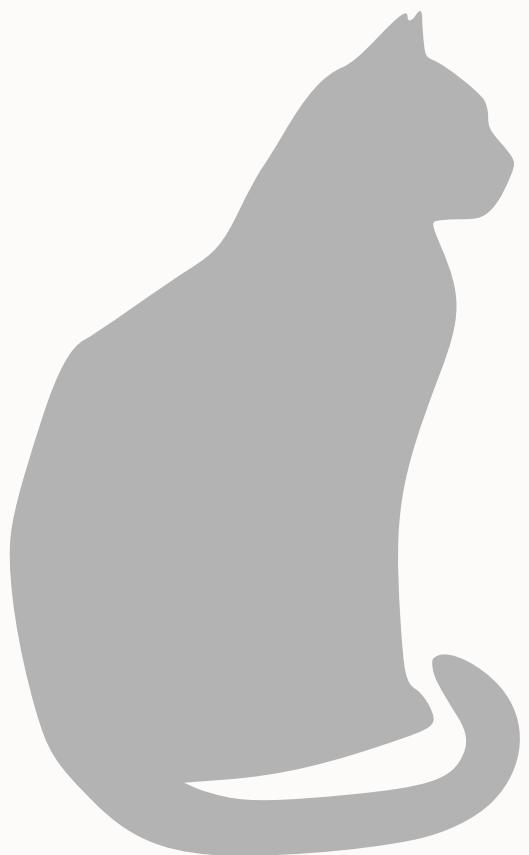


Advanced Statistics Mechanics



MINGYU XIA | PhD @Westlake University



This page was intentionally left blank.

Contents

1 Review: Basic Concepts of Thermodynamics	1
1.1 Definitions	1
1.2 均匀系（单相系）的平衡	2
1.3 单元系的相变热力学	3
1.4 热力学第三定律	4
1.5 Linear Nonequilibrium Thermodynamics	4
2 Concepts of Statistical Physics, Nearly Independent Particle Systems	5
2.1 微观状态的描写	5
2.2 等几率原理	5
2.3 近独立粒子系统的统计物理	5
3 Microregular Ensemble	7
3.1 经典统计系综	7
3.2 系综所满足的方程: Liouville 定理	7
3.3 量子统计系综	8
3.4 微正则系综	9
4 From Microcanonical Ensembles to Canonical Ensembles	10
4.1 能量涨落, 热力学极限, 经典极限	11
4.2 State equation of non-ideal gas	12
5 Grand Canonical Ensemble	14
6 Quantum Statistics	16
6.1 Bose and Fermi Statistics of free particles under GRSC	16
6.2 The Symmetry of Quantum Statistic & Wave Function	17
6.3 Anyon (任意子), Braid Group (辫子群)	18
6.3.1 Non-Abelian Statistics	19
6.4 1D Statistics: Interaction Corresponding	20
7 Phase Transition, Critical Phenomenon & Renormalized Group	22
7.1 Categories of Phase transitions	22
7.2 Landau 2 order phase transition theory	22
7.2.1 Gingbang-Landau	23
7.3 Critical Phenomenon and Critical Index	24

7.4	Quantum Phase Transition	26
7.5	Ising Model	27
7.5.1	Average field approximation	27
7.5.2	The exact solution of 1D Ising model	28
7.5.3	2D Ising Model	29
7.5.4	1D + 1D dimensional quantum Ising model	32
7.6	Renormalization Group	33
7.6.1	Real space RG	33
7.6.2	Examples: 1D Ising model	34
7.7	Numerical Renormalized Group & DMRG	37
7.7.1	Momentum space renormalization	37
7.7.2	Wilson's N.R.G.	37
7.7.3	Eigenstates of the $\psi_i = 1, m, L$ -site system	37
7.8	K-T Phase Transition	40
8	Non-equilibrium Statistic Physics	42
8.1	Boltzmann integral ODE	42
8.1.1	Derivation of the drift term	43
8.1.2	Derivation of the collision term	43
8.2	H-theomre, H-function and entropy	44
8.3	Application of Boltzmann Equation	45
8.4	Fluctuation Phenomenon: Themoral Variables	47
8.4.1	Regrex System	47
8.4.2	Quasi-Themoral Theory (Smoluchowski-Einstein Method)	48
8.4.3	Vande vars Gas	49
8.5	Fluctuation Phenomenon (Random External Forces, Brown Motions)	50
8.5.1	Langevin equation	50
8.5.2	The Diffusion of Brown particles	51
8.5.3	Time correlation in Brown motion	51
8.5.4	Fluctuation-Usage Theorem	52
8.5.5	The themoral conductance noice and the fluctuations in voltage	53
8.5.6	Shot noise	53
Lecture Homework #1 [2025-09-02]	i
Problem Set		i
Lecture #2	Homework #2 [2025-09-09]	viii
Lecture #3	Homework #3 [2025-09-16]	xii
Lecture #4	Homework #4 [2025-09-23]	xxii
Lecturer Yue Yu's Mmanuscript		i

CHAPTER 1 Review: Basic Concepts of Thermodynamics

1.1 Definitions

Definition 1.1.1 (Equilibrium State). 在没有外界影响的条件下，物体部分的长时间不发生变化的状态.

Definition 1.1.2 (热平衡定律). A 与 B 平衡，B 与 C 平衡，则 A 与 C 平衡.

Definition 1.1.3 (Temperature). 衡量物体间是否热平衡的物理量称为温度，一切互为热平衡的物体温度相等.

Definition 1.1.4 (温标). 确定温度具体数值的规则叫温标

Definition 1.1.5 (物态方程). 几何变量 V, A, L

力学变量 p, σ, F

电磁变量 E, p, H, M

化学变量 μ

$$T = f(p, V, \dots) \quad (1.1)$$

Definition 1.1.6 (内能). 绝热过程（没有热量/能量交换的过程）中外界对物体做功只与初态和末态有关，初态和终态的内能差 $U_2 - U_1 = W_a$ 外界对物体的绝热功

Definition 1.1.7 (热力学第一定律). 推广到非绝热过程，系统从外界吸热， $Q = U_2 - U_1 - W_0$ (能量守恒).

Definition 1.1.8 (热容).

$$C_y = \frac{dQ_y}{dT}, \quad y \text{ 是一个不变的量} \quad (1.2)$$

如果 $y = V$, 称为定容; $y = p$, 称为定压.

比热 C/V

Definition 1.1.9. 内能是态函数， $H = U + pV$, 称为焓

绝热过程中， $\Delta H = W_a$.

等压过程中， p 固定 $\Delta H = Q_p$.

Entropy: 对可逆过程，态函数

$$\Delta S = S - S_0 = \int_{\text{Initial State}}^{\text{Final State}} \frac{dQ}{T} \quad (1.3)$$

Definition 1.1.10 (热力学第二定律).

$$\Delta S \geq \int_{(i)}^{(f)} \frac{dQ}{T} \quad (1.4)$$

Definition 1.1.11 (热力学基本方程).

$$dU = T dS = \sum_i F_n dy_i p - V - T : dU = T dS - p dV \quad (1.5)$$

自由能: $F = U - TS$ $dF = dY - d(TS)$, $dF = -S dT - p dN$

Definition 1.1.12 (G.bbs 自由能: $G = F + pV$).

$$dG = -S dT + V dp \quad (1.6)$$

means 等温等压过程中, G 又不增加.

1.2 均匀系 (单相系) 的平衡

均匀系 $p - V - T$:

$$dU = T dS - p dV \quad (S, V) \quad (1.7)$$

$$df = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y dx + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x dy \quad (1.8)$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = -(PS)_V \quad (1.9)$$

同理, 对于焓

$$dH = T dS + V dP \quad (S, P) \quad (1.10)$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_S = \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_P \quad (1.11)$$

$$dF = -S dT - p dV \quad (1.12)$$

$$dG = -S dT + V dP \quad (1.13)$$

Definition 1.2.1 (可测量热力学量). 1. p, V, \dots, T .

2. 响应函数: 压缩系数, 膨胀系数, ...

1.3 单元系的相变热力学

- 单相系 ∈ 单元系
- 相变：整个单详细的性质发生了变化，从一个平衡态到另一个平衡态
- 系统处于某一个相中，就是系统处于热平衡，判据 $S = S_{\max} \Leftrightarrow$ 孤立系处于平衡态. $\delta S = \delta^2 S = 0, \delta U = \delta V = \delta N = 0.$
- $\delta S = 0, \delta^2 S < 0.$
 - $\delta^3 S = 0$ 是稳定的必要条件
 - $\delta^4 S < 0 \rightarrow$ critical state
- 1. 自由能判据: T, V, N 不变, $F = F_{\min}$
- 2. Gibbs 自由能判据: T, P, N are constants, $G = G_{\min}.$
- If the number of particles is changeable, then

$$dU = T dS - p dV + (u + T_s + pV) dN \quad (1.14)$$

Here, $G/N = \mu$ is chemical potential.

- μdN

$$\mu = \left(\frac{\partial U}{\partial N} \right)_{S,V} = \left(\frac{\partial H}{\partial N} \right)_{S,P} = \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V} = \left(\left(\frac{\partial G}{\partial N} \right)_{T,P} \right) \quad (1.15)$$

$$d\mu = -S dT + \sigma dP \quad (1.16)$$

- $\Psi = F - \mu N = U - T_s - \mu N = F - G$ is called the giant potential (巨势).

由平衡判据，可以得到平衡条件.

如熵极大 $T_1 = T_2$ (热平衡), $P_1 = P_2$ (力学平衡), $\mu_1 = \mu_2$ (化学平衡).

总粒子数不守恒 $\delta F = 0, P_1 = P_2, \mu_1 = \mu_2 = 0.$

由平衡判据，可以得到稳定条件

E.g.: 自由能极小

$$C_v > 0, K_T = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T > 0$$

- Due to equilibrium conditions, we can obtain the phase diagram.

两相平衡, $\mu^1 = \mu^2, T_1 = T_2 = T, P_1 = P_2 = P.$

$$\mu^1(T, P) = \mu^2(T, P), T, P \text{平面上}$$

Three-phase equilibrium: $\mu_1 = \mu_2 = \mu_3.$

1.4 热力学第三定律

Definition 1.4.1. 多元系的复相平衡和化学平衡 (T, P, N, \dots, N_k) $\{N_i\} \mu dN \rightarrow \sum_i \mu_i dN_i \mu_1 = \left(\frac{\partial \xi}{\partial N_i}\right)_{T, P, \{N_j \neq i\}}$

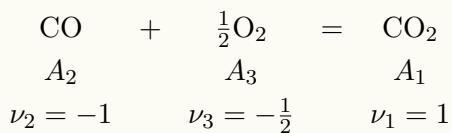
$$\int dT - V dq + \sum_i N_i d\mu_i = 0$$

$k+1$ 是独立的.

发生化学反应时,

$$\sum_{i=1}^k \nu_i A_i = 0$$

如



反应平衡条件

$$\sum_i \nu_i \mu_i = 0 \quad (1.17)$$

一些经验关系

- 等温等压条件下, 反应向放热方向进行, $\Delta H < 0$.
- 等温等压化学反应, 向着 ΔG 减小方向进行.

$$\Delta G = \Delta H - TS \Rightarrow \lim_{T \rightarrow 0} (\Delta S)_T \rightarrow 0$$

称为 Nernst Theorem.

Definition 1.4.2 (热力学第三定律). 绝对熵 $\lim_{T \rightarrow 0} S = 0$: 不可能通过有限步骤使物体冷却到绝对零度.

1.5 Linear Nonequilibrium Thermodynamics

- 能量守恒方程 -> 推广的热力学第一定律 (每一小块质心运动考虑进去) .
- 对小块, 熵的微分方程成立.
- 第二定律: $\theta = \frac{\delta S}{\delta t}$ 表示小块熵产生率.

$$\frac{dS}{dt} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_s + \theta \cdot \mathbf{J}_s \text{ 为熵流密度}$$

$\mathbf{J}_s = \frac{\mathbf{J}_q}{T}$, \mathbf{J}_q 为热流, $\theta = \frac{K}{T^2}(\nabla T)^2 > 0$. K 为热导率.

- $\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_n = 0$

- 输运过程

Fourier: $\mathbf{J}_q = -K \nabla T$ Fick: $\mathbf{J}_n = -D_n \nabla n$, $\mathbf{J}_e = \sigma \mathbf{E} = -\sigma \nabla \phi$

CHAPTER 2 Concepts of Statistical Physics, Nearly Independent Particle Systems

2.1 微观状态的描写

粒子，子系：院子，分子，振子，自旋，
 (q, p) , $q^a = 1, r, \epsilon(q, p)$

$$d\omega = d^r q d^r p$$

N : $q_1, \dots, q_s, p_1, \dots, p_s$. $s = Nr$

$$d\Omega = d^s q d^s p$$

$$\Gamma = \{(q_1, \dots, q_s; p_1, \dots, p_s)\}$$

称为相空间.

(q, p) 相空间中一个点，叫做一个微观状态.

量子：单粒子的量子态由一组守恒的量子数标志.

用一组可对易力学量算符的本征值描述.

例如，自由粒子：动量本征值

量子经典对应：单粒子量子态 $\leftrightarrow \Delta\omega = h^r$ 的单粒子相阵积元.

全同性：

2.2 等几率原理

- 对孤立系， E, V, N 固定，最简单朴素的假设就是等几率假设：对于处于平衡态下的孤立系，系统各个可能的微观状态出现的几率相等.
- 可能的微观状态是指与宏观状态 E, ν, N 相容的经典或量子态.

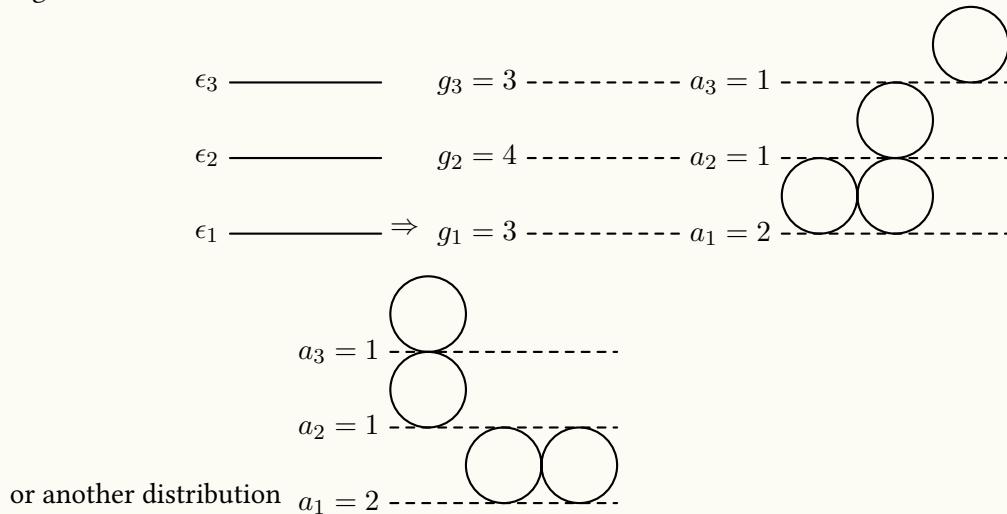
2.3 近独立粒子系统的统计物理

- 近独立是指相互作用很弱（只对体系达到平衡起作用）

$$E = \sum_{i=1}^N \epsilon_i \tag{2.1}$$

- $\epsilon_{n,\alpha}, \alpha = 1$, 能级指标. g_α 称为简并度. a_α 指每一个能级上的占有数.

E.g.:



能级 能极简并度

- 对孤立子

$$\sum_{\alpha} a_{\alpha} = N, \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} a_{\alpha} = E$$

- 对一个给定的 $\{a_{\alpha}\}$, 可以有不同的量子态. $\Rightarrow W(\{a_{\alpha}\})$ 等几率原理 $\{a_{\alpha}\}$ 出现的几率 $\propto W\{a_{\alpha}\}$.

如果可区分 $W(\{a_{\alpha}\}) = \frac{N!}{\prod_{\alpha} a_{\alpha}!} \prod_{\alpha} g_{\alpha}^{a_{\alpha}}$, Fermion $W_F(\{a_{\alpha}\}) = \prod_{\alpha} \frac{g_{\alpha}!}{a_{\alpha}!(g_{\alpha}-a_{\alpha})!}$, Boson $W_B(\{a_{\alpha}\}) = \prod_{\alpha} \frac{(g_{\alpha}+a_{\alpha}-1)!}{a_{\alpha}!(g_{\alpha}-1)!}$.

CHAPTER 3 Microregular Ensemble

平衡态统计一般理论是系综理论. 适用范围: 宏观多粒子系统.
系综: 微正则系综 (基本系综), 正则系综, 巨正则系综.

- 微正则系综: E, N, V 固定
- 正则系综: T, N, V 固定
- 巨正则系综: T, μ, V 固定

3.1 经典统计系综

经典力学的微观状态: 相空间中一个点 (q, p) 满足正则运动方程

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, i = 1, \dots, s \quad (3.1)$$

$\{(q_n(t), p_n(t))\}$ 相轨道 $(\dot{q}_i(t), \dot{p}_i(t))$, 轨道上任意一点 $d\Omega = \prod_i dq_i dp_i, i = 1, \dots, s$.

设 Γ 为给定宏观物理条件下所有可能的微观状态 $\tilde{\rho} d\Omega$: $d\Omega$ 内的微观状态数, 则 $\rho d\Omega = \frac{\tilde{\rho} d\Omega}{\Gamma} = \frac{\tilde{\rho} d\Omega}{\int \tilde{\rho} d\Omega}$ 是某微观状态出现在 $d\Omega$ 内的几率, 满足归一化 $\int \rho d\Omega = 1$, ρ 为几率密度.

任何物理可观测量 O 是微观力学量 O 的统计平均.

$$\bar{O} = \int d\Omega \rho O \quad (3.2)$$

- 系统处于某一微观状态 \Leftarrow 处于该微观状态的系统
- 处于 $d\Omega$ 中的系统是 $\tilde{\rho} d\Omega$ 个 Γ 个系统的集合称为一个统计系综.
- 系综是假想的和所研究系统性质完全相同的彼此独立、各自处于某一微观状态的大量系统的集合.

3.2 系综所满足的方程: Liouville 定理

Theorem 3.2.1 (Liouville 定理). 系综的几率密度 ρ 在运动中不变,

$$\frac{d\rho}{dt} = 0, \frac{d\tilde{\rho}}{dt} = 0.$$

代表点数守恒

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_\rho = 0, \mathbf{J}_\rho = \rho \mathbf{v}, \nabla = \left(\frac{\partial}{\partial q_i}, \frac{\partial}{\partial p_i} \right), \mathbf{v} = \sum_i (\dot{q}_i, \dot{p}_i) \quad (3.3)$$

$$\frac{d\tilde{\rho}}{dt} = \frac{\partial\tilde{\rho}}{\partial t} + \sum_i \mathbf{r}_i (\rho \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i) = \frac{\partial\tilde{\rho}}{\partial t} + \sum_i \left(\left(\frac{\partial\tilde{\rho}}{\partial q} \right)_i \dot{q}_i + \left(\frac{\partial\tilde{\rho}}{\partial p} \right)_i \dot{p}_i \right) = -\tilde{\rho} \sum_i \left\{ \frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_j} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_j} \right\} = 0 \quad (3.4)$$

最后得出 Liouville 方程

$$\frac{\partial\tilde{\rho}}{\partial t} + \{\tilde{\rho}, \rho\} = 0 \quad (3.5)$$

3.3 量子统计系综

- 对量子力学系统，我们用波函数 ψ_n 或态 $|n\rangle$ 来代替相空间的 (q, p)
- $A_n = \langle n | \hat{A} | n \rangle$
- 统计系综，考虑一系列的态 $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle$.
- 第 n 个态有 $\tilde{\rho}_n$ 个简并度，即有 $\tilde{\rho}_n$ 个系统.

总系统数 $N = \sum_n \tilde{\rho}_n$

$\rho_n = \frac{\tilde{\rho}_n}{N}$ 处于第 n 个态的几率

$$\sum_n \rho_n = 1, \bar{A} = \langle A \rangle = \sum_n \rho_n A_n$$

统计算符（密度矩阵） $\hat{\rho} = \sum_n |n\rangle \rho_n \langle n|$

$\{|i\rangle\}$ 一套正交¹完备²基.

密度矩阵

$$\rho_{ij} = \langle i | \hat{\rho} | j \rangle = \sum_n \langle i | n \rangle \rho_n \langle n | j \rangle \quad (3.6)$$

$$A_{ij} = \langle i | A | j \rangle, \bar{A} = \sum_n \rho_n \langle n | A | n \rangle = \sum_{ij} \sum_n \rho_n \langle n | j \rangle \langle j | A | i \rangle \langle i | n \rangle = \sum_{ij} \rho_{ij} A_{ji} = \text{Tr}(\hat{\rho} A)$$

$$\text{Tr} \sum_i \rho_{ii} = 1$$

$\hat{\rho}, |n\rangle$ Schrödinger eq

$$i \frac{\partial}{\partial t} |n\rangle = \hat{H} |n\rangle \quad (3.7)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = \sum_n \left[\left(i \frac{\partial}{\partial t} |n\rangle \right) \rho_n \langle n | - |n\rangle \rho_n \left(-i \frac{\partial}{\partial t} \langle n | \right) \right] = \sum_n H |n\rangle \rho_n \langle n | - |n\rangle \rho_n \langle n | H = H \hat{\rho} - \hat{\rho} H = [H, \hat{\rho}]$$

Finally, we have

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} + i[H, \hat{\rho}] = 0 \quad (3.8)$$

即 $\hat{\rho}$ 的 Heisenberg eq. of motion.

¹ 即 $\delta\langle i | j \rangle = \delta_{ij}$

² 即 $\sum_i |i\rangle \langle i| = \mathbb{1}$: 对于 $\{|0\rangle m|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}$, 存在 $|0\rangle \langle 0| + |\uparrow\rangle \langle \uparrow| + |\downarrow\rangle \langle \downarrow| + |\uparrow\downarrow\rangle \langle \uparrow\downarrow| = \mathbb{1}$

3.4 微正则系综

- 经典微正则系综: E, N, V 不变系综 – 孤立系.

由 Liouville 定理

$$\frac{d\rho}{dt} = 0$$

若在平衡态物理量不随时间变化, 就要求在相空间固定点, ρ 不随时间变化, 即必要条件 $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$.
 \Rightarrow 在相轨道内 ρ 为常数.

但 Liouville 定理和平衡态物理量不变不能保证不同轨道的 ρ 相同.

微正则系综的基本假设

- 当 $H(q, p) = E$ 时, ρ 是常数, 即相空间中的等能面.
- 当 $H(q, p) \neq E$ 时 (存在集合 $\{p, q\}$), $\rho = 0$.

To summarize

$$\rho = \begin{cases} C & E \leq H \leq E + \Delta E, \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3.9)$$

守恒条件 (Normalization of ρ)

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0} C \int_{\Delta E} d\Omega = 1. \quad (3.10)$$

The mean value

$$\bar{O} = \lim_{\Delta E \rightarrow 0} C \int_{\Delta O d\Omega}. \quad (3.11)$$

量子微正则系综

$$H(q, p) \longrightarrow E_n \quad (3.12)$$

加入

1. 粒子的全同性

$$2. \rho_n = \begin{cases} C, & E_n = E \\ 0, & E_n \neq E \end{cases}, n \text{ 为标记量子态的量子数. } \sum_{n(E_n=E)} \rho_n = C (\sum_{n(E_n=E)} 1 = 1).$$

$$\mathcal{N}(E, V, N) = \sum_{n(E_n=E)} 1, C = \frac{1}{\mathcal{N}(E, N, V)}$$

CHAPTER 4 From Microcanonical Ensembles to Canonical Ensembles

Definition 4.0.1 (正则系综). 系统与大热源接触，达到平衡的系综， (T, V, N) 固定.

大热源的作用是提供确定的温度

- A : 就是要研究的正则系综中的系统.
- B : 大热源中的系统
- $A + B$: 孤立系.

$$E_{\text{total}} = E_A + E_B, \quad V_{\text{total}} = V_A + V_B, \quad N_{\text{total}} = N_A + N_B$$

Assume $\Omega(E_{\text{total}})$ is the number of the total state of $A + B$, then the states in A is labelled as $|n\rangle$, and A is at the $|n\rangle$ state; B has $\Omega(E_{\text{total}} - E_A)$ states. The probability that the system A at state $|n\rangle$ can be described as

$$\rho_{An} = \frac{\Omega_B(E_{\text{total}} - E_A)}{\Omega(E_{\text{total}})}. \quad (4.1)$$

and the mean value $\bar{E}_n \ll E_{\text{total}}, E_A \ll E_{\text{total}}$. It's not important that which state B is located, as well as B 's properties. Then, the freedom-particle system can be used to represent B .

Example 4.0.1 (Chapter 3, Problem 1). $\Omega_B(E_{\text{total}} - E_A) \sim (E_{\text{total}} - E_A)^M, M \sim O(N_3) \sim O(N)$. To expand it:

$$\Omega_B(E_{\text{total}} - E_A) = E_{\text{total}}^M \left(1 - \frac{E_A}{E_{\text{total}}}\right)^M = E_{\text{total}}^M \left(1 - M \frac{E_A}{E_{\text{total}}} + \dots\right)$$

we can also expand it in another way (a safer expansion)

$$\Omega_B(E_{\text{total}} - E_A) = \exp[M \ln(E_{\text{total}} - E_A)]$$

Then expand the “ln” item

$$\ln(E_{\text{total}} - E_A) = \ln E_{\text{total}} + \ln \left(1 - \frac{E_A}{E_{\text{total}}}\right) = \ln E_{\text{total}} - \frac{E_A}{E_{\text{total}}} - \frac{1}{2} \left(\frac{E_A}{E_{\text{total}}}\right)^2 + \dots$$

then we have

$$\rho_{An} = \frac{1}{\Omega(E_{\text{total}})} e^{\ln \Omega_B} = \frac{1}{\Omega(E_{\text{total}})} \exp \left[\ln \Omega_B(E_{\text{total}}) - \frac{\partial \Omega_B(E_{\text{total}})}{\partial E_{\text{total}}} E_A + \dots \right] \approx \frac{\Omega_B(E_{\text{total}})}{\Omega(E_{\text{total}})} e^{-\beta E_A} \equiv \frac{1}{Z_N} e^{-\beta E_A}$$

we define $\beta = \frac{\partial \Omega_B(E_{\text{total}})}{\partial E_{\text{total}}} \triangleq \frac{1}{k_B T}$ then remove the “ A ” index

$$\rho_{An} = \rho_n, \quad \sum_n \rho_n = 1 \Rightarrow Z_N = \sum_n e^{-\beta E_N}$$

Now, we arrive at the partition function Z_N

$$Z_N = \text{Tr } e^{-\beta H} = \sum_n \langle n | e^{-\beta H} | n \rangle = \sum_n e^{-\beta E_n} \quad (4.2)$$

Using the partition function, we have

$$\bar{A} = \sum_n A_n \rho_n = \frac{1}{Z_n} \sum_n \langle n | A | n \rangle e^{-\beta E_n} = \frac{1}{Z_n} \sum_n \langle n | A e^{-\beta H} | n \rangle = \frac{1}{Z_n} \text{Tr } A e^{-\beta H}. \quad (4.3)$$

$$\bar{E} \xrightarrow{\text{inner energy}} \sum_n E_n \rho_n = \frac{1}{Z_n} \sum_n E_n e^{-\beta E_n} = \frac{1}{Z_n} \left(-\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_n e^{-\beta E_n} \right) = -\frac{1}{Z_n} \frac{\partial}{\partial p} Z_n = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_n \quad (4.4)$$

$$p_n = -\frac{\partial E_n}{\partial V}, \bar{p} = \sum_n p_n \rho_n = \frac{1}{Z_n} \sum_n -\frac{\partial E_n}{\partial V} e^{-\beta E_n} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} \ln Z_N \quad (4.5)$$

$$dS = \frac{d\bar{E}}{T} + \frac{\bar{p}}{T} dN = k_B(\beta d\bar{E} + \beta \bar{p} dV) = k_B \left(-\beta \frac{\partial}{\partial \beta} d \ln Z_N + dV \frac{\partial}{\partial V} \ln Z_N \right) = d \left[k_B \left(\ln Z_N - \beta \frac{\partial}{\partial p} \ln Z_N \right) \right] \quad (4.6)$$

$$F = \bar{E} - TS = -k_B T \ln Z_N \quad (4.7)$$

4.1 能量涨落, 热力学极限, 经典极限

Definition 4.1.1 (涨落). For energy:

$$(a) \text{ 方差: } \frac{\overline{(E - \bar{E})^2}}{E^2}$$

$$(b) \text{ 方均根: } \sqrt{\frac{\overline{(E - \bar{E})^2}}{E^2}}$$

$$\overline{(E - \bar{E})^2} = \overline{(E^2 - 2E\bar{E} + \bar{E}^2)} = \overline{E^2} - \bar{E}^2, \overline{E^2} = \sum_n E_n^2 \rho_n = \dots = \bar{E}^2 - \frac{\partial \bar{E}}{\partial \beta} \Big|_{N,V}$$

$$\overline{(E - \bar{E})^2} = -\frac{\partial \bar{E}}{\partial \beta} \Big|_{N,V} = k_B T \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_{N,V} = k_B T^2 C_V$$

$$\frac{\sqrt{\overline{(E - \bar{E})^2}}}{\bar{E}} = \frac{\sqrt{k_B + C_V}}{\bar{E}} = \frac{\sqrt{k_B c_v} + \sqrt{N}}{A + N} \propto \frac{1}{\sqrt{N}}$$

Definition 4.1.2 (热力学极限). $N, V \rightarrow \infty, n = \frac{N}{V}$ final.

Definition 4.1.3 (经典极限). 热波长 $\lambda_T = h/(2\pi m k_B T)^{1/2} \ll \delta r$ (average distance of particle).

$\Delta E = E_n - E_{n-1} \ll k_B T$ – 经典极限.

$$Z_n = \frac{1}{N! h^3} \int d\Omega e^{-\beta H(q,p)}$$

4.2 State equation of non-ideal gas

Model:

$$E = k + V = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} = \sum_{i < j} \phi_{ij} \quad (4.8)$$

here, $\phi_{ij} = \phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ stands for the interactions between molecule.

$$Z_N = \int (d\Omega) e^{-\beta(k+V)}, \quad (d\Omega) = \frac{1}{N! h^{3N}} \prod_i d^3 p_i d^3 r_i = \frac{1}{N! \lambda_T^{3N}} Q_N(\beta, V)$$

while $Q_N = \int d\mathbf{r}_1 \cdots d\mathbf{r}_N e^{-\beta \sum_{i < j} \phi_{ij}} = \int (d\mathbf{r}) \prod_{i < j} e^{-\beta \phi_{ij}}$.

For ideal gas, $Q_N = V^N$. The interacting force is graphed: $r^* \sim 1\text{\AA}$

$$f_{ij} = e^{-\beta p_{ij}} - 1$$

$$f(r) = \begin{cases} -1, & r \rightarrow 0, (\phi \rightarrow \infty) \\ 0, & r \rightarrow r^*(\phi \rightarrow 0) \end{cases}$$

$$Q_N = \int (d\mathbf{r}) \prod_{i < j} (1 + f_{ij}) = \int (d\mathbf{r}) \left(1 + \sum_{i < j} f_{ij} + \sum_{i < j} f_{ij} \sum_{i' < j'} f_{i'j'} + \dots \right)$$

Since $e^{-\beta\phi(r_0)}/2 \ll 1$,

$$Q_N = \int (d\mathbf{r}) (1 + \sum_{i < j} f_{ij}) = V^N + \frac{1}{2} N(N-1) V^{N-2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 f_{12}, \quad \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}$$

$$\int d\mathbf{r}, d\mathbf{r}_2 f_{12} = \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 f(|\mathbf{r}|) \approx V \int dr f(r)$$

$$Q_N \approx V^N \left(1 + f \frac{1}{2} (N^2 - N) \right) / V \int d^3 \mathbf{r} f(r) \approx V^N \left(1 + \frac{1}{2} \frac{N^2}{V} \int d\mathbf{r} f(r) \right)$$

$$\ln Q_N = N \ln V + \ln \left(1 + \frac{N^2}{2V} \int d^3 \mathbf{r} f(r) \right)$$

The pressure

$$p = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} \ln N_N = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} \ln Q_N = \frac{Nk_B T}{V} \left[1 - \boxed{\frac{N}{2V^2} \int d^3 \mathbf{r} f(r)} \right]$$

$$\phi(r) = \begin{cases} \infty, & r < r_0 \\ -p_0 \left(\frac{r_0}{r} \right)^b, & r \geq r_0 \end{cases}$$

$$B_2 = -\frac{N}{2} \int_0^\infty \exp \left(-\frac{-\phi(r)}{k_B T} - 1 \right) r^2 dr \approx 2\pi N \left(\frac{r_0^3}{3} - \phi_0 \frac{r_0^3}{3k_B T} \right) \equiv N_b - \frac{Na}{k_B T}$$

Substitute B_2 into p

$$p = \frac{Nk_B T}{V} \left(1 + \frac{Nb}{V} \right) - \frac{N^2 a}{V^2} \approx \frac{Nk_B T}{V(1 - Nb/V)} - \frac{N^2 a}{V^2}$$

Then we arrive at the 范德瓦耳斯 equation

$$\left(p + \frac{N^2 a}{V^2} \right) (V - Nb) = Nk_B T \quad (4.9)$$

CHAPTER 5 Grand Canonical Ensemble

(T, μ, V) 不变.

