



相变的图案语言刻画

杨贇彤^{1,2}, 陈富州^{1,2}, 罗洪刚^{1,2*}

1. 兰州大学物理科学与技术学院, 兰州 730000

2. 兰州理论物理中心, 甘肃省理论物理重点实验室, 量子理论及应用基础教育部重点实验室, 甘肃省量子物理基础学科研究中心, 兰州 730000

*联系人, E-mail: luohg@lzu.edu.cn

收稿日期: 2025-11-14; 接受日期: 2026-01-12; 网络出版日期: 2026-04-13

国家重点研发计划(编号: 2022YFA1402704)和国家自然科学基金(编号: 12247101)资助项目

摘要 凝聚态物理的核心课题在于探究由大量相互作用粒子所构成的宏观体系的物性及其状态改变, 相互作用是催生丰富物理现象的根源. 针对“粒子间如果有相互作用, 其运动有什么关系”这一基本问题, 本文介绍了一种新的理论框架: 图案语言. “图案”被定义为由相互作用导致的粒子间“同相”与“反相”关系所构成的有序组织结构. 本文以一维轴向次近邻伊辛模型为例展示该方法如何刻画相变. 结果表明, “图案”能够直观地刻画系统各类“序”的特征, 可被视作广义序参量. 该框架为理解和刻画相互作用的集体效应提供新的视角与语言.

关键词 图案语言, 同相/反相, 相与相变, 一维轴向次近邻伊辛模型

PACS: 68.35.Rh, 75.10.Pq, 75.40.Mg

1 引言

凝聚态物理以宏观尺度下大量微观粒子(如电子、原子、离子等)构成的体系为研究对象, 探索其结构、物性及相互转变^[1]. 这类系统通常包含 10^{23} 数量级的粒子, 其行为不能简单还原为单体运动的叠加, 而是在复杂的相互作用下涌现出全新的物理现象与规律, 即演生现象^[2,3].

多体理论的发展极大促进了人们对演生现象的理解, 其中朗道的对称破缺理论和费米液体理论被视为两大基石^[4]. 对称破缺理论通过序参量描述系统在相变中对称性的改变, 并指出在有序相中出现的元激发

如声子、磁振子等具有普适行为, 这些准粒子正是演生现象的体现. 费米液体理论则阐明, 相互作用的费米子系统可映射为一个自由费米体系, 此时微观粒子不再是裸电子, 而是演生而来的“准粒子”. 这两个理论在解释相变与临界现象和金属低温行为上取得了巨大成功, 构成了凝聚态物理描述演生现象的基础.

然而, 从20世纪70年代开始, 这两个范式逐步显现出其局限性. 朗道的对称破缺理论依赖于序参量的选取与相应的对称性改变, 难以处理那些不破缺任何对称性的拓扑相变, 亦无法完全涵盖强关联体系中丰富的竞争序与演生现象. 费米液体理论则在所谓的“非费米液体”行为中失效, 此时准粒子图像不再成立. 这些

引用格式: 杨贇彤, 陈富州, 罗洪刚. 相变的图案语言刻画. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2026, 56: 250007

Yang Y-T, Chen F-Z, Luo H-G. Characterizing phase transitions through the pattern language (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2026, 56: 250007, doi: [10.1360/SSPMA-2025-0527](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2025-0527)

挑战表明, 我们仍需发展新的概念与理论框架, 以更全面地刻画多体系统中的演生行为.

2 朗道的连续相变理论

相变的系统性研究始于1822年de la Tour对临界现象的观察. 这些观察引出一个问题: 汽化线在升温或加压时会伸向无穷还是停止在某一点? Andrews在1869年对这个问题给出明确回答并提出“临界点”的概念. 1873年, van der Waals基于分子运动论提出了范德瓦尔斯状态方程, 解释了气液相变的连续性, 这是第一个成功的平均场理论. 1907年, 根据磁-液类比, Weiss提出分子平均场理论, 解释了铁磁-顺磁相变. 1934年, Bragg与Williams也采用了平均场近似解释了合金的有序-无序相变. 这些理论的共同点是用一个均匀的“平均场”来代替粒子间复杂的相互作用. 关于这部分内容, 文献[5]有详细的介绍.

1937年, 朗道^[6]概括了这些平均场的精神, 提出一个统一的唯象框架, 即朗道的连续相变理论, 其中, 对称破缺是核心概念. “破缺”指研究对象从高对称状态变为低对称状态, 比如, 圆形变为椭圆形或正方形变为长方形, 对称性降低了; 一个磁针从无外磁场时的自由状态变成施加外磁场后沿着磁场的方向, 也是对称性的降低. 这些是比较平庸的例子. 相变研究的是热力学极限下的对称破缺, 即一个宏观体系随着温度的降低, 从由热涨落主导的无序相进入由相互作用主导的有序相的过程. 最典型的例子就是水从液相到固相, 在液相时, 水分子能够在一定的范围内移动; 然而在固相时, 水分子只能在非常小的范围内振动, 因为此时形成了晶格结构, 表明连续平移对称性发生了破缺. 为了直观地描述相变, 朗道引入了序参量的概念, 来刻画低对称相对高对称相的偏离. 高温时, 系统处于无序相, 对称性高, 序参量为零; 低温时, 系统处于有序相, 对称性低, 序参量不为零. 序参量从零到非零代表着系统发生了相变. 朗道的对称破缺理论能描述几乎所有的有序相及它们与无序相之间的相变, 比如液态相-固态相、顺磁相-铁磁相、正常相-超流相等.

