习题 XII

截止时间：2021. 5. 25（周二）

姓名：陈 稼 霖
学号：45875852
成绩：________

第 1 题 得分：________. 求具有周期边界条件和仅有近邻相互作用 u 的一维格气巨配分函数 $\mathcal{Q}(y)=0$ 的根 $y_1, y_2, \cdots, y_{\mathcal{N}}$，并讨论在 $u>0$ 和 $u<0$ 两种情况下根在复平面上的分布.

解: 具有周期性边界条件且仅有近邻相互作用的一维 Ising 模型的配分函数为

$$Q_I=\lambda_+^{\mathcal{N}}+\lambda_-^{\mathcal{N}}, \tag{1}$$

其中

$$\lambda_\pm=\frac{1}{2}\left[x_I\left(y_I+\frac{1}{y_I}\right)\pm\sqrt{x_I^2\left(y_I-\frac{1}{y_I}\right)^2+\frac{4}{x_I^2}}\right], \tag{2}$$

$$x_I=e^{-\frac{1}{kT}\varepsilon}, \tag{3}$$

$$y_I=e^{\frac{\mu H}{kT}}. \tag{4}$$

注意 y_I 与格气的经典易逸度 y 区分：

$$y=e^{\frac{2}{kT}(\mu H+2\varepsilon)}. \tag{5}$$

对应的一维格气巨配分函数可表为

$$\mathcal{Q}=Q_I e^{\frac{\mathcal{N}(\mu H+\varepsilon)}{kT}}=(\lambda_+^{\mathcal{N}}+\lambda_-^{\mathcal{N}})e^{\frac{\mathcal{N}(\mu H+\varepsilon)}{kT}}=e^{\frac{\mathcal{N}\varepsilon}{kT}}y_I^{\mathcal{N}}(\lambda_+^{\mathcal{N}}+\lambda_-^{\mathcal{N}}), \tag{6}$$

其中有对应关系

$$\varepsilon=\frac{u}{4}. \tag{7}$$

因为

$$y_I\lambda_\pm=\frac{1}{2}\left[x_I\left(y_I^2+1\right)\pm\sqrt{x_I^2\left(y_I^2-1\right)^2+\frac{4y_I^2}{x_I^2}}\right], \tag{8}$$

所以

$$\begin{aligned}\mathcal{Q}=&e^{\frac{\mathcal{N}\varepsilon}{kT}}\sum_{n=0}^{\lfloor\mathcal{N}/2\rfloor}\binom{\mathcal{N}}{2n}\left[x_I(y_I^2+1)\right]^{\mathcal{N}-2n}\left[\sqrt{x_I^2(y_I^2-1)+\frac{4y_I^2}{x_I^2}}\right]^{2n}\\=&e^{\frac{\mathcal{N}\varepsilon}{kT}}\sum_{n=0}^{\lfloor\mathcal{N}/2\rfloor}\binom{\mathcal{N}}{2n}\left[x_I(y_I^2+1)\right]^{\mathcal{N}-2n}\left[x_I^2(y_I^2-1)+\frac{4y_I^2}{x_I^2}\right]^{n}.\end{aligned} \tag{9}$$

注意到

$$y_I=y^{1/2}e^{-\frac{2\varepsilon}{kT}}, \tag{10}$$

故格气的巨配分函数 $\mathcal{Q}$ 是其经典易逸度 y 的 $\mathcal{N}$ 次多项式，故 $\mathcal{Q}=0$ 应有 $\mathcal{N}$ 个根.

$$\mathcal{Q}=0, \tag{11}$$

$$\Longrightarrow\lambda_+^{\mathcal{N}}=-\lambda_-^{\mathcal{N}}, \tag{12}$$

$$\Longrightarrow\lambda_+=\omega\lambda_-, \tag{13}$$

其中

$$\omega^{\mathcal{N}}=-1, \tag{14}$$

从而

$$x_I(y_I^2+1)+\sqrt{x_I^2(y_I^2-1)^2+\frac{4y_I^2}{x_I^2}}=\omega\left[x_I(y_I^2+1)-\sqrt{x_I^2(y_I^2-1)^2+\frac{4y_I^2}{x_I^2}}\right], \tag{15}$$

$$\Longrightarrow y_I^4+2\left[1-\frac{(\omega+1)^2}{2\omega}\frac{x_I^4-1}{x_I^4}\right]y_I^2+1=0. \tag{16}$$