- 与正则系综类似，热库同时也是粒子源.

$$E_T = E_A + E_B, N_T = N_A + N_B \quad (5.1)$$

$$\begin{aligned} \rho_n = \rho_{AN} &= \frac{\Omega_B(N_T - N_A, E_T - E_A)}{\Omega(N_T, E_T)} = \frac{1}{\Omega(N_T, E_T)} e^{\ln \Omega_B(N_T - N_A, E_T - E_A)} \\ &= \frac{\Omega_3(N_T, E_T)}{\Omega(N_T, E_T)} \exp \left[-\frac{\partial \ln \Omega_B(N_T, E_T)}{\partial N_T} N_A - \frac{\partial \ln \Omega_B(N_T, E_T)}{\partial N_T} N_A \right] \\ &= \frac{1}{Z_G} e^{\beta \mu N_A - \beta E_A} \end{aligned}$$

即 $\rho_{N_A} = \frac{1}{Z_G} e^{-\beta(E_n - \mu_N)}$. The normalization condition

$$\sum_{N=0}^{\infty} \sum_n \rho_{Nn} = 1$$

$$Z_G = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta \mu N} \sum_n e^{-\beta E_N} = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta \mu N} Z_N = \text{Tr } e^{-\beta(\hat{H} - \mu N)}$$

while μ is fermion's energy.

$$\langle n | \hat{H} | n \rangle = E_n$$

$$\bar{E} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_G \quad (5.2)$$

$$p = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} \ln Z_G \quad (5.3)$$

$$S = \alpha_B (\ln Z_G - \alpha \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln Z_G - \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_G) \quad (5.4)$$

$$F = -k_B T \ln Z_G + k_B T \alpha \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln Z_G \quad (5.5)$$

$$\psi = -k_B T \ln Z_G \quad (5.6)$$

- 经典和粒子数涨落 $\sim \frac{1}{\sqrt{N}}$.

- 经典极限 $Z_G = \sum_N e^{-\alpha N} Z_N$

Example 5.0.1 (固体表面的吸附率).

$$\theta = \frac{\bar{N}}{N_0}, N \rightarrow \bar{N}$$

(T, μ, ν) 单个分子被吸附后的能量降低 ϵ_0 .

$$E_N = -\epsilon_0 N$$

$$Z_G = \sum_{N=0}^{N_0} \sum_n e^{-\alpha N - \beta E_N} = \sum_{N=0}^{N_0} \sum_n e^{-\alpha N - \beta E_N} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_n e^{\beta(\beta + \epsilon_0)N}$$

其中 n 表示分子占据 N 个确定吸附中心中的 N 个时的某一特定状态

$$\sum_n = \frac{N_0!}{N!(N_0 - N)!}$$

$$Z(G) = \sum_{N=0}^{N_0} \frac{N_0!}{N!(N_0 - 1)!} e^{p(\mu + \epsilon_0)N} = (1 + x)^{N_0} = (1 + e^{\beta(\mu + \epsilon_0)})^{N_0}$$

$$\bar{N} = -\frac{\partial}{\partial x} \ln Z_G = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z_G|_{T_{\beta(\mu + \epsilon_0)}} = N_0 \frac{\partial}{\partial \alpha} e^{\alpha + \beta_0 \epsilon} = \frac{N_0 e^{\beta(\mu + \epsilon_0)}}{1 + e^{\beta(\mu + \epsilon_0)}}$$

这里达到平衡态 $\mu = \mu_A = \mu_B$, 这里 μ_B 可以用理想气体的化学势.

$$e^{-\beta \mu} = \frac{(2\pi m k_B T)^{3/2} k_B T}{\beta h^3}$$

$$\theta = \frac{\bar{N}}{N_0} = \frac{p h^3}{p h^3 + (2\pi m)^{3/2} - (k_B T)^{5/2} - e^{-\epsilon_0/k_B T}}$$

即 p 升高, θ 升高; T 升高; θ 下降.

CHAPTER 6 Quantum Statistics

- For dimension $d = 3$: Quantum gas could be either boson or fermion
- For dimension $d = 2$: Quantum gas could be either boson, or fermion, or anyon.
- For dimension $d = 1$: The statistic properties are related to interactions.

6.1 Bose and Fermi Statistics of free particles under GRSC

The Giant Regular System Comprehensive is

$$Z_G = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\substack{s \\ N \text{ is fixed}}} e^{-\alpha N - \beta E_s} \quad (6.1)$$

Combine $E_{N_{n_1}} = E_{N_{n_2}} = \dots = E_N$ together and substitute them into Z_G

$$Z_g = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{E_N} \sum_{s(E_{Ns}=E_N)} e^{-\alpha N - \beta E_{Ns}}$$

For free particles

$$E_N = \sum_{\lambda} a_{\lambda} \epsilon_{\lambda}, \quad \text{and} \quad N = \sum_{\lambda} a_{\lambda}$$

ϵ_{λ} is the energy of single particle, a_{λ} is the occupation number of λ energy level, and $\{a_{\lambda}\}$ is a distribution of the number of particles after a given λ . Now, we can sum in partition

$$Z_a = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{E_N} \sum_{\{a_{\lambda} \mid \sum_{\lambda} a_{\lambda} \epsilon_{\lambda} = E_N\}} W(\{a_{\lambda}\}) e^{-\sum_{\lambda} (\alpha + \beta \epsilon_{\lambda}) a_{\lambda}} = \sum_{\{a_{\lambda}\}} W(\{a_{\lambda}\}) e^{-\sum_{\lambda} (\alpha + \beta \epsilon_{\lambda}) a_{\lambda}}$$

Here, $\{a_{\lambda}\}$ represent various energy level and particle numbers; W is the micro state number of distributing $\{a_{\lambda}\}$. Hence

$$Z_a = \sum_{\{a_{\lambda}\}} \prod_{\lambda} W_{\lambda} e^{-\alpha a_{\lambda} - \beta a_{\lambda} \epsilon_{\lambda}} = \prod_{\lambda} \left(\sum_{a_{\lambda}} \right) W_{\lambda} e^{-\alpha a_{\lambda} - \beta a_{\lambda} \epsilon_{\lambda}}$$

For Fermion, a state can only contain one particle

$$W_{\lambda} = \frac{g_{\lambda}!}{a_{\lambda}!(g_{\lambda} - a_{\lambda})},$$

here, g_{λ} is the degeneracy number. For Boson,

$$W_{\lambda} = \frac{(g_{\lambda} + a_{\lambda-1})!}{a_{\lambda}!(g_{\lambda} - 1)!}$$

Substitute W respectively

$$Z_{\lambda}^{(F)} = \sum_{a_{\lambda}=0}^{\infty} \frac{g_{\lambda}!}{a_{\lambda}!(g_{\lambda}-1)!} e^{-(\alpha+\beta\epsilon_{\lambda})a_{\lambda}} = (1 + e^{-\alpha-\beta\epsilon_{\lambda}})^{-g_{\lambda}} \quad (6.2)$$

$$Z_{\lambda}^{(B)} = \sum_{a_{\lambda}=0}^{\infty} \frac{(g_{\lambda}+a_{\lambda}-1)!}{a_{\lambda}!(g_{\lambda}-1)!} e^{-(\alpha+\beta\epsilon_{\lambda})a_{\lambda}} = (1 - e^{-\alpha-\beta\epsilon_{\lambda}})^{-g_{\lambda}} \quad (6.3)$$

Combine $Z_{\lambda}^{(F)}$ and $Z_{\lambda}^{(B)}$ together,

$$Z_G = \prod_{\lambda} Z_{\lambda} = \prod_{\lambda} (1 \pm e^{-\alpha-\beta\epsilon_{\lambda}})^{\pm g_{\lambda}}$$

$$\ln Z_G = \pm \sum_{\lambda} g_{\lambda} \ln(1 \pm e^{-\alpha-\beta\epsilon_{\lambda}})$$

Now, calculating the average distribution (assume that ξ is a given energy level)

$$\begin{aligned} \bar{a}_{\xi} &= \sum_N \sum_n a_{\xi} \rho_{N\xi} = \frac{1}{Z_G} \sum_{G_{\xi}} a_{\xi} W_{\xi} e^{-(\alpha+\beta\epsilon_{\xi})a_{\xi}} = \frac{1}{Z_{\xi}} \sum_{a_{\xi}} a_{\xi} W_{\xi} e^{-(\alpha+\beta\epsilon_{\xi})a_{\xi}} \\ &= -\frac{1}{Z_{\xi}} \frac{\partial}{\partial \alpha} Z_{\xi} = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln Z_{\xi} = -\frac{\partial}{\partial \alpha} (\pm g_{\xi} \ln(1 \pm e^{-\alpha-\beta\epsilon_{\xi}})) = \frac{g_3}{e^{\beta(\epsilon_{\xi}-\mu)\pm 1}} \end{aligned}$$

6.2 The Symmetry of Quantum Statistic & Wave Function

For example, a wave function contains N -particle

$$\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$$

If $\mathbf{r}_i \leftrightarrow \mathbf{r}_j$, then

$$|\psi(\dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots)|^2 = |\psi(\dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_i, \dots)|^2$$

then

$$\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \dots) = e^{i\alpha_{12}} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$$

For Fermion, due to paul's principle, $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) = 0$.

$$\lim_{\mathbf{r}_2 \rightarrow \mathbf{r}_1} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots) = 0$$

and $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) = -\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \dots)$. Since $e^{i\pi} = -1$, then $\alpha_{12} = \pi \pm 2n\pi$.

For Boson,

$$\lim_{\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}_2} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) = \lim_{\mathbf{r}_2 \rightarrow \mathbf{r}_1} \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \dots) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1, \dots) \neq 0$$

then we have $\alpha_{12} = \pm 2n\pi$.

In 3D space, rotate the particle \mathbf{r}_2 rotate around \mathbf{r}_1 has no topo barrier. $e^{i\phi} = e^{i2\pi n}$. If n is odd, then it's Fermion; or it is Boson.

In the space's dimension greater or equal than 3, only exist Bose or Fermi statistic.

6.3 Anyon (任意子), Braid Group (辫子群)

$\tau \in (0, \beta)$, then

$$\rho(x, x'; t) = \int_{(x)}^{(x')} Dx e^{-i \int_0^\infty dt \mathcal{L}}$$

where D means integral by all the paths.

In 3D space, path 1 is equivalent to path 2, since it could transform between two paths without break by the propagator; but when the paths are limited with in 2D space, it could not transform from path 1 to path 2 continuously. Now,

$$Dx \rightarrow \sum_{\alpha} \varphi_{\alpha} Dx_{\alpha}$$

where α is used to label the 有可相互连续互变的等价 in 2D space.. Since the integral is not related to the length of the path, φ_{α} is a phase factor $e^{i\theta}$, in which $|\varphi_{\alpha}| = 1$.

If there are N particles in a 2D space, that is

$$R^{2N} = \{\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N\} = M_N(\text{多连通})$$

and there many paths that form different 等价类 $\{\alpha\}$.

For N particles, the process of braiding form group. $B_M(\mathbb{R}^2)$: braid group, for example (2D) [!Figure]

$$(a) \quad x_i x_{i+1} = \sigma_i \quad (b) \quad \sigma_i \sigma_{i+1} \sigma_i = \sigma_{i+1} \sigma_i \sigma_{i+1}. \quad (c) \quad x_{i+1} x_i = \sigma_i^{-1}.$$

then, $\sigma_i \sigma_i^{-1} = 1$. and $\sigma_i \sigma_k = \sigma_k \sigma_i$, where $k \neq i \pm 1$. also 3D. [!Figure] (1) – (3) are the relation that a braid group needs to satisfy.

Non-abelian group.

The expression of Braid group:

$$\varphi_{\theta}(\sigma_i) = e^{-i\theta}, \quad (0 \leq \theta < 2\pi)$$

(a) $\theta = 0$, identity rep \rightarrow Boson

(b) $\theta = \pi$, Z_L rep \rightarrow Fermion

(c) $\theta = \text{rational}$ \rightarrow Fractional statistics Anyon.

Exchange: $r_i r_{i+1}$, rotate: $r_i r_{i+1} r_i$, then move $r_{i+1} r_i$. That is

$$\varphi_{\theta}(\sigma_i^{\pm 1}) = e^{\mp i\theta} = e^{-i\frac{\theta}{\pi}(\pm\pi)} = \exp\left[-i\frac{\theta}{\pi} \sum_{l < j} \Delta\phi_{lj}\right] \quad (6.4)$$

where, only $\Delta\phi_{i,i+1} = \pm\pi$, and $\Delta\phi_{lj} = 0$.

For normal α ,

$$\varphi_{\theta}(\alpha) = \exp\left(-i\frac{\theta}{\pi} \int dt \frac{d}{dt} \sum_{i < j} \phi_{ij}\right) \quad (6.5)$$

(? extra factor $\sum_\alpha \varphi_\alpha D\mathcal{L}$) For the original propagator,

$$K(r't'; rt) = \int Dr \exp \left\{ i \int_t^{t'} dt \left(\mathcal{L} - \frac{\theta}{\pi} \frac{d}{dt} \sum_{i < j} \phi_{ij} \right) \right\}$$

then

$$\psi(r't') = \int Dr K^{(0)}(r't', rt) \psi(r, t) \quad (6.6)$$

Now, define

$$\tilde{\psi}(rt) = \exp \left\{ -i \frac{\theta}{\pi} \int_r^{r^0} d\left(\sum_{i < j} \phi_{ij}\right) \right\} \psi(r, t) \quad (6.7)$$

where r^0 is some ref point. After considering braiding

$$\tilde{\psi}(r't') = \int Dr K(r't', rt) \tilde{\psi}(rt) \quad (6.8)$$

$$\tilde{\psi}(r, t) = \prod_{i < j} \frac{(z_i - z_j)^{\theta/\pi}}{|z_i - z_j|^{\theta/\pi}} \psi(r, t) = \prod_{i < j} (z_i - z_j)^{\theta/\pi} f(\theta, t) \quad (6.9)$$

where $f(\theta)$ is the exchange pair. If the two particles exchanged, then it will lead to a factor

$$(-1)^{\theta/\pi} = e^{i\frac{\theta}{\pi}\pi} = e^{i\theta}$$

that is a phase of $\exp(i\frac{\theta}{\pi} \arg(z_i - z_j))$.

6.3.1 Non-Abelian Statistics

If the wave function is s order degeneracy at a certain energy level, then for

$$\{\psi_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \dots, \psi_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)\}$$

if we switch $\mathbf{r}_i \leftrightarrow \mathbf{r}_j$, it will lead

$$\psi_a(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum B_{ab} \psi_b(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N)$$

where B_{ab} is a matrix. Write it into matrix equation form

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_s \end{pmatrix}_{r_j, r_i} = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & \cdots & B_{1s} \\ B_{21} & B_{22} & \cdots & B_{2s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{s1} & B_{s2} & \cdots & B_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_s \end{pmatrix}_{r_i, r_j} \quad (6.10)$$

obviously, $B_{ij}B_{jk} \neq B_{jk}B_{ij}$, which is the non-Abelian representation. of braid group. Tops Quan Computational

6.4 1D Statistics: Interaction Corresponding

For N particles with G states, how to promote Bose or Fermi Statistics.

$$W_B = \frac{[G + N - 1]!}{N!(G - 1)!}, \quad (6.11)$$

$$W_F = \frac{G!}{N!(G - 1)!}, \quad (6.12)$$

$$(6.13)$$

when $0 \leq s \leq 1$,

$$W_s = \frac{[G + (N - 1)(1 - S)]!}{N![G - SN - (1 - S)]!}$$

For a set of N : $\{N_x\}$, existing α to satisfy

$$W = \prod_{\alpha} \frac{[G_{\alpha} + N_{\alpha} - 1 - \sum_{\beta \neq \alpha} S_{\alpha\beta}(N_{\alpha} - \delta_{\alpha\beta})]!}{N_{\alpha}![G_{\alpha} - 1 - \sum_{\beta} S_{\alpha\beta}(N_{\alpha} - \delta_{\alpha})]!}, \quad (6.14)$$

let $S_{\alpha} = s\delta_{\alpha\beta}$,

i $S = 0$

$$W_B = \prod_{\alpha} \frac{(G_{\alpha} + N_{\alpha} - 1)!}{N_{\alpha}(G_{\alpha} - 1)} \quad (6.15)$$

ii $S = 1$

$$W_F = \prod_{\alpha} \frac{G_{\alpha}!}{N_{\alpha}!(G_{\alpha} - 1)!} \quad (6.16)$$

Example 6.4.1. δ -interaction Boson (Yang-Yang). For 1D, the Hamiltonian is

$$H = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2C \sum_{i < j} \delta(x_i - x_j), \quad c \geq 0$$

Apply the Periodic Boundary Conditions, we can have the strict solution. Due to the translation conservation, apply the Fourier transformation

$$E = \sum_n K_i^2$$

while the continuous limitation

$$S_{\alpha\beta} \rightarrow S(k, k') = \delta(k - k') + \frac{1}{2\pi} \frac{d}{dk} \theta(k - k')$$

that is

$$\frac{d\theta(k - k')}{dk} = - \frac{2C}{C^2 + (k - k')^2}$$

where $\theta(k) = -2 \tan^{-1}(k/c)$.

(a) When $C \rightarrow \infty$, $\theta' = 0$, $S(k, k') = \delta(k - k')$.

(b) When $C \rightarrow 0$, then it's ideal boson.

Example 6.4.2 (Calogero-Sutherland model).

$$H = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} + \sum_{i < j} \lambda(\lambda - 1) \frac{\pi^2}{L^2} \sin\left(\frac{\pi}{L} \frac{x_i - x_j}{L}\right)^{-2}$$

when $L \rightarrow \infty$, the last term becomes $\lambda(\lambda - 1)/(x_i - x_j)^2$.

$$S(k, k') = \lambda\delta(k - k') = \delta(k - k') + (\lambda - 1)\delta(k - k')$$

when $\lambda = \frac{1}{2}$, it becomes a semion; when $\lambda = 2$, it becomes dual semion.

$$\epsilon(k) = \begin{cases} (k^2 - k_F^2)/\lambda, & |k| < k_F, \\ k^2 - k_F^2, & |k| > k_F \end{cases} \quad (6.17)$$

Now, the partition function becomes

$$Z_G = \prod_k \left(1 + e^{-\epsilon(k, T)/T} \right) \quad (6.18)$$

CHAPTER 7 Phase Transition, Critical Phenomenon & Renormalized Group

7.1 Categories of Phase transitions

- (a) 1 order: At the phase transition point, the chemical potential of the two phases are equal, but the partial derivation is not equal, that is

$$\mu^a - \mu^b = 0, \quad \text{and} \quad \rho_a \neq \rho_B \left(= \frac{\partial N}{\partial V}\right), S^a - S^b = -\left(\frac{\partial \mu^a}{\partial T}\right)_P + \left(\frac{\partial \mu^b}{\partial T}\right)_P \neq 0. \quad (7.1)$$

- (b) 2 order: $\Delta\mu = 0$, $\Delta S = 0$, $\Delta\rho = 0$. But the heat capacity $\frac{\partial^2 \mu}{\partial T^2}$, expansion factor $\frac{\partial^2 \mu}{\partial T \partial \beta}$, and the compression factor $\frac{\partial^2 \mu}{\partial p^2}$ are not continuous. $\Delta C_p \neq 0$, $\Delta\lambda$, $\Delta k \neq 0$

- (c) 3 order: BEC is advanced (without $K - T$ phane transition, 1 order or ∞ order)

7.2 Landau 2 order phase transition theory

描述相变：序参量，对称性破缺

序参量：用于区分两个相不同的物理量。例如：磁性物质中，有顺磁（磁化强度 $M = 0$ ），铁磁（磁化强度 $M \neq 0$ ）。

$$M = \sum (-1)^i s_i$$

[!Figure] 顺磁 [!Figure] 铁磁 \rightarrow SU(2) Conservatioin.

随 $T \downarrow$ 的相变，叫自发对称破缺。

自发破缺和序参量

- (a) 固液相变，平移不变性用 DLRO 参数表示。
- (b) 液体-液晶：转动对称性，密度的各向异性。
- (c) 超导 - Normal Metal: 基态粒子数守恒。序参量：|电子对 (Copper pair) 波函数|^2。
- (d) Boson 超流： $k = 0$ 粒子数守恒 \rightarrow ODLRO。
- (e) 二元合金固体结构相变：晶体点群 $\frac{W_1-W_2}{W_1+W_2}$

Definition 7.2.1 (序参量). 序参量概念也用到一级相变。

气 - 液相变：一级相变， $\rho_{\text{liquid}} - \rho_{\text{gas}} = 0$ 。

外磁场中的超导 - NM 相变 |超导波函数|^2

理想波色紫超流：三级相变. $k = 0$, 波色紫密度。

7.2.1 Gingbang-Landau

The Gibbs free energy of Superconductor, as a function of SC order parameter ψ .

At the critical point

$$g_s(\psi = 0) = g_n$$

and

$$g_s(\psi) = g_n + A|\psi|^2 + \frac{B}{2}|\psi|^4 + \dots$$

when $T < T_c$, $g_s < g_n$, and $A(T) < 0$ ($A(T_c) = 0$). then, around T_c

$$A(T) = (T - T_c) \left(\frac{\partial A}{\partial T} \right)_{T=T_c}$$

while $B = \text{Const}$, $B(T) = B(T_c) = B_c$.

$$\frac{dg_s(\psi)}{d\psi} = 0, \quad A + B_c|\psi|^2 = 0$$

then we have $|\psi|^2 = -A/B_c$, $g_s = g_n - A^2/2B_c$. On the other hand,

$$g_n - g_s = \mu_0 H_c^2(T)/2$$

around T_c ,

$$H_c^2(T) = \frac{A^2}{\mu_0 B_c} = \frac{(T_c - T)}{\mu_0 B_c} \left(\frac{\partial A}{\partial T} \right)_{T=T_c}, \quad H_c \propto T_c - T$$

In Landau's theory, GL: $|\psi|^2 = n_s$ should has a space distribution

$$g_s = g_n + A|\psi|^2 + \frac{B}{2}|\psi|^4 + \frac{1}{2n^*} | -i\hbar\nabla\psi |^2$$

while ψ is the pairing function. the second term becomes

$$| (i\hbar\nabla - e^* \mathbf{A})\psi |$$

where $e^* = 2e$.

$$\frac{\delta G_s}{\delta \varphi^\alpha} = 0 \Rightarrow \begin{cases} A\psi + B|\psi|^2\psi - \frac{\hbar^2}{2m^*} D^2\psi = 0 \\ \hat{n} \cdot D\psi = 0, \end{cases}$$

Consider weak field $|\mathbf{A}\psi| \gg |\Delta\psi|$. Then ignore \mathbf{A} , $\psi_0 = \sqrt{|A|/B}$. $\psi \sim \psi_0$, $f = \frac{\psi}{\hbar}\psi$, $f^* = f$. then we have

$$-\frac{\hbar^2}{2m_c^* A} \nabla^2 f + f - f^3 = 0.$$

To summarize

$$\begin{cases} \xi^2 \frac{d^2 f}{d\xi^2} + f - f^3 = 0 \\ f(0) = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial z}|_{z \rightarrow 0} = 0 \\ f'(\infty) = 1, \quad \left(\frac{\partial f}{\partial z} \right)_{z \rightarrow \infty} = 1. \end{cases} \quad (7.2)$$

$$\int_{\infty}^z dx \xi^2 \left(\frac{df}{dz} \right) \frac{d}{dz} \left(\frac{df}{dz} \right) = \int_{\infty}^z dz \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{4} f^4 - \frac{1}{2} f^2 \right)$$

Expand it

$$\frac{1}{2} \xi^2 \left(\frac{df}{dz} \right)^2 = \frac{1}{4} f^4 - \frac{1}{2} f^2 + \frac{1}{4} = \frac{1}{2} (1 - f^2)^2$$

Since $\frac{df}{dz} > 0$,

$$\frac{df}{dz} = \frac{1 - f^2}{\sqrt{2}\xi(T)}, \quad f = \operatorname{th} \frac{z}{\sqrt{2}\xi(T)}$$

where

$$\xi(T) = \frac{\hbar}{[2m^2(T_c - T) \frac{\partial A}{\partial T_c}]^{1/2}} \rightarrow \infty, \quad T \rightarrow T_c$$

The coherent long wave divergent at the critical point.

7.3 Critical Phenomenon and Critical Index

At critical point, $\xi \propto (T_c - T)^{-1/2}$.

Physics parameters behave the dependence of the power function of ΔT at the critical point, it's the so-called critical phenomenon. The power exponents are the critical exponents. $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu, \eta$ stands for different physics parameters.

Since f is the function of $\epsilon = \frac{T-T_c}{T_c}$, that is

$$f(\epsilon) = \epsilon^\lambda (1 + B\epsilon^\lambda), \quad \lambda > 0$$

$\lambda = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln f(\epsilon)}{\ln \epsilon}$ is the critical exponent.

(a) β : The order parameter, which is decided with the change of temperature. $M(T) \propto (T - T_C)^\beta$

- Superconductivity: $|\psi| \propto (T - T_c)^{1/2}$
- Gas & liquid phase transition: $\Delta\rho \propto (T_c - T)^\beta$, $T \rightarrow T_c^-, p = p_c$. The order parameter $\sim |T - T_c|^\beta$.

(b) The flatness of critical isotherms δ

$$H = M^\delta \operatorname{sgn}(M) \quad (T \rightarrow T_c, H \rightarrow 0)$$

while

$$(p - p_c) \sim |\rho - \rho_c|^\delta \operatorname{sgn}(\rho - \rho_c), \quad (T = T_c, p \rightarrow p_c) \tag{7.3}$$

$$(H - H_c) \sim |\psi|^\delta \quad (T = T_c) \tag{7.4}$$

(c) χ_0, K_t, γ

$$X_0 = \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_T \Big|_{H \rightarrow 0} \text{ Suspetibility, zero field magnetic ratio}$$

$$X_0 \sim (T - T_c)^{-\gamma}$$

$$K_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial \beta} \right)_T \text{ is isotherm compress ratio}$$

$$K_T \sim (T - T_c)^\gamma, (T \rightarrow T_c, p \rightarrow p_c)$$

$$\left. \frac{\partial \text{Order parameter}}{\partial \text{Extra field}} \right|_{\text{Extra field} \rightarrow 0} \sim (T - T_c)^{-\gamma}$$

is so-called zero-field response.

(d) Heat capacity α

- Magnetic: $C_H \sim (T - T_c)^{-\alpha}, H \rightarrow 0$
- Liquid: $C_V \sim (T - T_c)^{-\alpha}, T \rightarrow T_c, p = p_c$

(e) Correspond length ν $A(\mathbf{r}, t), B(\mathbf{r}, t)$

$$\langle (A(\mathbf{r}, t) - \langle A \rangle)(B(\mathbf{r}, t) - \langle B \rangle) \rangle$$

is called the correspond function between A and B .

$$\langle (S_i - \langle S_i \rangle)(S_j - \langle S_j \rangle) \rangle$$

$$A = B, \mathbf{r} = \mathbf{r}', t = t'$$

$$G(r, t) = \langle (A(\mathbf{r}, t) - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2(\mathbf{r}, t) \rangle - \langle A \rangle^2$$

is called raise and fall.

MFA: $G(r) \sim \frac{1}{r} e^{-r/\xi}$, ξ is called the correspond length. At the critical point, $\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}$.

$$f = \text{th} \frac{\delta}{\sqrt{2}\xi(T)}, f - 1 \sim e^{-\frac{\gamma}{\sqrt{2}\xi}}$$

For superconduct G-L equation, $\xi \propto |T - T_c|^{-1/2}$, $\nu = 1/2$.

But MF estimation some times has difference from the experient result.

(f) Correspond function

$$G(r) \sim r^{-d+2-\eta}, d = \text{space dimesions}$$

it should be a power law. After taking the Fourier transformation,

$$G(k) \sim k^{\eta-2}$$

- These critical exponents can be measured in experiments.
- Since the raises and falls around the critical point is large, it will take longer time to reach equilibrium (临界慢化)
- The accuracy of the measure is not good (P. 480, Lin).

These critical exponents have the relations: scaling law (标度律).

$$\alpha + 2\beta - \gamma = 2 \quad (7.5)$$

$$\gamma = \beta(\delta - 1) \quad (7.6)$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (7.7)$$

$$\nu d = 2 - \alpha \quad (7.8)$$

There are $6 - 4 = 2$ independent variables. 这些关系与具体的微观细节无关，具有一定的普适性（普适性假设）。

The critical behaviors of the system is determined by two variables: One is the dimension of space d , and the dimension of the order parameter n . If $d = n$, the critical phenomena are included in the same 普适类.

The order parameters of a system can be real number, complex number, or vector. If it's 实数, then $n = 1$; if it's complex number, then $n = 2$. For 3D space vector, $n = 3$.

- $n = 1$, 气液相变密度差二元合金中, 占位率差.
- $n = 2$, XY model, wave functions in superflow and superconduct.
- $n = 3$, Heisenberg model

The physics behind 普适性: The correspond length will be infinity at the critical point.

7.4 Quantum Phase Transition

Quantum Phase Transition is at the temperature of $T = 0$, the different phases of the system occur phase transition due to the change of some parameter.

For a finite system, assume $H(g)$ is Hamiltonian, g is coupling constant. Usually, $E(g)$ is the smooth function of g , means that no phase transition.

Sometimes

$$H = H_0 + gH,$$

where $[H_0, H_1] = 0$. Then, H_0, H_1 can be diagnosed at the same time, and they have the common eigenfunction

$$E_n = E_n^{(0)} + gE_n^{(1)}$$

$$E_0 = E_0^{(0)} - gE_0^{(1)}, E_1 = E_1^{(0)} - gE_1^{(1)}. \text{ At } g = g_c, E_0(g_c) = E_1(g_c), g_c = \frac{E_1^{(0)} - E_0^{(0)}}{E_0^{(1)} - E_1^{(1)}}.$$

$$E_1 = 1 + g3, E_0 = 1 + g(-2) \Rightarrow g_c = -\frac{1}{5}$$

Since $[H_0, H_1] \neq 0$. For infinite lattice system, will have the second condition,

1. Simple level crossing: 1st level phase transform
2. The opened g^a is infinite near to zero, then quantum phase transformation will take place. The correction function will have difference on 定性 before and after phase transition.

The quantum phase transition take place at the energy gap $\Delta \rightarrow 0$, or the 元激态 on the basis state.

$$\Delta \sim J|q - q_c|^{Z\nu}$$

- (a) $k_B T < \Delta$. quantum fluctuation will stronger than the heat fluctuation. Quantum critical
- (b) $k_B T > \Delta$. quantum fluctuation will weaker than the heat fluctuation.

7.5 Ising Model

Hamiltonian

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z - B \sum_i S_i^z$$

where $S_i^z = \pm \frac{1}{2}\hbar$, $S_i^z \rightarrow \sigma_i = \pm 1$

7.5.1 Average field approximation

Hamiltonian

$$H = - \sum_i \sigma_i (B = J \sum_{\delta} S_{i+\delta})$$

Replace $\sigma_{i+\delta}$ with $\bar{\sigma} = \langle \sigma_{i+\delta} \rangle$, $\sum_{\delta} \bar{\sigma} = z\bar{\sigma}$. Now,

$$H_{MF} = - \sum_i (B + \bar{h}) \sigma_i$$

where $\bar{h} = zJ\bar{\sigma}$. Then

$$\begin{aligned} Z_{\parallel} &= \sum_{\sigma_1} \cdots \sum_{\sigma_N} \exp \left[\sum_i \beta(B + \bar{h}) \sigma_i \right] = \sum_{\sigma_1} \exp [\beta(B + \bar{h}) \sigma_1] \sum_{\sigma_2} \exp [\beta(B + \bar{h}) \sigma_2] \\ &= \prod_i \left(\sum_{\sigma_i} \exp \beta(B + \bar{h}) \sigma_i \right) = \prod_i [\exp \beta(B + \bar{h}) - \exp [-\beta(B + \bar{h})]] = \left[2 \operatorname{ch} \left(\frac{B + \bar{h}}{k_B T} \right) \right]^N \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned} F &= -k_B T \ln Z_N = -N k_B T \left\{ \ln z + \ln \operatorname{ch} \left[\frac{B}{k_B T} + \frac{zJ}{k_B T} \bar{\sigma} \right] \right\} \\ M &= N\bar{\sigma} = -\frac{\partial F}{\partial B} = N \operatorname{th} \left(\frac{B}{k_B T} + \frac{zJ}{k_B T} \bar{\sigma} \right) \end{aligned}$$

then we can obtain the expression of σ (it's the 自洽方程 of σ).

- If $B = 0$, then $\bar{\sigma} = \text{th}\left(\frac{ZJ}{k_B T}\bar{\sigma}\right) = \text{th}\left(\frac{T_c}{T}\bar{\sigma}\right)$, where $T_c = \frac{ZJ}{k_B}$. Denote $y = \text{th}\left(\frac{T_c}{T}\bar{\sigma}\right)$, $u' = \bar{\sigma}$. Then we can plot $y(\bar{\sigma})$: linear; Also $T > T_c$ and $T < T_c$. $\bar{\sigma} = 0$ or $\pm\sigma_0$.