由此看来, 平均场理论对相变的描述是有效的. 然而, 从平均场理论得到的临界指数与实验观察并不符合, 这早在1896年比利时物理学家沃沙费尔特就已观察到, 但在当时没有引起人们的注意. 1944年, Ons-

ger^[7]严格求解了二维伊辛模型, 得到的临界指数与平均场的结果不一致, 而且严格解表明比热在临界点附近呈现对数发散, 不是平均场理论预言的有限跃变. 这些不一致说明平均场理论没有完全抓住相变的本质, 原因是没有处理好涨落. 当时, 人们也注意到一个有趣的现象, 平均场理论和精确解得到的临界指数虽然不一致, 但都很好地满足一些相同的关系, 以及不同的体系通过一个尺度变换后, 实验点都能落在一条线上, 这从热力学的一般考虑很难得到解答. 20世纪60年代末, Kadanoff^[8]和Fisher^[9]从不同的角度独立地找到了一种新的描述, 就是“标度假定”, 并由此得到各种临界指数的“标度关系”. 这些思想最终通过Wilson^[10]在1971年引进的重正化群及数值实现所证实, Wilson由此获得了1982年诺贝尔物理学奖. 重正化群的成功在于有效描述了相变点附近的涨落, 这一过程通过尺度变换达到, 即先处理小尺寸的涨落, 再考虑较大尺寸的涨落, 最终关联起整个系统.

至此, 发现新的相变, 寻找序参量及相关的对称性破缺, 并根据临界指数对相变进行分类一直是相变的实验和理论研究的主旋律, 这个框架也被称为朗道-金兹堡-威尔逊范式, 是至今发展的最为成熟的刻画相变与临界现象的框架. 对于20世纪70年代发现的量子相变(指在极低温或零温极限意义下, 由量子涨落驱动的相变. 对这类相变, 热力学涨落已经不重要或消失了, 相变是通过改变其他参数如电磁场、掺杂、压强、化学势等而发生), Hertz^[11]将Wilson的重正化群思想应用到零温相变的研究中, 打开了量子相变研究的大门. 考虑量子涨落的动力学本质, 与热力学相变比较, 增加了动力学临界指数, 并对朗道-金兹堡-威尔逊范式所使用的序参量泛函形式进行修订, 得到处理量子相变问题的一般范式. 这个范式, 与研究热力学的范式一脉相承. Sachdev^[12]撰写的*Quantum Phase Transitions*一书, 对量子相变有一个全面系统的介绍.

3 超越朗道的相变范式

Mermin-Wagner定理指出, 在二维系统中, 具有连续对称性的体系在有限温度下不可能发生有序相变, 热涨落会破坏任何试图建立的长程序^[13,14]. 然而, 1973年Kosterlitz和Thouless^[15]发现有限温度下可以发生不破缺连续对称性的相变, 这种相变有拓扑缺陷的参与,

对应涡旋对的束缚与解耦。这是人们认识到的最早的超越朗道-金兹堡-威尔逊范式的例子, 这项工作也由此被授予了2016年的诺贝尔物理学奖。到了20世纪80年代, 以量子霍尔效应为代表的一大类拓扑相变均超出了朗道的相变范式; 以高温超导为代表的强关联电子系统更是因电子关联带来的复杂度, 其相图至今都没有得到很好的理解; 近二三十年受到极大关注的量子自旋液体, 也无法完全囊括在朗道的相变框架内。这些实验上的观察和数值上的模拟表明, 一个更大的超越朗道-金兹堡-威尔逊范式的相变框架是需要的。

相变理论为什么困难? 因为它要处理的是一个真正的多体问题。对于经典系统, 即使得不到解析解, 有效的数值方法比如蒙特卡罗模拟也能给出准确的结果, 三维伊辛模型就是典型的例子。严峻的挑战来自量子系统, 即量子多体问题, 这是凝聚态物理中最难啃的骨头。能精确求解的模型极少, 仅限部分一维系统和特殊条件下的二维或三维系统, 因而数值方法成了非常依赖的工具。但是, 精确对角化、密度矩阵重正化群、张量网络和量子蒙特卡罗方法有各自的局限性, 无法实现对量子多体问题的彻底求解。这些方法面临的困难有相同的根源, 就是“指数墙问题”(量子蒙特卡罗的“负符号问题”最终也表现为“指数墙问题”)。但这并不是指对一个没有解析解的量子模型, 无法得到任何有效的信息。相反, 对于有序相, 几乎所有方法都能给出可靠且自洽的结果, 比如横场伊辛模型的铁磁相, 哈伯德模型的反铁磁相, 方格子 J_1 - J_2 海森堡模型的反铁磁相与条纹相等。困难来源于系统中不同的相竞争最激烈的区域, 比如电子的局域和巡游之间的转变, 此时才是真正的量子多体问题。

