

第 1 题 得分：_____. 令 \mathcal{Q}_G 是具有两体势能为

$$u(r) = \begin{cases} \infty, & \text{如果 } r = 0, \\ u_l, & \text{如果 } r = \text{第 } l \text{ 近邻} \end{cases}$$

的格气的巨配分函数.

证明：只要令

$$N = N_{\uparrow} \\ y = \exp \left\{ \frac{1}{kT} \left(2\mu H - \sum_l n_l [\varepsilon_l(\uparrow\downarrow) - \varepsilon_l(\uparrow\uparrow)] \right) \right\} \\ u_l = 2[\varepsilon_l(\uparrow\uparrow) - \varepsilon_l(\uparrow\downarrow)]$$

则对应于 Ising 模型配分函数 Q_I 格气配分函数可以表示为

$$\mathcal{Q}_G = Q_I \exp \left\{ \frac{\mathcal{N}}{kT} \left[\mu H + \frac{1}{2} \sum_l n_l \varepsilon_l(\uparrow\uparrow) \right] \right\}$$

其中 \mathcal{N} 是格点总数, y 是格气的易逸度, $\varepsilon_l(\uparrow\uparrow) = \varepsilon_l(\downarrow\downarrow)$ 表示 Ising 模型中第 l 近邻自旋平行的相互作用能, $\varepsilon_l(\uparrow\downarrow)$ 是相应的自旋反平行的作用能, n_l 为每一格点第 l 近邻的数目.

证: Ising 模型的能量为

$$U_I = \sum_l [N_{\uparrow\uparrow}^l \varepsilon^l(\uparrow\uparrow) + N_{\downarrow\downarrow}^l \varepsilon^l(\downarrow\downarrow) + N_{\uparrow\downarrow}^l \varepsilon^l(\uparrow\downarrow)] - \mu H (N_{\uparrow} - N_{\downarrow}), \quad (1)$$

其中 $N_{\uparrow\uparrow}^l$ 为第 l 近邻自旋平行向上的对数, $N_{\downarrow\downarrow}^l$ 为第 l 近邻自旋平行向下的对数, $N_{\uparrow\downarrow}^l$ 为第 l 近邻自旋反平行的对数, $\varepsilon^l(\uparrow\uparrow) = \varepsilon^l(\downarrow\downarrow)$ 为第 l 近邻自旋平行的相互作用能, $\varepsilon^l(\uparrow\downarrow)$ 为第 l 近邻自旋反平行的相互作用能, μ 为格点的磁矩, H 为沿 z 方向的磁场强度. 设格点总数为 \mathcal{N} , 则有

$$N_{\uparrow} + N_{\downarrow} = \mathcal{N}. \quad (2)$$

设每个格点的第 l 近邻的数目为 n_l , 令自旋向上的格点向其第 l 近邻连线, 总连线数目为 $n_l N_{\uparrow}$, 每对第 l 近邻自旋平行向下贡献两条连线, 每对第 l 近邻自旋平行向上贡献一条连线, 从而有

$$2N_{\uparrow\downarrow}^l + N_{\uparrow\uparrow}^l = n_l N_{\uparrow}, \quad (3)$$

同理有

$$2N_{\downarrow\downarrow}^l + N_{\uparrow\downarrow}^l = n_l N_{\downarrow}. \quad (4)$$

由上面三式, 我们可以解得

$$N_{\downarrow} = \mathcal{N} - N_{\uparrow}, \quad (5)$$

$$N_{\uparrow\downarrow} = n_l N_{\uparrow} - 2N_{\uparrow\uparrow}^l, \quad (6)$$

$$N_{\downarrow\downarrow} = \frac{1}{2} n_l \mathcal{N} - n_l N_{\uparrow} + N_{\uparrow\uparrow}^l. \quad (7)$$

将上面三式回代入 Ising 模型能量 (式 (1)) 得

$$U_I = 2 \sum_l N_{\uparrow\uparrow}^l [\varepsilon^l(\uparrow\uparrow) - \varepsilon^l(\uparrow\downarrow)] + N_{\uparrow} \left\{ \sum_l n_l [\varepsilon_l(\uparrow\downarrow) - \varepsilon_l(\uparrow\uparrow)] - 2\mu H \right\} + \mathcal{N} \left[\frac{1}{2} \sum_l n_l \varepsilon_l(\uparrow\uparrow) + \mu H \right] \quad (8)$$

Ising 模型的巨配分函数为

$$\mathcal{Q}_I = \sum e^{-\frac{U_I}{kT}}. \quad (9)$$

其中求和是对所有自旋分布求和.

格气的巨配分函数可表为

$$\mathcal{Q}_G = \sum_N y^N \frac{1}{N!} \sum_{N \text{ 个可区分粒子的分布}} e^{-\frac{U_g}{kT}} = \sum_N y^N \sum_{N \text{ 个不可区分粒子的分布}} e^{-\frac{1}{kT} \sum_l n_{pp}^l u_l}. \quad (10)$$

其中 n_{pp}^l 是第 l 近邻的对数. 当我们令 $N = N_{\uparrow}$, $n_{pp}^l = N_{\uparrow\uparrow}^l$, $y = \exp \left\{ \frac{1}{kT} (2\mu H - \sum_l n_l [\varepsilon_l(\uparrow\downarrow) - \varepsilon_l(\uparrow\uparrow)]) \right\}$, $u_l = 2[\varepsilon_l(\uparrow\uparrow) - \varepsilon_l(\uparrow\downarrow)]$ 时,

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_G &= \sum_{N_{\uparrow}=1}^{\mathcal{N}} \exp \left\{ \frac{N_{\uparrow}}{kT} (2\mu H - \sum_l n_l [\varepsilon_l(\uparrow\downarrow) - \varepsilon_l(\uparrow\uparrow)]) \right\} \sum_{N_{\uparrow} \text{ 个 } \uparrow \text{ 的分布}} \exp \left\{ -\frac{1}{kT} \sum_l N_{\uparrow\uparrow}^l \cdot 2[\varepsilon_l(\uparrow\uparrow) - \varepsilon_l(\uparrow\downarrow)] \right\} \\ &= \sum_{\uparrow \text{ 的分布}} \exp \left\{ -\frac{1}{kT} \left[\sum_l N_{\uparrow\uparrow}^l \cdot 2[\varepsilon_l(\uparrow\uparrow) - \varepsilon_l(\uparrow\downarrow)] - N_{\uparrow}[(\varepsilon_l(\uparrow\uparrow) - \varepsilon_l(\uparrow\downarrow)) + 2\mu H] \right] \right\} \\ &= \sum \exp \left\{ \frac{\mathcal{N}}{kT} \left[\mu H + \frac{1}{2} \sum_l n_l \varepsilon_l(\uparrow\uparrow) \right] - \frac{1}{kT} U_I \right\} = \mathcal{Q}_I \exp \left\{ \frac{\mathcal{N}}{kT} \left[\mu H + \frac{1}{2} \sum_l n_l \varepsilon_l(\uparrow\uparrow) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (11)$$

□