

相变与临界现象简介

Q. X. Fang 

fangqixuan23@mails.ucas.ac.cn

KITS, UCAS

2025-09-19

ABSTRACT

1 从热力学谈起

热力学的一个重要问题是研究宏观物理量。在物理模型中，总是可以构建类似于“点电荷”，“质点”一类的理想模型，通常是忽略体积的影响，来简化问题的复杂度。然而在热力学中，物质的体积是一个不可忽略的因素。我们通常研究的物质都是由大量粒子组成的宏观体系，这些粒子之间存在着复杂的相互作用。理论上，这些相互作用都可以写成牛顿定律：

$$m_i \mathbf{a}_i = \mathbf{F}_i \quad (1)$$

其中 \mathbf{F}_i 是第 i 个粒子受到的合力，由其他所有粒子的复杂相互作用决定， m_i 是粒子的质量， \mathbf{a}_i 是粒子的加速度。对于一个由 N 个粒子组成的系统，我们可以写出 N 个这样的方程。然而，当 N 很大时（例如，1 克水大约含有 3.34×10^{22} 个水分子），直接求解这些方程组是不可行的。

为了简化问题，我们引入了“热力学极限”的概念，即考虑粒子数趋于无穷大时（或者至少是足够大）的行为。在这种情况下，系统的性质可以用一些宏观变量来描述，如温度、压力、体积等，而不是通过微观粒子的具体状态描述。统计力学/热力学就是用来寻找大量粒子组成系统的宏观性质的学科。

但我们不可能未知所有的东西，总是要有一些已知量表示未知量，这样就构成了函数关系，于是称为状态函数。比如，理想气体的状态方程 $PV = nRT$ 就是一个典型的状态函数关系，其中 P 是压力， V 是体积， n 是物质的量， R 是气体常数， T 是温度。当我们希望获得压强 P 作为函数的性质，其他物理学量就是参数，于是：

$$P(V, T) = \frac{nRT}{V} \quad (2)$$

P 就表示成了 V 和 T 的函数，类似的， V 也可以表示成 P 和 T 的函数， T 也可以表示成 P 和 V 的函数。

温度是一个只有宏观意义的物理量，这是存在于热力学体系中的特殊物理量，注意温度实际上是一个能量量纲的量，它反映的是某种能量特性，一般来说，会解释成这个宏观体系内部具有能量的量度。温度和熵有关系，具体的说：它是一个体系的熵随着温度变化率（也就是导数）的倒数，即

$$\frac{dS}{dT} = \frac{1}{T} \quad (3)$$

最后，如果你还记得熵，它应该是系统微观状态数的对数，或者说是系统的无序度。熵越大，系统的无序度越大，微观状态数也就越多。

2 相与相变

物质的相是指物质在一定条件下（如温度、压力等）所处的状态。常见的相有固态、液态和气态。此外，还有一些特殊的相，如等离子体、玻璃态等。不同的相具有不同的物理性质，例如密度、熔点、沸点等。

相变也很好理解，就是物质从一种相转变为另一种相的过程。常见的相变包括熔化（固态变为液态）、凝固（液态变为固态）、蒸发（液态变为气态）和凝结（气态变为液态）。相变通常伴随着能量的吸收或释放，例如，水在熔化过程中吸收热量，而在凝固过程中释放热量。

一阶相变和二阶相变是相变的两种主要类型。一阶相变是指在相变过程中，物质的某些性质（如密度、熔点等）发生突变的相变。例如，水在 0 摄氏度时从固态变为液态，这个过程伴随着体积的突然变化。二阶相变则是指在相变过程中，物质的某些性质发生连续变化，但其导数（如比热容、磁化率等）发生突变的相变。例如，铁在居里温度附近从顺磁性转变为铁磁性，这个过程伴随着磁化率的突然变化。

一阶相变往往伴随着潜热效应，即在相变过程中，物质吸收或释放的热量不会引起温度的变化。例如，水在熔化过程中吸收的热量用于克服分子间的相互作用，而不是用于提高温度，相变潜热由克拉伯龙方程描述：

$$\frac{dP}{dT} = \frac{L}{T_c dV} \quad (4)$$

这个方程当然可以理解成导数，但也可以理解成单位体积变化下的单位温度变化时，压强变化率是多少。其中 L 是潜热(正负号包含在内，用于表示吸热还是放热)， T_c 是相变温度， dV 是单位体积变化。

由于本身就和温度有关系，在温度变化时序参量就有跳变，因此没有什么好研究的。

二级相变才是大家很感兴趣的，又叫做连续相变。它是说，系统的某种序参量在相变过程中随温度是连续变化的，但是其导数随着温度变化时非连续的（也就是说这个参量的二阶导数是不连续的）。比如铁磁-顺磁相变，铁磁材料在低温下具有自发磁化现象，而在高温下则表现为顺磁性。随着温度的升高，铁磁材料的磁化强度逐渐减小，并在居里温度处达到零。然而，磁化强度的导数（即磁化率）在居里温度处发生突变，这就是一个典型的二级相变现象。