In another way, $H(-\sigma_i) = H(\sigma_i)$, means Z_2 has the symmetry, leads to 自发破缺.

$$\sigma_0 = \sigma_0(T), T \sim T_C^-, \bar{\sigma}_0 \sim 0.$$

$$\text{th} \frac{T_c}{T} \bar{\sigma} \approx \frac{T_c}{T} \bar{\sigma} - \frac{1}{3} \left(\frac{T_c}{T} \bar{\sigma} \right)^3 = \bar{\sigma}$$

then we obtain $\bar{\sigma} = \sqrt{3} \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^{1/2}$, and $M = N\bar{\sigma} \sim (T_c - T)^{1/2}$.

$$C_B = \begin{cases} 0, & T \rightarrow T_c^+ \\ 3Nk_B T_c, & T \rightarrow T_c^- \end{cases}$$

Now $M \sim (T - T_c)^{-1}B$, $\chi = \frac{\partial M}{\partial B} \sim (T - T_c)^{-1}$, $M(T_c, B) \sim B^{1/3}$. $\beta = \frac{1}{2}$, $\alpha = 0$, $\gamma = 1$, $\delta = 3$, $T_c = \frac{zJ}{k_B}$, it's finite.

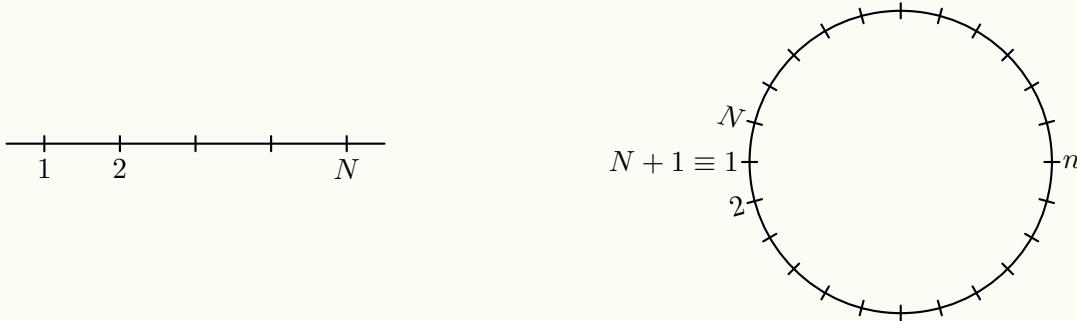
- If $B \neq 0$, then ...

7.5.2 The exact solution of 1D Ising model

The Hamiltonian

$$H = -J \sum_n \sigma_n \sigma_{n+1} - h \sum_n \sigma_n$$

with a 1D chain, or a circle (Periodic Boundary Condition $N + 1 \equiv 1$)



The partition function is

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \exp\{K \sum_n \sigma_n \sigma_{n+1}\} \exp\{B \sum_n \sigma_n\} \\ &= \sum_{\{\sigma_n\}} \exp\{B\sigma_1\} \delta_{\sigma_1 \sigma'_1} \exp\{K\sigma'_1 \sigma_2\} \exp\{B\sigma_2\} \delta_{\sigma_2 \sigma'_2} \exp\{K\sigma'_2 \sigma_3\} \cdots \exp\{B\sigma_N\} \delta_{\sigma_N \sigma'_N} \exp\{K\sigma'_N \sigma_1\} \end{aligned} \quad (7.9)$$

where $K = J/kT$, and $B = h/kT$. We define $(V_1)_{\sigma_i \sigma_j} = \exp(K\sigma_i \sigma_j)$, $\sigma_i = \pm 1$, $\sigma_j = \pm 1$ stands for two directions of spins $|\uparrow\rangle$ and $|\downarrow\rangle$. Conduct a 2×2 matrix. Also for $(v_2)_{\sigma_i \sigma_j} = \exp(B\sigma_i) \delta_{\sigma_i \sigma_j}$. The matrix can be expressed as

$$V_1 = \begin{pmatrix} e^K & e^{-K} \\ e^{-K} & e^K \end{pmatrix}, \quad \text{and} \quad V_2 = \begin{pmatrix} e^B & 0 \\ 0 & e^{-B} \end{pmatrix} \quad (7.10)$$

so, we can express Z in terms of the elements of matrices

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{\sigma_n\}} (V_2)_{\sigma_1 \sigma'_1} (V_1)_{\sigma'_1 \sigma_2} \cdots (V_2)_{\sigma_N \sigma'_N} (V_1)_{\sigma'_N \sigma_1} \\ &= \text{Tr}(V_2 V_1 \cdots V_2 V_1) = \text{Tr}(V_2 V_1)^N = \text{Tr}(V_2 V_1^{1/2} V_1^{1/2})^N = \text{Tr}(V_1^{1/2} V_2 V_1^{1/2})^N = \text{Tr } V^N \end{aligned} \quad (7.11)$$

where

$$V = \begin{pmatrix} e^{K+B} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-B} \end{pmatrix} = e^{K+B} I + e^{-K} \sigma_x \quad (7.12)$$

The eigenfunction

$$\det(V - \lambda) = 0, \lambda_{\pm} e^K \operatorname{ch} B \pm \sqrt{e^{2K} \operatorname{sh}^2 B + e^{-2K}} \quad (7.13)$$

Then, the trace to V^N is

$$\text{Tr}(V^N) = \text{Tr} \left[\begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}^N \right] = \lambda_+^N + \lambda_-^N = \lambda_+^N [1 + (\lambda^-/\lambda_+)^N] \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \lambda_+^N \quad (7.14)$$

From the expansion of λ_+ , we have

$$f = \frac{F}{N} = -\frac{1}{\beta^N} \ln Z = -\beta^{-1} \ln \lambda_+, \quad M \propto -\frac{\partial f}{\partial h} = \beta^{-1} \frac{\partial \ln \lambda_+}{\beta^{-1} \partial B} = \operatorname{sh} B (\operatorname{sh}^2 B + e^{-4K})^{1/2} \xrightarrow[T>0]{B \rightarrow 0} 0 \quad (7.15)$$

So, at a finite temperature, there's no phase transition, and the mean field $T_c = 2J/k_B$. In summary,

$$T = 0, \quad M = \frac{\operatorname{sh} B}{\operatorname{sh} B = 1}, \quad T_c = 0 \quad (7.16)$$

7.5.3 2D Ising Model

For 2D Ising model, $h = 0$ have exact solution. Now the matrix

$$V = \begin{pmatrix} e^K & e^{-K} \\ e^{-K} & e^K \end{pmatrix} = e^K I + e^{-K} \sigma_x = e^K (I + e^{-2K} \sigma_x) \quad (7.17)$$

we can define $\operatorname{th} a = u p e^{-2K}$. Then

$$\exp(a \sigma_x) \left(= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (a \sigma_x)^n \right) = I \operatorname{ch} a + \sigma_x \operatorname{sh} a$$

Then, we can define

$$V = A \exp(a \sigma_x) = A \operatorname{ch} a (I + \operatorname{th} a \sigma_x) = A \operatorname{ch} a (I + e^{-2k} \sigma_x)$$

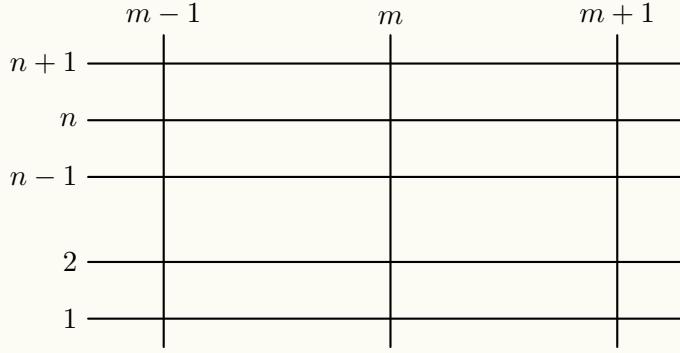
And A can be expressed as

$$A = \frac{1}{\operatorname{ch} a \sqrt{\operatorname{th} a}} = \frac{1}{\sqrt{\operatorname{ch} a \operatorname{sh} a}} = \sqrt{\frac{2}{\operatorname{sh} 2a}}$$

Since

$$\operatorname{sh} 2a \operatorname{sh} 2k = 2 \operatorname{sh} a \operatorname{ch} a \left(\frac{1}{\operatorname{th} a} - \operatorname{th} a \right) = 2(\operatorname{ch}^2 a - \operatorname{sh}^2 a) = 2, \quad \text{then} \quad A = \sqrt{\operatorname{sh} 2k}, F = \sqrt{\operatorname{sh} 2k} \exp(a \sigma_x)$$

We can draw the 2D lattice: $j = (1, 2), (2, 3), \dots, (N, 1)$.



Consider fixed the m -th column, $V \rightarrow V(m, j) = \sqrt{\sinh 2k_1} \exp(a\sigma_j^{x(m)})$; The Ising model for this column is

$$H = -J \sum_{m,n} \sigma_{mn} \sigma_{m,n+1} - J_2 \sum_{m,n} \sigma_{mn} \sigma_{m+1,n}, \quad (7.18)$$

$$Z = \sum_{\{\sigma_{m,n}\}} \exp \left(\underbrace{K_1 \sum_{mn} \sigma_{mn} \sigma_{m,n+1}}_{\prod_j V_1(j,m)} + K_2 \sum_{mn} \sigma_m \sigma_n \sigma_{m+1,n} \right) \quad (7.19)$$

and we can define $V_2(m)$

$$V_2(m) \equiv e^{K_2 \sum_j \sigma_{m,j} \sigma_{m+1,j}} V(m) = (\sinh 2k_1)^{N/2} e^{K_1 \sum_j \sigma_j^{x(m)}} \quad (7.20)$$

In terms of trace

$$Z = \text{Tr}(V_2^{1/2} V_1 V_2^{1/2})^M = \text{Tr } V^M,$$

where V_2 and V_1 are $2M \times 2M$ matrices, and

$$\{\sigma_i^a, \sigma_j^b\} = \delta^{ab}, \quad [\sigma_i^a, \sigma_j^b]_{i \neq j} = 0$$

To make it behaves as fermion, we shall

$$c_j = \exp \left(\pi i \sum_{l=1}^{j-1} \sigma_{l+} \sigma_{l-} \right) \sigma_j^- \quad (7.21)$$

$$c_j^+ = \exp \left(\pi i \sum_{l=1}^{j-1} \sigma_{l+} \sigma_{l-} \right) \sigma_j^+ \quad (7.22)$$

where $\sigma_i^\pm = \sigma_i^x \pm i\sigma_i^y$. Then we have

$$\{c_j^+, c_{j'}^-\} = \delta_{jj'}, \quad c_j^\dagger c_j = \sigma_j^+ \sigma_j^- \quad (7.23)$$

which is so-called Jordan-Wigner Transmission. To inverse, we have

$$\sigma_{j+} = \exp \left(i\pi \sum_{l=1}^{j-1} c_l^\dagger c_l \right) c_j^\dagger, \quad \sigma_j^- = \exp \left(i\pi \sum_{l=1}^{j-1} c_l^\dagger c_l \right) c_j \quad (7.24)$$

We make a transformation in V_1 , and V_2

$$(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \rightarrow (\sigma'_x, \sigma'_y, \sigma'_z) = (-\sigma_z, \sigma_y, \sigma_x) \quad (7.25)$$

i.e., $\sigma_x \sigma_y = i \sigma_z \rightarrow \sigma'_x \sigma'_y = i \sigma'_z$. Then,

$$V_1 = (\operatorname{sh} 2K_1)^{M/2} \exp \left[-2K_1 \sum_j \left(\sigma_{j+} \sigma_{j-} - \frac{1}{2} \right) \right] = (\operatorname{sh} 2k_1)^{M/2} \exp \left[-2K_1 \sum_j \left(c_j^\dagger c_j - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (7.26)$$

In V_2 , make the transformation $\sigma_z \rightarrow \sigma_x = \sigma_+ - \sigma_-$, Then

$$V_2 = \exp \left\{ K_2 \sum_{j=1}^{M-1} (c_j^\dagger - c_j)(c_{j+1}^\dagger + c_{j+1}) - (-1)^{\hat{n}} (c_M^\dagger - c_M)(c_1^\dagger - c_1) \right\} \quad (7.27)$$

where $\hat{n} = \sum_{l=1}^M c_l^\dagger c_l$. Now,

$$\frac{F}{N} = -\beta^{-1} \left[\ln(2 \operatorname{sh} 2K_1)^{1/2} + \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \epsilon_q dq \right] \quad (7.28)$$

where

$$\cos \epsilon_q = \operatorname{ch} 2K_2 \operatorname{ch} 2a - \operatorname{sh} 2K_2 \operatorname{sh} 2a \cos q$$

Since $\operatorname{sh} 2a = \operatorname{sh} 2K_2$ is fixed, then $J_1 = J_2$. The critical temperature now satisfies

$$\frac{k_B T_c}{J} \approx 2.7 \neq 0 \quad (7.29)$$

The heat capacity ratio

$$C \propto \ln \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right|, \quad (7.30)$$

$$M \propto \begin{cases} (1 - T/T_c)^{1/8}, & T < T_c, \\ 0, & T > T_c, \end{cases} \quad (7.31)$$

$$g(r) \sim \begin{cases} (T - T_c)^{1/4} \frac{e^{-r/3}}{(r/3)^{1/2}}, & T > T_c, \\ (T_c - T)^{1/4} \frac{e^{-2r/3}}{(r/3)^{1/2}}, & T < T_c, \end{cases} \quad (7.32)$$

$$\chi \sim |t|^{-7/4}, \quad t = (T - T_c)/T_c \quad \xi \sim (T - T_c)^{-1}. \quad (7.33)$$

To compare with the exact solution,

Exact Solution	$\alpha = 0$ (\ln)	$\beta = 1/8$	$\gamma = 7/4$	$\nu = 1$	$\eta = 1/4$	$\delta = 15$
MF	$\alpha = 0$ (discontinuation)	$\beta = 1/2$	$\gamma = 1$	no ν	no η	$\delta = 3$

7.5.4 1D + 1D dimensional quantum Ising model

Which is so-called the Horizontal field Ising model, in a chain. The Hamiltonian is

$$H = -K \sum_n \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z - \mathbf{h} \cdot \sum_n \boldsymbol{\sigma}_n \quad (7.34)$$

where $\mathbf{h} = (h_x, 0, 0)$, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$. Obviously, $[\sigma^z, \sigma^x] \neq 0$. We shall prove that *1D + 1D quantum Ising model is equivalent to 2D Ising model*.

Proof. Starting from the 0D + 1D single spin model is equivalent to 1D Ising model

$$Z_{1D} \longleftrightarrow \text{Tr } e^{-H_Q/kT}, \quad H_Q = -h_x \sigma_x$$

and M site lattice (K_1).

$$V = V_1 = e^{K_1} (1 + e^{-2K_1} \sigma^x) = \sqrt{\frac{M}{\beta h_x}} \left(1 + \frac{h_x \beta}{M}\right) \quad (7.35)$$

$$V^M = \left(\frac{M}{\beta h_x}\right)^{M/2} \left(1 + \frac{h_x \beta}{M} \sigma^x\right)^M = \left(\frac{M}{\beta h_x}\right)^{M/2} (1 - \Delta\tau H_Q)^{\beta/\Delta\tau} \xrightarrow{\Delta\tau \rightarrow 0} \left(\frac{M}{\beta h_x}\right)^{M/2} e^{-\beta H_Q} \quad (7.36)$$

where $\Delta\tau = \beta/M$. When $M \rightarrow \infty$,

$$Z_{1D} = \text{Tr } V^M = \text{Tr } e^{-\beta H_Q} \quad (7.37)$$

For 2D Ising model, the n -th chain

$$V_n(j) = \sqrt{\frac{M}{\beta h_x}} \left(1 + \frac{h_x \beta}{M} \sigma_n^x\right), \quad V_n^M = \left(\frac{M}{\beta h_x}\right)^{M/2} e^{-\beta h_Q(n)} \quad (7.38)$$

Concerning the couple between chains,

$$\begin{aligned} \exp\left(K_i \sum_{m,n} \sigma_{m,n}^z \sigma_{m,m-1}^z\right) &= \prod_m \exp\left(K_2 \sum_n \sigma_{m,n}^z \sigma_{m,n+1}^\delta\right) \\ &\approx \exp\left(\frac{K_2}{\Delta\tau} \beta \sum_n \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z\right) \equiv \exp(\beta K \sum_n \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z) \end{aligned}$$

So, we obtain the Horizontal field 2D Ising model

$$H_{2D} = \left(-K \sum_n \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z - h_x \sum_n \sigma_n^x\right) \quad (7.39)$$

Now, back to the proof. We have $h\Delta\tau = e^{-2K_2}$, $K\Delta\tau \equiv K_\tau$. At the critical point, $\text{sh } 2K_x \text{ sh } 2K_\tau = 1$, or $\frac{2K\Delta\tau}{2h\Delta\tau} = 1$, then we have $K = h$.

$$\begin{cases} K = h, & \text{QCP} \\ K > h, & \text{FM} \\ K < h, & \text{Quantum disorder} \end{cases} \quad (7.40)$$

The Quantum 1 + 1 Ising model (such as 2D) Lagrangian is

$$\psi \bar{\psi} + \bar{\psi} \partial \bar{\psi} \quad (7.41)$$

which is very simple, where $\partial = \partial_x - i \partial_y$, $\bar{\partial} = \partial_x + i \partial_y$, and $\bar{\partial}\psi = 0$, $\partial\bar{\psi} = 0$. \square

7.6 Renormalization Group

Basic Point

- (a) 作“粗粒化”尺度变换，RG is a “half-group” (No inverse element)，找出 RG 规律.
- (b) Determine the “fixed-points”，find the fixed-points that concerning to the critial points.
- (c) Linearization the RG transformation, determine the critial index.

7.6.1 Real space RG

For the Spin model: d -space dim. Treat the integral l^d spins as a spin, i.e., for $l = 2, d = 2$,

$$\sigma : \begin{bmatrix} \uparrow & \uparrow \\ \uparrow & \uparrow \end{bmatrix} \implies \sigma' : \uparrow$$

$\sigma \rightarrow \sigma' = \pm 1$. Then the previous N sites becomes current $N = l^{-d}N$ sites.

For the spins, let $l = 2, d = 2$.

$$\left(\begin{bmatrix} \uparrow \uparrow \\ \downarrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow \\ \downarrow \uparrow \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \uparrow \downarrow \\ \downarrow \uparrow \\ \uparrow \uparrow \\ \downarrow \downarrow \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \downarrow \downarrow \\ \uparrow \uparrow \\ \uparrow \downarrow \\ \downarrow \uparrow \end{bmatrix} \right)$$

At the beginning, $N = 24$, then $N' = 2^{-2}N = 24/4 = 6$.

$$\begin{cases} \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} & \sigma' = 1 \\ \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & -1 \end{bmatrix} & \sigma' = -1 \end{cases}$$

Using the decimation (消元法)

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp[-\beta H_N(\sigma_i)] \quad (7.42)$$

to let spins' degrees of freedom on the the $N - N'$ sites summed, then

$$Z = \sum_{\{\sigma'_i\}} \exp[-\beta H_{N'}(\sigma_i)] = Z \quad (7.43)$$

Assume H_N is a 1D Ising model. $i = 1, 2, \dots, N = 1, 3, 5, \dots, 2, 4, \dots, 6$. Then sum all the odd blocks. If the free energies at the critial point are equal in two systems,

$$N' f^{(s)}(t', h') = N f^{(s)}(t, h), \quad N' = N l^{-d}$$

where $t = (T - T_c)/T_c$, and h is the external field.

$$f^{(5)}(t, h) = l^{-d} f^{(5)}(t, h)$$

where t, t', h, h' are all small. So the linear part

$$t' = l^{y_t} t, \quad h' = l^{y_h} h$$

According to Scaling assumption, f is not sensitive to scaling. f should be a function of the following variables that have no relation l

$$\frac{h'}{|t'|^{y_h/y_t}} = \frac{h}{|t|^{y_h/y_t}} = \frac{h}{|t|^\Delta}$$

At the same time, to cancel l^{-d} , $f^{(s)}$ should have the expression

$$f^{(s)}(t', h') = |t'|^{d/y_t} \tilde{f}(h/|t|^\Delta) = l^{-d} |t'|^{d/y_t} \tilde{f}(h/|t|^\Delta) = l^{-d} |l^{y_t} t|^{d/y_t} \tilde{f}(h/|t|^\Delta) = |t|^{d/y_t} \tilde{f}(h/|t|^\Delta)$$

If these can be achieved, then

$$\begin{aligned} C_n &= \frac{\partial^2 f^{(s)}}{\partial t^2} \sim |t|^{-(2-d/y_t)} \Rightarrow \alpha = 2 - \frac{d}{y_t} \\ \frac{M}{N} &= \frac{\partial f^{(s)}}{\partial h} = |t|^{d/y_t} |t|^{-\Delta} \frac{d}{d(h/|t|^\Delta)} \tilde{f}(h/|t|^\Delta) \sim |t|^{d/y_t - \Delta} \\ \frac{\partial M}{\partial H} &= \frac{\partial^2 f^{(s)}}{\partial h^2} \sim |t|^{d/y_t - 2\Delta} \end{aligned}$$

where $\beta = \frac{(d-y_h)}{y_t} = 2 - \alpha - \Delta$, $\gamma = \frac{2y_h - d}{y_t} = -(2\alpha - 2\Delta)$, $\gamma = \beta(\delta - 1)$, $\delta = \frac{\Delta}{\beta} = y_h/(\alpha - y_h)$, $\gamma = \beta(\delta - 1)$. The correlation length $\xi' = l^{-1}\xi$. We also want

$$\xi \sim |t|^{-\nu}, \quad \xi' \sim |t'|^{-\nu}, \quad l^{-1} = (\xi'/\xi) = (t'/t)^{-\nu}, \quad \nu y_t = 1, \quad \nu = 1/y_t$$

Then, $d \cdot \nu = d/y_t = 2 - \alpha$. The Green function

$$\begin{aligned} g(r') &= \langle \sigma'(\mathbf{r}'_1) \sigma'(\mathbf{r}'_2) \rangle \sim r'^{-(d+2-\eta)}, \\ g(r) &= \langle \sigma(\mathbf{r}_1) \sigma(\mathbf{r}_2) \rangle \sim r^{-(d+2-\eta)} \end{aligned}$$

So, $\sigma'(\mathbf{r}') = l^{(d+2-\eta)/2} \sigma(\mathbf{r})$, $\gamma = (1 - \eta)\nu$, $\eta = d + 2 - 2y_h$, $\sigma'(\mathbf{r}') = l^{y_h} \sigma(\mathbf{r})$, i.e., σ and h has the same rescaling.

7.6.2 Examples: 1D Ising model

Example 7.6.1 (Exponents (Exact result in Pathria's book)).

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[\sum_{i=1}^N \left(K_0 + K \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{B}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right) \right]$$

where $K_0 = 0$, $K = \beta J$, $B = \beta h$. Then the exponent

$$\exp[\dots] = \prod_{j=1}^{N/2} \exp[2K_0 + K(\sigma_{2j-1}\sigma_{2j} + \sigma_{2j}\sigma_{2j+1}) + \frac{1}{2}B(\sigma_{2j-1} + 2\sigma_{2j} + \sigma_{2j+1})]$$

where $\sigma_{2j} = \pm 1$. Then sum over σ_{2j}

$$\begin{aligned} &\prod_{j=1}^{N/2} \left\{ \exp \left[2K_0 + K(\sigma_{2j-1} + \sigma_{2j+1}) + \frac{1}{2}B(\sigma_{2j-1} + \sigma_{2j+1} + 2) \right] + \exp \left[2K_0 - K(\sigma_{2j} + \sigma_{2j+1}) + \frac{1}{2}B(\sigma_{2j-1} + \sigma_{2j+1} + 2) \right] \right\} \\ &= \prod_{j=1}^{N/2} \exp \left[2K_0 + \frac{1}{2}B(\sigma_{2j-1} + \sigma_{2j+1}) \right] \cdot 2 \operatorname{ch}(K(\sigma_{2j-1} + \sigma_{2j+1}) + 3) \end{aligned}$$

Do the transformation $\sigma_{2j+1}, j = 0, 1, 2, \dots \rightarrow \sigma'_j$.

$$Z = \sum_{\{\sigma'_j\}} \prod_{j=1}^{N/2} \exp(2K_2) 2 \operatorname{ch}(K(\sigma'_j + \sigma'_{j+1}) + B) \exp\left[\frac{1}{2}B(\sigma'_j + \sigma'_{j+1})\right]$$

If we require Z is still Ising model, then

$$Z = \sum_{\{\sigma'_j\}} \exp\left\{ \sum_{j=1}^{N/2} \left[K'_0 + K' \sigma'_j \sigma'_{j+1} + \frac{1}{2} B' (\sigma'_j + \sigma'_{j+1}) \right] \right\}$$

What are K'_0 , K' , and B' ?

(a) $\sigma'_j = \sigma'_{j+1} = 1$

$$\exp(K'_0 + K' + B') = \exp(2K_0 + B) 2 \operatorname{ch}(2K + B)$$

(b) $\sigma'_j = \sigma'_{j+1} = -1$

$$\exp(K'_0 + K' - B') = \exp(2K_0 - B) 2 \operatorname{ch}(-2K + B)$$

(c) $\sigma'_j = \sigma'_{j+1} = \pm 1$

$$\exp(K'_0 - K') = \exp(2K_0) 2 \operatorname{ch} B$$

Define $\exp(K'_0) = \alpha$, $\exp K' = y$, $\exp B' = z$. Then,

$$\begin{aligned} xyz &= 2 \exp(2K_0 + B) \operatorname{ch}(2K + B) \\ xy/2 &= 2 \exp(2K_0 - B) \operatorname{ch}(-2K + B) \\ x/2 &= 2 \exp(2K_0) \operatorname{ch} B \\ e^{K'_0} &= x = 2 e^{2K_0} [\operatorname{ch}(2K + B) \operatorname{ch}(2K - B) \operatorname{ch}^2 B]^{1/4} \\ e^{K'} &= y = [\operatorname{ch}(2K + B) \operatorname{ch}(2K - B) / \operatorname{ch}^2 B]^{1/4}, \\ e^{B'} &= z = e^B [\operatorname{ch}(2K + B) / \operatorname{ch}(2K - B)]^{1/2} \end{aligned}$$

Starting at

$$Z_N(K, B) = e^{N' K'_0} Z_{N'}(K', B')$$

where $K_0 = 0$.

$$K' = \frac{1}{4} \ln [\operatorname{ch}(2K + B) \operatorname{ch}(2K - B)] - \frac{1}{2} \ln \operatorname{ch} B \equiv R_K(K, B), \quad (7.44)$$

$$B' = B + \frac{1}{2} \ln [\operatorname{ch}(2K + B) / \operatorname{ch}(2K - B)] \equiv R_B(K, B) \quad (7.45)$$

which is so-called RG equations.

At the fixed points

$$R_K(K^*, B) = K^*, \quad R_B(K^*, B^*) = B^*$$

When $K^* = 0$, for any B , it is fixed point. The zero-interaction or $T \rightarrow \infty$. For another, $K^* \rightarrow \infty$, $B^* = 0$. Let $h = 0$, then $T \rightarrow 0$.

Around the fixed point of $T \rightarrow 0$,

$$\begin{aligned} K' &= \frac{1}{2} \ln \operatorname{ch} 2K \approx \frac{1}{2} \ln e^{2K}/2 = K - \frac{1}{2} \ln 2, \\ B' &\approx B + \frac{1}{2} \ln e^{2B} = 2B \end{aligned}$$

Define $t = \exp(-\beta K)$, for $p > 0$. Then $t^* = 0$, $t' = 2^{p/2}t$. So, $l = 2$, $y_t = p/2$, $B' = 2B$, $y_h = 1$, $\alpha = 2 - 2/p$, $\beta = 0$, $\gamma = 2/p$, $\delta = \infty$, $\eta = 1$.

For normal situation, we can expand linearly at the fixed point to get the Linearization RG. For n coupling constants, apply decimation

$$N' = l^{-d}N, \quad \xi' = l^{-1}\xi, \quad l = 1,$$

For the vector \mathbf{K}

$$\mathbf{K}' = R_l(\mathbf{K}), \quad \mathbf{k}^{(n)} = R_l(\mathbf{K}^{(n-1)}) = \dots = R_l^n(\mathbf{K}^{(0)})$$

when $n = 0$, $\mathbf{K}^{(0)} = \mathbf{K}$. Singular part of free energy per site

$$f_s^{(n)} = l^{nd} f_s^{(0)}$$

Now, the fixed point

$$R_l(\mathbf{K}^*) = \mathbf{K}^*, \quad \xi(K^*) = l^{-1}\xi(K^*)$$

then $\xi(\mathbf{K}^*) = 0$, or ∞ . $P_\xi \sim \hbar \rightarrow P_\xi \rightarrow \infty$.

- $\xi(\mathbf{K}^*) = 0$, $P - \xi \rightarrow \infty$, is so-called “UV” fixed point, high energy.
- $\xi(\mathbf{K}^*) = \infty$, $P - \xi \rightarrow 0$, is so-called “inferred” fixed point, low energy.

Around K^* ,

$$K = K^* + \delta K, \quad K' = K^* + \delta K' = R_l(K^* + \delta K), \quad \delta K' = R_l(K^* + \delta K) - K^* \quad (7.46)$$

Since δK and $\delta k'$ are small,

$$\delta K'_a = \left(\frac{dR_l}{dK'} \Big|_{K'=K^*} \right)_{ab}, \quad \delta K_b = (A_l^*)_{ab} \delta K_b$$

where A_l^* is the matrix that linearized from R_l^* . We can diagonalize A_l^* , then get the eigenvalues λ_i , and the eigenstates ϕ_i

$$\delta K = \sum_i u_i \phi_i, \quad \delta L' = \sum_i u_i A_l^* \phi_i = \sum_i u_i \lambda_i \phi_i = \sum_i u'_i \phi_i$$

In a series of transformations, we have

$$u_i^{(n)} = \lambda_i^n u_i^{(0)}$$

- (a) If $\lambda_i > 1$, then $u_i \uparrow a = n$ gets more important. We call u_i is relevant variabl. $\delta K'$ get more and more, and K' gets far away from K^* , then K^* is unstable fixed point.
- (b) If $\lambda < 1$, then u_i is irrelevant variable, K^* is stable fixed point.
- (c) If $\lambda = 1$, then marginae variable logarithmic.

7.7 Numerical Renormalized Group & DMRG

7.7.1 Momentum space renormalization

For point-particle

$$[x, p] \sim \hbar, \quad (7.47)$$

when $p \rightarrow \infty$, then $\lambda \propto \frac{1}{p}$, i.e., *UV radiation*. The divergency (Singularity) need to be excluded¹, then an offsetting term will be added for renormalization.

In momentum space, the “scaling” invariance ($\xi = 0, \xi \rightarrow \infty$). The fixed point of $\xi = 0$ ($p \rightarrow \infty$, the fixed point of UV).

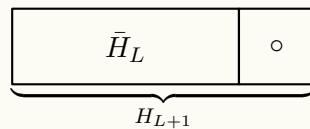
For the condensed matter, since $a = \text{finite}$, there is a “natural” cut-off, so we do not care about UV, but the infrared divergence ($p \sim \frac{1}{L}$), i.e., we consider the infrared fixed point $\xi \rightarrow \infty$.

7.7.2 Wilson’s N.R.G.

The basic concept of RG is, keep the states around the *fixed point*, i.e., integrate or sum to “cancel” the unimportant states.

In the condensed matter, the important states include 1. the basic states, 2. low-energy excited states. Wilson

1. Exactly diagonalize the L -sites subsystems (with Hamiltonian H_L) in a lattice system, with the observable variables A_L .
2. After being exact diagonalized, take n lowest energies E_i and corresponding eigenstates ψ_i , ($i = 1, 2, \dots, m$).
3. Define $O_L = (\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_m)$, $\bar{H}_L = O_L^\dagger H_L O_L \xrightarrow{\text{diagonalization}} \begin{pmatrix} E_1 & & \\ & \ddots & \\ & & E_m \end{pmatrix}$, similarly, $\bar{A}_L = O_L^\dagger A_L O_L = (\bar{A}_{ij})_{m \times m}$.
4. Add a site, then $\bar{H}_L \rightarrow H_{L+1}$ to reconstruct the interaction between L sites and the particles on the external site.
5. Repeat the 4 steps for H_{L+1} , then $m \rightarrow Sm$.



7.7.3 Eigenstates of the $\psi_i = 1, m, L$ -site system

S. White: Enlarge the system first, and add the boundary condition to the enlarged system, which has less effect to the original system. Then, project to the original system. For non-interaction, the effect is pretty good.

