高等热力学与统计物理第十一次作业

董建宇

1. 考虑近邻作用的铁磁性 Ising 模型，写出自由能

$$F_I(M) \equiv -\frac{kT}{\mathcal{N}} \ln Q_{N_\uparrow}.$$

在零磁场下展开到 M^4 的形式，讨论此展开式在 $T > T_c$ 和 $T < T_c$ 的图像并求出两种情况下 $F_I(M)$ 的最小值和相应的磁化强度 M。(此类展开只适用于临界温度附近，故展开式中各项的系数只需要保留到 $|T - T_c|$ 的领头阶。)

对于近邻作用的 Ising 模型，有:

$$Q_{N_\uparrow} = e^{-\frac{U_I}{kT}} \frac{\mathcal{N}!}{N_\uparrow! N_\downarrow!}.$$

当 $\mathcal{N}, N_\uparrow, N_\downarrow$ 充分大时，可以利用 Stirling 公式得:

$$\frac{1}{\mathcal{N}} \ln Q_{N_\uparrow} = -\frac{U_I}{\mathcal{N}kT} - \frac{N_\uparrow}{\mathcal{N}} \ln \frac{N_\uparrow}{\mathcal{N}} - \frac{N_\downarrow}{\mathcal{N}} \ln \frac{N_\downarrow}{\mathcal{N}}.$$

磁化强度为:

$$M = \frac{1}{\mathcal{N}}(N_\uparrow - N_\downarrow)$$

可得:

$$\frac{1}{\mathcal{N}} \ln Q_{N_\uparrow} = \frac{\mu H}{kT} M - \frac{n\varepsilon M^2}{2kT} - \frac{1+M}{2} \ln \frac{1+M}{2} - \frac{1-M}{2} \ln \frac{1-M}{2}.$$

则自由能为:

$$F_I(M) = -\frac{kT}{\mathcal{N}} \ln Q_{N_\uparrow} = -\mu H M + \frac{1}{2} n\varepsilon M^2 + \frac{kT(1+M)}{2} \ln \frac{1+M}{2} + \frac{kT(1-M)}{2} \ln \frac{1-M}{2}$$

对于铁磁材料，$\varepsilon < 0$，则临界温度为：$T_c = -n\varepsilon/k$。在零磁场下，展开式系数只保留到 $|T - T_c|$ 的领头阶，则有:

$$F_I(M) = -kT \ln 2 + \frac{1}{2} k(T - T_c) M^2 + \frac{1}{12} kT M^4.$$

对 M 求导得:

$$\frac{\partial F_I(M)}{\partial M} = k(T - T_c) M + \frac{1}{3} kT M^3.$$

当 $T > T_c$ 时，有 $\frac{\partial F_I(M)}{\partial M} \geq 0$，即当 $M = 0$ 时 $F_I(M)$ 取最小值为 $-kT \ln 2$。
当 $T < T_c$ 时，一阶导数为 0 可得:

$$M = 0, \text{ or } \pm\sqrt{\frac{3(T_c - T)}{T}}.$$

此时 $F_I(M)$ 最小值为：$-kT \ln 2 - \dfrac{3}{4} \dfrac{k(T_c - T)^2}{T}$，此时 $M = \pm\sqrt{\frac{3(T_c - T)}{T}}$。

2. 求出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 $y_1, y_2, \ldots, y_{\mathcal{N}}$，并讨论在 $u > 0$ 和 $u < 0$ 两种情况下根在复平面上的分布。

具有周期边界条件同时仅有紧邻相互作用的一维 Ising 模型的配分函数为：

$$Q_I = \lambda_+^{\mathcal{N}} + \lambda_-^{\mathcal{N}}.$$

其中

$$\begin{aligned}\lambda_\pm =& \frac{1}{2}\left[x_I\left(y_I + \frac{1}{y_I}\right) \pm \sqrt{x_I^2\left(y_I - \frac{1}{y_I}\right)^2 + \frac{4}{x_I^2}}\right],\\ x_I =& e^{-\frac{1}{kT}\varepsilon},\\ y_I =& e^{\frac{\mu H}{kT}}.\end{aligned}$$

对应一维格气巨配分函数可表示为：

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

令巨配分函数为 0，则有：

$$\lambda_+ = \lambda_- \exp\left(i(2k+1)\pi/N\right)$$

其中 $k \in N$，$y_I^2 = ye^{-u/kT}$，则 y 满足的方程为：

$$y^2 + 2y\exp\left(\frac{u}{kT}\right)\left[1 + \exp\left(\frac{u}{kT}\right)\cos^2\left(\frac{(2k+1)\pi}{2N}\right)(\exp(u/kT) - 1)\right] + \exp\left(\frac{2u}{kT}\right) = 0.$$

当 $u < 0$ 时，有：

$$\begin{aligned}y =& -\exp\left(\frac{u}{kT}\right)\left[1 + 4\exp\left(\frac{u}{kT}\right)\cos^2\frac{(2k+1)\pi}{2N}\left(\exp\left(\frac{u}{kT}\right) - 1\right)\right]\\ &\pm i\exp\left(\frac{u}{kT}\right)\sqrt{1 - \left[1 + 4\exp\left(\frac{u}{kT}\right)\cos^2\frac{(2k+1)\pi}{2N}\left(\exp\left(\frac{u}{kT}\right) - 1\right)\right]^2}\end{aligned}$$

此时，所有根分布在半径为 $\exp(u/kT)$ 的圆上。
当 $u > 0$ 时，有：

$$\begin{aligned}y =& -\exp\left(\frac{u}{kT}\right)\left[1 + 4\exp\left(\frac{u}{kT}\right)\cos^2\frac{(2k+1)\pi}{2N}\left(\exp\left(\frac{u}{kT}\right) - 1\right)\right]\\ &\pm \exp\left(\frac{u}{kT}\right)\sqrt{\left[1 + 4\exp\left(\frac{u}{kT}\right)\cos^2\frac{(2k+1)\pi}{2N}\left(\exp\left(\frac{u}{kT}\right) - 1\right)\right]^2 - 1}\end{aligned}$$

3. 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

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

当 $\mathcal{N} \to \infty$ 时，配分函数为:

$$Q_I = \lambda_+^{\mathcal{N}} + \lambda_-^{\mathcal{N}} \approx \lambda_+^{\mathcal{N}}$$

则巨配分函数为:

$$\mathcal{Q} = e^{\frac{\mathcal{N}\varepsilon}{kT}} y_I^{\mathcal{N}} \lambda_+^{\mathcal{N}} = \frac{1}{2}\left[1 + \frac{y}{x} + \sqrt{\left(1 - \frac{y}{x}\right)^2 + 4y}\right].$$

则压强为:

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

粒子数密度为:

$$n = y\frac{\partial}{\partial y}\ln \mathcal{Q} = y\frac{\frac{1}{x} + \frac{-\frac{1}{x}(1-\frac{y}{x})+4}{\sqrt{(1-\frac{y}{x})^2+4y}}}{1 + \frac{y}{x} + \sqrt{\left(1 - \frac{y}{x}\right)^2 + 4y}}$$