除了朗道的对称破缺理论, 朗道的费米液体理论是量子多体理论的另一基石。费米液体理论的核心是绝热演化, 即一个自由的费米系统能够绝热演化到一个有相互作用的费米子组成的多体系统, 此时的微观粒子不再是自由的费米子, 而是准粒子。费米液体理论取得了诸多重要的成果, 尤其是金属的低温物理性质。然而, 当应用到高温超导尤其是奇异金属时, 这个理论失效了。2023年11月, 美国莱斯大学的科研团队报道了一项实验^[16], 他们测量了奇异金属的散粒噪声(用来衡量粒子的颗粒属性)。实验结果表明, 在费米液体中, 电流由单个准粒子激发承载, 电流随时间的变化随每个离散传输载流子的到达而波动。在缺乏明确定义

准粒子的系统中, 电荷传输更趋连续, 导致电流涨落被抑制。为了定量地刻画不同材料的颗粒属性, 他们测量了法诺因子, 在弱关联系统, 法诺因子较大; 在强关联系统, 法诺因子较小, 甚至趋于零。这个实验向人们提出了一个问题: 找不到准粒子时, 该怎么办? 或许从物质的另一种存在方式——波, 能得到一些启发。

4 图案语言: 同相与反相

4.1 惠更斯的观察

1665年, 惠更斯因生病在家中休养。他当时正在研究改进摆钟的精度, 旨在解决海上经度测量难题。他制作了两台带有长摆杆的摆钟, 并排悬挂在房间同一根木梁上。在卧床期间, 他注意到这两台摆钟变得完全同步但反相。即, 当一座钟的摆锤摆到最左端时, 另一个恰好摆到最右端, 两者相位差精确保持在 180° 。惠更斯手动干扰钟摆振荡, 破坏了这种同步, 令他惊讶的是, 几分钟后, 两个钟摆总会自发地重新恢复到反相同步的状态。

惠更斯在他1673年出版的《摆钟论》中详细描述了这一现象。他认为, 这两个钟并非独立, 它们通过共同的木梁耦合在一起, 同步现象正是通过耦合来实现的, 且这种精确的反相模式是最稳定的状态。惠更斯的观察开启了人们对同步现象的研究。

4.2 从耦合谐振子中得到的启发

在经典力学中, 两个耦合的谐振子是最简单的能展示出同相和反相的例子^[17]。如图1所示, 假设两个小车质量相同, 三个弹簧的劲度系数也相同, 使用牛顿第二定律求解这个系统, 会得到两种独立的简正模式: 两个小车的同相运动和反相运动。任何其他的运动形式可以通过这两种简正模式叠加出来。当耦合在一起的小车增多时, 简正模式也会相应的增加。如果研究对象变成一块固体材料, 原子核因为质量重只能在一个小范围内振动, 类似于一个谐振子。宏观数量的原子一起振动, 相当于宏观数量的谐振子耦合, 此时不同谐振子的同相与反相运动产生的行为像是一列列波在传送, 类似于声波, 量子化后则为声子。这些简正模式也被称为集体模式。

从惠更斯的摆钟和耦合的小车可以看出, 当谈及同相或反相时, 系统中至少要包含两个元素, 因为同

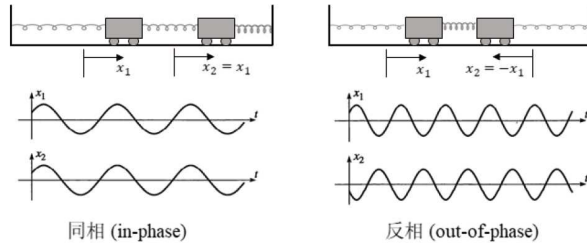


图 1 两个质量相等的小车通过三个劲度系数相同的弹簧耦合在一起, 其运动表现出两种简正模式: 同相与反相

Figure 1 Two carts of equal mass are coupled by three springs with identical stiffness coefficients. Their motion exhibits two normal modes: in-phase and out-of-phase.

相和反相描述的是物体之间的运动关系, 而不是物体运动本身. 这种运动关系从何而来? 答案是: 物体之间的耦合或相互作用. 那么我们是否可以反过来问这样的一个问題: 对于一个有相互作用的系统, 能否先找到所有的简正模式, 通过这些模式来刻画系统的状态?

4.3 图案语言是什么?

对上面的问题的探究, 使得我们提出了图案语言 (Pattern Language). 图案指由相互作用导致的集体运动模式. 在经典耦合谐振子中, 等价于简正模式. 那么在量子系统中, 这种同相与反相关系是什么表现形式? 如何得到它们?