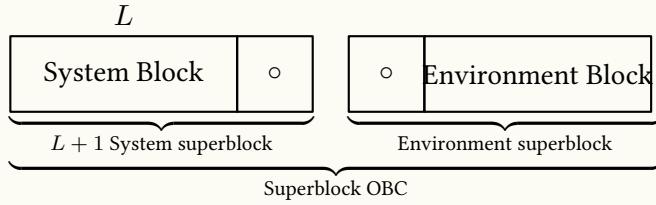
¹Normalization in QFT (actually, we consider QED).

But for the system with interaction, the result of the projection is

$$|\Psi_{Sb}\rangle \rightarrow |\Psi_L^{(1)}\rangle, \quad \text{multiple numbers}$$

$$\rightarrow |\Psi_L^{(2)}\rangle,$$

and $|\Psi_L^{(-)}\rangle$ is the most proper one. When executing the calculation,



- (a) Construct a basic state number and a superblock which needs exceed m but also small enough for exact diagonalization.
- (b) Exactly diagnose the superblock, and take the lowest eigenstate (m)
- (c) These states use system Sb basic state $|i\rangle$ and $C Sb |j\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} \psi_{ij} |i\rangle |j\rangle$$

then project to the reduced density matrix of the sysbm Sb

$$\rho_{ii'} = \sum_{j(\text{environment})} |\psi\rangle \langle \psi|$$

where $\text{Tr } \rho = 1$, then we can diagonalize ρ , the eigenvalues $W_\alpha \geq 0$, and $\sum_\alpha w_\alpha = 1$, and the eigenstates $|u^\alpha\rangle$.

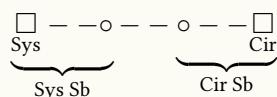
- (d) If $\alpha = 1, \dots, s$, then
 - i. If $s \leq m$, then keep all the states;
 - ii. If $s > m$, them keep the n maximum states of w^α in the s states.

Example 7.7.1. 1D spin $1/2$ AFM Heisenberg model

$$H = \sum_i \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1}, \quad \text{let } m = S, S_{\text{tot}}^z = 0$$

the so-called antiferromagnetic model.

- (a) $L = 4$, the Superblock



contains B_L, S_L, S_R, B_R respectively in the figure, and

$$\begin{aligned} H_{B_L} &= H_{S_L} = H_{S_R} = H_{B_R} = 0 \\ S_{B_L}^z &= S_{S_L}^z = S_{S_R}^z = S_{B_L}^z = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} \\ S_{B_L}^+ &= S_{S_L}^+ = S_{S_R}^+ = S_{B_L}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ S_{B_L}^- &= \dots = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

The 4 blocks, to keep $S_{\text{tot}}^z = 0$, there are 6 states

$$\left(\begin{array}{c} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \end{array} \right)$$

then, the Hamiltonian

$$\hat{H} = \mathbf{S}_{B_L} \cdot \mathbf{S}_{S_L} + \mathbf{S}_{S_L} \cdot \mathbf{S}_{S_R} + \mathbf{S}_{S_R} \cdot \mathbf{S}_{B_R} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & -\frac{3}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

The eigenvector

$$|\psi\rangle = (0.149429, -0.557678, 0.408248, -0.557678, -0.149427)^T = \psi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} + \dots$$

and the density matrix element

$$\rho_{i_1, i_2, i'_1, i'_2} = \sum_{j_1 j_2} \psi_{i_1 i_2 j_1 j_2} \psi_{j_1 j_2 i'_1 i'_2}$$

from the basis

$$\{|i_1, i_2\rangle\} = \{(1/2, 1/2), (1/2, -1/2), (-1/2, 1/2), (-1/2, -1/2)\}$$

the density matrix is

$$\rho = \begin{pmatrix} -0.022329 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.477671 & 0.455342 & 0 \\ 0 & 0.455342 & -0.477671 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0.022329 \end{pmatrix}.$$

Diagonalize ρ

$$W = (0.022329, 0.933013, 0.022329, 0.022329)$$

$$u^1 = (1, 0, 0, 0)^\top, u^2 = (0, \sqrt{2}/2, -\sqrt{2}/2, 0)^\top, u^3 = (0, \sqrt{2}/2, \sqrt{2}/2, 0)^\top, u^4 = (0, 0, 0, 1)^\top$$

$S = 4 \times 5$ matrix.

(b) $L = 2$.

7.8 K-T Phase Transition

The spin on a 2D plane

$$\mathbf{S} = (S_x, S_y), \quad \text{and} \quad \mathcal{H} = -J' \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -\underbrace{J' S^2}_{J} \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \quad (7.48)$$

i.e., $X - Y$ model.



The partition function

$$Z = \text{Tr } e^{-\beta H} = \int_0^{2\pi} \prod_i \frac{d\theta_i}{2\pi} e^{-\beta H(\theta_i)} \xrightarrow{T \gg J/k_B} \int_0^{2\pi} \prod_i \frac{d\theta_i}{2\pi} \prod_{\langle ij \rangle} (1 + \beta J \cos(\theta_i - \theta_j) + \mathcal{O}(\beta J)^2) \quad (7.49)$$

Therefore

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_1 \rangle &= S^2 \int_0^{2\pi} \prod_i \frac{d\theta}{2\pi} \prod_{\langle ij \rangle} (1 + \beta J \cos(\theta_i - \theta_j)) \cos(\theta_0 - \theta_1) \sim \left(\frac{\beta J}{2}\right)^{|\mathbf{r}|} \\ &= \exp\left(-\ln \left| \left(\frac{2}{\beta J}\right)^{|\mathbf{r}|} \right| \right) \equiv \exp\left(-\frac{|\mathbf{r}|}{\xi}\right) \end{aligned} \quad (7.50)$$

where $\xi^{-1} = \ln \frac{2}{\beta J}$. The exponential state stands for the disorder. This is so-called the *High-temperature expansion*.

For *Low-temperature expansion*, $\beta J \geq 1$. It should near a ferromagnetic state, so $\theta_i - \theta_j \ll 1$, $\cos(\theta_i - \theta_j) = 1 - \frac{1}{2}(\theta_i - \theta_j)^2$.

$$(\theta_i - \theta_{i+\delta x})^2 + (\theta_i - \theta_{i+\delta y})^2 \Rightarrow a^2(\partial_x \theta_i)^2 + a^2(\partial_y \theta_i)^2 = a^2(\nabla \theta_i)^2$$

At the continuous limit

$$\beta H = \beta E_0 - \frac{\beta J}{2} |\nabla \theta(x)|^2$$

where $\beta E_0 = 2\beta JL^2/a^2$, $\langle \cos(\theta_0 - \theta_1) \rangle \sim |\mathbf{r}/a|^{-1/(2\pi\beta J)}$. It is power law decay, we call it *Quasi-long order*, or *algebraic*, or *long range order*.

Take a peek $\frac{\delta H}{\delta \theta} = 0$, then,

$$-(\nabla \theta)^2 = \theta \nabla^2 \theta - \nabla(\theta \nabla \theta)$$

we have $\nabla^2 \theta = 0$.

(a) $\theta = \text{Const}$

(b) $\nabla\theta = \left(-\frac{y}{r^2}, \frac{x}{r^2}\right)$, $\theta = \arctan(\frac{y}{x})$, which satisfies $\oint \nabla\theta \cdot d\mathbf{r} = 2\pi$

(c) Common solution: $\oint \nabla\theta \cdot d\mathbf{l} = 2\pi n$

The Hamiltonian

$$H = -\theta \nabla^2 \theta \rightarrow (\nabla\theta)^2$$

where

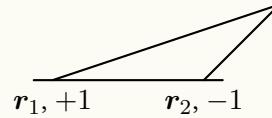
$$\nabla\theta \cdot \nabla\theta = \frac{x^2 + y^2}{r^4} = \frac{1}{r^2}$$

Then, the integral

$$\frac{J}{2} \int d^2\mathbf{r} (\nabla\theta)^2 - E_0 = \frac{J}{2} \int_a^L r dr \int_0^{2\pi} d\theta \frac{1}{r^2} = J\pi \ln \frac{L}{a}$$

This kind of solution is a high-energy excitation at $T = 0$.

Consider a pair of vertices: $\theta_1 - \theta_2 \approx 0$, $|\mathbf{r}_{12} \rightarrow \infty|$ with finite energy.



$$\begin{aligned} E_{\text{vortex-pair}} &= \int d^2\mathbf{r} [(\nabla\theta_1)^2 + (\nabla\theta_2)^2] \approx \int_{\text{core}} d^2\mathbf{r} (\nabla\theta_1)^2 \int_{\text{core}} d^2\mathbf{r} (\nabla\theta_2)^2 \\ &= \int_a^R r dr (\nabla\theta_1)^2 d\theta + \int_a^R r dr d\theta (\nabla\theta_2)^2 = 2E_{\text{core}} + 2J\pi \ln \frac{R}{a} \end{aligned}$$

The 2D Column gas

$$F = -\frac{\partial E}{\partial R} = -\frac{1}{R}$$

At a finite temperature, a vortex's square proportion to a^2 . In a square of L^2 , there can be around L^2/a^2 positions of vortices. The entropy

$$S = \ln\left(\frac{L^2}{a^2}\right)$$

then, the free energy of a vortex is

$$F = U - TS = \left(J\pi \ln \frac{L}{a} - T \ln\left(\frac{L^2}{a^2}\right)\right) = \left(J\pi - \frac{2}{\beta}\right) \ln \frac{L}{a}$$

If $J\pi - 2/\beta < 0$, then a single vortex can escape from the vortex-pair; and take a phase transition to becomes favorable. The critical temperature $T_c = J\pi/2k_B$.

CHAPTER 8 Non-equilibrium Statistic Physics

8.1 Boltzmann integral ODE

At the equilibrium state, we have a distribution function, aka a function of the energy that independent from the time

$$f_0 = f_0(\mathbf{r}) = f_0(E) \quad (8.1)$$

which only depends on r and E .

$$f_0 = \frac{1}{e^{\beta E} \pm 1} \xrightarrow{\text{Non-equilibrium}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \quad (8.2)$$

This is the Boltzmann equation for the classical short-term interaction thin gas.

- (a) Classical: $\lambda_T \ll |\delta r|$, $\lambda_T = \frac{h}{(2\pi mk_B T)^{1/2}}$ is the high-temperature wavelength. The gas under the standard state (0°C , 1 atm). For the Argon: $n = 2.7 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, $m \approx 6.7 \times 10^{-23} \text{ g}$. Then

$$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi mk_B T}} \sim 0.17 \times 10^{-8} \text{ cm}, \quad \text{and} \quad \frac{\delta r}{\lambda_T} \approx 190.$$

- (b) Thin and Short-term force $\delta r \gg d$. Most of the gas molecules are free most time. Separate the “hit” and the “motion”: There is no motion when hitting, or there will be no hitting when moving.

$$\delta r \approx 3.3 \times 10^{-7} \text{ cm}, \quad m \sim 6.7 \times 10^{-23} \text{ g}, \quad \lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi mk_B T}} \approx 0.17 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

- (c) Three-body hitting can be omitted

Taking another simplification

- i. Omit the structure of molecules, take the rigid-sphere model to instead the Van der Waals force.
- ii. There's no relation between the velocities of two hitting molecules.

To derive the evolution of $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{v}$$

is the average number of molecules around the volume unit in the phase (\mathbf{r}, \mathbf{v}) . From $t \rightarrow t + dt$

$$\frac{1}{dt} [f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t + dt) - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)] d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{v} = \frac{\partial f}{\partial t} d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{v}$$

where $\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_d + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c$: d stands for the drift, and c stands for the collision.

8.1.1 Derivation of the drift term

Since

$$df = [f(\mathbf{r} + \dot{\mathbf{r}} dt, \mathbf{v} + d\mathbf{v}, t + dt) - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)] dt = 0$$

then,

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_d + \sum_i \left(\dot{x}_i \frac{\partial f}{\partial \dot{x}_i} + \dot{v}_i \frac{\partial f}{\partial v_i} \right) = 0$$

So, the drift term

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_d = -\mathbf{r} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{r} f - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \mathbf{v} f$$

8.1.2 Derivation of the collision term

To derive the collision term, consider the collision between two particles

$$\begin{aligned} m_1 \mathbf{v}_1 + m_2 \mathbf{v}_2 &= m_1 \mathbf{v}'_1 + m_2 \mathbf{v}'_2 \\ \frac{1}{2} m_1 v_1^2 + \frac{1}{2} m_2 v_2^2 &= \frac{1}{2} m_1 v'_1^2 + \frac{1}{2} m_2 v'_2^2 \end{aligned}$$

Since at the normal direction, $v'_{1\perp} = v_{1\perp}$. Then the bound condition

$$\mathbf{v}'_1 - \mathbf{v}_1 = \lambda_1 \mathbf{n}, \quad \text{and} \quad \mathbf{v}'_2 - \mathbf{v}_2 = \lambda_2 \mathbf{n}$$

For a given \mathbf{n} , we can solve

$$\begin{aligned} \mathbf{v}'_1 &= \mathbf{v}_1 + \frac{2m_2}{m_1 + m_2} [(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \cdot \mathbf{n}] \mathbf{n} \\ \mathbf{v}'_2 &= \mathbf{v}_2 - \frac{2m_1}{m_1 + m_2} [(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \cdot \mathbf{n}] \mathbf{n} \end{aligned}$$

Then, we have

$$\mathbf{v}'_2 - \mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1 - 2[(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \cdot \mathbf{n}] \mathbf{n}, \quad (\mathbf{v}'_2 - \mathbf{v}'_1)^2 = (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1)^2, \quad v'^2_{12} = v^2_{12}.$$

To calculate $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c$

$$f_i = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, t), \quad f'_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}'_i, t)$$

$\Delta f_1^{(t)}$ is the collision in the $d^3 \mathbf{r}$ space during the dt time. Then,

$$\left(\frac{\partial f_1}{\partial t} \right)_c dt d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{r}_1 = \Delta f_1^{(+)} - \Delta f_1^{(-)}$$

When the two molecules collide, if collide with the m_2 molecule with the centre of \mathbf{r}_2 within the volume unit of $d^3 \mathbf{r}_2$, then, the collision direction will be limited in the cubic angle $d\Omega$ with the normal vector \mathbf{n} . Then, it must be limited in a cylinder with height $v_{12} \cos \theta dt$ and with the lower square $r_{12}^2 d\Omega$. The volume of the cylinder is $r_{12}^2 d\Omega v_{12} \cos \theta dt$, where includes the number of molecules with $d^3 v_{12}$

$$(f_2 d^3 r_2) r_{12} I^2 d\Omega v_{12} \cos \theta dt$$

Multiply the number of molecules m

$$(f_1 d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{v}_1)(f_2 d^3r_2)r_{12} d\Omega v_{12} \cos \theta dt$$

equal to the number of collisions between molecules in $d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{v}_1$ and molecules in $d^3\mathbf{r}_2$ within the $d\Omega$ direction during time dt is equal to the number of collisions between molecules in $d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{v}_1$ and molecules in $d^3\mathbf{r}_2$ within the domega direction.

$\delta f_1^{(-)}$ enable the decrease of molecules within $d^3\mathbf{v}_1$: $(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) \rightarrow (\mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2)$

$$\delta f_1^{(+)} = [f'_1 f'_2 \lambda'_{12} d\Omega' d^3\mathbf{v}'_2] dt d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{v}'_1$$

with $(\mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2, -\mathbf{n}) \rightarrow (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$, and the transformation

$$d^3\mathbf{v}'_1 d^3\mathbf{v}'_2 = d^3v_1 d^3\mathbf{v}_2 \begin{vmatrix} \frac{\partial v_1}{\partial v'_1} & \frac{\partial v_2}{\partial v'_1} \\ \frac{\partial v_1}{\partial v'_2} & \frac{\partial v_2}{\partial v'_2} \end{vmatrix}.$$

Then,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c dt d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{v}_1 &= \Delta f_1^{(+)} - \Delta f_1^{(-)} = \int [(f'_1 f'_2 - f_1 f_2) d^3\mathbf{v}_2 \lambda_{12} d\Omega] dt d^3\mathbf{v}_1 d^3\mathbf{v}_1 \\ \frac{\partial f}{\partial t} - \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_d &= \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c \\ \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}}\right) + \mathbf{g} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} &= \int (f'_v f'_w - f_v f_w) \lambda d^3\omega d\Omega \end{aligned}$$

8.2 H-theorem, H-function and entropy

The Entropy

$$S = - \sum_i p_i \ln p_i \quad (8.3)$$

The H -function

$$H = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \ln f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3\mathbf{v} d^3\mathbf{r} \quad (8.4)$$

The gas at the equilibrium state

$$n = N/V$$

The Maxwell distribution

$$f = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{mv^2}{2k_B T} \right) \quad (8.5)$$

Then, the H -function becomes

$$H = \int f \left[\ln n + \frac{3}{2} \ln \frac{m}{2\pi k_B T} - \frac{mv^2}{2k_B T} \right] d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{v} \quad (8.6)$$

where the integral

$$\int f d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{v} = n, \quad \frac{1}{n} \int \frac{mv^2}{2} f d^3\mathbf{v} = \frac{3}{2} k_B T$$

The entropy of single-atom ideal gas

$$S = Nk_B \left[\ln \frac{V}{N} + \frac{3}{2} \ln T + \frac{5}{2} + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{2\pi m k_B}{h^2} \right) \right] = -k_B H + C$$

Use the Boltzmann equation to derive the H -theorem

$$\frac{dH}{dT} \leq 0 \quad (8.7)$$

The time derivative to H

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dT} &= \int \left(\frac{\partial f}{\partial t} \ln F + f \cdot \frac{1}{f} \right) d^3r d^3v = \int (1 + \ln f) \frac{\partial f}{\partial t} d^3r d^3v \\ &= - \int (1 + \ln f) \left(\mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \right) d^3r d^3v - \int (1 + \ln f) (\mathbf{q} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}}) d^3r d^3v - \int (1 + \ln f) (f_1 f_2 - f'_1 f'_2) d^3v d^3v' \Lambda d\Omega \end{aligned}$$

The first term

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\mathbf{v} f \ln f) &= \mathbf{v} (1 + \ln f) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \\ \int d^3r \nabla \cdot (\mathbf{v} f \ln f) &= \oint \oint \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v} f - \ln f) d\Sigma = 0 \end{aligned}$$

The second term $\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \mathbf{q} = 0$

$$\int \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \mathbf{q} f \ln f d^3v = \oint \oint d\mathbf{S}_v \cdot \mathbf{q} f \ln f$$

when $v \rightarrow \infty$, $f(v)|_{v \rightarrow \infty} = 0$. The third term: $1 \leftrightarrow 2$,

$$\frac{dH}{dT} = - \int (1 + \ln f_2) (f_1 f_2 - f'_1 f'_2) d^3v_1 d^3r_2 \Lambda d\omega d^3r$$

Combine and then half

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{1}{2} \int (2 + \ln(f_1 f_2)) (f_1 f_2 - f'_1 f'_2) d(\dots)$$

$v'_{1,2} \leftrightarrow v_{1,2}$, we have

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{1}{2} \int (2 + \ln(f'_2 f_1)) (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) d(\dots) = -\frac{1}{4} \underbrace{\left(\ln(f_1 f_2) - \ln(f'_1 f'_2) \right) (f_1 f_2 - f'_1 f'_2)}_{\geq 0} d(\dots)$$

Then, $\frac{dH}{dt} \leq 0$, $\frac{dS}{dt} \geq 0$. When $f_1 f_2 = f'_1 f'_2$ (Detailed equilibrium condition), they equal to zero.

8.3 Application of Boltzmann Equation

The relaxation time approximation

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c = -\frac{f - f^{(0)}}{\tau} \quad (8.8)$$

where τ is the relaxation time that tends to equilibrium, independent of \mathbf{r} . Assume f is also independent of \mathbf{r} . Without the external force,

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{f - f^{(0)}}{t}$$

Then, we have

$$\frac{d(f - f^{(0)})}{f - f^{(0)}} = -\frac{dt}{\tau},$$

$$f(\mathbf{v}) - f^{(0)}(\mathbf{v}) = [f(\mathbf{v}, 0) - f^{(0)}(\mathbf{v})] e^{-t/\tau}$$

τ is the time that required by tending to equilibrium. In the free electron gas,

$$f^{(0)}(\mathbf{p}) = \frac{1}{e^{(\epsilon(p)-\mu)/k_B T} + 1}$$

and the Fermi energy $\epsilon(p) = \frac{p^2}{2m}$.

In the unit volume, the average electron number that with in the momentum range $d^3 p$ is $2 \frac{d^3 p}{h^3} f^{(0)}$.

The Boltzmann equation

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{f - f^{(0)}}{\tau}$$

where $\mathbf{F} = -e\mathbf{E}$, i.e., the ecurent is a uniform and eternal

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0, \quad \nabla f = 0, \quad -e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{f - f^{(0)}}{\tau}$$

where $f = f^{(0)} + f^{(1)} + \dots$, and we keep the first order

$$e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \mathbf{p}} = \frac{f^{(1)}}{\tau} \quad f^{(1)} = e\tau \mathbf{E} \cdot \mathbf{v} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial E}$$

Hence,

$$f \approx f^{(0)} + e\tau \mathbf{E} \cdot \mathbf{v} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \epsilon} = f^{(0)}(\epsilon + e\tau \mathbf{E} \cdot \mathbf{v})$$

where

$$\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial \beta} = \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \epsilon} \mathbf{v}$$

The \mathbf{E} patt through dA perpendicularly, hence

$$\int J_e dt dA = e \int v_x dt dA f \frac{2 d^3 p}{h^3}$$

where

$$J_e = nev_x = \frac{2 d^3 p}{h^3} f e v_x = 2e \int v_x (f^{(0)} + f^{(1)}) \frac{d^3 p}{h^3}$$

and we have

$$v_p = \frac{k}{m}, \quad \text{and} \quad f^{(0)}(v_x) = f^{(0)}(-v_x)$$

Now, handel $d^3 p$

$$d^3 p = p^2 dp \int d\theta \sin \theta d\varphi = 2m\epsilon d(\sqrt{2m}\sqrt{\epsilon}) \cdot 4\pi = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{2} \epsilon^{1/2} d\epsilon$$

Substitute it into J_e

$$J_e = 2eEt \int v_x^2 \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \epsilon} \frac{d^3 p}{h^3} = e^2 E \tau, \quad \int v_x^2 \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \epsilon} D(\epsilon) d\epsilon$$

where

$$D(\epsilon) = 4\pi \frac{(2m)^{3/2}}{h^3} \epsilon^{1/2}$$

Finally,

$$J_e = e^2 E \int \tau \frac{v^3}{3} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial t} D(\epsilon) d\epsilon$$

Around $T \sim 0$, $f^{(0)} = \theta(\epsilon - \mu)$. Then,

$$J = \frac{2e^2 t}{3m} \mu D(\mu) E, \quad n = \int_0^\mu D(\epsilon) d\epsilon = \frac{2}{3} \mu D(\mu)$$

We can use it to calculate the conductivity,

$$J_e = \frac{ne^2 \tau}{m} E = \sigma E, \quad \text{where} \quad \sigma = \frac{ne\tau}{m}$$

The force

$$\mathbf{F} = -e\mathbf{E} - \frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad (8.9)$$

where $\mathbf{v} = (v_x, v_y)$, $v = v_x + i v_y$. The stability

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f = 0 = -\frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c$$

The derivative

$$0 = \frac{d\langle v \rangle}{dt} = -\frac{eE}{m} + i\omega_c \langle v \rangle - \frac{\langle v \rangle}{\tau}, \quad \text{where} \quad \langle v \rangle = -\frac{eE/m}{1 - i\omega_c \tau}$$

Substitute $E = E_x + iE_y$, $\omega_c = \frac{eB}{mc}$, the current density

$$\mathbf{j} = \sigma \cdot \mathbf{E} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = j_x + i j_y$$

So, we have the elements of the conductivity matrix

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{\sigma_0}{1 + \omega^2 \tau^2}, \quad \sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = -\frac{nce}{B} - \frac{\sigma_{xx}}{\omega_c \tau}$$

where $\sigma_0 = \frac{ne^2 \tau}{m}$.

8.4 Fluctuation Phenomenon: Themoral Variables

8.4.1 Regrex System

The fluctuation of energy

$$\frac{\sqrt{\langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle}}{\langle E \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}, \quad \text{and} \quad n = \frac{N}{V} \quad \text{finite} \quad (8.10)$$

are all the fluctuations corresponding the microscope variable.

8.4.2 Quasi-Themoral Theory (Smoluchowski-Einstein Method)

The theromal entropy

$$\bar{S} = k_B \ln W_{\max} \quad (\text{theromal probability}) \quad (8.11)$$

where $W_{\max} = e^{\bar{S}/k_B}$.

The differ from equilibirum

$$W = e^{S/k_B} = W_{\max} e^{(S-\bar{S})/k_B} = W_{\max} e^{\Delta S/k_B}$$

(a) For dependent system, $\Delta E = 0, \Delta V = 0$.

(b) For regrex system, $\Delta E + \Delta E_e = 0, \Delta V + \Delta V_e = 0$.

$$\begin{aligned} W_T &= W_{\max} e^{(\Delta S + \Delta S_e)/k_B} = W_{\max} e^{(\Delta S + \frac{\Delta E_e + pV_e}{T})/k_B} \\ &= W_{\max} e^{(\Delta ST - \Delta E - p\Delta V)/(k_B T)} = W_{\max} e^{-(\Delta F + p\Delta V)/(k_B T)} \end{aligned}$$

The free energy

$$\Delta F = \underbrace{\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T}_{-p} \delta V + \frac{1}{2} \underbrace{\left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2}\right)_T}_{-\partial p/\partial V} (\Delta V)^2 + \dots \quad (8.12)$$

Then,

$$W_T \approx W_{\max} \exp \left[\frac{1}{2k_B T} \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T (\Delta V)^2 \right] \quad (8.13)$$

The probability of the quasi-themoral in regrex system

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \frac{\int (\Delta A)^2 W d(\Delta A)}{\int W d(\Delta A)} \quad (8.14)$$

Example 8.4.1. Calculate $\langle (\Delta V)^2 \rangle$.

$$\begin{aligned} &\frac{\int_{-\infty}^{\infty} (\Delta V)^2 \exp \left[\frac{1}{2k_B T} \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T (\Delta V)^2 \right] d(\Delta V)}{\text{normalization factor}} \\ &= \frac{1}{\int \dots} \int_{-\infty}^{\infty} (\Delta V)^2 \frac{k_B T}{(\partial p/\partial V)_T} \frac{1}{\Delta V} d \left\{ \exp \left[\frac{1}{2k_B T} (\partial p/\partial V)_T (\Delta V)^2 \right] \right\} \\ &= \frac{1}{\int \dots} \frac{\Delta V (k_B T)}{(\partial p/\partial V)_T} \exp \left[-\frac{1}{2k_B T} \left| \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T \right| (\Delta V)^2 \right] \Big|_{-\infty}^{\infty} - k_B T \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T = -k_B T \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T \end{aligned}$$

Then, we have

$$\frac{\langle (\Delta V)^2 \rangle}{V^2} = - \frac{k_B T}{V^2} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T$$

If the mass of the system $M = \text{Const}$, i.e., $M = pV$ is fixed. Then,

$$\Delta M = \Delta \rho V + \rho \Delta V = 0 \Rightarrow \frac{\Delta \rho}{\rho} = -\frac{\Delta V}{V}, \quad \frac{\langle (\Delta \rho)^2 \rangle}{\rho^2} = \frac{\langle (\Delta V)^2 \rangle}{V^2} = -k_B T \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T$$

$\rho = N/V$, if V is fixed, then $\Delta\rho \propto \Delta N$.

$$\begin{aligned}\left\langle \left(\frac{\Delta N}{N} \right)^2 \right\rangle &= \left\langle \left(\frac{\Delta\rho}{\rho} \right)^2 \right\rangle = -\frac{k_B T}{V^2} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T \\ \Delta\rho &= \frac{\Delta N}{V} - \frac{N\Delta V}{V^2} \\ (\Delta\rho)^2 &= \left(\frac{\Delta N}{V} \right)^2 - \frac{2\Delta N\Delta V}{V^3} + \frac{N^2(\Delta V)^2}{V^4} \\ \langle (\Delta\rho)^2 \rangle &= \langle \left(\frac{\Delta N}{V} \right)^2 \rangle + \frac{N^2 \langle (\Delta V)^2 \rangle}{V^4} \\ \frac{\langle (\Delta\rho)^2 \rangle}{N^2} &= \frac{\langle (\Delta N)^2 \rangle}{N^2} + \frac{\langle (\Delta N)^2 \rangle}{N^2} = 2 \langle \left(\frac{\Delta N}{N} \right)^2 \rangle\end{aligned}$$

The critical point

$$\left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T = \left(\frac{\partial^2 p}{\partial V^2} \right)_T = 0$$

Then,

$$\begin{aligned}\Delta F &= -p\Delta V - \frac{1}{4!} \left(\frac{\partial^3 p}{\partial V^3} \right)_T (\Delta V)^4 + \dots \\ W &= W_{\max} \exp(-\alpha x^4), \quad x = \Delta V \\ \langle (\Delta V)^2 \rangle &= \frac{\int_0^\infty x^2 e^{-\alpha x^4} dx}{\int_0^\infty e^{-\alpha x^4} dx} = \frac{\Gamma(\frac{3}{4})}{\Gamma(\frac{1}{4})} \frac{1}{\sqrt{\alpha}} = 0.338 \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\end{aligned}$$

8.4.3 Vandé vars Gas

$$p_c = \frac{a}{27b^2}, \quad v_c = 3b, \quad T_c = \frac{8a}{27bR}$$

Substitute them into the ideal gas formula

$$\left(p + \frac{a}{v^2} \right) (v - b) = RT, \quad p = \frac{3RT}{3V - V_c} - \frac{9RT_c v_c}{8v^2}, \quad V = \frac{N}{N_a} \sigma, \quad N_a = 6.02 \times 10^{23}$$

Then,

$$p = \frac{3Nk_B T}{3V - V_c} - \frac{9Nk_B T_c V_c}{8V^2}$$

The derivatives

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial^3 p}{\partial V^3} \right)_T &= -\frac{486Nk_B T}{(3V - V_c)^4} + \frac{27Nk_B T_c V_c}{V^5} \\ \left(\frac{\partial^3 p}{\partial V^3} \right)_{T_c} &= -\frac{27Nk_B T_c}{8V_c^4}\end{aligned}$$

Finally, we have

$$\left(\frac{\Delta V}{V} \right)_c^2 = 0.338 \left[-\frac{V_c^4}{24kT_c} \left(\frac{\partial^3 p}{\partial V^3} \right)_c \right]^{-1/2} = 0.901/\sqrt{N}$$

Example 8.4.2 (The sky is blue (When the air is clean, not frog / haze)). The magnitude of the scatter of light

$$I \propto \frac{1}{\lambda^4} \frac{\langle (\Delta\rho)^2 \rangle}{\rho^2}$$

Example 8.4.3 (Liquid).

$$\frac{\langle I \rangle}{V} \propto \frac{1}{\lambda^4} V \left[-\frac{V^4}{24k_B T} \left(\frac{\partial^3 p}{\partial V^3} \right)_T \right]^{1/2} \propto \frac{1}{\sqrt{N}}$$

8.5 Fluctuation Phenomenon (Random External Forces, Brown Motions)

8.5.1 Langevin equation

For particles: $10^{-5} \sim 10^{-4}$ cm.

(a) For fixed external forces: Gravity, Buoyancy, Viscous Force.

(b) Random forces: 10^{-4} cm, liquid molecule density $n = 10^{22}$ cm $^{-3}$, the collisions occur 10^{22-4} /s.

For gas: $n \sim 10^{19}$, collision occurs 10^{15} s.

