 是一个常数, 表示所有自旋之间的相互作用强度。这种简化使得模型的分析变得更加可行。由于 J 可正可负, 因此在哈密顿量前面往往提出一个负号, 写成:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \quad (4)$$

当 $J > 0$ 时, 哈密顿量最小要求临近格点的 spin 取向 (就是+1或者-1) 趋同, 也就是铁磁的排列。反之, 则要求它们趋于反向, 也就是反铁磁排列。

还有一些结构特殊的晶格,如三角晶格,由于几何限制,一个三角的三个格点无法存在非简并的,唯一的基态,而是有很多能量相同的态,这就是阻挫。

考虑存在外磁场的情况下,哈密顿量可以写成

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i \quad (5)$$

考虑铁磁耦合 $J > 0$,首先直观的考量温度的极限情况。当 $T = 0$ 时,系统处在基态,整体上表现顺着外磁场的方向排列。当 $T \rightarrow \infty$ 时,系统热涨落极大,自旋排列由熵驱动,变得杂乱无序。从而,在温度升高的过程中,应该存在有序到无序的相变。这个相变的临界温度 T_c 。考量的序参量是格点上的磁矩:

$$\langle \sigma_i \rangle = m \quad (6)$$

选定某个 spin 记为 σ_0 , 其能量可以写成:

$$\begin{aligned} H(\sigma_0) &= -\sigma_0 \left(J \sum_j^q \sigma_j + h \right) \\ &= -\sigma_0 (Jqm + h) - J\sigma_0 \sum_j^q (\sigma_j - m) \end{aligned} \quad (7)$$

其中 q 是最近邻的格点个数,即配位数。上面是一个严格的等式。可以看到,第二行的第一项就是平均作用,即用最近邻的格点的平均值代替即时的取值。第二项是涨落项,表示了临近格点在平均值附近的涨落作用。如果涨落的贡献,即: $\sum_j (\sigma_j - m)$ 的贡献很小,可以忽略,那么就得到了无相互作用模型。另外,我们应该注意到,对于 σ_0 的选择如果是任意的,并保证晶格体系的平移不变,那么应当满足自洽条件:

$$m = \langle \sigma_0 \rangle = \langle \sigma_i \rangle \quad (8)$$

这就是 Weiss 平均场的基本思路。在统计物理中,计算 σ_0 自旋的平均值:

$$\begin{aligned} m &= \frac{\text{Tr } \sigma_0 \exp(\{-\beta H(\sigma_0)\})}{\text{Tr } \exp(\{-\beta H(\sigma_0)\})} \\ &= \frac{\exp(\{\beta(Jqm + h)\}) - \exp(\{-\beta(Jqm + h)\})}{\exp(\{\beta(Jqm + h)\}) + \exp(\{-\beta(Jqm + h)\})} \\ &= \tanh(\beta(Jqm + h)) \end{aligned} \quad (9)$$

于是 m 可以看作耦合系数和外场的函数 $m(J, h)$, 需要通过自洽方程:

$$m = \tanh(\beta(Jqm + h)) \quad (10)$$

求解。容易看出, $m(h, T) = -m(-h, T)$. 首先看当无外场时, 这个自洽方程的一个解显然是: $m = 0$, 当 $\beta Jq > 1$ 时, 这个方程还存在两个解 $\pm m_0$