我们使用了对哈密顿量依次做两次对角化的方式^[18–20]. 为了清晰地展示数学框架, 这里以自旋系统为例^[20]. 第一次对角化在算符空间操作. 定义自旋矢量 $S = (\sigma_1^0, \sigma_1^x, \sigma_1^y, \sigma_1^z, \sigma_2^0, \sigma_2^x, \sigma_2^y, \sigma_2^z, \dots, \sigma_L^0, \sigma_L^x, \sigma_L^y, \sigma_L^z)^T$, T 代表转置, σ_i^0 是单位算符, $\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z$ 是泡利算符. 哈密顿量可表达为

$$\hat{H} = S^T [h_{ij}] S = \sum_n \hat{H}_n = \sum_n \lambda_n \hat{A}_n^\dagger \hat{A}_n, \quad (1)$$

$$\hat{A}_n = \sum_i [u_{n,4i-3} \hat{\sigma}_i^0 + u_{n,4i-2} \hat{\sigma}_i^x + u_{n,4i-1} \hat{\sigma}_i^y + u_{n,4i} \hat{\sigma}_i^z],$$

其中, $\hat{A}_n$ 是单体算符, 且是厄米的, 即 $\hat{A}_n^\dagger = \hat{A}_n$. $\{\lambda_n, u_n\}$ 是实对称矩阵 $[h_{ij}]$ 的本征值和本征矢. 对于每一个 $\hat{A}_n$, 提取出 u_n 的正负号, 将其作为图案. 对于经典系统, 只有 $\hat{\sigma}_i^z$ 项, 代表自旋的上与下. 对于量子系统, 除了 $\hat{\sigma}_i^z$ 项, 还有 $\hat{\sigma}_i^x$ 和 $\hat{\sigma}_i^y$ 项. 这些图案表现出不同的畴结构, 代表了系统所有的“序”.

第二次对角化在希尔伯特空间中操作, 与精确对

角化没有区别. 找到一组完备基将算符 $\hat{A}_n$ 的矩阵表达出来, 进而得到哈密顿量矩阵:

$$\begin{aligned} & \langle \{\sigma_i^z\} | \hat{H} | \{\sigma_i^z\}' \rangle \\ &= \langle \{\sigma_i^z\} | \sum_n \lambda_n \hat{A}_n^\dagger \hat{A}_n | \{\sigma_i^z\}' \rangle \\ &= \sum_n \lambda_n \sum_{\{\sigma_i^z\}, \{\sigma_i^z\}'} [\hat{A}_n^\dagger]_{\{\sigma_i^z\}, \{\sigma_i^z\}'} [\hat{A}_n]_{\{\sigma_i^z\}', \{\sigma_i^z\}}. \end{aligned} \quad (2)$$

将该哈密顿量矩阵对角化, 得到系统的波函数. 将波函数投影到哈密顿量的每一部分, 观察每部分在不同参数区域的权重. 由此判断哪个图案在起作用, 进而得知系统处于什么相. 下面我们以具体的模型来展示.

5 一维轴向次近邻伊辛模型

一维轴向次近邻伊辛模型 (ANNNI), 是最简单的阻挫模型. 该模型从 20 世纪 80 年代开始被广泛研究, 哈密顿量如下:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z + \kappa J \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z - g \sum_i \hat{\sigma}_i^x, \quad (3)$$

其中, $J > 0$, 即第一项为铁磁近邻相互作用, 第二项为反铁磁次近邻相互作用, 这两项的竞争引入阻挫, κ 为无量纲阻挫参数. 第三项代表横场, 引入量子涨落.

在 $\kappa=0$ 时, 该模型为横场伊辛模型, 是最简单的量子模型, 该模型存在一个从顺磁相到铁磁相的连续相变. 我们用图案语言刻画了这个过程: 在顺磁相, 所有的图案都有贡献; 在铁磁相, 只有代表铁磁序的图案贡献了几乎所有的权重, 这种转变发生在 $J=g=1$ 的位置. 对横场伊辛模型的刻画证明了图案语言能够有效地描述相变, 细节请参考文献^[20].

5.1 经典情形

我们首先讨论 $g=0$ 的情形, 此时哈密顿量(3)退化为经典模型. 为了方便展示, 格点尺寸取为 $L=8$. 第一次对角化后得到的图案如图2所示, 从上到下对应单畴(铁磁)→双畴→四畴→六畴→八畴(反铁磁). 格点增加时, 规律依然存在, 但中间演化过程增加, 即单畴(铁磁)→双畴→ $\cdots$ → L 畴(反铁磁). 图3为每部分哈密顿量的贡献, $\kappa<0.5$ 时, 系统的能量全部来源于 H_1 , H_1 对应的图案具有铁磁序; $\kappa>0.5$ 时, 系统的能量全部来源于 $H_{4,5}$, $H_{4,5}$ 对应的图案是(2,2)结构. 当系统尺寸增加时, 该结论依然成立, 此时铁磁序对应 H_1 , (2,2)结构对应