Fluctuation forces: the eigen time of collisions $10^{-18} \sim 10^{-15}$ s.

$$m \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2(t), \quad \mathbf{u} = \frac{d\mathbf{x}}{dt}, \quad \mathbf{u} = u_x$$

where F is the viscous force: $F_1 = -\alpha u$, $F_2 = x(t)$.

$$m\langle u \rangle = kT, \quad \frac{d^2\langle x^2 \rangle}{dt^2} + \frac{1}{\tau} \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle - \frac{2kT}{m} = 0, \quad \tau = \left(\frac{\alpha}{m} \right)^{-1}$$

Then, the solution

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2kT\tau}{m} t + C_1 e^{-t/\tau} + C_2$$

and substitute the initial condition $t = 0$, $\langle x^2 \rangle, \frac{d}{dt}\langle x^2 \rangle = 0$. Hence,

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2kT\tau^2}{m} \left[\frac{t}{\tau} - \left(1 - e^{-t/\tau} \right) \right] \tag{8.15}$$

i. If the observe time $t \ll \tau$,

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2kT\tau}{m}, \quad \left(\frac{t}{\tau} - \left(1 - 1 + \frac{t}{\tau} - \frac{1}{2} \frac{t^2}{\tau^2} \right) \right) = \frac{kT}{m} t^2 = \langle u^2 \rangle t^2$$

ii. If $t \gg \tau$, then

$$\langle x^2 \rangle \approx \frac{2kT\tau}{m} t = \frac{2kT}{\alpha} t = 2Dt \propto t$$

8.5.2 The Diffusion of Brown particles

Assume $n(x, t) dx$ is in the range of $(x, x + dx)$ at time t , introduce $f(x, t) dx$ for the Brownian particle number of the unit area perpendicular to x -axis: The probability of a particle at $t = 0$ and located at $x = 0$ to time t is transformed to $(x, x + dx)$.

$$n(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x - x', \tau) n(x', t) dx' = \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi, \tau) n(x - \xi, t) d\xi \quad (8.16)$$

where

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x, \tau) = 1, \quad \text{and} \quad f(x, \tau) = f(-x, \tau)$$

For small τ

$$n(x, t + \tau) = n(x, t) + \tau \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{2} \tau^2 \frac{\partial^2 n}{\partial t^2} + \dots \quad (8.17)$$

For small ξ

$$n(x - \xi, t) = n(x, t) - \xi \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{1}{2} \xi^2 \frac{\partial^2 n}{\partial t^2} + \dots \quad (8.18)$$

Assume when ξ is large, $n(x - \xi, t)$ is small. Then,

$$n(x, t + \tau) \approx n(x, t) + \tau \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{2} \tau^2 \frac{\partial^2 n}{\partial t^2} + \dots = \int_{-infy}^{\infty} d\xi f(\xi, \tau) \left(n(x, t) - \xi \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{1}{2} \xi^2 \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \xi^3 \xi^4 \right), \quad (8.19)$$

where $\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$, $D = \frac{\langle \xi^2 \rangle}{2\tau}$.

$$\frac{\partial}{\partial t'} n(x, t + t') - D \frac{\partial^2}{\partial x^2} n(x, t + t') = 0 \quad (8.20)$$

$$\int_{-infy}^{\infty} \left[\frac{\partial}{\partial t'} f(x - x') - D \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x - x', t') \right] n(x', t) dx' = 0 \quad (8.21)$$

So, the kernel

$$\frac{\partial f(\xi, t)}{\partial t} - D \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} f(\xi, t) = 0.$$

8.5.3 Time correlation in Brown motion

$$u(t) = g(t) e^{-t/\tau}$$

where

$$\frac{d(g e^{-t/\tau})}{dt} = -\frac{g(t) e^{-t/\tau}}{\tau} + \frac{\chi(t)}{m}$$

Then, we obtain the ODE

$$\frac{dg(t)}{dt} = e^{t/\tau} \frac{\chi(t)}{m} A(t)$$

the solution

$$[g(t) - g(0)] e^{-t/\tau} = e^{-t/\tau} \int_0^t e^{t'/\tau} A(t') dt' \quad (8.22)$$

$$u(t) = u(0) e^{-t/\tau} + e^{-t/\tau} \int_0^t e^{t'/\tau} A(t') dt' \quad (8.23)$$

$$u^2(t) = u^2(0) + 2u(0) e^{-2t/\tau} \int_0^t e^{t'/\tau} A(t') dt' + e^{2t/\tau} \int_0^t dt dt'' e^{(t'+t'')/\tau} A(t') A(t'') \quad (8.24)$$

The correlation function determines the expectation value

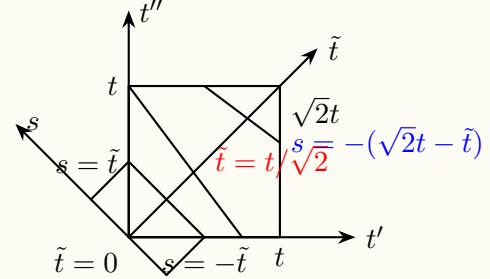
$$\langle u^2(t) \rangle = u^2(0) e^{-t/\tau} + e^{-2t/\tau} \int_0^t dt' dt'' e^{(t'+t'')/\tau} \langle A(t') A(t'') \rangle \quad (8.25)$$

Take the rotation

$$e^{(t'+t'')} \langle A(t') A(t'') \rangle \equiv e^{\sqrt{2}\tilde{t}/\tau} C(s) = \int_0^{t/\sqrt{2}} d\tilde{t} e^{\sqrt{2}\tilde{t}/\tau} \int_{-\tilde{t}}^{\tilde{t}} C(s) ds = + \int_{t/\sqrt{2}}^{\sqrt{2}t} d\tilde{t} e^{\sqrt{2}\tilde{t}/\tau} \int_{-\sqrt{2}t+\tilde{t}}^{\sqrt{2}t-\tilde{t}} C(s) ds \quad (8.26)$$

where $dt' dt'' = d\tilde{t} ds$.

$$I = \int dt' dt'' e^{\sqrt{2}\tilde{t}/\tau} C(s)$$



Brownian motion $C(s)$ Markov process

$$C(s) = C(\delta s), \quad I = \frac{Ct}{\Omega} \int_0^{\sqrt{2}t} d\tilde{t} \frac{\sqrt{2}}{2} e^{\sqrt{2}\tilde{t}/\tau} = C \frac{t}{\sqrt{2}} (e^{it/\tau} - 1)$$

Then,

$$\langle u^2(t) \rangle = u^2(0) e^{-2t/\tau} + C \frac{\tau}{\sqrt{2}} (1 - e^{-2t/\tau})$$

For $t \rightarrow \infty$, $\langle u^2(\infty) \rangle = kT/m$, $C = \frac{\sqrt{2}kT}{m\tau}$,

$$\langle u^2(t) \rangle = u^2(0) e^{-2t/\tau} + \frac{kT}{m} (1 - e^{-2t/\tau})$$

8.5.4 Fluctuation-Usage Theorem

The relation between the fluctuation of time and usage for Brownian, $\tau = (\frac{\alpha}{m})^{-1}$, so

$$\alpha = \frac{m}{\tau} = \frac{m^2}{\alpha kT} C = \frac{m^2}{\alpha kT} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \delta(t) \rangle = \frac{m^2}{\alpha kT} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle A(0) A(t) \rangle = \frac{m^2}{\alpha kT} \int_{-\infty}^{\infty} ds \langle A(t+s) A(t) \rangle$$

We can also prove the distribution coefficient

$$D = \frac{kT}{\alpha} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} du \langle u(t) u(t+s) \rangle \quad (8.27)$$

8.5.5 The themoral conductance noise and the fluctuations in voltage

In RL circuit, the KVL equation

$$L \frac{dI(t)}{dt} = -RI(t) + V(t)$$

where $V_{\text{ext}} = 0$, $\langle I(t) \rangle = 0$, $\langle V(t) \rangle = 0$. The form of Brown motation

$$I(t) \leftrightarrow u(t), \quad (8.28)$$

$$L \leftrightarrow m, \quad (8.29)$$

$$R \leftrightarrow \alpha, \quad (8.30)$$

$$V(t) \leftrightarrow \chi(t) \quad (8.31)$$

Taking the Fourier transformation

$$\tilde{V}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} V(t) e^{-i\omega t} dt$$

and

$$\langle V(t)V(t+\delta) \rangle = C\delta(s)$$

$$\frac{1}{4\pi^2} \int d\omega d\omega' \langle \tilde{V}(\omega)\tilde{V}(\omega') \rangle e^{i\omega t+i\omega'(t+s)} = C\delta(s) = C \frac{1}{2\pi} \int d\omega' e^{i\omega's}$$

Assume

$$\begin{aligned} \langle \tilde{V}(\omega)\tilde{V}(\omega') \rangle &= \langle |\tilde{V}(\omega)|^2 \rangle \delta(\omega + \omega') = \frac{1}{4\pi^2} \int d\omega d\omega' \langle |\hat{V}(\omega)|^2 \rangle e^{i\omega t+i\omega(t+s)} \delta(\omega + \omega') \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int d\omega' \underset{2\pi C \rightarrow \text{Independent from } \omega}{\langle |\tilde{V}(\omega')|^2 \rangle} e^{-i\omega's} \end{aligned} \quad (8.32)$$

The fluctuation of voltage

$$\langle V^2 \rangle = \langle V^2(t) \rangle = K(0) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{K}(\omega) d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} 4\pi \tilde{K}(\nu) d\nu$$

where $\nu = 2\pi\omega$ and

- | | |
|---|---|
| (a) $S(\nu) = 4k_B T R \propto T$: Themoral noise | (c) $\langle I^2 \rangle \neq 0$ |
| (b) $S(\nu) = 4k_B T R \propto R$: Superconduct: no noise. | (d) $S(\nu)$ is independent from ν : white noise. |

8.5.6 Shot noise

- (a) The shot of electrons is random
- (b) The time between electrons released and arrive at the positive point is short, equivalent to a sudden current.

If $n(\tau)$ is the number of released electrons in unit time around time τ , then the current $j(t - \tau)$ at time τ raised from the released electrons will get weaker until 0 when $t - \tau$ is large.

$$I(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau n(\tau) i(t - \tau)$$

and the average

$$\langle I(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \langle n \rangle i(t - \tau) = \langle n \rangle \int_{-\infty}^{\infty} i(t - \tau) d\tau = \langle n \rangle e$$

The fluctuation

$$\Delta I = I(t) - \langle I \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt [n(\tau) - \langle n \rangle] i(t - \tau) dt$$

and the square

$$\langle (\Delta I)^2 \rangle = \int d\tau d\tau' \langle \Delta n(\tau) \Delta n(\tau') \rangle i(t - \tau) i(t - \tau')$$

For shot noise,

$$\begin{aligned} \langle \Delta n(\tau) \Delta n(\tau') \rangle &\propto \delta(\tau - \tau'), \\ \langle (\Delta I)^2 \rangle &= \langle n \rangle \int_{-\infty}^{\infty} |n(\tau)|^2 d\tau = \langle n \rangle 4\pi \int_0^{\infty} |S(\omega)|^2 d\omega \approx 4\pi \langle n \rangle |S(\omega)|^2 \Delta\omega \end{aligned}$$

For a scalar, $S(\omega) = \tau$ only at a given frequency.

If $\omega t \ll 1$, $e^{-i\omega t} \approx 0$.

$$S(\omega) \approx \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} i(t) dt = \frac{e}{2\pi}$$

Then, we can measure the charge e^* of a quasi-particle.

$$\langle (\Delta I)^2 \rangle = 2\langle n \rangle e^2 \Delta\nu = 2e^* \langle I \rangle \Delta\nu^*$$

In 1981: Fractional Quantum Hall Effect $\nu = \frac{1}{3}$, $e^* = \frac{e}{3}$.

Lecture #1 Homework #1 [2025-09-02]

Problem 1.1. 总结热力学的基本概念：什么叫平衡态？写出温度、温标的定义；内能的定义；热容和比热的定义；熵的定义和物理意义。

Solution.

- (a) 平衡态：在没有外界影响的条件下，物体各部分的性质长时间不发生任何变化的状态。
- (b) 温度：衡量物体间是否热平衡的物理量称为温度。
- (c) 温标：确定温度具体数值的规则叫温标。
- (d) 内能：系统所含有的能量，但不包含因外部力场而产生的系统整体之动能与势能。
- (e) 热容：在不发生相变化和化学变化的前提下，系统与环境所交换的热与由此引起的温度变化之比称为系统的热容。即 $C_\eta = \frac{dQ_\eta}{dT}$ 称为热容，其中 η 表示不变的量。
- (f) 比热：单位质量的物质在温度变化时所吸收或释放的热量与其质量之比，即 $c = C/V$ 。
- (g) 熵：一个系统内所有元素状态的总和，物理意义：用来衡量系统的无序程度。

Problem 1.2. 什么叫物态方程？写出理想气体的物态方程。写出范德瓦尔斯气体的物态方程，并解释对理想气体物态方程修正项的物理意义。

Solution.

- (a) 物态方程：物体的物理状态由几何变量 (V, A, L) ，力学变量 (p, σ, F) ，电磁变量 (E, P, H, M) 和化学变量等描述，温度与这些状态变量之间的函数关系 $T = f(p, V, \dots)$ 称为物态方程。
- (b) 理想气体状态方程： $pV = nRT = NkT$
- (c) 范德瓦尔斯气体的物态方程： $ab(p + \frac{n^2a}{V^2})(V - nb) = nRT$ 。
 - i. 体积修正 $-nb$: 分子有固有体积，活动空间减少
 - ii. 压力修正 $+an^2/V^2$: 分子间吸引力减弱对器壁的冲击

Problem 1.3. 对 $p - V - T$ 系统，依据自变量不同，写出 4 种等价的热力学微分方程，说明各自在什么条件下适用。

Solution.

- | | |
|--|------------------------------------|
| (a) $dU = T dS - p dV$ (S, V)，适用绝热过程 | (c) $dF = -S dT - p dV$ ，适用等温等容 |
| (b) $dH = T dS + V dP$ (S, P)，适用等压过程 | (d) $dG = -S dT + V dP$ ，适用等温等压、相变 |

Problem 1.4. 解释热力学第一、二、三定理的物理意义.

Solution.

- (a) 热力学第一定律: 推广到非绝热过程, 系统从外界吸热, $Q = U_2 - U_1 - W_0$, 即能量守恒
- (b) 热力学第二定律: 熵增加原理
- (c) 热力学第三定律: 不可能通过有限步骤使物体冷却到绝对零度

Problem 1.5 (林宗涵《热力学与统计物理》1.1). 设三个函数 f, g, h 都是二独立变量 x, y 的函数, 证明:

$$\begin{array}{lll} \text{(a)} \quad \left(\frac{\partial f}{\partial g}\right)_h = 1/\left(\frac{\partial g}{\partial f}\right)_h & \text{(c)} \quad \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_f = -\frac{\partial f}{\partial x}/\frac{\partial f}{\partial y} & \text{(e)} \quad \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_g = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y}\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_g \\ \text{(b)} \quad \left(\frac{\partial f}{\partial g}\right)_x = \frac{\partial f}{\partial y}/\frac{\partial g}{\partial y} & \text{(d)} \quad \left(\frac{\partial f}{\partial g}\right)_h \left(\frac{\partial g}{\partial h}\right)_f \left(\frac{\partial h}{\partial f}\right)_g = -1 & \end{array}$$

Solution.

- (a) 对 f 取微分

$$df = \left(\frac{\partial f}{\partial g}\right)_h dg + \left(\frac{\partial f}{\partial h}\right)_g dh$$

令 $dh = 0$ 得

$$1 = \left(\frac{\partial f}{\partial g}\right)_h \left(\left(\frac{\partial g}{\partial f}\right)_h\right), \quad \left(\frac{\partial f}{\partial g}\right)_h = 1/\left(\frac{\partial g}{\partial f}\right)_h$$

- (b) $f = f(x, y(x, g))$. 由复合函数求导法则

$$\left(\frac{\partial f}{\partial g}\right)_x = \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial y}{\partial g}\right)_x = \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_x$$

这里利用了 (a) 中的结论.

- (c) $f = f(x, y)$. 令 f 的微分为 0 得

$$df = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y dx + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x dy = 0, \quad \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_f = -\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y / \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x$$

- (d) $f = f(g, h)$. 对 (c) 中结论做变量替换

$$\left(\frac{\partial h}{\partial g}\right)_f = -\left(\frac{\partial f}{\partial g}\right)_h / \left(\frac{\partial f}{\partial h}\right)_g$$

利用 (a) 中的结论得

$$\left(\frac{\partial f}{\partial g}\right)_h \left(\frac{\partial g}{\partial h}\right)_f \left(\frac{\partial h}{\partial f}\right)_g = -1$$

- (e) $f = f(x, y(x, g))$. 由复合函数求导法则

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_g = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_g$$

Problem 1.6 (林宗涵《热力学与统计物理》1.5). 有一铜块处于 0°C 和 1 atm 下, 经测定, 其膨胀系数和等温压缩系数分别为 $4.85 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$, $\kappa_\tau = 7.8 \times 10^{-7} (\text{atm})^{-1}$, α 和 κ_τ 可以近似当成常数. 今使铜块加热至 10°C , 问

- (a) 压强要增加多少才能维持铜块体积不变? (b) 若压强增加 100 atm, 铜块的体积改变多少?

Solution.

- (a) 在温度变化 dT 和压强变化 dp 范围内, 铜块体积变化

$$dV = V(\alpha dT - \kappa dp)$$

要维持铜块体积不变, 则 $dV = 0$, 即

$$dp = \frac{\alpha}{\kappa_T} dT = 621.79 \text{ atm}$$

- (b) 对体积变化公式分离变量并积分得

$$\ln \frac{V}{V_0} = \alpha \Delta T - \kappa_T \Delta p$$

令 $V = V_0 + \Delta V$, 则

$$\ln \frac{V_0 + \Delta V}{V_0} \approx \frac{\Delta V}{V_0} = \alpha \Delta T - \kappa_T \Delta p = 4.07 \times 10^{-4}$$

即铜块体积改变 $4.07 \times 10^{-2}\%$.

Problem 1.7 (林宗涵《热力学与统计物理》1.6). 已知一理想弹性丝的物态方程为

$$\mathcal{F} = bT \left(\frac{L}{L_0} - \frac{L_0^2}{L^2} \right)$$

其中 \mathcal{F} 使张力; L 使长度, L_0 使张力为零时的 L 值, L_0 只是温度 T 的函数; b 使常数. 定义 (线) 膨胀系数为

$$\alpha \equiv \frac{1}{L} \left(\frac{\partial L}{\partial T} \right)_{\mathcal{F}}$$

等温杨氏模量为

$$Y = \frac{L}{A} \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial L} \right)_T$$

其中 A 使弹性丝的横截面积. 证明:

$$(a) Y = \frac{bT}{A} \left(\frac{L}{L_0} + \frac{2L_0^2}{L^2} \right). \quad (b) \alpha = \alpha_0 - \frac{1}{T} \frac{L^3/L_0^3 - 1}{L^3/L_0^3 + 2}, \text{ 其中 } \alpha_0 = \frac{1}{L_0} \frac{dL_0}{dT}.$$

Solution.

- (a) 将 \mathcal{F} 带入 Y 即可

$$Y = \frac{L}{A} bT \left(\frac{1}{L_0} + \frac{2L_0^2}{L^3} \right) = \frac{bT}{A} \left(\frac{L}{L_0} + \frac{2L_0^2}{L^2} \right)$$

- (b) 令 $\partial \mathcal{F} / \partial T = 0$

$$0 = b \left(\frac{L}{L_0} - \frac{L_0^2}{L^2} \right) + bT \left(\frac{1}{L_0} + \frac{2L_0^2}{L^3} \right) \left(\frac{\partial L}{\partial T} \right)_{\mathcal{F}} + bT \left(-\frac{L}{L_0^2} - \frac{2L_0}{L^2} \right) \frac{dL_0}{dT}$$

得

$$\alpha = \alpha_0 = \frac{1}{T} \frac{L^3/L_0^3 - 1}{L^3/L_0^3 + 2}$$

Problem 1.8 (林宗涵《热力学与统计物理》2.2). 证明下列关系:

(a) $\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_p = -T\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_S$

(d) $\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_H = T\left(\frac{\partial V}{\partial H}\right)_p - V\left(\frac{\partial T}{\partial H}\right)_p$

(b) $\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_p = -T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_S - p$

(e) $\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_H = \frac{T}{C_p} - \frac{T^2}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial H}\right)_p$

(c) $\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_U = p\left(\frac{\partial T}{\partial U}\right)_V - T\left(\frac{\partial p}{\partial U}\right)_V$

Solution.

(a) 由热力学基本微分方程

$$dU = T dS - p dV$$

得 Maxwell 关系

$$\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_S = -\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_v = -\frac{\partial^2(S, V)}{\partial(p \partial V)} = -\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_V \left(\frac{\partial U}{\partial p}\right)_v = -\frac{1}{T} \left(\frac{\partial U}{\partial p}\right)_V$$

即

$$\left(\frac{\partial U}{\partial p}\right)_V = -T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_S$$

(b) 将热力学基本微分方程两侧对 V 取偏微分

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_p = T \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_p - p$$

已知

$$dH = T dS + V dp$$

得 Maxwell 关系

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_S = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_p$$

所以有

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_p = T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_S - p$$

(c) 将热力学基本微分方程写为

$$dS = \frac{1}{T} dU + \frac{p}{T} dV$$

由此得 Maxwell 关系

$$\left(\frac{\partial(1/T)}{\partial V}\right)_U = \left(\frac{\partial(p/T)}{\partial U}\right)_V$$

展开得

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_U = p \left(\frac{\partial T}{\partial U}\right)_V - T \left(\frac{\partial p}{\partial U}\right)_V$$

(d) 同 (iii), 使用

$$dS = \frac{1}{T} dH - \frac{V}{T} dp$$

得 Maxwell 关系

$$\left(\frac{\partial(1/T)}{\partial p}\right)_H = -\left(\frac{\partial(V/T)}{\partial H}\right)_p$$

展开得

$$\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_H = T \left(\frac{\partial V}{\partial H}\right)_p - V \left(\frac{\partial T}{\partial H}\right)_p$$

(e) 由复合函数求导法则

$$\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_H = \frac{\partial^2(T, H)}{\partial(S \partial p)} \cdot \frac{\partial^2(S, p)}{\partial(S \partial H)} = \frac{T}{C_p} + \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_s \left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_H$$

令 $dH = 0$, 得

$$0 = T dS + V dp, \quad \left(\frac{\partial p}{\partial S}\right) = -\frac{T}{V}$$

使用 Maxwell 关系

$$\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_s = \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_p = T \left(\frac{\partial V}{\partial H}\right)_p$$

将以上两式带入求导结果

$$\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_H = \frac{T}{C_p} - \frac{T^2}{V} (pdV VH)_p$$

Problem 1.9 (林宗涵《热力学与统计物理》2.3). 对 $p - V - T$ 系统, 证明

$$\frac{\kappa_T}{\kappa_S} = \frac{C_p}{C_V}$$

其中

$$\kappa_T \equiv -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T, \quad \kappa_S \equiv -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_S$$

分别代表等温与绝热压缩系数.

Solution. *Proof.*

$$\frac{C_p}{C_v} = \frac{T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p}{T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V} = \frac{\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_p \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p}{\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_V \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_V} = \left[-\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T \right] / \left[-\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_S \right] = \frac{\kappa_T}{\kappa_S} \square$$

Problem 1.10 (林宗涵《热力学与统计物理》2.5).

(a) 证明

$$\left(\frac{\partial C_V}{\partial V}\right)_T = T \left(\frac{\partial^2 p}{\partial T^2}\right)_V; \quad \left(\frac{\partial C_p}{\partial p}\right)_T = -T \left(\frac{\partial^2 V}{\partial T^2}\right)_p$$

并由此导出

$$C_V = C_{V_0} + T \int_{V_0}^V \left(\frac{\partial^2 p}{\partial T^2}\right)_V dV, \quad C_p = C_{p_0} - T \int_{p_0}^p \left(\frac{\partial^2 V}{\partial T^2}\right)_p dp.$$

其中 C_{V_0} 与 C_{p_0} 分别代表体积为 V_0 时的定容热容与压强为 p_0 时的定压热容, 它们都只是温度的函数.

(b) 根据以上 C_V, C_p 两式证明, 理想气体的 C_V 与 C_p 只是温度的函数.

(c) 证明范德瓦耳斯气体的 C_V 只是温度的函数, 与体积无关.

Solution.

(a) 将 C_V 对 V 取偏导数

$$\left(\frac{\partial C_V}{\partial V}\right)_T = T \frac{\partial^2 S}{\partial T \partial V} = T \left(\frac{\partial^2 p}{\partial T^2}\right)_V$$

则 $C_V(T, V)$ 的积分分为等容过程和等压过程

$$C_V(T, V) - C_V(T_0, V_0) = \int_{T_0}^T \left(\frac{\partial C_V}{\partial T}\right)_V dT + \int_{V_0}^V \left(\frac{\partial C_V}{\partial V}\right)_T dV$$

使用 Maxwell 关系，积分可写作

$$C_V(T, V) = C_{V_0}(T) + T \int_{V_0}^V \left(\frac{\partial^2 p}{\partial T^2}\right)_V dV.$$

同理可证

$$\left(\frac{\partial C_p}{\partial p}\right)_T = -T \left(\frac{\partial^2 V}{\partial T^2}\right)_p, \quad C_p = C_{p_0} - T \int_{p_0}^p \left(\frac{\partial^2 V}{\partial T^2}\right)_p dp.$$

(b) 由理想气体状态方程

$$pV = NRT$$

可得

$$\left(\frac{\partial^2 p}{\partial T^2}\right)_V = 0, \quad \left(\frac{\partial^2 V}{\partial T^2}\right)_p = 0.$$

带入 (a) 中结论得

$$\left(\frac{\partial C_V}{\partial V}\right)_T = 0, \quad \left(\frac{\partial C_p}{\partial p}\right)_T = 0$$

即理想气体的 C_V 与 C_p 都只是温度的函数.

(c) 由范德瓦耳斯气体的物态方程

$$\left(p + \frac{N^2 a}{V^2}\right)(V - Nb) = NRT$$

当 V 固定时，有

$$\left(\frac{\partial^2 p}{\partial T^2}\right)_V = \left(\frac{\partial C_V}{\partial V}\right)_T = 0$$

表明范德瓦耳斯气体的 C_V 只是温度的函数，与体积无关.

Problem 1.11 (林宗涵《热力学与统计物理》3.1). 利用无穷小的变动，导出下列各平衡判据（假设总粒子数不变，且 $S > 0$ ）

- | | |
|------------------------------------|------------------------------------|
| (a) 在 U 及 V 不变的情形下，平衡态的 S 极大 | (e) 在 S 及 p 不变的情形下，平衡态的 H 极小 |
| (b) 在 S 及 V 不变的情形下，平衡态的 S 极小 | (f) 在 T 及 V 不变的情形下，平衡态的 F 极小 |
| (c) 在 S 及 U 不变的情形下，平衡态的 V 极小 | (g) 在 F 及 T 不变的情形下，平衡态的 V 极小 |
| (d) 在 H 及 p 不变的情形下，平衡态的 S 极大 | (h) 在 T 及 p 不变的情形下，平衡态的 G 极小 |

Solution.

(a) 系统孤立, 内能和体积固定. 由熵增原理, 一切自发过程朝熵增方向进行, 平衡时熵取最大值.

(b) 熵和体积固定时, 由

$$dU = T dS - p dV$$

得可逆过程 $dU = 0$. 实际不可逆过程在总熵不变时内能会减少, 平衡时内能最小.

(c) 熵与内能固定, 由

$$dU = T dS - p dV$$

得 $p dV = 0$. 考虑力学稳定性, 系统会自发收缩或抵抗膨胀, 平衡时体积最小.

(d) 焓 $H = U + pV$, 压强不变时 $dH = T dS$. 固定 H, p 则 $dS = 0$, 熵判据要求平衡时熵最大.

(e) 熵与压强固定, 由

$$dH = T dS + V dp$$

得 $dH = 0$. 系统自发趋向焓更低的状态, 平衡时焓最小.

(f) 亥姆霍兹自由能 $F = U - TS$, 固定 T, V 时

$$dF = -S dT - p dV = 0$$

自发过程 $dF < 0$, 平衡时 F 最小.

(g) 固定 F, T , 由

$$dF = -S dT - p dV$$

得 $p dV = 0$. 体积稳定性要求平衡时体积最小.

(h) 吉布斯自由能

$$G = U - TS + pV$$

固定 T, p 时 $dG = 0$ (可逆). 自发过程 $dG < 0$, 平衡时 G 最小.

Lecture #2 Homework #2 [2025-09-09]

Problem 2.1. 对独立粒子体系，用排列组合公式对可区分粒子、玻色子和费米子在给定粒子数分布 $\{a_\alpha\}$ 下的量子状态数 $W(\{a_\alpha\})$.

Solution.

(a) 可区分粒子

由于粒子可区分，能级 ε_α 有 g_α 个简并量子态。将 N 个粒子分成若干组 $\{a_\alpha\}$ ，分配方式数为

$$\frac{N!}{\prod_\alpha a_\alpha!}$$

对能级 α ，每个粒子可占据 g_α 个态中的任意一个，因此有 $g_\alpha^{a_\alpha}$ 种占据方式。总方式数为

$$W = \frac{N!}{\prod_\alpha a_\alpha!} \times \prod_\alpha g_\alpha^{a_\alpha} = N! \prod_\alpha \frac{g_\alpha^{a_\alpha}}{a_\alpha!}$$

(b) 玻色子

粒子全同，每个量子态占据粒子数不限。对能级 α ：将 a_α 个全同粒子放入 g_α 个态，等价于 a_α 个粒子与 $g_\alpha - 1$ 个棒隔开不同态的排列数：

$$\frac{(a_\alpha + g_\alpha - 1)!}{a_\alpha! (g_\alpha - 1)!}$$

各能级独立，所以：

$$W = \prod_\alpha \frac{(a_\alpha + g_\alpha - 1)!}{a_\alpha! (g_\alpha - 1)!}$$

(c) 费米子

粒子全同，受泡利原理限制：每个量子态最多一个粒子，且 $a_\alpha \leq g_\alpha$ 。对能级 α ：从 g_α 个态中选择 a_α 个被占据的方式数为组合数：

$$\frac{g_\alpha!}{a_\alpha! (g_\alpha - a_\alpha)!}$$

各能级独立，所以：

$$W = \prod_\alpha \frac{g_\alpha!}{a_\alpha! (g_\alpha - a_\alpha)!}$$

Problem 2.2. 用最可几分布求出上题相应的配分函数。

Solution.

(a) 可区分粒子 (MB 统计) 由 $\ln W = \ln N! + \sum_\alpha [a_\alpha \ln g_\alpha - \ln a_\alpha!]$ 及约束变分得

$$a_\alpha = g_\alpha e^{-\alpha - \beta E_\alpha}$$

代入 $\sum a_\alpha = N$ 得 $e^{-\alpha} = N/Z_1$ ，于是

$$a_\alpha = N \frac{g_\alpha e^{-\beta E_\alpha}}{Z_1}, \quad Z_N = Z_1^N$$

(或 $Z_N = Z_1^N/N!$ 以修正吉布斯佯谬)

(b) 玻色子 (BE 统计) 由 $\ln W = \sum_{\alpha} [\ln(a_{\alpha} + g_{\alpha} - 1)! - \ln a_{\alpha}! - \ln(g_{\alpha} - 1)!]$ 变分得

$$a_{\alpha} = \frac{g_{\alpha}}{e^{\alpha+\beta E_{\alpha}} - 1}$$

令 $\alpha = -\beta\mu$, 则

$$a_{\alpha} = \frac{g_{\alpha}}{e^{\beta(E_{\alpha}-\mu)} - 1}, \quad \Xi = \prod_{\alpha} \left(1 - e^{-\beta(E_{\alpha}-\mu)}\right)^{-g_{\alpha}}$$

(c) 费米子 (FD 统计) 由 $\ln W = \sum_{\alpha} [\ln g_{\alpha}! - \ln a_{\alpha}! - \ln(g_{\alpha} - a_{\alpha})!]$ 变分得

$$a_{\alpha} = \frac{g_{\alpha}}{e^{\alpha+\beta E_{\alpha}} + 1}$$

令 $\alpha = -\beta\mu$, 则

$$a_{\alpha} = \frac{g_{\alpha}}{e^{\beta(E_{\alpha}-\mu)} + 1}, \quad \Xi = \prod_{\alpha} \left(1 + e^{-\beta(E_{\alpha}-\mu)}\right)^{g_{\alpha}}$$

Problem 2.3. 一个二能级系统, $\epsilon_1 = -\epsilon$, $\epsilon_2 = \epsilon$, 且 $g_1 = g_2 = 1$. 设有 N 个独立可区分粒子处于平衡态, 求

(a) 温度 $T \rightarrow 0$ 时系统的熵.

(b) 若“粒子”是自旋 \uparrow, \downarrow 两个态, 则 $T \rightarrow 0$ 的熵值在此时的物理意义是什么?

Solution.

(a) 单粒子配分函数 $Z_1 = e^{\beta\epsilon} + e^{-\beta\epsilon} = 2 \operatorname{ch}(\beta\epsilon)$, 系统配分函数 $Z_N = Z_1^N$. 熵

$$S = Nk[\ln(2 \operatorname{ch}(\beta\epsilon)) - \beta\epsilon \operatorname{th}(\beta\epsilon)]$$

$$\text{当 } T \rightarrow 0, \beta\epsilon \rightarrow \infty, \operatorname{th}(\beta\epsilon) \rightarrow 1, \operatorname{ch}(\beta\epsilon) \sim \frac{1}{2}e^{\beta\epsilon},$$

$$\ln(2 \operatorname{ch}(\beta\epsilon)) \rightarrow \beta\epsilon \Rightarrow S \rightarrow Nk[\beta\epsilon - \beta\epsilon] = 0$$

所以 $S(T \rightarrow 0) = 0$.

(b) 若为自旋系统, $T \rightarrow 0$ 时所有自旋处于低能态 (完全极化), 系统处于唯一基态, 微观状态数 $W = 1$, 熵为零, 符合热力学第三定律.

Problem 2.4. 论证光子气体不发生玻色 - 爱因斯坦凝聚.

Solution. 光子气体化学势 $\mu = 0$ 且 $\epsilon_{\min} = 0$, 故 μ 始终等于最低能级, 不存在随温度降低而趋近于零的过程. 同时光子数不守恒, 总粒子数由平衡条件调节, 无 BEC 所需的粒子数重新分布相变机制. 因此光子气体不发生玻色-爱因斯坦凝聚.

Problem 2.5 (林宗涵《热力学与统计物理》7.5). 计算爱因斯坦固体模型的熵.