由于 ω 的模为 1，不妨设 $\omega=e^{i\theta}$，则上面的方程可化为

$$y_I^4+2\left[1-(1+\cos\theta)\frac{x^4-1}{x^4}\right]y_I^2+1=0. \tag{17}$$

当 $u>0$，$x_I<1$，$\left[1-(1+\cos\theta)\frac{x_I^4-1}{x_I^4}\right]<1$，方程有一对共轭负根 $y_{I,1},y_{I,2}$，由于$y_{I,1},y_{I,2}$乘积为 1，故这两根在单位圆上，而最终由式 (10) 可以求得对应的 y_1 和 y_2 在以原点为圆心半径为 $e^{-\frac{4\varepsilon}{kT}}$ 的圆上，又由于 ω 可以有 $\mathcal{N}$ 个取值，但在 $\theta\to-\theta$ 对称下，方程实际上不变，故实际上有 $y_1,y_2,\cdots,y_{\mathcal{N}}$ 共计 $\mathcal{N}$ 个根在以原点为圆心，半径为 $e^{-\frac{4\varepsilon}{kT}}$ 的圆上.

当 $u<0$，$x_I>1$，$\left[1-(1+\cos\theta)\frac{x_I^4-1}{x_I^4}\right]>1$，故方程有两个负实根 $y_{I,1},y_{I,2}$，同理可以由式 (10) 和 ω 的不同取值得到 $y_1,y_2,\cdots,y_{\mathcal{N}}$ 共计 $\mathcal{N}$ 个实根. □

第 2 题 得分: _________. 当 $\mathcal{N}\to\infty$ 时，证明上一题讨论的一维格气的压强为

$$\frac{P}{kT}=\ln\left[1+\frac{y}{x}+\sqrt{\left(1-\frac{y}{x}\right)^2+4y}\right]-\ln 2$$

并求出粒子的数密度. 其中

$$x=e^{\frac{u}{kT}}.$$

证: 一维格气的巨配分函数为

$$\mathcal{Q}=e^{\frac{\mathcal{N}\varepsilon}{kT}}y_I^{\mathcal{N}}(\lambda_+^{\mathcal{N}}+\lambda_-^{\mathcal{N}}) \tag{18}$$

其中

$$y_I\lambda_\pm=\frac{1}{2}\left[x_I(y_I^2+1)\pm\sqrt{x_I^2(y_I^2-1)^2+\frac{4y_I^2}{x_I^2}}\right]. \tag{19}$$

由于 $\lambda_+>\lambda_-$，当 $\mathcal{N}\to\infty$，巨配分函数可近似为

$$\mathcal{Q}\approx e^{\frac{\mathcal{N}\varepsilon}{kT}}y_I^{\mathcal{N}}\lambda_+^{\mathcal{N}}=e^{\frac{\mathcal{N}u}{kT}}y_I^{\mathcal{N}}\lambda_+^{\mathcal{N}} \tag{20}$$

由于

$$x_I=e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}=x^{-1/4}, \tag{21}$$

$$y_I=y^{1/2}e^{-\frac{2\varepsilon}{kT}}=y^{1/2}e^{-\frac{u}{2kT}}=y^{1/2}x^{-1/2}, \tag{22}$$

故

$$y_I\lambda_\pm=\frac{1}{2}\left[x^{-1/4}(yx^{-1}+1)\pm\sqrt{x^{-1/2}(yx^{-1}-1)^2+\frac{4yx^{-1}}{x^{-1/2}}}\right], \tag{23}$$

从而巨配分函数可表为

$$\mathcal{Q}=x^{\mathcal{N}/4}y_I^{\mathcal{N}}\lambda_+^{\mathcal{N}}=\exp\left\{\frac{\mathcal{N}}{2}\left[\left(\frac{y}{x}+1\right)\right]+\sqrt{\left(1-\frac{y}{x}\right)^2+4y}\right\}. \tag{24}$$

一维格气的压强为

$$\frac{P}{kT}=\frac{1}{\mathcal{N}}\ln\mathcal{Q}=\ln\left[1+\frac{y}{x}+\sqrt{\left(1-\frac{y}{x}\right)^2+4y}\right]-\ln 2. \tag{25}$$

格气的粒子数密度为

$$\rho=y\frac{\partial}{\partial y}\frac{P}{kT}=y\frac{\frac{1}{x}+\frac{-\frac{1}{x}\left(1-\frac{y}{x}\right)+4}{\sqrt{(1-\frac{y}{x})^2+4y}}}{1+\frac{y}{x}+\sqrt{\left(1-\frac{y}{x}\right)^2+4y}}. \tag{26}$$

□