Pattern λ_1	$\uparrow$	$\uparrow$	$\uparrow$	$\uparrow$	$\uparrow$	$\uparrow$	$\uparrow$
Pattern λ_2, λ_3	$\uparrow$	$\uparrow$	$\uparrow$	$\uparrow$	$\downarrow$	$\downarrow$	$\downarrow$
Pattern λ_4, λ_5	$\uparrow$	$\uparrow$	$\downarrow$	$\downarrow$	$\uparrow$	$\uparrow$	$\downarrow$
Pattern λ_6, λ_7	$\uparrow$	$\downarrow$	$\downarrow$	$\uparrow$	$\downarrow$	$\uparrow$	$\downarrow$
Pattern λ_8	$\uparrow$	$\downarrow$	$\uparrow$	$\downarrow$	$\uparrow$	$\downarrow$	$\uparrow$

图2 经典ANNNI模型的哈密顿量的图案, 系统尺寸为 $L=8$. 从上到下对应单畴→双畴→四畴→六畴→八畴. 图片来自文献[21]

Figure 2 Patterns of the Hamiltonian for the classical ANNNI model, with system size $L=8$. From top to bottom, they correspond to one-, two-, four-, six-, and eight-domain structures. Image sourced from ref. [21].

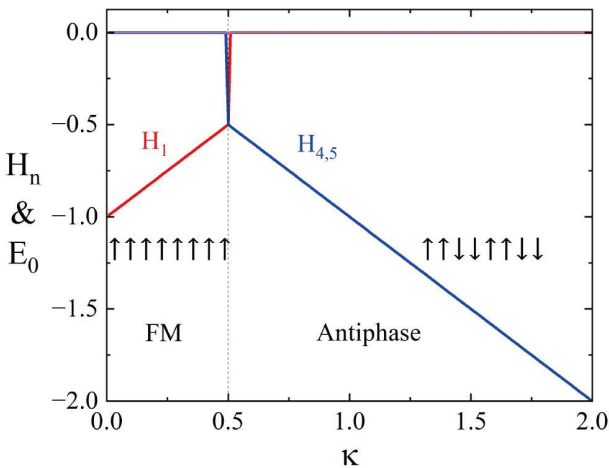


图3 系统的每部分哈密顿量的能量. 红色线代表 H_1 , 蓝色线代表 $H_{4,5}$. 其能量与系统总能量一致. 图片来自文献[21]

Figure 3 The energy of each sub-Hamiltonian. The red line denotes H_1 , and the blue line represents $H_{4,5}$. Their energies are consistent with the total energy of the system. Image sourced from ref. [21].

$H_{L/2, (L+2)/2}$, $\kappa=0.5$ 的位置是高简并点, 此处系统发生了从铁磁相到(2,2)反相(Anti-Phase)的一级相变.

从这个简单的例子中, 我们总结如何在图案语言框架下刻画相变: 第一步对角化得到图案, 并将总哈密顿量分为多个子哈密顿量; 第二步对角化计算出每个子哈密顿量的能量, 通过子哈密顿量的能量在总能量中所占的权重来判断哪一部分哈密顿量最重要, 由此知道哪个图案在起作用, 也就知道了系统处于什么相. 从图2和3可以看出, 在经典模型中, 图案扮演了序参量的作用.

5.2 量子情形

现在讨论 $g \neq 0$ 的情形, 因有量子涨落的存在, 此时ANNNI模型的基态变得非常丰富. 第一次对角化得到的图案如图4所示, 此时除了 $\hat{\sigma}_i^z$, 还有算符 $\hat{\sigma}_i^x$, 因上、下箭头不足以表达它们之间的关系, 这里用正号和负号表示. 可以看出, 量子情形下的图案数目要比经典情形多, 除了格点之间的同相/反相关系, 还有格点内的同相/反相关系. 图4展示的图案依然表现出了畴结构, 从上到下对应铁磁向反铁磁演化. 与经典情形一致, 当系统尺寸增大时, 这种规律不会变, 但是中间演化过程会变多, 表现为单畴→双畴→四畴→ $\cdots$ → L 畴.

Pattern λ_1	(-, -)	(-, -)	(-, -)	(-, -)	(-, -)	(-, -)	(-, -)
Pattern λ_2, λ_3	(-, -)	(-, -)	(-, -)	(-, -)	(+, +)	(+, +)	(+, +)
Pattern λ_4, λ_5	(-, -)	(-, -)	(+, +)	(+, +)	(-, -)	(-, -)	(+, +)
Pattern λ_6, λ_7	(-, -)	(+, +)	(+, +)	(-, -)	(+, +)	(-, -)	(-, -)
Pattern λ_8	(-, -)	(+, +)	(-, -)	(+, +)	(-, -)	(+, +)	(-, -)
Pattern λ_9	(+, -)	(+, -)	(+, -)	(+, -)	(+, -)	(+, -)	(+, -)
Pattern $\lambda_{10}, \lambda_{11}$	(+, -)	(+, -)	(+, -)	(+, -)	(-, +)	(-, +)	(-, +)
Pattern $\lambda_{12}, \lambda_{13}$	(+, -)	(+, -)	(-, +)	(-, +)	(+, -)	(+, -)	(-, +)
Pattern $\lambda_{14}, \lambda_{15}$	(+, -)	(-, +)	(-, +)	(-, +)	(-, +)	(+, -)	(-, +)
Pattern λ_{16}	(+, -)	(-, +)	(+, -)	(-, +)	(+, -)	(-, +)	(+, -)