Solution. 爱因斯坦固体模型可看作近独立子系, 每一个子系的 Maxwell-Boltzmann 分布函数为

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\epsilon_n} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(n+1/2)\hbar\omega} = \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}$$

设原子总数为 N , 则总振动自由度为 $3N$. 系统的熵为

$$S = 3Nk \left(\ln Z - \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \right) = 3Nk \left[\frac{\hbar\omega/kT}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} - \ln(1 - e^{\hbar\omega/kT}) \right]$$

Problem 2.6 (林宗涵《热力学与统计物理》7.7). 自旋为 $\hbar/2$ 的粒子处于磁场 \mathcal{H} 中, 粒子的磁矩为 μ , 磁矩与磁场方向平行或反平行所相应的能量分别为 $-\mu\mathcal{H}$ 与 $\mu\mathcal{H}$. 今设有 N 个这样的定域粒子处于磁场 \mathcal{H} 中, 整个系统处于温度为 T 的平衡态, 粒子之间的相互作用很弱, 可以忽略.

- (a) 求子系统的配分函数 Z .
- (b) 求系统的自由能 F , 熵 S , 内能 \bar{E} 和热容 $C_{\mathcal{H}}$.
- (c) 证明总磁矩的平均值为 $\bar{\mathcal{M}} = N\mu \operatorname{th}\left(\frac{\mu\mathcal{H}}{kT}\right)$.
- (d) 证明在高温弱场下, 亦即 $\frac{\mu\mathcal{H}}{kT} \ll 1$ 时: $\bar{\mathcal{M}} = \frac{N\mu^2}{kT}\mathcal{H}$; 磁化率 $\chi = \frac{\partial(\bar{\mathcal{M}}/V)}{\partial\mathcal{H}} = \frac{N\mu^2}{kT}$; 在低温强场下, 亦即 $\frac{\mu\mathcal{H}}{kT} \gg 1$ 时: $\bar{\mathcal{M}} = N\mu$; $\chi = 0$.

Solution.

- (a) 代入配分函数的定义得

$$Z = e^{\beta\mu\mathcal{H}} + e^{-\beta\mu\mathcal{H}} = 2 \operatorname{ch}(\beta\mu\mathcal{H})$$

- (b) i. 自由能 $F = -NkT \ln Z = -NkT \ln(2 \operatorname{ch}(\beta\mu\mathcal{H}))$.
ii. 熵 $S = Nk \left(\ln Z - \beta \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right) = Nk [\ln(2 \operatorname{ch}(\beta\mu\mathcal{H})) - \beta\mu\mathcal{H} \operatorname{th}(\beta\mu\mathcal{H})]$.
iii. 内能 $\bar{E} = -N \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = -N\mu\mathcal{H} \operatorname{th}(\beta\mu\mathcal{H})$.
iv. 热容 $C_{\mathcal{H}} = \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_{\mathcal{H}} = Nk \left(\frac{\mu\mathcal{H}}{kT} \right)^2 \left\{ 1 - \operatorname{th}^2 \left(\frac{\mu\mathcal{H}}{kT} \right) \right\}$.

- (c) 设原子总数为 N . 则处于平行与反平行的概率分别为

$$P_1 = \frac{N}{Z} e^{\beta\mu\mathcal{H}}, \quad P_2 = \frac{N}{Z} e^{-\beta\mu\mathcal{H}}.$$

则磁矩的期望值为

$$\bar{\mathcal{M}} = \langle \mu \rangle = P_1\mu + P_2(-\mu) = N\mu \operatorname{th}\left(\frac{\mu\mathcal{H}}{kT}\right).$$

- (d) 由于以下极限

$$\lim_{x \rightarrow 0} \operatorname{th} x = x, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \operatorname{th} x = 1, \quad \lim_{x \rightarrow 0} \operatorname{ch} x = 1, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \operatorname{ch} x = \infty,$$

所以在高温弱场、低温强场下

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \bar{\mathcal{M}} = \frac{N\mu^2}{kT}\mathcal{H}, \quad \text{and} \quad \lim_{T \rightarrow 0} \bar{\mathcal{M}} = N\mu,$$

磁导率的一般表达式

$$\chi = \frac{\partial(\bar{\mathcal{M}}/V)}{\partial\mathcal{H}} = \frac{N\mu^2}{kT} \frac{1}{\operatorname{ch}^2(\mu\mathcal{H}/kT)}$$

则在在高温弱场、低温强场下

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \chi = \frac{N\mu^2}{kT}, \quad \text{and} \quad \lim_{T \rightarrow 0} \chi = 0$$

Problem 2.7 (林宗涵《热力学与统计物理》7.15). 粒子的态密度 $D(\epsilon)$ 定义为: $D(\epsilon) d\epsilon$ 代表粒子的能量处于 ϵ 与 $\epsilon + d\epsilon$ 之间的量子态数 (见原书 §7.15). 这里指考虑粒子的平动自由度所对应的态密度.

(a) 设粒子的能谱（即能量与动量的关系）是非相对论性的，试分别对下列三种空间维数，求相应的态密度 $D(\epsilon)$:

i. 粒子局限在体积为 V 的三维空间内运动

$$\epsilon = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2);$$

ii. 粒子局限在面积为 A 的二维平面内运动

$$\epsilon = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2)$$

iii. 粒子局限在长度为 L 的一维空间内运动

$$\epsilon = \frac{p_x^2}{2m}$$

(b) 设粒子的能谱是极端相对性的，即 $\epsilon = cp, p = |\mathbf{p}|$ ，试对空间维数分别为 1. 三维 2. 二维 3. 一维三种情况，求相应的 $D(\epsilon)$.

Solution.

(a) 首先计算关系 $dp/d\epsilon$

$$\epsilon = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow \frac{dp}{d\epsilon} = \frac{m}{p}$$

三维、二维、一维情况下的态密度分别为

$$\begin{aligned} D_{3D}(\epsilon) &= \frac{1}{d\epsilon} \int \frac{d\omega}{h^3} = \frac{1}{d\epsilon} \int \frac{dx dp_x dy dp_y dz dp_z}{h^3} = \frac{V}{h^3} 4\pi p^2 \frac{dp}{d\epsilon} = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \epsilon^{1/2} \\ D_{2D}(\epsilon) &= \frac{1}{d\epsilon} \int \frac{dx dp_x dy dp_y}{h^3} = \frac{2\pi A m}{h^2} \\ D_{1D}(\epsilon) &= \frac{L}{h} \int 2 \frac{dp}{d\epsilon} = \frac{L}{h} (2m)^{1/2} \epsilon^{-1/2} \end{aligned}$$

(b) $\epsilon = cp$ 时， $dp/d\epsilon = \frac{1}{c}$. 只需将 (a) 中的 $dp/d\epsilon$ 替换为新的 $dp/d\epsilon$ 即可. 结果分别为

$$D_{3D} = \frac{4\pi V}{(hc)^3} \epsilon^2, D_{2D} = \frac{2\pi A}{(hc)^2} \epsilon, D_{1D} = \frac{2L}{hc}.$$

Lecture #3 Homework #3 [2025-09-16]

Problem 3.1. N 个单原子分子组成的理想气体,

$$H = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m}$$

微观状态数的定义为

$$\Omega(E) = \frac{1}{N!h^{3N}} \int_{E \leq H \leq E + \Delta E} dq_1 \cdots dq_{3N} dp_1 \cdots dp_{3N}$$

证明

$$\Omega(E) = \frac{\partial \Sigma(E)}{\partial E} \Delta E$$

其中 $\Sigma(E) = K \frac{V^N}{N!h^{3N}} (2mE)^{3N/2}$, $K = \frac{\pi^{3N/2}}{(3N/2)!}$.

Solution. *Proof.* N 个分子构成的 $3N$ 维 Euclidean 空间 (动量空间) 体积为

$$V_p^{(3N)} = \int \prod_{i=1}^{3N} dp_i = \frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3}{2}N + 1)} R^{3N} = \frac{\pi^{3N/2}}{(3N/2)!} R^{3N} = KR^{3N}$$

其中 $R = \sqrt{2mE}$ 为动量空间半径. 则区间 $E \sim E + \Delta E$ 内的空间壳体积为

$$\Delta V_p^{(3N)} = \frac{\partial V_p^{(3N)}}{\partial R} \Delta R = 3NKR^{3N-1} \Delta R \xrightarrow{\Delta R = m\Delta E/R} 3mNK(2mE)^{(3N-2)/2} \Delta E$$

代入微观状态数的定义中

$$\Omega(E) = \frac{3NmKV^N}{N!h^{3N}} (2mE)^{(3N-2)/2} \Delta E$$

其中 $V^N = (\int d^3 q_i)^N$. 注意到

$$\frac{\partial \Sigma(E)}{\partial E} = \frac{3NmKV^N}{N!h^{3N}} (2mE)^{3N/2-1}$$

于是证明了 $\Omega(E) = \frac{\partial \Sigma(E)}{\partial E} \Delta E$. □

Problem 3.2. 一维谐振子

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{k}{2} q^2$$

证明

(a) 正则方程的解是

$$q = A \cos(\omega t + \phi), \quad p = m\dot{q} = -m\omega A \sin(\omega t + \phi)$$

A 为振幅, $\omega = \sqrt{k/m}$ 是频率.

(b) 振子的能量为

$$E = \frac{1}{2} m\omega^2 A^2$$

(c) (q, p) 在相空间的轨道是

$$\frac{q^2}{\frac{2E}{m\omega^2}} + \frac{p^2}{2mE} = 1$$

(d) 求在能量区间 $E - \frac{\Delta}{2} \leq H \leq E + \frac{\Delta}{2}$, 在相空间代表点的数目

$$\int_{E-\Delta/2 \leq H \leq E+\Delta/2} dq dp$$

Solution.

(a) 由哈密顿正则方程

$$\dot{q} = \frac{p}{m}, \quad \dot{p} = -kq$$

将 \dot{q} 再次对时间求导, 得运动方程

$$\ddot{q} = \frac{\dot{p}}{m} = -\frac{k}{m}q, \quad \ddot{q} + \frac{k}{m}q = 0$$

则通解为

$$q = A \cos(\omega t + \phi), \quad p = m\dot{q} = -m\omega A \sin(\omega t + \phi)$$

其中 $\omega = \sqrt{k/m}$.

(b) 振子的能量为

$$E = K + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2q^2 = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2q^2 = \frac{1}{2}m\omega^2A^2$$

(c) 将 p, q 表达式合并

$$\left(\frac{q}{A}\right)^2 + \left(\frac{p}{m\omega A}\right)^2 = 1$$

由 $E = \frac{1}{2}mA^2$ 得 $A^2 = 2E/m$. 代入得相空间轨道

$$\frac{q^2}{\frac{2E}{m\omega^2}} + \frac{p^2}{2mE} = 1$$

(d) (q, p) 在相空间的轨道为椭圆, 其面积为

$$A(E) = \pi ab = \pi \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \sqrt{2mE} = \frac{2\pi E}{\omega}$$

则在能量区间 $E - \frac{\Delta}{2} \leq H \leq E + \frac{\Delta}{2}$, 相空间代表点的数目即为能量区间的对应的相空间面积

$$\int_{E-\Delta/2 \leq H \leq E+\Delta/2} dq dp = A(E + \Delta/2) - A(E - \Delta/2) = \frac{2\pi\Delta}{\omega}$$

Problem 3.3. 读 Pathria 书的 §1.2, §1.3, 写一个阅读笔记.

§1.2 统计学与热力学之间的联系

(a) **系统描述与基本假设.**

- i. 两个系统 A_1 和 A_2 , 分别处于平衡态, 宏观态由 (N_1, V_1, E_1) 和 (N_2, V_2, E_2) 描述.
- ii. 系统的微观状态数分别为 $\Omega_1(N_1, V_1, E_1), \Omega_2(N_2, V_2, E_2)$.
- iii. 复合系统 $A^{(0)} = A_1 + A_2$ 的总能量守恒 $E^{(0)} = E_1 + E_2 = \text{Constant}$.

(b) **复合系统的微观状态数.** $\Omega^{(0)}(E_1, E_2) = \Omega_1(E_1) \cdot \Omega_2(E_2)$

(c) **平衡条件与最概然状态.** 平衡时, $\Omega^{(0)}$ 取最大值

$$\frac{\partial \ln \Omega_1(E_1)}{\partial E_1} = \frac{\partial \ln \Omega_2(E_2)}{\partial E_2}$$

定义 $\beta \equiv \left(\frac{\partial \ln \Omega(N, V, E)}{\partial E}\right)_{N, V}$, 则平衡条件为 $\beta_1 = \beta_2$.

(d) **熵与温度的联系.** 热力学中存在关系

$$\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{N, V} = \frac{1}{T}$$

对比统计定义 $S = k \ln \Omega$ 可得 $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k 为玻尔兹曼常数

§1.3 统计学与热力学的进一步联系

(a) **能量与体积交换.** 若系统间可交换能量与体积, 则平衡条件为

$$\beta_1 = \beta_2 \quad \text{and} \quad \eta_1 = \eta_2$$

其中 $\eta \equiv \left(\frac{\partial \ln \Omega}{\partial V}\right)_{N, E}$.

(b) **能量、体积与粒子数交换.** 若还可交换粒子, 则平衡条件为

$$\beta_1 = \beta_2, \quad \eta_1 = \eta_2, \quad \zeta_1 = \zeta_2$$

其中 $\zeta \equiv \left(\frac{\partial \ln \Omega}{\partial N}\right)_{V, E}$.

(c) **与热力学量的对应.** 由热力学基本关系

$$dE = T dS - P dV + \mu dN$$

可得 $\eta = \frac{P}{k_B T}, \zeta = -\frac{\mu}{k_B T}$.

(d) **统计热力学的核心公式.**

- i. 熵: $S(N, V, E) = k \ln \Omega(N, V, E)$.
- ii. 强度量: $\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{N, V}, \frac{P}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{N, E}, -\frac{\mu}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial N}\right)_{V, E}$.

Problem 3.4. 经典单原子分子理想气体，忽略气体内自由度，用正则系综求内能，物态方程和熵。

Solution. 考虑单粒子的 Hamiltonian，对于理想气体

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$$

无势能，与 \mathbf{q} 无关。单粒子的配分函数为

$$Z_0 = \frac{1}{h^3} \int_V d^3\mathbf{q} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-\beta H} = \frac{V}{h^3} \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta p_i^2/(2m)} dp_i \right)^3$$

其中 $i = x, y, z, \beta = (k_B T)^{-1}$ 。这里利用了单粒子三个自由度之间的对称性，并引入量子相空间尺度 h^3 作无量纲化。利用 Gaussian 积分

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta p_i^2/(2m)} dp_i = \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}}$$

单粒子的配分函数可写做

$$Z_0 = \frac{V}{h^3} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3/2} = \frac{V}{\lambda^3}$$

其中 $\lambda \equiv \sqrt{\frac{\beta h^2}{2\pi m}}$ 为 de Broglie 波长。接下来考虑 N 个不可区分粒子的配分函数，其可近似为

$$Z_N = \frac{Z_0^N}{N!} = \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{\lambda^3} \right)^N$$

其中因子 $N!$ 为 Gibbs 修正，为了解不可区分性。

(a) 内能

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_N \xrightarrow[\ln Z_N = N \ln Z_0 - \ln N!]{\text{Stirling identity}} -N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_0 = \frac{3}{2} N k_B T$$

(b) 状态方程。系统的自由能

$$F = -k_B T \ln Z_N \xrightarrow[\ln Z_N = N \ln Z_0 - \ln N!]{\text{Stirling identity}} -N k_B T \left[\ln \left(\frac{V}{N \lambda^3} \right) + 1 \right]$$

由热力学关系 $p = -(\partial F / \partial V)_T$ 得

$$p = k_B T \frac{\partial}{\partial V} \ln Z_N = \frac{n k_B T}{V}$$

于是状态方程为

$$pV = N k_B T$$

(c) 熵。由 $S = -(\partial F / \partial T)_V$ 得

$$S = k_B \ln Z_N + k_B T \frac{\partial}{\partial T} \ln Z_N = N k_B \left[\ln \left(\frac{V}{N \lambda^3} + 1 \right) \right] + \frac{3}{2} k_B T = N k \left\{ \ln \left[\frac{V}{N} \left(\frac{4\pi m}{\beta h^3} \right)^{3/2} \right] + \frac{5}{2} \right\}$$

这里在 Stirling 公式的基础上做了一阶 Taylor 展开。

Problem 3.5 (林宗涵《热力学与统计物理》8.1). 设有 N 个粒子组成的系统处于平衡态, 满足经典极限条件.

(a) 试由正则系统的几率分布导出系统微观能量处在 E 与 $E + dE$ 之间的几率 $P(E) dE$ ($P(E)$ 为正则系综按能量的几率分布).

(b) 证明使 $P(E)$ 取得极大值的能量满足方程

$$\frac{\Sigma''(E)}{\Sigma(E)} = \beta$$

其中 $\Sigma(E)$ 定义为

$$\Sigma(E) = \frac{1}{N!h^s} \int_{H \leq E} d\Omega$$

$H = H(q_1, \dots, q_s; p_1, \dots, p_s)$ 为系统的 Hamiltonian.

(c) 将上述结果用到单原子分子理想气体, 证明

$$E = \left(\frac{3N}{2} - 1\right) \frac{1}{\beta} \approx \frac{3}{2} N k_B T.$$

这个结果说明什么?

Solution.

(a) 在正则系综中, 系统处于某一微观状态 i 的几率为:

$$p_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i}, \quad \text{and} \quad Z = \sum_i e^{-\beta E_i}$$

系统的微观状态数函数

$$\Sigma(E) = \frac{1}{N!h^{3N}} \int_{H \leq E} d\Omega = \frac{1}{N!h^{3N}} \int_V d^3N \mathbf{q} \int_{H \leq E} d^3N \mathbf{p} = \frac{V^N}{N!h^{3N}} \frac{(2\pi m E)^{3N/2}}{\Gamma(3N/2 + 1)}$$

则系统处在能量区间 $E \sim E + dE$ 之间的概率为

$$P(E) dE = p_i (\Sigma(E + dE) - \Sigma(E)) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i} \Sigma'(E) dE$$

(b) $P(E)$ 最大时, $\frac{dP(E)}{dE} = 0$, 即

$$\frac{dP(E)}{dE} = -\frac{\beta}{Z} e^{-\beta E_i} \Sigma'(E) + \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i} \Sigma''(E) = 0$$

由此得 $\Sigma''(E)/\Sigma'(E) = \beta$.

(c) 展开 (b) 中的结论

$$\frac{-\frac{3N}{2E} \Sigma(E) + \frac{3N}{2E} \frac{3N}{2E} \Sigma(E)}{\frac{3N}{2E} \Sigma(E)} = \frac{3N - 2}{2E} = \beta$$

由此得最概然能量

$$E = \frac{1}{\beta} \left(\frac{3}{2} N - 1 \right) \xrightarrow{N \gg 1} \frac{3}{2} N k_B T$$

表明使 $P(E)$ 取极大值的能量即平均能量, 体现了统计物理中的大数定律.

Problem 3.6 (林宗涵《热力学与统计物理》8.2). 有两种不同分子组成的混合理想气体, 处于平衡态. 设该气体满足经典极限条件; 且可把分子当作质点 (即忽略其内部运动自由度) . 试用正则系统求该气体的 $p, \bar{E}, S, \mu_i (i = 1, 2)$.

Solution. 设第一种与第二种分子数分别为 N_1, N_2 , 微观能量分别为 ϵ_i, ϵ_j . 则混合理想气体的微观总能量为

$$E = E_1 + E_2 = \sum_{i=1}^{N_1} \epsilon_i + \sum_{j=1}^{N_2} \epsilon_j$$

由 **Problem 3.4**: 单粒子的配分函数, 则两种分子的配分函数分别为

$$Z^{(1,2)} = \frac{Z_0^{(1,2)}}{N_{1,2}!}, \quad Z_0^{(1,2)} = \frac{V}{h^3} \left(\frac{2\pi m_{1,2}}{\beta} \right)^{3/2}$$

则系统的配分函数为

$$Z_{N_1, N_2} = Z_{N_1} Z_{N_2} = N_1 \ln Z^{(1)} - \ln N_1! + N_2 \ln Z^{(2)} - \ln N_2!$$

则气体的参数为

$$\begin{aligned} p &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} \ln Z_{N_1, N_2} = \frac{(N_1 + N_2) k_B T}{V}, \\ \bar{E} &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_{N_1, N_2} = (N_1 + N_2) \frac{3}{2} k_B T, \\ S &= k (\ln Z_{N_1, N_2} - \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_{N_1, N_2}) = \sum_{i=1,2} N_i k_B \left\{ \frac{3}{2} \ln T + \ln \frac{V}{N_i} + \left[\frac{5}{2} + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{2\pi m_i k_B}{h^2} \right) \right] \right\}, \\ \mu_i &= \left(\frac{\partial F}{\partial N_i} \right)_{T,V} = \left(\frac{\partial \bar{E} - TS}{\partial N_i} \right)_{T,V} = -k_B T \left[\frac{3}{2} \ln T + \ln \frac{V}{N_i} + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{2\pi m_i k_B}{h^2} \right) \right] \end{aligned}$$

Problem 3.7 (林宗涵《热力学与统计物理》8.3). 有一极端相对论性的理想气体, 粒子的能谱为 $\epsilon = cp$ ($p = |\mathbf{p}|$, c 为光速), 并满足非简并条件. 设粒子的内部运动自由度可以忽略 (即可将粒子看成质点) . 试用正则系综求该气体的 $p, \bar{E}, S, \mu, C_v, C_p$.

Solution. 此时单粒子的配分函数为

$$Z_0 = \frac{1}{h^2} \int_V d^3 q \int_{\mathbb{R}^2} d^3 q e^{-\beta \epsilon} = \frac{V}{h^3} \int_0^\infty e^{-\beta cp} 4\pi p^2 dp = \frac{8\pi V}{(hc)^3} (k_B T)^3$$

系统的配分函数仍然成立

$$Z_N = \frac{Z_0}{N!} = \frac{V^N T^{3N}}{N!} \left[\frac{8\pi k_B^3}{(hc)^3} \right]^N$$

则该系统的参数分别为

$$\begin{aligned} p &= -\left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T,N} = -\left(\frac{\partial -k_B T \ln Z_N}{\partial V} \right)_{T,N} = \frac{N k_B T}{V}, \quad \bar{E} = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} (F/T) = 3N k_B T, \\ S &= -\left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V,N} = N k_B \left\{ 3 \ln T + \ln \frac{V}{N} + \left[4 + \ln \frac{8\pi k_B^3}{(hc)^3} \right] \right\}, \\ \mu &= -k_B T \left\{ 3 \ln T + \ln \frac{V}{N} + \ln \left[\frac{8\pi k_B^3}{(hc)^3} \right] \right\}, \quad C_v = \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_V = 3N k_B, \quad C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p = 4N k_B \end{aligned}$$

其中焓 $H \equiv \bar{E} + pV = 4N k_B T$.

Problem 3.8 (林宗涵《热力学与统计物理》8.6). 设被吸附在液体表面上的分子形成一种二维气体，分子之间相互作用为两两作用的短程力，且只与两分子的质心距离有关。试根据正则系综，证明在第二位力系数的近似下，该气体的物态方程为

$$pA = Nk_B T \left(1 + \frac{B_2}{A} \right)$$

其中 A 为液面的面积， B_2 由下式给出

$$B_2 = -\frac{N}{2} \int (e^{-\phi(r)/k_B T} - 1) 2\pi r dr$$

Solution. 气体的 Hamiltonian 为

$$H = K + \Phi = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i < j} \phi_{ij}$$

其中 $U = \sum_{i < j} \phi(r_{ij})$ 对二维气体，配分函数为

$$Z_N = \frac{1}{N! h^{2N}} \int e^{-\beta H} d^{2N} \mathbf{q} d^{2N} \mathbf{p}$$

单个粒子的动量积分为

$$\frac{1}{h^2} \int \exp\left(-\frac{\beta p^2}{2m}\right) d^2 \mathbf{p} = \frac{2\pi m k_B T}{h^2} = \lambda_T^{-2}$$

所以气体的配分函数为

$$Z_N = \frac{1}{N! \lambda_T^{2N}} \int_{A^N} e^{-\beta \sum_{i < j} \phi_{ij}} \prod_{i=1}^N d^2 \mathbf{q}_i = \frac{1}{N! \lambda_T^{2N}} Q_N$$

其中 Q_N 为位形积分。使用 Mayer 函数 $f_{ij} = e^{-\beta \phi_{ij}} - 1$ ，位形积分在第二位力系数近似下可展开为

$$Q_N \approx \int_{A^N} \left(1 + \sum_{i < j} f_{ij} \right) \prod_{i=1}^N d^2 \mathbf{q}_i = A^N \left(1 + \frac{N^2}{2A} \int f_{12} 2\pi r dr_1 \right)$$

其中 $f_{12} = f(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2)$, $d^2 \mathbf{r}_1 = 2\pi r_1 dr_1$. 令 $B_2 = -\frac{N}{2} \int f_{12} 2\pi r dr_1$, 则位形积分的对数可写做

$$\ln Q_N = N \ln A + \ln \left(1 - \frac{N}{A} B_2 \right) \approx N \ln A - \frac{N}{A} B_2$$

对二维气体，正则系综压强为

$$p = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial A} \ln Z_N \approx N k_B T \left(1 + \frac{B_2}{A} \right)$$

Problem 3.9 (林宗涵《热力学与统计物理》8.7). 物质磁性的起源是纯量子力学性质的，这一点可以从玻尔-范列文 (Bohr-van Leeuwen) 定理看出。该定理可以表述为：遵从经典力学和经典统计力学的系统的磁化率严格等于零。

Remark. 由公式 $\chi = \left(\frac{\partial \mathcal{M}}{\partial \mathcal{H}}\right)_{T,V}$, $\mathcal{M} = -\left(\frac{\partial F}{\partial \mathcal{H}}\right)_{T,V}$ 及 $F = -k_B T \ln Z_N$, 只需证明正则系综的配分函数 Z_N 与磁场 \mathcal{H} 无关即可. 设矢势为 \mathbf{A} (磁场由 \mathbf{A} 定出), 处于磁场中的 N 个带电粒子系统的微观总能量 (即系统的 Hamiltonian) 可以表为

$$E = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p}_i + \frac{e_i}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \right)^2 + \Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N),$$

其中 Φ 代表粒子之间的相互作用能. 由正则系统出发, 在满足经典极限条件下, 证明 Z_N 与 \mathbf{A} 无关.

Solution. 正则系统的配分函数为

$$Z_N = \frac{1}{N! h^{3N}} \left\{ \int_{V^N} e^{-\beta \phi(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N)} \prod_{i=1}^N d^3 \mathbf{q}_N \right\} \left\{ \int_{\mathbb{R}^{3N}} \exp \left[-\beta \sum_i \left(\mathbf{p}_i + \frac{e_i}{c} \mathbf{A}(\mathbf{q}_i) \right)^2 / 2m \right] \prod_{i=1}^N d^3 \mathbf{p}_i \right\}$$

做动量积分的变量变换, 令

$$\mathbf{p}'_i = \mathbf{p}_i + \frac{e_i}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i)$$

由多重积分变换

$$\prod_{i=1}^N d^3 \mathbf{p}_i = |J| \prod_{i=1}^N d^3 \mathbf{p}'_i$$

其中 Jacobian 为

$$J = \frac{\partial(p_{1_x}, p_{1_y}, p_{1_z}, \dots, p_{N_x}, p_{N_y}, p_{N_z})}{\partial(p'_{1_x}, p'_{1_y}, p'_{1_z}, \dots, p'_{N_x}, p'_{N_y}, p'_{N_z})}$$

由于 $\partial p_i / \partial \mathbf{A}(\mathbf{r}_i) = 0$, 所以 $J = 1$, Z_N 与 \mathbf{A} 无关.

Problem 3.10. 用巨正则系综计算单原子理想气体的热力学函数.

Solution. 单粒子配分函数

$$Z_1 = \frac{V}{\lambda^3}, \quad \lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$$

由此得巨配分函数和巨势

$$\Xi = \exp(e^{\beta\mu} Z_1) = \exp\left(e^{\beta\mu} \frac{V}{\lambda^3}\right), \quad \Omega = -k_B T \ln \Xi = -k_B T e^{\beta\mu} \frac{V}{\lambda^3}$$

粒子数

$$\langle N \rangle = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{T,V} = e^{\beta\mu} \frac{V}{\lambda^3} \implies e^{\beta\mu} = \frac{\langle N \rangle \lambda^3}{V}$$

内能

$$U = \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle = e^{\beta\mu} \frac{V}{h^3} \int \frac{p^2}{2m} e^{-\beta p^2/(2m)} d^3 p = \frac{3}{2\beta} e^{\beta\mu} \frac{V}{\lambda^3} = \frac{3}{2} \langle N \rangle k_B T$$

压强

$$P = -\frac{\Omega}{V} = k_B T e^{\beta\mu} \frac{1}{\lambda^3} = \frac{\langle N \rangle k_B T}{V} \implies PV = \langle N \rangle k_B T$$

由 $\Omega = U - TS - \mu \langle N \rangle$ 得熵

$$S = \frac{U - \mu \langle N \rangle - \Omega}{T} = \langle N \rangle k_B \left[\frac{5}{2} - \ln(n\lambda^3) \right], \quad n = \frac{\langle N \rangle}{V}$$

Problem 3.11 (林宗涵《热力学与统计物理》8.9). 试用巨正则系综求解题 **Problem 3.7**, 并于正则系综的结果比较.

Solution. 由 **Problem 3.7** 中单粒子的配分函数 $Z = \frac{8\pi V}{(hc)^3} \beta^{-3}$ 得巨正则系综函数

$$\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(e^{-\alpha} Z)^N}{N!} = \exp(e^{-\alpha} Z), \quad \ln \Xi = e^{-\alpha} Z = \frac{8\pi V}{(hc)^3} \beta^{-3}$$

利用巨正则系综求解系统的参数为

$$\begin{aligned} \bar{N} &= -\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \Xi = e^{-\alpha} Z, \quad \mu = -k_B T \ln \frac{Z}{\bar{N}} = -k_B T \left[3 \ln T + \ln \frac{V}{\bar{N}} + \ln \left[\frac{8\pi k_B^3}{(hc)^3} \right] \right], \\ \bar{E} &= -\frac{\partial}{\partial p} \ln \Xi = 3\bar{N}k_B T, \quad p = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} \ln \Xi = \frac{\bar{N}k_B T}{V} = \frac{\bar{E}}{3V}, \\ S &= k_B \left(\ln \Xi - \alpha \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \Xi - \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \Xi \right) = \bar{N}k \left\{ 3 \ln T + \ln \frac{V}{\bar{N}} + \left[4 + \ln \left(\frac{8\pi k_B^3}{(hc)^3} \right) \right] \right\}, \\ C_V &= \left(\frac{\partial}{\partial T} \bar{E} \right)_V = 3Nk_B, \quad C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p = 4Nk_B \end{aligned}$$

结果与 **Problem 3.7** 一致.

Problem 3.12 (林宗涵《热力学与统计物理》8.10). 证明熵的下列公式.

- (a) 对正则系综, $S = -k \sum_s \rho_s \ln \rho_s$, 其中 $\rho_s = \frac{1}{Z_N} e^{-\beta E_s}$ 为正则系综的几率分布.
- (b) 对巨正则系综, $S = -k \sum_N \sum_s \rho_{Ns} \ln \rho_{Ns}$, 其中 $\rho_{Ns} = \frac{1}{\Xi} e^{-\alpha N - \beta E_s}$ 为巨正则系综的几率分布.

Solution.

(a) *Proof.* 由熵的定义出发

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = -\frac{\partial -kT \ln Z}{\partial T} = k \ln Z + \frac{\langle E \rangle}{T}$$

其中 $Z = \sum_s e^{-\beta E_s}$, $\beta = (kT)^{-1}$, $\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_s E_s e^{-\beta E_s}$. 将正则系综概率分布 $\rho_s = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_s}$ 代入题目中正则系综中 S 的右式

$$-k \sum_s \rho_s \ln \rho_s = -k \sum_s \rho_s \ln \left(\frac{1}{Z} e^{-\beta E_s} \right) = k \ln Z + k\beta \langle E \rangle$$

结果和 $S = -\partial F / \partial T$ 的表达式一致. \square

(b) *Proof.* 类似的, 从巨势 $\Omega \equiv -kT \ln \Xi$ 出发, 熵的表达式为

$$S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T} = k \ln \Xi + \frac{\langle E \rangle - \mu \langle N \rangle}{T}$$

其中巨正则系综几率分布 $\Xi = \sum_{N,s} \exp[\beta(\mu N - E_s)]$. 从熵的定义出发可得

$$S = -k \sum_N \sum_s \rho_{Ns} \ln \rho_{Ns} = -k \sum_{N,s} \rho_{Ns} (-\ln \Xi + \beta \mu N - \beta E_s) = k \ln \Xi + k\beta \mu \langle N \rangle - k\beta \langle E \rangle$$

结果和 $S = -\partial \Omega / \partial T$ 的表达式一致. \square

Problem 3.13 (林宗涵《热力学与统计物理》8.12). 设有一 N 个相互作用可以忽略的粒子（可看成质点）组成的系统，在满足经典极限的条件下，巨正则系综的几率分布为

$$\rho_N(q_1, \dots, p_{3N}) d\Omega_N = \frac{1}{\Xi N! h^{3N}} e^{-\alpha N - \beta E_N(q_1, \dots, p_{3N})} d\Omega_N$$

(a) 试证明巨正则系综的总粒子数是 N 的几率为

$$P(N) = \frac{1}{\Xi} e^{-\alpha N} Z_N,$$

其中 Z_N 是总粒子数为 N 时的正则系综配分函数.