类似的有高阶相变，就是高次导数不连续，几阶相变意味着几阶导数不连续，但高阶相变目前来讲实际研究价值不大。

3 临界现象和临界点

在连续相变体系中，临界现象就是临界点（连续相变点）附近这种非解析性质（二阶导数发散）的总称。临界现象的一个重要特征是临界放大，即在临界点附近，系统的某些物理量（如磁化率、比热容等）会出现异常大的变化。这种现象可以通过临界指数来描述，临界指数是用来描述物理量在临界点附近如何发散或趋近于零的参数。例如，磁化率 χ 在临界点附近的行为可以表示为：

$$\chi \sim |T - T_c|^{-\gamma} \quad (5)$$

其中 γ 就是临界指数， T_c 是临界温度。

当然，如果止步于此，临界现象的研究就只能是一一对应的机械化方法。但是，我们应该相信，临界现象是存在某种普适性的，相同类型的临界现象应该具有相同的临界指数。这种现象被称为普适性，它表明不同物理系统在临界点附近表现出相似的行为。例如，液体-气体临界点和铁磁-顺磁相变虽然是不同的物理现象，但它们在临界点附近的行为却具有相似的临界指数。在 Kadanoff 的假设下，临界现象应该被分类成：

- 与物理维度有关

- 与对称性有关
- 与其他可能的因素有关

每一类临界现象都具有相同的临界指数，这就是普适类的概念。

4 重整化群

重整化群 (Renormalization Group, RG) 是一种强有力的数学工具，可以用于研究临界现象和相变。它的基本思想是通过逐步“缩放”系统的长度尺度，来分析系统在不同尺度下的行为。具体来说，重整化群方法包括以下几个步骤：

1. 缩放变换：通过对系统进行缩放变换，将系统的长度尺度扩大或缩小。例如，可以将系统的每个格点替换为一个更大的格点，从而减少系统的自由度。
2. 重整化：在缩放变换后，重新计算系统的参数（如耦合常数、温度等），以反映系统在新的尺度下的行为。这一步通常涉及到积分出高频模式，从而得到一个有效的低频理论。
3. 迭代过程：重复上述缩放和重整化步骤，直到系统的参数趋于一个固定点。这个固定点对应于系统的临界行为。

举一个简单例子：

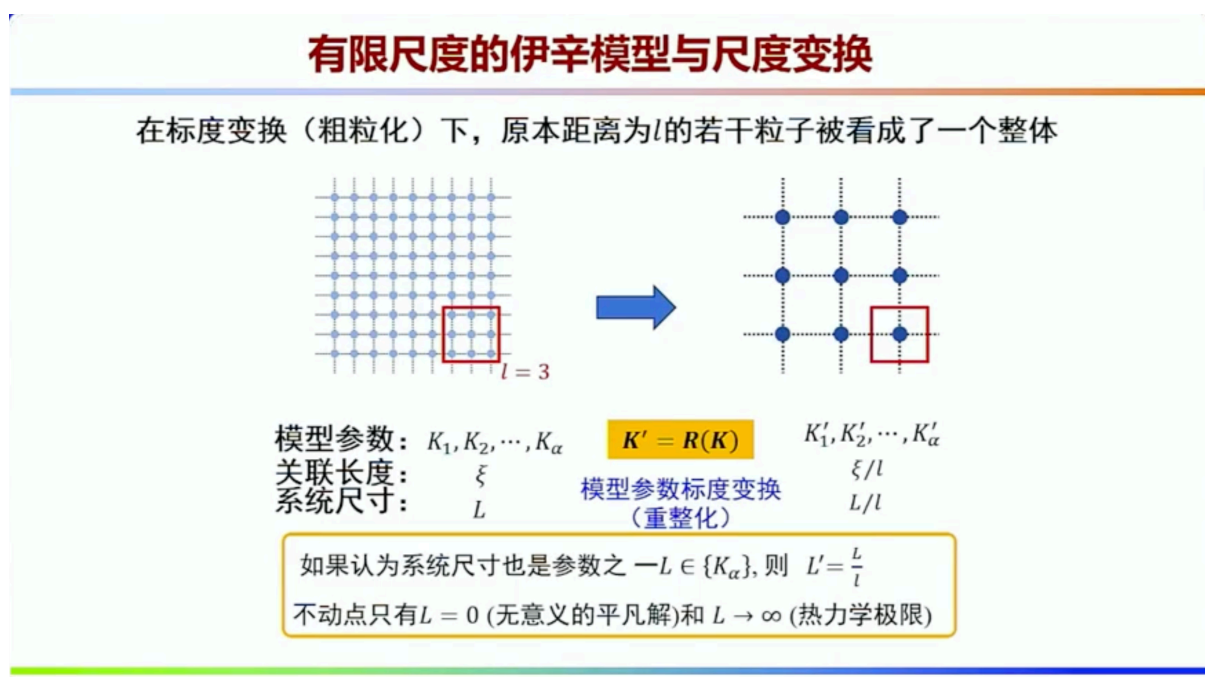


Figure 1: 一个 Ising 重整化示意图

图中每个格点之间存在着某些相互作用，但是如果在一个足够大网络结构上，不观察的十分仔细，可以把某一个区域内的格子的整体行为都看成一个，忽略去里面复杂的相互作用，只关心这个新的结构的相互作用，这样既可以减少计算的复杂性，又可以获得不同尺度上的物理行为，通过不同尺度下的临界行为分析，我们能够很好的发现普适规律的使用，从而反推系统的一些物理性质。

5 参考资料

- [1]Igor Herbut, A Modern Approach to Critical Phenomena (Cambridge University Press, Cambridge, 2007).
- [2]D. A. Lavis, Equilibrium Statistical Mechanics of Lattice Models (Springer, Cop, Dordrecht ; Heidelberg ; New York (N.Y.), 2015).