习题 X

截止时间：2021. 5. 9（周日）

姓名：陈 稼 霖
学号：45875852
成绩：________

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

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

其中 $N^l_{\uparrow\uparrow}$ 为第 l 近邻自旋平行向上的对数，$N^l_{\downarrow\downarrow}$ 为第 l 近邻自旋平行向下的对数，$N^l_{\uparrow\downarrow}$ 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

$$N_\uparrow+N_\downarrow=\mathcal{N}. \tag{2}$$

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 $n_lN_\uparrow$，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

$$2N^l_{\uparrow\uparrow}+N^l_{\uparrow\downarrow}=n_lN_\uparrow, \tag{3}$$

同理有

$$2N_{\downarrow\downarrow}+N_{\uparrow\downarrow}=n_lN_\downarrow. \tag{4}$$

由上面三式，我们可以解得

$$N_\downarrow=\mathcal{N}-N_\uparrow, \tag{5}$$
$$N_{\uparrow\downarrow}=n_lN_\uparrow-2N^l_{\uparrow\uparrow}, \tag{6}$$
$$N_{\downarrow\downarrow}=\frac{1}{2}n_l\mathcal{N}-n_lN_\uparrow+N^l_{\uparrow\uparrow}. \tag{7}$$

将上面三式回代入 Ising 模型能量（式 (1)）得

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

Ising 模型的巨配分函数为

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

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

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

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

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

□