(b) 证明使 $P(N)$ 取极大的总粒子数满足下面的关系

$$\alpha = \frac{\partial \ln Z_N}{\partial N}.$$

(证明时，直接求 $\ln P(N)$ 的极大更方便.)

(c) 上式进一步可化为

$$N = e^{-\alpha} Z$$

其中 Z 为单粒子的配分函数，即 $Z = \frac{V}{h^3} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3/2}$. 上述结果说明什么？

Solution.

(a) 巨正则系综的总粒子数是 N 的几率可写做微观态的几率对相空间的积分

$$P(N) = \int \rho_N(q_1, \dots, q_{3N}; p_1, \dots, p_{3N}) d\Omega_N = \frac{1}{\Xi N! h^{3N}} \int e^{-\beta E_N} d\Omega_N$$

由于 N 个粒子的正则系综配分函数为

$$Z_N = \frac{1}{N! h^{3N}} \int e^{-\beta E_N} d\Omega_N$$

所以可得 $P(N) = \frac{1}{\Xi} e^{-\alpha N} Z_N$.

(b) 在 $P(N)$ 取极大时， $\frac{\partial P}{\partial N} = 0$. 将 (a) 中的表达式取对数并对 N 求导得

$$\frac{\partial \ln P(N)}{\partial N} = -\alpha + \frac{\partial \ln Z_N}{\partial N} = 0$$

于是得 $\alpha = \partial \ln Z_N / \partial N$.

(c) 考虑 N 个可忽略相互作用的粒子，系统的配分函数为

$$Z_N = \frac{Z_0}{N!}$$

其中 $Z_0 = \frac{V}{h^3} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3/2}$. 对系统的配分函数取对数并对 N 求导得

$$\frac{\partial \ln Z_N}{\partial N} = \ln Z - \ln N = \ln \frac{Z}{N} = \alpha$$

由此得 $N = e^{-\alpha} Z \bar{N}$. 即使 $P(N)$ 取极大值的 N 就是平均值 \bar{N} .

Lecture #4 Homework #4 [2025-09-23]

Problem 4.1. 理想费米气体的巨配分函数为

$$Z_G = \text{Tr} \exp \left\{ -\beta \sum_p [\epsilon(p) - \mu] \hat{n}_p \right\}$$

其中 \hat{n}_p 的本征值为 0 或 1. 证明

- (a) $Z_G = \prod_p (1 + e^{-\beta(\epsilon(p)-\mu)})$
- (b) 根据热力学关系求 $U = \sum_p \epsilon(p) \hat{n}_p$ 和 $\langle N \rangle = \sum_p \hat{n}_p$.
- (c) 若 $\epsilon(p) = \frac{p^2}{2m}$, $\sum_p \rightarrow V \int \frac{d^3 p}{(2\pi^3)}$, 求 $T = 0$ 时 $\langle N \rangle$ (设 $\mu = \epsilon_F$ 是费米能).
- (d) 证明 $T > 0$, $\beta_{\epsilon_F} \gg 1$ 时,

$$\begin{aligned} \frac{\langle N \rangle}{V} &= \frac{(2m\mu)^{1/2}}{6\pi^2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} (\beta\mu)^{-2} + \frac{7\pi^4}{640} (\beta\mu)^{-4} + \dots \right] \\ \frac{U}{V} &= \frac{(2m\mu)^{3/2}}{10\pi^2} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} (\beta\mu)^{-2} - \frac{7\pi^4}{384} (\beta\mu)^{-4} + \dots \right] \end{aligned}$$

积分公式

$$\int_0^\infty \frac{du}{e^{-\alpha+u} + 1} \left(\frac{d\varphi}{du} \right) = \varphi(u) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} C_{2n} \left(\frac{d^{2n}\varphi}{du^{2n}} \right)_{u=\alpha}, \quad C_m = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k^m}, \quad C_2 = \frac{\pi^2}{12}, \quad C_4 = \frac{7\pi^2}{720}$$

Solution.

- (a) 对 $n_p = 0$ 与 $n_p = 1$ 的情况求和

$$Z_G = \prod_p \sum_{n_p=0}^1 e^{-\beta[\epsilon(p)-\mu]n_p} = \prod_p \left[1 + e^{-\beta(\epsilon(p)-\mu)} \right].$$

- (b) 巨势 $\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln Z_G = -\frac{1}{\beta} \sum_p \ln \left[1 + e^{-\beta(\epsilon(p)-\mu)} \right]$, 由热力学关系:

$$\langle N \rangle = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T,V} = \sum_p \frac{1}{e^{\beta(\epsilon(p)-\mu)} + 1}, \quad U = \sum_p \frac{\epsilon(p)}{e^{\beta(\epsilon(p)-\mu)} + 1}.$$

- (c) $T = 0$ 时 $\mu = \epsilon_F$, $\langle n_p \rangle = \Theta(\epsilon_F - \epsilon(p))$,

$$\frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{p_F} 4\pi p^2 dp = \frac{p_F^3}{6\pi^2} = \frac{(2m\epsilon_F)^{3/2}}{6\pi^2}.$$

- (d) 令 $\varphi(\epsilon) = \frac{2}{3}\epsilon^{3/2}$, 则 $\varphi'(\epsilon) = \epsilon^{1/2}$, 利用 Sommerfeld 展开:

$$\int_0^\infty \frac{\epsilon^{1/2} d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} = \varphi(\mu) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} C_{2n} \varphi^{(2n)}(\mu) \beta^{-2n},$$

其中 $C_2 = \frac{\pi^2}{12}$, $C_4 = \frac{7\pi^4}{720}$, 代入得

$$\frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{(2m)^{3/2}}{6\pi^2} \mu^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} (\beta\mu)^{-2} + \frac{7\pi^4}{640} (\beta\mu)^{-4} + \dots \right].$$

对 U , 取 $\varphi(\epsilon) = \frac{2}{5}\epsilon^{5/2}$, 得:

$$\frac{U}{V} = \frac{(2m)^{3/2}}{10\pi^2} \mu^{5/2} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} (\beta\mu)^{-2} - \frac{7\pi^4}{384} (\beta\mu)^{-4} + \dots \right].$$

Problem 4.2. 声子的状态可用一组整数 $\{n_{k\lambda}\}$ 来表征 ($\lambda = 1, 2, 3$ 是声波的偏振方向), 能量为 $E_{\{n_{k\lambda}\}} = \sum_{k,\lambda} (n_{k\lambda} + \frac{1}{2})\omega_{0\lambda}(\mathbf{k})$. 在低能近似下, $\omega_{01,2}(\mathbf{k}) = c_T k$, $\omega_{03}(\mathbf{k}) = c_L k$.

(a) 利用 $Z = \prod_{k,\lambda} \sum_{n_{k\lambda}}^\infty e^{-\beta(n_{k\lambda} + \frac{1}{2})\omega_{0\lambda}}$, 求 Z 和 F (用 $\langle n_{k\lambda} \rangle [1 - e^{-\beta\omega_{0\lambda}}]^{-1}$ 表达).

(b) 设 ω_T 和 ω_L 是横、纵声子的频率上限, 把 ω 连续化, 写出 F .

Solution.

(a) 配分函数

$$Z = \prod_{k,\lambda} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(n + \frac{1}{2})\omega_{0\lambda}(\mathbf{k})} = \prod_{k,\lambda} \frac{e^{-\beta\omega_{0\lambda}/2}}{1 - e^{-\beta\omega_{0\lambda}}}$$

自由能

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z = \sum_{k,\lambda} \left[\frac{\omega_{0\lambda}}{2} + \frac{1}{\beta} \ln(1 - e^{-\beta\omega_{0\lambda}}) \right]$$

利用 $\langle n_{k\lambda} \rangle = (e^{\beta\omega_{0\lambda}} - 1)^{-1}$, 有

$$1 - e^{-\beta\omega_{0\lambda}} = \frac{1}{\langle n_{k\lambda} \rangle + 1}$$

因此

$$F = \sum_{k,\lambda} \left[\frac{\omega_{0\lambda}}{2} - \frac{1}{\beta} \ln(\langle n_{k\lambda} \rangle + 1) \right]$$

(b) 横模 $\omega = c_T k$ (2 支), 纵模 $\omega = c_L k$ (1 支), 频率上限分别为 ω_T , ω_L . 态密度

$$g_T(\omega) = \frac{V}{\pi^2 c_T^3} \frac{\omega^2}{c_T^3}, \quad g_L(\omega) = \frac{V}{2\pi^2 c_L^3} \frac{\omega^2}{c_L^3}$$

自由能

$$F = \frac{V}{\pi^2 c_T^3} \int_0^{\omega_T} \omega^2 \left[\frac{1}{2}\omega + \frac{1}{\beta} \ln(1 - e^{-\beta\omega}) \right] d\omega + \frac{V}{2\pi^2 c_L^3} \int_0^{\omega_L} \omega^2 \left[\frac{1}{2}\omega + \frac{1}{\beta} \ln(1 - e^{-\beta\omega}) \right] d\omega$$

Problem 4.3. 粒子数守恒的玻色子系统, 巨配分函数为 $Z_G = \prod_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_p\}} e^{-\beta \sum_p (\epsilon(p) - \mu)}$, 求和 $\sum_{\{n_p\}} 1 = N$.

(a) 证明 $Z_G = \prod_p [1 - e^{-\beta(\epsilon(p) - \mu)}]^{-1}$.

(b) 若 $\epsilon(p) = \frac{p^2}{2m}$, 在把求和化作积分后, 证明

$$\ln Z_G = V \left(\frac{m}{2\pi\beta} \right)^{3/2} g_{5/2}(\beta\mu), \quad g_k(\beta\mu) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\mu}}{n^k}$$

(c) $g_k(\nu)$ 只在 $\nu \leq 0$ 才收敛, 即对玻色子化学势最大为 0. 说明存在临界密度 $n_c = \left(\frac{m}{2\pi\beta} \right)^{3/2} g_{3/2}(0)$, 当密度 $n \leq n_c, \mu \leq 0$. 反之, 对给定 n , 有一个临界温度 $T_c^{-1} = \frac{km}{2\pi} \left(\frac{g_{3/2}(0)}{n} \right)^{2/3}$, 当 $T \geq T_c, \mu \leq 0$. 问将温度降到 $T < T_c$, 会发生什么物理现象?

(d) $\langle n \rangle = [1 - e^{-\beta(\epsilon(p)-\mu)}]^{-1}$ 在 $p = 0$ 时是无意义的, $\langle N \rangle$ 中的 $p = 0$ 部分应单独写出

$$\langle N \rangle = N_0 + \frac{(2m)^{3/2}V}{(2\pi)^2} \int_{0^+}^{\infty} d\epsilon \epsilon^{1/2} (e^{\beta\epsilon} - 1)$$

证明 $T < T_c$ 时, N_0/V 是一个宏观量

$$\frac{N_0}{V} = n \left(1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right)$$

Solution.

(a) *Proof.* 巨正则系综对每个单粒子态独立求和 (对玻色子 $n_p = 0, 1, 2, \dots$)

$$Z_G = \prod_{\mathbf{p}} \sum_{n_p=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon(\mathbf{p})-\mu)n_p}$$

于是几何级数的求和结果为

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon-\mu)n} = \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon-\mu)}}, \quad \mu < \epsilon$$

最终得到

$$Z_G = \prod_{\mathbf{p}} \left[1 - e^{-\beta(\epsilon(\mathbf{p})-\mu)} \right]^{-1} \square$$

(b) *Proof.* 已知恒等式

$$-\ln(1 - e^{-\beta(\epsilon-\mu)}) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\mu} e^{-n\beta\epsilon}}{n}$$

于是, 在三维连续极限下

$$\ln Z_G = - \sum_{\mathbf{p}} \ln \left[1 - e^{-\beta(\epsilon(\mathbf{p})-\mu)} \right] = \sum_{\mathbf{p}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\mu}}{n} e^{-n\beta p^2/(2m)}$$

对 \mathbf{p} 积分

$$\sum_{\mathbf{p}} e^{-n\beta p^2/(2m)} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 p e^{-n\beta p^2/(2m)} = \frac{V}{(2\pi)^3} \left(\frac{2\pi m}{n\beta} \right)^{3/2}$$

因此

$$\ln Z_G = V \left(\frac{m}{2\pi\beta} \right)^{3/2} g_{5/2}(\beta\mu), \quad g_k(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^k} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\mu}}{n^k} \square$$

(c) 粒子数密度:

$$n = \frac{1}{V} \frac{\partial \ln Z_G}{\partial (\beta \mu)} = \frac{1}{\lambda_T^3} g_{3/2}(e^{\beta \mu}).$$

$g_{3/2}(z)$ 在 $z \leq 1$ 收敛, 故 $\mu \leq 0$ 。临界密度:

$$n_c = \frac{1}{\lambda_T^3} g_{3/2}(1) = \left(\frac{m}{2\pi\beta} \right)^{3/2} \zeta(3/2).$$

当 $n > n_c$ 或 $T < T_c$ 时发生 Bose - Einstein 凝聚, $\mu \rightarrow 0^-$, 宏观占据基态.

(d) $T < T_c$ 时 $\mu \approx 0$, 总粒子数:

$$N = N_0 + \frac{V}{\lambda_T^3} g_{3/2}(1) = N_0 + N \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2},$$

所以

$$\frac{N_0}{V} = n \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right].$$

高等统计物理

说 明

本课程是热力学和统计物理基础上的高级课程，所以，不再系统地讲授热力学理论和近独立子系统统计物理（相当于林宗涵老师书的前七章）。对这部分内容，我会用一次课的时间回顾一下，请同学们也复习一下热统 I（重点是林老师书的第一、二、三、七章），以便更好地学新的内容。本课程内容主要包括（1）平衡态统计物理的系综理论；（2）不同空间维数的量子统计；（3）相变和临界现象：朗道理论。（4）相变和临界现象：标度理论和临界指数；（5）相变和临界现象：重整化群；（6）量子相变和 K-T 相变；（7）数值重整化群和密度矩阵重整化群简介；（8）非平衡态统计物理：Boltzmann 输运方程、H 定理和线性响应理论；（9）非平衡态统计物理：涨落现象；（10）统计物理中的数值计算方法：分子动力学简介；（11）统计物理中的中的数值计算方法：蒙特卡罗模拟；（12）量子蒙特卡罗模拟。（1）-（9）是板书，数值方法简介用 ppt. 期末考试考（1）-（9）的知识，占总成绩的 60%；（1）-（9）相关的平时习题计入平时成绩；数值计算由我在课堂主讲，作业是分组文献阅读，读一些经典的数值计算原始文章，做一些小系统的编程计算，就所得结果进行课堂交流。这部分也计入平时成绩。平时成绩占总成绩 40%。

目 录

第一章 回顾热力学	
第二章 统计物理基本概念和近独立粒子系统统计物理的回顾	
第三章 微正则系综	
§ 3.1 经典统计系综	
§ 3.2 量子统计系综	
§ 3.3 微正则系综	
第四章 正则系综	
§ 4.1 从微正则系综到正则系综	
§ 4.2 热力学量	
§ 4.3 能量涨落、热力学极限和经典极限	
§ 4.4 应用：非理想气体的状态方程	
第五章 巨正则系综	
第六章 量子统计 $d=1,2,3$	
§ 6.1 巨正则系综导出玻色统计和费米统计	
§ 6.2 量子统计和波函数	
§ 6.3 路径积分和量子统计	
§ 6.4 任意子、辫子群和其他	
§ 6.5 一维统计：与相互作用相关性	
第七章 相变、临界现象和重整化群简介	
§ 7.1 朗道二级相变理论简介	
§ 7.2 临界现象和临界指数	
§ 7.3 量子相变	§ 8.7.3 涨落的空间关联
§ 7.4 Ising 模型： § 7.4.1 平均场近似	§ 8.8 涨落现象：随机外力和布朗运动：
§ 7.4.2 一维伊辛模型的精确解	§ 8.8.1 朗之万方程；
§ 7.4.3 二维伊辛模型的精确解	§ 8.8.2 布朗粒子的扩散；
§ 7.4.4 1+1 维量子伊辛模型	§ 8.8.3 布朗运动中的时间关联
§ 7.5 重整化群： § 7.5.1 实空间 RG	§ 8.8.5 涨落-耗散定理；
§ 7.5.2 举例：一维伊辛模型	§ 8.8.6 布朗运动类似的物理过程：
§ 7.6 数值重整化群和 DMRG 简介：	电路中的热噪声和电压涨落；
§ 7.6.1 动量空间 RG；	§ 8.8.7 散粒噪声
§ 7.6.2 Wilson's 数值 RG	§ 8.9 主方程和福克-普朗克方程：
§ 7.6.3 DMRG 简介	§ 8.9.1 Master 方程
§ 7.7 Kosterlitz-Thouless 相变	§ 8.9.2 福克-普朗克方程
第八章 非平衡态统计物理	第九章 统计物理中计算方法简介
§ 8.1 引言	§ 9.1 引言
§ 8.2 Boltzmann 积分微分方程： § 8.2.1 漂移项的计算；	§ 9.2 分子动力学简介： § 9.2.1 Verlet algorithm
§ 8.2.1 碰撞项的计算	§ 9.2.2 辛算法
§ 8.3 H 定理，H 函数和熵	§ 9.3 蒙特卡罗方法：
§ 8.4 Boltzmann 方程的应用	§ 9.3.1 概说
§ 8.5 线性响应理论：力学扰动	§ 9.3.2 均匀或权重取样
§ 8.6 线性响应理论：热力学扰动	§ 9.3.3 对平衡体系的马尔可夫链取样
§ 8.7 涨落现象：热力学量： § 8.7.1 准热力学理论；	§ 9.3.4 重要性取样 Metropolis algorithm
§ 8.7.2 高斯分布；	§ 9.3.4 伊辛模型

- § 9.4 相变和蒙特卡罗模拟
 § 9.5 变分蒙特卡罗
 § 9.6 量子蒙特卡罗：
 § 9.6.1 相互作用玻色子，SSE 算法
 § 9.6.2 相互作用费米子，Determinantal QMC
 和连续时间 QMC
- 教科书和参考文献
- [1] 热力学与统计物理，林宗涵，2006，北京大学出版社
 [2] 统计物理学，苏汝铿，2003，高等教育出版社
 [3] Statistical Mechanics 3rd Edition, P. K. Pathria and P. D. Beale, 2012, 世界图书出版社
 [4] Statistical Mechanics 2nd Edition, F. Schwabl, 2006, Springer
 [5] Statistical Mechanics, R. P. Feynman, 1998
 [6] Statistical Physics, L. D. Landau and E. M. Lifshitz, 1980.
 [7] Thermodynamics of a One-Dimensional System of Bosons with Repulsive Delta-Function Interaction, C. N. Yang and C. P. Yang, J. Math. Phys. 10, 1115 (1963).
 [8] General Theory for Quantum Statistics in Two Dimensions, Y. S. Wu, Phys. Rev. Lett. 52, 24, 2103 (1984).

第一章 固体物理基础

固体和统计物理研究的是固态。固态是宏观现象的宏观唯象理论。统计物理则研究微观的微观理论。固态不考虑物体是由什么物质组成，不管微观结构，把物质看成连续介质。统计物理一开始就在考虑物质是由微观粒子组成，由微观性质出发，然后统计推导出宏观性质。以下我们总结一下固体和统计物理学的主要结论。

1.1 固体的基本概念与基本规律

* 平衡态：在没有外界影响的条件下，物体各部分的性质长时间不发生任何变化的状态。

* 平衡定律：A与B平衡，B与C平衡，则A与C平衡。

* 温度：衡量物体间是否平衡的物理量称为温度。一切达到平衡的物体温度相等。

* 温度温标是数值规则叫温标。

[9] "Fractional statistics" in arbitrary dimensions: A generalization of the Pauli principle, F.D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. 67, 937 (1991).

[10] Statistical Distribution for Generalized Ideal Gas of Fractional Statistics Particles, Y. S. Wu, Phys. Rev. Lett. 73, 922 (1994).

[11] Density Matrix Formulation for Quantum Renormalization Groups, S. White, Phys. Rev. Lett. 69, 2863 (1992).

[12] Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups, S. White, Phys. Rev. B48, 10345 (1993).

[13] Numerical Simulation in Statistical Physics, P. Viot, 2006, <http://www.lptmc.jussieu.fr/user/viot/COURS/simulation.pdf>

[14] 分子模拟，陈正隆，

<http://vdisk.weibo.com/s/aQWdvCGsXlJz9>

[15] Stochastic series expansion method with operator-loop update, A. W. Sandvik, Phys. Rev. B 59, R14157, (1999).

[16] Quantum Monte Carlo, K. Haule, 2006:

<http://www.physics.rutgers.edu/grad/509/qmc.pdf>

* 物态方程：物体的物理状态由几何参数（V, A, L），力学变量（P, T, F），电荷变量（E, P, A, M）和化学变量描述，温度与这些状态变量之间的函数关系

$$T = f(P, V, \dots)$$

称为物态方程。

* 内能：绝热（与外界有热量交换）过程中外界对物体做功和在末态和初态时状态的内能差 $U_2 - U_1 = W_a$ (外界对物体作功绝热)。

* 固体第一定律：推广的非绝热过程，系统从外界吸热 $Q = U_2 - U_1 - W_a$ 即能守恒。

* $C_y = \frac{\partial Q_y}{\partial T}$ 表示热量，y表示不变量， $y = V$ 容量， $y = P$ 压强， $y =$

单位质量的热量称为比热容。

* 内能是态函数， $H = U + PV$ 也是态函数
 内能是绝热过程中外界做功的函数， $\Delta U = W_a$
 绝热过程中外界吸热为负值 $Q_p = -W_a$

* 熵：对可逆过程，志取大熵

$$\Delta S = S - S_0 = \int_{\text{初态}}^{\text{末态}} \frac{dq}{T} \quad \text{与过程无关.}$$

* 恒定子二定律：

$$\Delta S \geq \int_{(i)}^{(f)} \frac{dq}{T}$$

熵增加原理.

* 直子基本方程：第一定律 + 第二定律. 定义

$$dU = TdS + \sum_i F_i dq_i, \quad \text{例: } dU = TdS - pdV$$

例如，对 $P-V-T$ 子

$$dU = TdS - pdV$$

* 自由能： $F = U - TS$

$$dF = dU - d(TS)$$

$$\text{例: } dF = -SdT - pdV \quad (\text{等温准静态})$$

* Gibbs 自由能：

$$G = F + PV$$

$$\text{例: } dG = -SdT + Vdp$$

等温准静态，无永磁场.

Kelvin 不可能从单一同级
退，但必定变为不可逆的
而产生其他影响
classical mechanics
不可能起因从低级到高级
或低级而产生其他影响

1.2 单相系(单相系)的平衡

* 单相系，顾名思义，就是各部分性质完全一样的物体.

* 单相系的微小可逆过程由热力学基本微分方程
描述. 依据前面对应不同，可以有3种表达描述，
例如对 $P-V-T$ 子

$$dU = TdS - pdV \quad (S, V) \quad \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = -\left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_V$$

$$dH = TdS + Vdp \quad (S, p)$$

$$dF = -SdT - pdV \quad (T, V)$$

$$dG = -SdT + Vdp \quad (T, p)$$

* 可以把热力学量：

(1) $P, V \dots; T$.

(2) 上物理方程是和，坦言影响系数.

即各种变化时，膨胀系数、压缩系数、
压缩系数，… 可见. (强度强，很弱)

U, S, F, G 等不直接相关.

(3) 应用：理想气体、麦克斯韦气体.

互易性、称性很好.

(复相)，例如水

1.3 单之系的相变热力学 (单之系)-“热学”

(单之系)物质

* 单相系，有些是单之系(即相同的状态性质). 例如
相变，就是整个单相系的性质发生变化，从一个平
衡态变为另一个平衡态.

* 系统处于某一相中，该系统处于热力学平衡中.

热力学平衡的判据： $S = S_{\max} \Leftrightarrow$ 孤立系处于平衡态.

数学表达为： $\delta S = 0, \delta^2 S < 0, \delta U = \delta V = \delta N = 0$.

S : 热变功. 可能的变功.

* $\delta S = 0, \delta^2 S < 0$, 找出局部域相对极大. 其它在
它是几个相对大集中取大. 那么，极点相对互换.

* $\delta S = 0, \delta^2 S = 0$, 这时， $\delta^3 S = 0$ 是保证稳定性
条件. $\delta^2 S < 0$ 该系统绝对至稳定. 这样的稳定性
称为临界点. 例如气-液相变的临界点.

* 热力学判据对孤立系. 从应用角度，热力学平衡
地可用 (1) 自由能判据， (T, V, N) 不变，自由能极小 $F = F_{\min}$.

(2) 吉布斯自由能判据， (T, p, N) 不变， $G = G_{\min}$.

(3) 内能判据： (V, S, N) 不变， $U = U_{\min}$.

热力学可变系的热力学判据

* 对单之系， λ 可变，则内能的基东
数方程是：($P-V-T$ 子)

$$dU = TdS - pdV + (u - Ts + Pv)dN$$

$$u - Ts + Pv = \frac{G}{N} \equiv \mu, \text{ 化学势, 1 mol m Gibbs 热能}$$

$$(U = Nu, V = Nv, S = Ns)$$

* 仅有热力学平衡的方程高一阶， μdN .

$$\mu = \left(\frac{\partial U}{\partial N}\right)_{S,V} = \left(-\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{S,p} = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V} = \left(\frac{\partial G}{\partial N}\right)_{T,p}$$

$$\delta \mu = -SdT + Vdp.$$

* $\sigma = F - \mu N = U - TS - \mu N = F - G$ 称为

吉布斯 平衡

* 仅有热力学判据都需考虑 μdN 这一项.

* 热力学判据，可以得到达到平衡的条件，

即状态变量之间的关系. 例如，升高热力学

判据可得 $\frac{\partial \mu}{\partial T} = \frac{\partial G}{\partial T}$ 二相之间的平衡条件是

- $T_1 = T_2, P_1 = P_2, \mu_1 = \mu_2$
 $\text{恒压平行} \quad \text{相变平行 (不发生相变)}$
- (二元相, $S_i, U_i, V_i, N_i : i=1, 2$ 都可变, 但各体积不变, 总体积不变, 总内能不变)
 又例如, 若总内能不变, 则 $\delta F = 0$ 条件
 得出: $P_1 = P_2, \mu_1 = \mu_2 = 0$: 相变不守恒条件
 m化系数为0, 例如, 蒸汽, 液体.
- * 由平衡了稳定性判据, 可得稳定性条件. 稳定条件往往由一些响应条件给出, 例如, 有由能极小, 稳定度高比例 $c_0 > 0$ 和等温压缩系数的 $K_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T > 0$. 等.
- * 根据相变平行条件, 可以得到相同:
 例如, 二相平衡: $\mu^1 = \mu^2, T_1 = T_2, P_1 = P_2 = P$.
 则 $\mu^1(T, P) = \mu^2(T, P)$ 给出 $T-P$ 平面两条曲线, 这就是二相~3界线; 若共有三元相, $\mu^1 = \mu^2 = \mu^3$ 则完全确定了 (T, P) , 这就是三相共存. 另外, 对于某一单 (T, P) 点, 只有一个相是稳定的. 这样一来是以前错误. 水 m相固.

- * 在研究低温化学反应过程中, 実验显示
 出现规律是: 在等温等压条件下, 反应向放热
 方向进行, 即 $\Delta H < 0$.
- * 热力学表明, 等温等压化学反应向着 ΔG 方向进行.
- * $\Delta G = \Delta H - T \Delta S \Rightarrow \lim_{T \rightarrow 0} (\Delta S)_T \rightarrow 0$ Nernst 定理

- * 热力学三定律:
- Nernst 定理
 - 绝对熵 $\lim_{T \rightarrow 0} S = 0$.
 - 不可逆通过有限步导致物体冷却绝对零度.

1.5 线性非平衡热力学

- * 线性非平衡热力学: 仅限于偏离平衡远. 在一个宏观小、微观大的区域, 可用局域平衡近似.
- * 保时守恒定律 \Rightarrow 推广的热力学第一定律 (把小块的质点加起来)
- * 对小块, 热力学方程仍成立.
- * 不守律, $\Theta = \frac{\partial S}{\partial E}$ 表示小块的熵产率

- * 关于相变, 我们以后将译成国际, 所以就不继续展开.
- 1.4 热力学第三定律: 多元的复相平衡和化学平衡
- * 多元系就是不同化学 (广泛) 组分的系统, 平衡态又可以是 (T, P, N_1, \dots, N_k) . $(N_1, \dots, N_k) = \{N\}$.
- * 基本微分方程中 $dN \rightarrow \sum_i \mu_i dN_i$.
- $\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial N_i} \right)_{T, P, \{N_j\}}$.
- * $(T, P, \{N\})$ 满足 Gibbs 关系:
- $$SdT - VdP + \sum_i N_i d\mu_i = 0.$$
- 其中只有 $k+1$ 个是独立的.
- * 若不发生化学反应, 相平衡条件可类似写出.
- * 发生化学反应, $\sum_i v_i A_i = 0$, 例如
 $CO + \frac{1}{2} O_2 \rightleftharpoons CO_2, \Rightarrow v_1 = 1, v_2 = -1, v_3 = \frac{1}{2}$
 $A_1 = CO_2, A_2 = CO, A_3 = O_2$.
- m化平衡条件是
 $\sum_i v_i \mu_i = 0$. “+”为生成物
“-”为反应物

- $\rho_n \frac{\partial \vec{J}_s}{\partial t} = - \nabla \cdot \vec{J}_s + \Theta, \vec{J}_s$ 为大电流密度
- $\vec{J}_s = \frac{\vec{J}_n}{T}, \vec{J}_n$ 为速度, $\Theta = \frac{k}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right) > 0$
- * $\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_n = 0$, 电子守恒.
- n 为 density. \vec{J}_n 为 particle current density.
- * 电荷守恒:
- 热传导 Fourier 定律: $\vec{J}_q = -k \nabla T$.
 - 扩散 Fick 定律: $\vec{J}_n = -D_n \nabla n$.
 - 电场定律: $\vec{J}_e = \sigma \vec{E} = -\sigma \nabla \phi$
- 一般 $\vec{J} = (J_1, \dots, J_n)$ 为热力学量, $\vec{X} = (X_1, \dots, X_n)$ 为力, 则 $J_k = \sum_i L_{ki} X_i, L_{ki}$ 为动力学量.
- * 马克斯well 定律: $L_{ki} = L_{ik}, L$ 是对称矩阵

第3章 统计物理基本概念和近独立粒子系统统计的因果回溯

指对于宏观物体的现象实验基础上得出一些规律的经验定律，与物质的微观细节无关。统计物理则研究大量微观粒子，从经典、量子物理的基本原理出发，结合大量实验提出的统计律：统计规律，导出宏观物性的理论十全十美。

2.1 微观状态的描述

* 经典：组成宏观物体的基本单元分子或“粒子”，可以是分子、原子，也可以是质子、自旋等。我们往往称“粒子”，用广义坐标 (\mathbf{r}, \mathbf{p}) ($\mathbf{r}^a; a=1, \dots, r$) 描述，单粒子能级 $E = E(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ 。一个微观大，宏观小的单粒子相空间中体积： $d\omega = d^{3r} \mathbf{d}^3 p$ 。对 N 个经典宏观物体，广义坐标和广义动量 $(q_1, \dots, q_s; p_1, \dots, p_s)$, $S = \Omega^N$ 。~~在~~ 空间相体积之积 $dS = dq_1 \dots dq_s dp_1 \dots dp_s$

$\{(q_1, \dots, q_s; p_1, \dots, p_s)\}$ = 相空间，一个点就代表着一个微观状态。

* 不同统计的条件，造成不同的统计量。 (14)

2.2 ~~统计规律~~

2.2 平衡态统计的几率率原理

* 宏观视图是宏观大、统计大，宏观稳定、微观长，每次观测都对应于极大数目的微观状态。所以，除了微观运动规律外，统计规律也起作用。这是由宏观系统与外界的作用不可避免及随机性决定的。叫做几率分布宏观状态的宏观状态和微观状态的联系由几率率相联。

* 宏观和微观可观测量的统计平均值。

* 在一定宏观状态下，微观状态出现的几率是统计物理的基本假设给出的。

* 对一个孤立系，即 (E, V, N) 固定系统 最简单、朴素的假设是几率率假设，即得几率率原理：对于处于平衡态下的孤立系，系统有尽可能的微观状态在出现的几率相等。

* 可能的微观状态是指占有宏观状态 (E, V, N) 的宏观微观状态数

* 原子：单粒子量由一组量子数标志，

即一组可对易力学算符的一组本征值描述 (本征值可连结，也可互独立)。例如，对自由粒子，~~所有~~ 动量本征值，能本征值与经典一样，都是连续的。但在在一个盒子里，波函数 $\psi(x) \propto e^{i k x / \hbar}$ ，而不是高斯波，波数也是离散的。

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} = \frac{2\pi^2 h^2}{L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2), \quad \Psi = \frac{2\pi h}{L} (n_x, n_y, n_z).$$

对于 $(3)-$ 维，可以有不同的量子态，例如 $n_x=0, n_y=1, n_z=2, \vec{n}=(0, \pm 1, \pm 2)$ ，上它都有相同的能级，简并度 $g=4$ 。

* 能量经典对应：单粒子状态 $\leftrightarrow \omega = h^2 m$ 单粒子能级。

* 能量量子化的全局性：用量子描述能级，无论是分子、原子、电子还是自旋、质子、都是一样的。

* 在三维或以上空间，只有波动和量子子。

* 在 $d=2, 1$ ，可以有既非波动、又非量子的统计。
(\sim 光子)

* 全同粒子不违反 $(3)-$ 单粒子对应。 (Pauli 泛化)

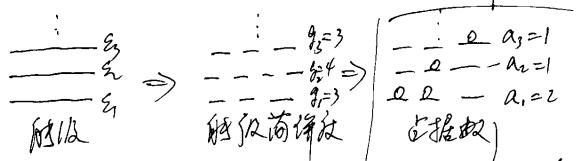
* 如果 ~~两个~~ 粒子可以“局域化”，则可互穿。如果，局域在不同区域的粒子，不能贯穿其中的电子，...

