高等热力学与统计物理第十次作业

董建宇

1. 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

$$N = N_\uparrow$$

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

$$u_l = 2[\varepsilon_l(\uparrow) - \varepsilon_l(\uparrow\downarrow)]$$

则对于 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，$\varepsilon_l(\uparrow\uparrow) = \varepsilon(\downarrow\downarrow)$ 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。

Ising 模型能量为:

$$U_I = \sum_l [N^l_{\uparrow\uparrow}\varepsilon_l(\uparrow\uparrow) + N^l_{\downarrow\downarrow}\varepsilon_l(\downarrow\downarrow) + N^l_{\uparrow\downarrow}\varepsilon_l(\uparrow\downarrow)] + \mu H(N_\uparrow - N_\downarrow).$$

设每个格点第 l 近邻的数目为 n_l，则有:

$$2N^l_{\uparrow\uparrow} + N_{\uparrow\downarrow} = n_l N_\uparrow;$$

$$2N^l_{\downarrow\downarrow} + N_{\uparrow\downarrow} = n_l N_\downarrow.$$

同时，有隔点数目为 $\mathcal{N}$:

$$N_\uparrow + N_\downarrow = \mathcal{N}$$

则可以用 $N_\uparrow$ 和 $N^l_{\uparrow\uparrow}$ 表示 Ising 模型能量:

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

则 Ising 模型的巨配分函数为

$$Q_I = \sum e^{-U_I/kT}.$$

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

$$Q_G=\sum_N y^N\frac{1}{N!}\sum_{\text{N 个可区分粒子的分布}}e^{-U_G/kT}=\sum_N y^N\sum_{\text{N 个不可区分粒子的分布}}e^{-\sum_l n^l_{pp}u_l/kT}.$$

令 $N=N_\uparrow$, $n^l_{pp}=N^l_{\uparrow\uparrow}$, $y=\exp\{(2\mu H-\sum_l n_l[\varepsilon_l(\uparrow\downarrow-\varepsilon_l(\uparrow\uparrow))])/kT\}$, $u_l=2[\varepsilon_l(\uparrow\uparrow)-\varepsilon_l(\uparrow\downarrow)]$ 则可以计算:

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