Report14

PB20020480 王润泽

问题

苏格拉底：诘问法是发现真理和明确概念的有效方法，请同学们以Ising经典自旋模型为例， 论述相空间、Liouville定理、正则系综、Markov链等概念

学生C

> 学生A： 相空间是以 N 个粒子的位置坐标 q 和动量 p 展开的 6N 维空间。Ising模型中的Hamiltonian仅与自旋变量有关，与坐标和动量无关，$\partial H/\partial q = \partial H/\partial p = 0$, 因此：$[\rho, H] = 0$,即Liouville定理成立，$d\rho/dt = [\rho, H] = 0$, 几率密度分布因此为 H 的函数，因此它就是正则系综中的Boltzmann分布：$\rho \propto \exp(-\beta H)$

这段话存在错误如下：

- 如果把自旋变量当作广义的角动量，那么 $S = r \times p$是含有自己的广义坐标的，所以并不能说明与坐标和动量无关。但更加本质的是自旋本身也是一种自由度，是量子系统中引入的概念，而关注的等式不应当是经典力学中的 $\partial H/\partial q = \partial H/\partial p = 0$，而是量子系统中的对易关系 $[\rho, H] = 0$.
- 如果是稳态系统，可以写成 $d\rho/dt = [\rho, H] = 0$，但并不能说明 ρ是 H的函数，ρ可以是常数，那么它也可以是微正则系综

> 学生B： 非也。将自旋作为广义坐标，则同样得到自旋也是广义动量。相空间是以物理问 题中的自由度为坐标展开的高维空间，对 N 个自旋体系展开的则是 N 维空间，空间的每 一维坐标只有两个取值：+1和-1。如对 2 个自旋的相空间，代表点只能取(+1,+1)、(+1,-1)、 (-1,+1)、(-1,-1) 这 4 个点。类似地，多自旋情况下代表点也只能位于多维相空间立方盒子的顶点上。不同于坐标 q 和动量 p 组成的相空间中代表点是流动的情况，现在这些代表点是与时间无关的，即密度不随时间改变的，因此 $d\rho/dt = 0$

这段话有正确的观点，但也有部分错误

- 正确的地方：把相空间当作物理问题中的自由度为坐标的展开高维空间是正确的方向。每一个粒子的自旋都是一个自由度。多自旋情况下代表点也只能位于多维相空间立方盒子的顶点上。
- 错误的地方：代表点是可以是与时间相关的，只要每个粒子的状态在不断的改变，则代表点任然是流动的，不能推出密度不随时间改变的。体系的密度不随时间改变需要从别的角度出发来推导。

  考虑N个粒子组成的 Ising 自旋系统，有 2^N 种状态，这里的系综的密度也不能以传统的经典系统的密度描述，而是以量子系统中的密度算符 ρ 来描述。

  设每个粒子的态为 $|n_k; +\rangle$或 $|n_k; -\rangle$ ；则对于系统的某种状态 $|a_i\rangle$是由 每个粒子态组成的共同本征态 $|n_1, n_2, ..., n_N\rangle$ 的一种情况，对应的布局数为w_i，则密度算符写作

  $$\rho = \sum_i w_i |a_i\rangle \langle a_i|$$

  随着时间的变化，只要相应的布局数不发生变化，那么体系的密度不随时间改变。

  在 $Ising$自旋模型中，Hamilton量为：

  $$H = -\sum J_{i,j}\sigma_i\sigma_j$$

对任意一个粒子自旋算符等价的是 $S_i=\mu_B\sigma$，$|n_k\rangle$是其本征态。注意到不同粒子的自旋之间是独立的，故 $[\sigma_i,\sigma_j]=0$，则 $|a_i\rangle$是哈密顿量 H 的本征态，而显然密度算符 ρ的本征态也是 $|a_i\rangle$,本征值是 w_i 故

$$[\rho,H]=0$$

根据薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t}=\sum_i w_i(H|a;t\rangle\langle a;t|-|a;t\rangle\langle a;t|H)$$

$$i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t}=-[\rho,H]=0$$

这正是量子系统的 $Liouville$定理，所以有密度不随时间改变的稳态的结论

> 学生A： 我不能同意你的观点。如果相空间是这样的话，由于代表点只能取在顶点上，连几率密度分布本身都是离散的，而不是在该相空间中连续分布的。另外，$d\rho/dt=\sum_i(d\rho/d\sigma)(d\sigma_i/dt)$，在无穷小的时间变化 dt 内，自旋的变化 $\Delta\sigma$ 则是有限的，不能得到Liouville定理。更何况系综理论推导时基于的也是 (q , p) 变量

这个同学有以下错误：

- 首先，虽然无穷小的时间变化内对一个粒子 $\Delta\sigma$是有限的，但是对于系综来说有很多的粒子，总系统的变化可以看作是连续。
- 其次虽然理论推导时基于的是 (q,p)，但 (q,p)本质上描述的仍然是系统的自由度，对于自旋系统本就应该用量子力学的语言描述才更为恰当，量子系统包含了经典的情况，没有 (q,p)也能推导出 $Liouville$定理

总结

1. 对于 $Ising$模型中，自旋本身就构成了一种自由度，应当把相空间当作物理问题中的自由度为坐标的展开高维空间取处理。
2. 对于“自旋”这样量子化的概念，放在量子系统中处理会更加合适，也能推导出其处于总的系综为稳态，而内部的子系统是按照概率分布的，$liouvile$定理也自然成立
3. 对于 $Ising$模型中，在给定温度下系统下，当熵 $-\operatorname{tr}(\rho\ln\rho)$取到极值时，为其稳态，能得到 $Ising$系统中各个子系统按照 $Boltzmann$分布规律分布
4. 对于体系中某个具体子系统其概率分布是恒定的。通过较长时间的演化，总能用 $Markov$链去模拟大量粒子组成的系综的情况，而不是系综本身在随着时间不断的按概率演化。