图4 量子ANNNI模型的哈密顿量的图案, 系统尺寸为 $L=8$. 从上到下对应单畴→双畴→四畴→六畴→八畴. 红色框的部分对应 $\lambda_n < 0$, 蓝色框的部分对应 $\lambda_n > 0$. 图片来自文献[21]

Figure 4 Patterns of the Hamiltonian for the quantum ANNNI model, with system size $L=8$. From top to bottom, they correspond to one-, two-, four-, six-, and eight-domain structures. The part within the red frame corresponds to $\lambda_n < 0$, and the part within the blue frame corresponds to $\lambda_n > 0$. Image sourced from ref. [21].

图5是基态能量与每个子哈密顿量的能量, 黑线代表总能量, 彩色线代表每部分 H_n 的能量. 模型的参数取为 $J=2$, $g=1$. 可以看出, 在 κ 两端, 依然是代表铁磁序的 H_1 和代表 $(2,2)$ 结构的 $H_{4,5}$ 起了主要作用, 但中间多出了具有双畴结构的 $H_{2,3}$, 这是与经典情形最大的差别, 即 κ 在0.5处扩展为一个区域. 为了得到可靠的基态相图, 我们计算了更大的格点尺寸, 采用的思路与 $L=8$ 完全一致.

图6是更大的格点尺寸的基态能量与对应的分解后的能量. 可以看出, 在不同的 κ 范围, 图案表现出不同的特征, 使得基态可分四个不同的区域. 第一个区域, 对应铁磁相, 具有铁磁特征的图案起主导作用; 第二个区域, 几乎所有的图案都贡献能量, 无法显示出长程序, 对应顺磁相; 第三个区域, 出现了图案接力的情形, 这正是阻挫导致的典型现象, 这个区域具有空间调制的特征, 称为浮动相(Floating Phase); 第四个区域, 具有 $(2,2)$ 结构的图案起主导作用, 即两个自旋向上两个自旋向下, 称为 $(2,2)$ 反相. 对比系统尺寸 $L=64$ 和 $L=128$, 铁磁相、顺磁相和反相表现类似, 浮动相则随着格点尺寸增加出现的图案增多, 并且表现出一级相变的特征. 由此可合理地认为, 在热力学极限时, 浮动相中有无穷多图案, 这个区域正是阻挫最鲜明的特征

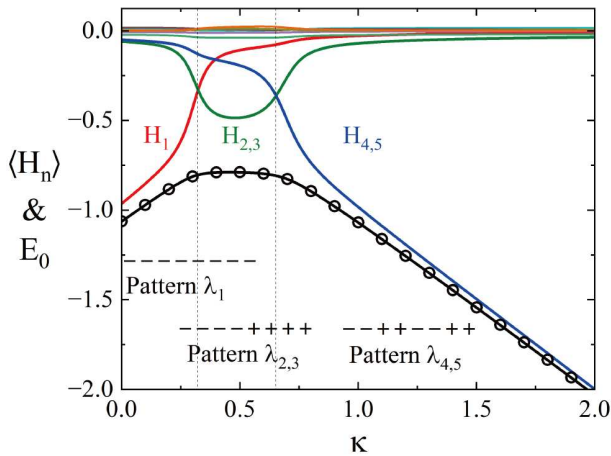


图5 系统的总能量(黑线)及各子哈密顿量能量(彩色线)随 κ 的变化. 红线、绿线和蓝线分别代表 H_1 , $H_{2,3}$ 和 $H_{4,5}$. 圆圈为精确对角化的结果. 系统尺寸为 $L=8$. 图片来自文献[21]

Figure 5 The total energy of the system (black line) and the energies of the sub-Hamiltonians (colored lines) as functions of κ . The red, green, and blue lines represent H_1 , $H_{2,3}$, and $H_{4,5}$, respectively. The open circles indicate the results from exact diagonalization. The lattice size is taken as $L=8$. Image sourced from ref. [21].

的体现.

为了验证图案图像的合理性, 我们直接对基态总能量求二阶导数, 并观察其行为与上面的分析是否一致. 图7中黑线是基态的总能量, 红色线是其对应的二阶导数. 可以看出, 浮动相中存在多个非解析点, 这与多个图案的接力是完全吻合的, 说明了图案语言的合理性. 关于该模型的细节, 请参考文献[21].

6 总结

传统的朗道对称破缺理论和费米液体理论, 其关注点主要在“粒子”或“准粒子”的行为上. 相比之下, 本文介绍的“图案语言”框架, 将视角转向了“波”或“波动”的层面, 这种“波”代表的是粒子由于相互作用形成的同相/反相关系. 通过两次对角化过程, 提取出粒子间同相与反相关系所构成的集体运动模式, 将其作为“图案”. 这些图案包含了系统所有可能的“序”, 其权重随参数的变化揭示了相变过程与不同相的特征.