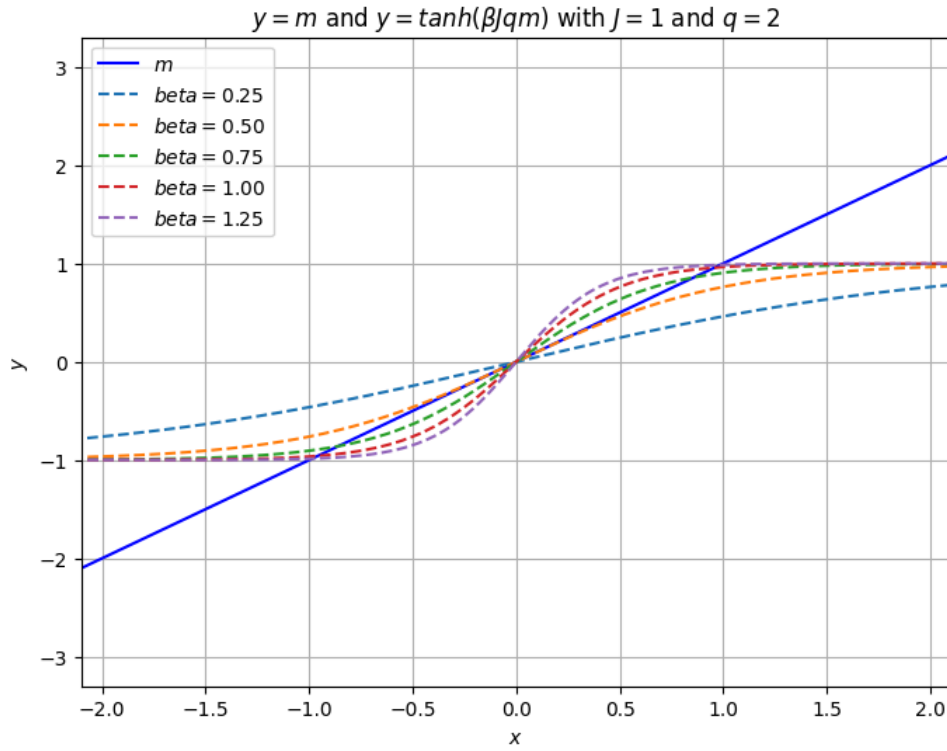


Figure 1: 自洽方程解的情况

我们可以解出 $T_c = \frac{qJ}{k_B}$ ，在温度 $T \rightarrow 0$ 时，两个非零解 m_0 趋于 ± 1 。

在临界点下方附近，通过 Taylor 展开来研究：

$$m_0 = \beta q J m_0 - \frac{1}{3}(\beta J q)^3 m_0^3 + \dots \quad (11)$$

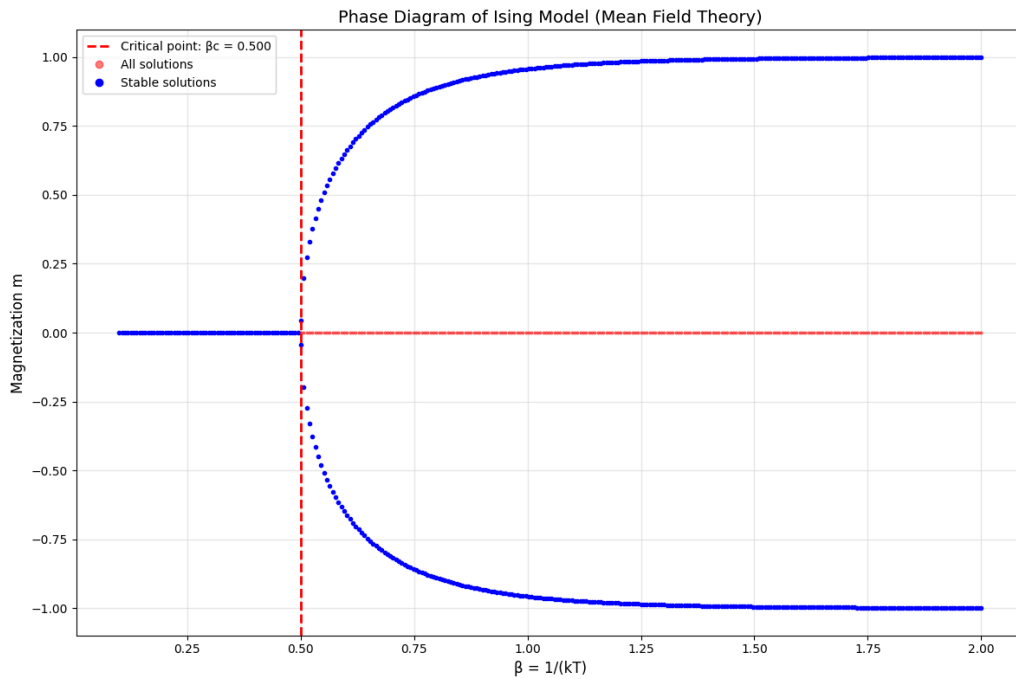


Figure 2: 自洽方程解与关系温度

展开保留到三阶幂次，得到：

$$\begin{aligned}
 m_0 &= \frac{1}{k_B T} q J m_0 - \frac{1}{3} \left(\frac{1}{k_B T} J q \right)^3 m_0^3 \\
 &= \frac{T_c}{T} m_0 - \frac{1}{3} \left(\frac{T_c}{T} \right)^3 m_0^3 \\
 \Rightarrow m_0^2(T) &= 3 \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \left(\frac{T_c}{T} - 1 \right) \\
 &= \pm \sqrt{3} \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{T_c}{T} - 1 \right)^{\frac{1}{2}}
 \end{aligned} \tag{12}$$

这里可以看到， m_0 随着温度逐渐升高到临界温度附近，其衰减的标度行为呈现半幂次的行为。

I.3 Brag-Williams 近似方法