对于第4节提出的问题——“对于一个有相互作用的系统, 能否找到所有的运动模式, 通过这些模式来刻画系统的状态?” 我们对横场伊辛模型、轴向次近邻

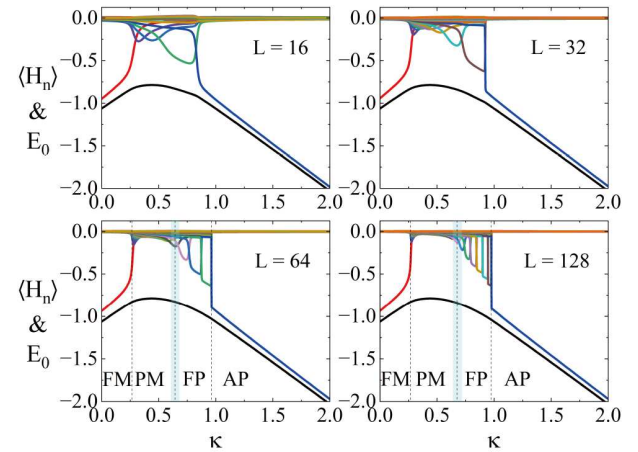


图6 量子ANNNI模型的基态能量(黑线)与对应的分解后的能量(彩线). 格点尺寸为 $L=16$ 到128. 根据图案的行为, 基态可分为四个区域: 铁磁相(FM)、顺磁相(PM)、浮游相(FP)和 $(2,2)$ 反相(AP). 图片来自文献[21]

Figure 6 Ground state energy of the quantum ANNNI model (black line) and the corresponding decomposed energies (colored lines). The lattice sizes range from $L=16$ to 128. Based on the behavior of the patterns, the ground states can be divided into four regions: ferromagnetic phase (FM), paramagnetic phase (PM), floating phase (FP), and $(2,2)$ anti-phase (AP). Image sourced from ref. [21].

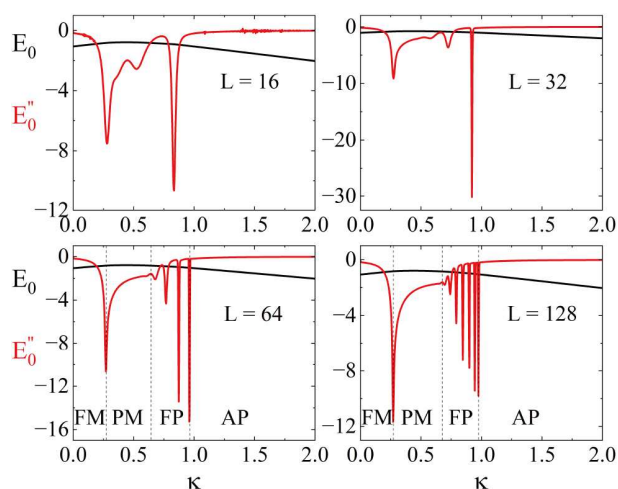


图 7 量子 ANNNI 模型的基态能量(黑线)和对应的二阶导数(红线). 根据二阶导数的行为, 基态包含四个相. 图片来自文献[21]

Figure 7 Ground state energy of the quantum ANNNI model (black line) and its corresponding second derivative (red line). Based on the behavior of the second derivative, the ground state includes four phases. Image sourced from ref. [21].

伊辛模型等体系的研究给出了初步的肯定答案. 图案语言不仅清晰地揭示了铁磁相、顺磁相和(2,2)反相, 也直观地捕捉到阻挫导致的浮动相中多个图案接力演化的微观竞争机制. 我们在量子拉比模型^[22]和更一般的量子自旋模型^[23]上的尝试进一步表明, 这一框架具有更广的适用性.

作为展望, 一个自然且重要的问题是: 这一基于“同相/反相”运动模式的图案语言框架, 能否应用于理解更为复杂的强关联体系, 例如高温超导中丰富的竞争序与奇异金属行为, 或量子自旋液体中演生的分数化激发? 这些体系往往缺乏明确的序参量或稳定的准粒子图像, 恰恰可能是图案语言发挥作用的舞台. 此外, 这一数学框架将哈密顿量分解为具有明确意义的子部分, 是否能为多体数值计算提供新的约化思路或算法改进, 也值得深入探索. 这些问题的答案, 有待于更多具体模型与真实材料的检验, 以及理论与计算方法的进一步融合.

参考文献

- 1 Feng D, Jin G J. Condensed Matter Physics (I) (in Chinese). Beijing: Higher Education Press, 2003 [冯端, 金国钧. 凝聚态物理学(上卷). 北京: 高等教育出版社, 2003]
- 2 Anderson P W. More is different. *Science*, 1972, 177: 393–396
- 3 Zhang G M, Yu L. Emergent phenomena in physics (in Chinese). *Physics*, 2010, 39: 543–549 [张广铭, 于渌. 物理学中的演生现象. *物理*, 2010, 39: 543–549]
- 4 Li Z Z. Solid State Theory (in Chinese). Beijing: Higher Education Press, 2002 [李正中. 固体理论. 北京: 高等教育出版社, 2002]
- 5 Yu L, Hao B L, Chen X S. Phase and Critical Phenomena (in Chinese). Beijing: Science Press, 2005 [于渌, 郝柏林, 陈晓松. 相变和临界现象. 北京: 科学出版社, 2005]
- 6 Landau L D. On the theory of phase transitions. In: ter Haar D, ed. Collected Papers of L. D. Landau. London: Pergamon Press, 1965
- 7 Onsager L. Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys Rev*, 1944, 65: 117–149
- 8 Kadanoff L P. Scaling laws for ising models near T_c . *Phys Phys Fiz*, 1966, 2: 263–273; Kadanoff L P. Operator algebra and the determination of critical indices, *Phys Rev Lett*, 1969, 23: 1430–1433
- 9 Fisher M E. The theory of equilibrium critical phenomena. *Rep Prog Phys*, 1967, 30: 615–730
- 10 Wilson K G. Renormalization group and critical phenomena. I. renormalization group and the Kadanoff scaling picture. *Phys Rev B*, 1971, 4: 3174–3183; Wilson K G. Renormalization group and critical phenomena. II. Phase-space cell analysis of critical behavior. *Phys Rev B*, 1971, 4: 3184–3205
- 11 Hertz J A. Quantum critical phenomena. *Phys Rev B*, 1976, 14: 1165–1184
- 12 Sachdev S. Quantum Phase Transitions. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2011
- 13 Mermin N D, Wagner H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic heisenberg models. *Phys Rev Lett*, 1966, 17: 1133–1136
- 14 Hohenberg P C. Existence of long-range order in one and two dimensions. *Phys Rev*, 1967, 158: 383–386
- 15 Kosterlitz J M, Thouless D J. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *J Phys C-Solid State Phys*, 1973, 6:

1181–1203

- 16 Chen L, Lowder D T, Bakali E, et al. Shot noise in a strange metal. *Science*, 2023, 382: 907–911
- 17 Taylor J R. *Classical Mechanics*. California: University Science Books, 2005
- 18 Yang Y T, Luo H G. Characterizing superradiant phase of the quantum Rabi model. *Chin Phys Lett*, 2023, 40: 020502
- 19 Yang Y T, Chen S M, Luo H G. On the origin of the hidden symmetry in the asymmetric quantum Rabi model. *J Chem Phys*, 2025, 163: 174106
- 20 Yang Y T, Chen F Z, Luo H G. Dissecting the quantum phase transition in the transverse Ising model. *Phys Rev E*, 2025, 112: 044102
- 21 Yang Y T, Chen F Z, Luo H G. Ground state properties of the one-dimensional axial next-nearest-neighbor Ising model in a transverse field. arXiv: [2301.08891](https://arxiv.org/abs/2301.08891)
- 22 Yang Y T, Luo H G. Dissecting superradiant phase transition in the quantum Rabi model. *Chin Phys Lett*, 2024, 41: 120501
- 23 Yang Y T, Chen F Z, Luo H G. Pattern description of quantum phase transitions in the transverse antiferromagnetic Ising model with a longitudinal field. *Chin Phys B*, 2025, 34: 127504

Characterizing phase transitions through the pattern language

YANG Yun-Tong^{1,2}, CHEN Fu-Zhou^{1,2} & LUO Hong-Gang^{1,2*}

¹ School of Physical Science and Technology, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China

² Lanzhou Center for Theoretical Physics, Key Laboratory of Theoretical Physics of Gansu Province, Key Laboratory of Quantum Theory and Applications of MoE, Gansu Provincial Research Center for Basic Disciplines of Quantum Physics, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China

*Corresponding author (email: luohg@lzu.edu.cn)

The central task of condensed matter physics is to investigate the physical properties of macroscopic systems composed of a vast number of interacting particles and the changes in their states. Interactions are the root cause of rich physical phenomena. Based on the fundamental question of “what is the relationship between the motions of particles if they interact”, the paper introduces a novel theoretical framework: pattern language. A “pattern” is defined as an ordered organizational structure formed by the “in-phase” and “out-of-phase” relationships between particles, arising from interactions. The paper applies this approach to the study of phase transitions using the one-dimensional axial next-nearest-neighbor Ising model as a concrete example. The results indicate that “patterns” can intuitively characterize various types of order in the system and can be regarded as generalized order parameters, offering a new perspective and language for understanding and describing the collective effects of interactions.

pattern language, in-phase/out-of-phase, phases and phase transitions, one-dimensional axial next-nearest-neighbor Ising model

PACS: 68.35.Rh, 75.10.Pq, 75.40.Mg

doi: [10.1360/SSPMA-2025-0527](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2025-0527)