2.3 近独立粒子系统的统计物理

* 近独立是相邻的相邻很弱，且只对体系的宏观性质起作用，但对粒子的性质及负责微观的忽略。

$$E = \sum_{i=1}^N E_i, \quad E_i \text{ 为第 } i \text{ 个粒子的能级。}$$

* 对于能级的粒子， $E_\alpha, \alpha=1, \dots, r$ 是能级指标， α_α 为能级的简并度 (recall 量子 Box 中的自由粒子)。由于能级的全局性，指标不重要，重要的是能级上占据的粒子数。以及粒子的占据数的统计分布



* 对孤立系， (E, V, N) 。

$$\sum \alpha_\alpha = N, \quad \sum \alpha_\alpha E_\alpha = E$$

* 给定一个能级占据数分布 $\{a_\alpha\}$ ，由于能级能级可能有多个不同的量子态，一个能级分布可以有不同微观看状态 ~~与~~ 与之对应，设 $W(\{a_\alpha\})$ 为对应一微观状态宏观。由几率率原理，给出宏观几率 $P(\{a_\alpha\}) \propto W(\{a_\alpha\})$ 。

* 粒子态也有可区分和不可区分，对可区分的，

$$W(\{a_{\alpha}\}) = \frac{N!}{\prod \alpha_i!} \prod g_{\alpha_i}^{\alpha_i}$$

上 g_{α_i} 有 m 个，就是简单从 m 里选。而前一节中考虑 N 个粒子放在 M 盒子中，每个盒子放 α_i 个，用最可能分布，可以得到配分函数，有微扰系数，则可求出附加的热力学量。这是 Boltzmann 统计力学

* 对 Fermi 子和 Bose 子，它们在不同阶段仍是不可分辨的，只考虑泡利不相容原理中的不可分辨性称 Pauli 反馈。法则是

$$(对 Fermion) W_F(\{a_{\alpha}\}) = \prod \frac{g_{\alpha}!}{\alpha_1!(g_{\alpha}-\alpha_1)!}$$

$$W_B(\{a_{\alpha}\}) = \prod \frac{(g_{\alpha}+\alpha_1-1)!}{\alpha_1!(g_{\alpha}-1)!}$$

* 假设几率分布已知导出 Bose 和 Fermi 统计力学

* 由玻尔兹曼统计物理结果可以推广到一般情况，但最可能分布的推导方式不同。包括玻耳兹曼定理，要讲一部分内容。

任何物理可观测项 \bar{O} 是微观粒子数的统计平均值

$$\bar{O} = \int d\Omega \bar{O} \quad \int d\Omega = 1$$

* 系统处于某一微观状态（把宏观理解为处于该微观状态的几率）

* 处于 $d\Omega$ 中的 \bar{O} 由于系统会存在一个统计系综，即

系统是随机的，和研究系统性质完全相同。

彼此独立地处于某一微观状态的概率是一样的。

3.3.2 列维 (Liouville) 定理

列维定理：系综的几率密度（或代表其密度）在运动中不变，即 $\frac{d\bar{O}}{dt} = 0$ 或 $\frac{d\bar{P}}{dt} = 0$ 。

列维定理 ~~假设~~ 代表真概率 ~~不是运动~~

~~代表真概率~~：

$$\frac{\partial \bar{P}}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_{\bar{P}} = 0, \quad \vec{J}_{\bar{P}} = \bar{P} \vec{v}$$

$$\vec{v} = \left(\frac{\partial \bar{P}}{\partial p_i}, \frac{\partial \bar{P}}{\partial q_i} \right), \quad \vec{v} = (\dot{q}_i, \dot{p}_i)$$

~~列维方程~~ ~~3.3.2~~：

$$\frac{\partial \bar{P}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\bar{P}; H] = 0$$

第三章 微观统计学

平衡态统计一般理论是经典理论，它适用于任何的微观粒子系统。统计系综包括玻尔兹曼统计、亚统计和正则统计系综，前者是基础，但后者在实际计算中更方便。

3.3.1 经典统计系综

经典力学的微观状态是相空间中的一点，它遵从从牛顿运动方程

$$\dot{q}_i = -\frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad i=1, \dots, s.$$

$\{q_i^{(+)}, p_i^{(+)}\}$ 形成一个相轨道，称为 (宏观) 演进

$$ds = dq_1 \dots dq_s dp_1 \dots dp_s$$

是相体积元，

Γ 表示

设 Γ 为给定初条件所有可能的微观状态， $\tilde{\rho} d\Omega$ 为其中的微观状态数，即

$$\tilde{\rho} d\Omega = \frac{\tilde{\rho} d\Omega}{\Gamma} = \frac{\tilde{\rho} d\Omega}{\int d\Omega} \text{ 是概率密度}$$

状态出现在机内几率。 $\tilde{\rho} = \frac{\tilde{\rho}}{\Gamma}$ 称几率密度

因果性方程

~~因果性方程~~ $\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial p_i} \dot{p}_i = 0 \quad (1)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} &= \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} + \sum_i \left\{ \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial p_i} \dot{p}_i \right\} \\ &= -\dot{\tilde{\rho}} \leq \left\{ \frac{\partial H}{\partial q_i \partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i \partial q_i} \right\} = 0. \end{aligned}$$

因果性方程 $\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} + \sum_i \left\{ \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial p_i} \dot{p}_i \right\} = 0$

另一方面，~~因果性方程~~ $\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} + \sum_i \left\{ \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial p_i} \dot{p}_i \right\} = 0$

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} + \sum_i \left\{ \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial p_i} \dot{p}_i \right\} = 0$$

* 列维定理是相空间代表类密度的运动方程是力学定律，但它的假定假设提供了依据。

* ~~量子力学~~：用波函数代替经典力学；
~~② Schrödinger eq. 代替波动方程；~~
~~薛定谔方程~~ ~~海森堡方程：~~

$$\hat{\psi}(t) = e^{iHt/\hbar} \hat{\psi}(0) e^{-iHt/\hbar}$$

$$\hat{\psi}(t) = e^{iHt/\hbar} e^{iHt/\hbar} \hat{\psi}(0) e^{-iHt/\hbar} + e^{iHt/\hbar} \hat{\psi}(0) e^{-iHt/\hbar}$$

$$\hat{\psi}(t) = \hat{\psi}(0) [H, \hat{\psi}(0)], \quad \hat{\psi}(0) \text{ 固定。}$$

$$\frac{\partial \hat{\psi}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{\psi}; H] = 0 \quad \text{或} \quad \text{列维方程}.$$

$$\bar{\rho} = \sum_n \rho_n \langle n | D(t) | n \rangle = \text{Tr } \hat{\rho}$$

§3.2 量子统计力学

(19)

- * 对量子力学，我们用波函数或态矢量来代替经典力学的相空间的代数量。波函数波函数中人有 $|n\rangle$ 或 $\langle n|$, 但 $|A_n = \langle n|A|n\rangle$ 是力学量的可观测量的平均值。

对这个~~力学量~~，我们寄希望于一个~~力学量~~， $|n\rangle$, $n=1, \dots$ 其中 n 有 p_n 与之~~有关~~，即有~~力学量~~，这个~~力学量~~为

$$\text{这样, } p_n = \sum_{n'} p_{n'} \text{ 是一个~~力学量~~. } \sum_{n'} p_{n'} = 1.$$

~~力学量~~的~~统计平均值~~为

$$\bar{A} = \langle A \rangle = \sum_n p_n A_n.$$

- * 伎俩存在(或密度矩阵)

$$\hat{\rho} = \sum_n |n\rangle \langle n|. |n\rangle \text{ 是一~~基波~~空壳.}$$

$$\langle i|j \rangle = \delta_{ij}, \quad \hat{\rho} \text{ 和 } \hat{A} \text{ 互~~通~~通.}$$

$$\langle \hat{\rho}_{ij} \rangle = \langle i|\hat{\rho}|j \rangle = \sum_n \langle i|n \rangle \langle n|j \rangle$$

$$A_{ij} = \langle i|A|j \rangle. \text{ 由 } \bar{A} = \sum_n p_n \langle n|A|n \rangle = \sum_{ij} \sum_n p_n \langle n|ij \rangle$$

$$\Rightarrow \hat{\rho}_{ij} A_{ji} = \text{Tr}(\hat{\rho} A), \text{ Tr } \hat{\rho} = 1.$$

§3.3 微正则力学

- * 经典微正则力学， (E, N, V) 不变的条件，孤立系。利用道理 $\frac{dP}{dt} = 0$ ，若平行在物理量不随时间变，则需求以 $\frac{dP}{dt} = 0$ 为必要条件。即在一条相轨迹内， P 有常数。成立一条相轨迹（~~一条~~一条轨道内~~所有~~）内 P 为常数。但这不能保证不同轨迹~~中~~相~~同~~。假设~~则~~力学的基本假设是，~~力学~~当 $H(q, p) = E$ 时 $P = \text{Const.}$ $H \neq E$ 时 $P = 0$ 。~~力学~~则 E 平衡为一常数很困难，数学上~~的~~处理是

$$P = \begin{cases} C, & \text{当 } E \leq H < E + \Delta E \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

$$\lim_{\Delta E \rightarrow 0} C \int_{AE} d\omega = 1, \quad D(E, P) = \lim_{\Delta E \rightarrow 0} \int_{AE} 0 d\omega.$$

- * 热力学：等几率原理或微正则力学意味着只要时间足够长， (E, N, V) 对应的微观状态都可能出现。即~~热力学~~，但~~热力学~~这是由于微观状态在演化上~~是~~与外界~~相~~接触而~~是~~的。而不是由~~于~~演化，即~~是~~波尔兹曼的~~宏观~~假设。

* $\hat{\rho}_m$ 的~~方程~~

in> 满足 Schrödinger eq.

$$i \frac{\partial}{\partial t} |n\rangle = \hat{H} |n\rangle$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = \sum_n \left\{ \left(i \frac{\partial}{\partial t} |n\rangle \right) \langle n| - \langle n| \left(i \frac{\partial}{\partial t} \langle n| \right) \right\}$$

$$\Leftarrow \hat{H} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{H} = [H, \hat{\rho}]$$

$$\therefore \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} + i[H, \hat{\rho}] = 0.$$

($\hat{\rho}_m$ Heisenberg eq.)

$$\sum_n H |n\rangle p_n \langle n| - |n\rangle \langle n| H$$

* 等几率~~统计~~力学：① 动力学~~和~~热力学

$$(2) \quad p_n = \begin{cases} C, & E_n = E \\ 0, & E_n \neq E, \end{cases} \quad N \text{ 是等效的粒子数}$$

即~~等效~~能级为 E ，则~~出~~现概率为 C ，否则为 0.

$$(C \text{ 由 } \sum_n p_n = C \quad (\sum_{n(E_n=E)} 1) = 1)$$

(~~分子数~~ $N(E, V, N) = (\sum_n 1)_{(E_n=E)}$). 全

$$C = \frac{1}{N(E, V, N)}.$$

~~注意：~~ 等~~几率~~力学§3.4 微正则力学中宏观~~的~~计算经典~~的~~：

$$\bar{A} = \int A(q, p) P d\omega$$

$$\Rightarrow \bar{A} = \frac{1}{N!} \int_{\Omega}^S A d\omega$$

$$\text{分子： } \bar{A} = \sum_n p_n A_n \quad (E = E_n)$$

第6章 正则系综

§4.1 从微正则系综到正则系综

正则系综是指导系统与大面积接触达到平衡的系综， (T, V, N) 固定，大面积提供确定的温度。

① A 代表正则系综中的系统，B 代表大面积。

且 $A+B$ 是一个孤立系综 $(E_{\text{total}}, V_{\text{total}} = V_A + V_B, N_{\text{total}} = N_A + N_B)$ 。

若 A 和 B 互不影响，则 $E_{\text{total}} = E_A + E_B$ 。设 $S(E)$ 为 $A+B$ 的总熵，若 A 处于某一状态， B 可处于 $S_B(E_A)$ 状态。 $\therefore A$ 处于这个状态的几率是

$$\rho_{An} = \frac{S_B(E_A)}{S(E)}$$

E_A 对 E_A 偏离状态的贡献率。由 $E_A < E_{\text{total}}$ ， $E_A < E_B$ ， E_A 贡献率高。B 有多种状态， \therefore 我们可用一个自由度子系统代替指定。由上部的推导，

$S_B(E_A) \sim (E_A - E_A)^M$, $M \sim O(N_B) \sim O(N)$ 。
由于 M 很大， $E_A^M (1 - \frac{E_A}{E_{\text{total}}})^M = E_A^M (1 - \frac{E_A}{E_{\text{total}}} + \dots)$
二项式展开把 E_A 视为常数。

内能

$$\bar{E} = \sum_n E_n \rho_n = \frac{1}{Z_N} \sum_n E_n e^{-\beta E_n}$$

$$= \frac{1}{Z_N} \left(-\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_n e^{-\beta E_n} \right) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_N$$

$$\text{热强度: } P_{vn} = -\frac{\partial \bar{E}_n}{\partial V},$$

$$P = \sum_n P_{vn} \rho_n = \sum_n \frac{\partial \bar{E}_n}{\partial V} e^{-\beta E_n} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} \ln Z_N.$$

$$dS = \frac{d\bar{E}}{T} + \frac{P}{T} dV = k_B (\beta d\bar{E} + \beta P dV)$$

$$= k_B \left(-\beta \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_N + \frac{\partial}{\partial V} \frac{\partial}{\partial V} \ln Z_N \right)$$

$$= k_B \left(\ln Z_N - \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_N \right)$$

$$\therefore S = k_B \left(\ln Z_N - \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_N \right)$$

$$F = \bar{E} - TS = -k_B T \ln Z_N.$$

§4.3 热力学函数、热力学极限和经典极限

(在经典统计中，没有用到能量分布，而是以概率， P 为 E 和 \bar{E} 的方差，或方均根。此时方差， $(\bar{E}-\bar{E})^2/\bar{E}^2$ ，或 $\sqrt{(\bar{E}-\bar{E})^2}/\bar{E}$ 。

麦克斯韦玻耳兹曼

$$(E_A - E_A)^M = e^{M \ln (E_A - E_A)}$$

$$\ln (E_A - E_A) = \ln E_A + \ln (1 - \frac{E_A}{E_A}) = \ln E_A - \frac{E_A}{E} - \frac{1}{2} \left(\frac{E_A}{E} \right)^2 + \dots$$

这时，可以把 $O(E_A)$ 视为常数， ρ_{An} 对 Σ_B 作同样处理

$$\rho_{An} = \frac{1}{\Sigma_B(E)} e^{\ln \Sigma_B} = \frac{1}{\Sigma_B(E)} e^{\ln \Sigma_B(E_A) - \frac{E_A}{E} + \dots}$$

$$\approx \frac{\Sigma_B(E_A)}{\Sigma_B(E)} e^{-\beta E_A} \triangleq \frac{1}{Z_N} e^{-\beta E_A}$$

其中 $\beta = \frac{\partial \ln \Sigma_B}{\partial E_A}$ ， β 大概没变，从而得

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \cdot k_B \text{ 是 Boltzmann 常数, } T \text{ 是温度.}$$

$$\rho_{An} \equiv \rho_n, \quad \sum_n \rho_n = 1, \quad \Rightarrow \quad \sum_n e^{-\beta E_n}$$

$$E_A = E_n, \quad \Sigma_N \text{ 是正则子综的总贡献.}$$

$$\Sigma_N = \text{Tr} e^{-\beta H} = \sum_n \langle n | e^{-\beta H} | n \rangle = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

§4.2 热力学

$$\bar{E} = \frac{\text{Tr}(A e^{-\beta H})}{\Sigma_N} = \frac{1}{\Sigma_N} \sum_n \frac{h \nu c_i c_j m_e}{10^{34} \text{ J} \cdot \text{s} \cdot \text{C} \cdot \text{m}^3 \cdot 10^{14} \text{ Hz} \cdot 10^3 \text{ K} \cdot 10^3 \text{ g}}$$

$$\bar{A} = \sum_n A_n \rho_n = \frac{1}{\Sigma_N} \sum_n \langle n | A | n \rangle e^{-\beta E_n} \quad \begin{cases} \text{没有} \\ 3 E_n = E \\ \text{+ P&J} \end{cases}$$

$$= \frac{1}{\Sigma_N} \sum_n \langle n | A e^{-\beta H} | n \rangle = \frac{1}{\Sigma_N} \text{Tr}[A \hat{\rho}]$$

$$\overline{(E - \bar{E})^2} = \overline{(E^2 - 2\bar{E}E + \bar{E}^2)}$$

$$= \bar{E}^2 - 2\bar{E}^2 + \bar{E}^2 = \bar{E}^2 - \bar{E}^2$$

$$\bar{E}^2 = \sum_n E_n^2 \rho_n = \dots = \bar{E}^2 - \frac{2\bar{E}}{\partial \beta} |_{N, V}$$

$$\therefore \overline{(E - \bar{E})^2} = -\frac{\partial \bar{E}}{\partial \beta} |_{N, V} = k_B T \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_{N, V} = \frac{1}{3} T^2 C_V$$

* 拉格朗日极值

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{E}} / \sqrt{(E - \bar{E})^2} = \frac{\sqrt{k_B T^2 C_V}}{\bar{E}} \propto \frac{\sqrt{N}}{N} \frac{1}{C_V}$$

$$\therefore \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial T} = \frac{\sqrt{k_B T^2 C_V}}{AT} \propto \frac{\sqrt{N}}{N} = \frac{1}{\sqrt{N}} \quad \begin{cases} \text{实际常数} \\ \text{一般结果} \end{cases}$$

* 拉格朗日极值是错的， $N, V \rightarrow \infty$ ，但子系统

密度不变： $n = \frac{N}{V}$ 固定 \rightarrow 非理想气体

* 我们前面都用分子速率， $\frac{1}{2} m v^2$
速度 $v_T = h/(2\pi m k_B T)^{1/2} \ll \bar{v}$ (平均速度)

$\Delta E = E_n - E_{n-1} \ll k_B T$ 时，可用经典力学。

$$\text{这时: } Z_N = \frac{1}{N! h^3} \int d\Omega e^{-\beta H(\Omega)}$$

$$A = \frac{1}{\Omega Z_N} \int d\Omega A e^{-\beta H}$$

3.4.4 应用：非理想气体的状志方程

$$\text{模型: } E = k + V = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \sum_{i,j} \phi_{ij}$$

$$\phi_{ij} = \phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \text{ 且 } = \epsilon + (n/a) \sim 1/r^3$$

$$Z_N = \int d\vec{p}_1 \dots d\vec{p}_N e^{-\beta(E+V)}$$

$$(d\Omega) = \frac{1}{N! V^N} \int d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N d\vec{p}_1 \dots d\vec{p}_N$$

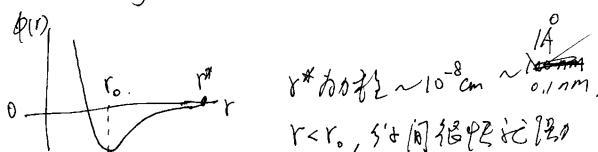
对分子积分非常简单，这就是玻尔兹曼分布。

$$Z_N = \frac{1}{N! V^N} Q_N(\beta, V), \quad V \text{ 是体积。}$$

$$Q_N = \int d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N e^{-\beta \sum_{i,j} \phi_{ij}} = \int (d\vec{r})^N e^{-\beta \sum_{i,j} \phi_{ij}}$$

是径向函数乘积。对理想气体， $\phi_{ij} \rightarrow 0$, $Q_N \approx V^N$

我们假设 ϕ_{ij} 是短程的，(例如， δ 势能)



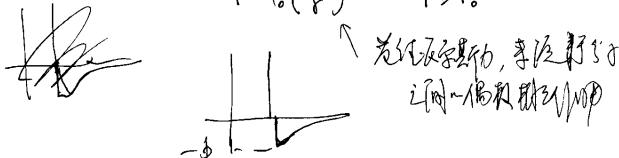
$$\left. \begin{aligned} \text{这样 } f_{ij} &= e^{-\beta \phi_{ij}} \\ f(r) &\Rightarrow \begin{cases} 1, & r \rightarrow 0, (\phi \rightarrow +\infty) \\ 0, & r \rightarrow r^*, (\phi \rightarrow 0) \end{cases} \end{aligned} \right\} \text{ 分段} \quad r > r_0, \text{ 分段势能解法。}$$

$$= \frac{Nk_B T}{V} \left[1 - \frac{N}{2V} \left(\int d\vec{r} f(r) \right) \right]$$

$$B_z = -\frac{N}{2} \int d\vec{r} f(r) \quad \text{即 } f = \text{径向分布}$$

(1) 径向分布

$$\phi(r) = \begin{cases} +\infty & r < r_0 \\ -b_0 \left(\frac{r_0}{r}\right)^6 & r \geq r_0 \end{cases}$$



$$B_z = -\frac{N}{2} \int_0^\infty (e^{-\phi(r)/k_B T} - 1) 4\pi r^2 dr$$

$$= 2\pi N \left[\int_0^{r_0} r^2 dr - \int_{r_0}^\infty (e^{-\phi(r)/k_B T} - 1) r^2 dr \right]$$

(设 $\phi_0 \ll k_B T$)

$$\approx 2\pi N \left(\frac{r_0^3}{3} - b_0 \frac{r_0^3}{3k_B T} \right) = Nb - \frac{Na}{k_B T}$$

$$\therefore p = \frac{Nk_B T}{V} \left(1 + \frac{Nb}{V} \right) - \frac{Na}{V^2} \approx \frac{Nk_B T}{V(1 - \frac{Nb}{V})} - \frac{N^2 a}{V^2}$$

$$\Rightarrow \left(p + \frac{N^2 a}{V} \right) (V - Nb) = Nk_B T$$

范德瓦尔斯方程

$$Q_N = \int (d\vec{r}) \prod_{i,j} (1 + f_{ij})$$

$$= \int (d\vec{r}) \left(1 + \sum_{i,j} f_{ij} + \sum_{i,j} f_{ij} \sum_{i,j} f_{ij} + \dots \right)$$

假设 $e^{-\beta \phi(r_0)} - 1 \ll 1$. 即 $e^{\beta \phi(r_0)/2} \ll 1$, 则在极限

情况下, $f_{ij} \rightarrow 0$ 可忽略

$$Q_N \approx \int (d\vec{r}) (1 + \sum_{i,j} f_{ij})$$

$$= V^N + \frac{1}{2} N(N-1) V^{N-2} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 f_{12}$$

假想边界条件 $\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 = \vec{r}$, 忽略边界效应。

$$\int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 f_{12} = \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 f(r) \approx V \int d\vec{r} f(r)$$

$$\therefore Q_N \approx V^N \left(1 + \frac{1}{2} (N^2 - N) / V \cdot \int d\vec{r} f(r) \right)$$

$$\approx V^N \left(1 + \frac{N^2}{2V} \int d\vec{r} f(r) \right)$$

$$\ln Q_N = N \ln V + \ln \left(1 + \frac{N^2}{2V} \int d\vec{r} f(r) \right)$$

$$\approx N \ln V + \frac{N^2}{2V} \int d\vec{r} f(r) \quad \text{化学方程: } \frac{N^2}{2V}$$

化方程,

$$p = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} \ln Z_N = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} \ln Q_N$$

$$= k_B T \left[\frac{N}{V} - \frac{N^2}{2V^2} \int d\vec{r} f(r) \right]$$

第5章 压缩系数

与膨胀系数类似，压缩同时体积减小的量

$$E_T = E_A + E_B, \quad N = N_A + N_B$$

$$\rho_n = \rho_{A,n} = \frac{S_B(N+N_A, E_T, E_B)}{\sum (N_j E_j)}$$

$$= \frac{1}{\sum (N_j E_j)} e^{\ln S_B(N+N_A, E_T, E_B)}$$

$$= \frac{S_B(N, E)}{S_B(N_A, E_A)} e^{-\frac{\partial \ln S_B(N, E)}{\partial N_A} N_A - \frac{\partial \ln S_B(N, E)}{\partial E_A} E_A}$$

$$= \frac{1}{N_A} e^{+\mu N_A - \beta E_A}$$

去掉 A 的指标, $N_A \rightarrow N$, $E_A \rightarrow E_n$

$$\rho_{N,n} = \frac{1}{\sum_n} e^{-\beta(E_n - \mu N)}$$

$$\text{由 } 1/2-\text{规则}, \sum_{n=0}^N \sum_{n=0}^N \rho_{N,n} = 1$$

$$\Rightarrow \sum_n e^{BN_n} \sum_n e^{-\beta E_n}$$

$$= \sum_{n=0}^N e^{BN_n} Z_N = T \cdot e^{-\beta(\hat{A} - \mu N)}$$

* 直到目前为止在统计物理中最常用。
 $(\text{effective}) \mu = \text{Fermi energy}$.

$$\bar{N} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_N = -k_B T \left(\frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z_N \right)_T$$

$$\bar{E} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_N$$

$$\beta = \frac{1}{k_B} \frac{\partial}{\partial V} \ln Z_N$$

$$S = k_B \left(\ln Z_N - \alpha \frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z_N - \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_N \right)$$

$$(\alpha = -\frac{\partial \mu}{\partial \beta})$$

$$F = -k_B T \ln Z_N + k_B T \alpha \frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z_N$$

$$U = -k_B T \ln Z_N$$

* 能级和半能级数随 $\sim \frac{1}{\sqrt{N}}$.

* 经典极限下

$$Z_N = \sum_n e^{-\epsilon_n N} Z_n$$

$$Z_N = \frac{1}{N! h^N} \int d\Omega_N e^{-\beta E_N}$$

* 应用举例：固体表面的吸附率

考虑 N , $N = \text{分子数}$, 设其为理想气体, 已知 [8.9.9]

$$e^{-\beta \mu} = \frac{(2\pi mk_B)^{3/2}}{h^3} k_B T$$

$$\text{于是 } \Theta = \frac{\bar{N}}{N_0} = \frac{1}{N_0} \frac{h^3}{(2\pi m)^{3/2} (k_B T)^{3/2}} e^{-\epsilon_0/k_B T}$$

$\uparrow \uparrow, \Theta \uparrow; T \uparrow, \Theta \downarrow$.

简并度

1. 用巨正则系统计算固体的理想气体-液体平衡.

2. 看书 8.9, 8.10, 8.12

(3)

$$\Theta = \frac{\bar{N}}{N_0} = \frac{\text{被吸收分子平均数}}{\text{总分子数}}$$

根据部分子数大于该处, 与外部分子达到平衡
 $N \rightarrow \bar{N}$. (T, μ, V) 不变, 设分子服从玻尔兹曼分布
 $-E_0$, 则 $E_N = -N E_0$.

$$\sum_{N_0} = \sum_{n=1}^{N_0} \sum_n e^{-\epsilon_n N - \beta E_N} = \sum_{N=0}^{N_0} e^{\beta(\mu + E_0) N}$$

n 表示 N_0 分子占据 N 分子中的一个
 \uparrow 对应于占据状态, 这样状态一定有 $\frac{N_0!}{N!(N_0-N)!}$, 且能分秩序.

$$\therefore \sum_n = \frac{N_0!}{N!(N_0-N)!}$$

$$\sum_{N_0} = \sum_{N=0}^{N_0} \frac{N_0!}{N!(N_0-N)!} e^{\beta(\mu + E_0) N}$$

$$= (1 + e^{\beta(\mu + E_0)})^{N_0}$$

$$\bar{N} = -\frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z_{N_0} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z_N \Big|_T$$

$$= N_0 \frac{\partial}{\partial \mu} e^{\mu + \beta E_0} = \frac{N_0 e^{\beta(\mu + E_0)}}{1 + e^{\beta(\mu + E_0)}}$$

$$\therefore \Theta = \frac{\bar{N}}{N_0} = \frac{1}{1 + e^{-\beta(\mu + E_0)}}$$

考虑量子统计 $-d=3, 2, 1$.

这里, 我们讨论量子统计. 若 $d=3$, 量子数 θ either bosons or fermions. 若 $d=2$, 以及 anyons.
 若 $d=1$, 量子数依赖于相环.

§ 6.1 用巨正则系统计出 Bose 和 Fermi 统计

$$Z_N = \sum_{N=0}^{N_0} \sum_{\substack{E_N \\ (\text{fixed})}} e^{-\epsilon_N N - \beta E_N}$$

(ϵ 为能量)
 把 E_N 放在一起

$$\text{设 } E_{N_1} = E_{N_2} = \dots = E_N \text{ 为 } \overbrace{\text{分子数}}^N \text{ 一起}$$

$$\sum_{N=0}^{N_0} \sum_{\substack{E_N \\ (\text{fixed})}} \sum_{\substack{a_x \\ E_{N_x}=E_N}} e^{-\epsilon_N N - \beta E_{N_x}}$$

$$\text{对自由粒子, } E_N = \sum_x a_x E_x, N = \sum_x a_x$$

$\{a_x\}$ 是一个子空间分布.

$$\begin{aligned} \sum_{N=0}^{N_0} \sum_{E_N} \sum_{\substack{a_x \\ \sum_x a_x E_x = E_N}} & W(sab) e^{-\sum_x a_x \epsilon_x - \beta \sum_x a_x E_x} \\ & = \sum_{\{a_x\}} W(sab) e^{-\sum_x (a_x \epsilon_x + \beta a_x) a_x} \end{aligned}$$

这里 $\{a_x\}$ 代表了所有可能分布 (各种可能, 各种状态).

对称粒子

$$W_\lambda = \frac{g_\lambda!}{a_\lambda!(g_\lambda-a_\lambda)!}$$

对称波函数

$$W_\lambda = \frac{(g_\lambda+a_\lambda-1)!}{a_\lambda!(g_\lambda-a_\lambda)!}$$

$$\Sigma_\alpha = \sum_{\{\alpha\}} \prod_\lambda [W_\lambda e^{-(\alpha+\beta\epsilon_\lambda)\alpha_\lambda}]$$

$$= \sum_{a_1} \dots \sum_{a_\lambda} \prod_\lambda [W_\lambda e^{-(\alpha+\beta\epsilon_\lambda)\alpha_\lambda}]$$

$$= \prod_\lambda \left(\sum_{a_\lambda} e^{-(\alpha+\beta\epsilon_\lambda)a_\lambda} \right)$$

$$\Sigma_\lambda^{(F)} = \sum_{a_\lambda=0}^{g_\lambda} \frac{g_\lambda!}{a_\lambda!(g_\lambda-a_\lambda)!} e^{-(\alpha+\beta\epsilon_\lambda)a_\lambda} = [1 + e^{-\alpha-\beta\epsilon_\lambda}]^{g_\lambda}$$

($a_\lambda \leq g_\lambda$)

$$\Sigma_\lambda^{(B)} = \sum_{a_\lambda=0}^{\infty} \frac{(g_\lambda+a_\lambda-1)!}{a_\lambda!(g_\lambda-a_\lambda)!} e^{-(\alpha+\beta\epsilon_\lambda)a_\lambda}$$

$$(利用) (1-x)^m = \sum_{n=0}^m \frac{(m+n-1)!}{n!(m-n)!}$$

$$= (1 - e^{-\alpha-\beta\epsilon_\lambda})^{g_\lambda}$$

$$\therefore \Sigma_\alpha = \prod_\lambda (\pm e^{-\alpha-\beta\epsilon_\lambda})^{g_\lambda}$$

$$\therefore \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) = e^{i\chi_{12}} \otimes \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots)$$

对称粒子, 由 Pauli 原理

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_1, \vec{r}_3, \dots) = 0.$$

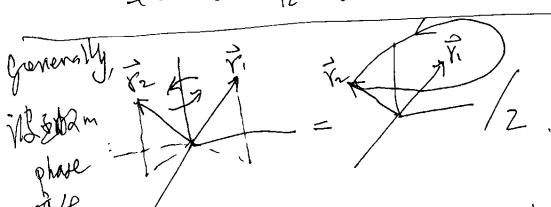
$$\text{or } \lim_{\vec{r}_1 \rightarrow \vec{r}_2} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) = 0 \quad \text{反交换}$$

$$\text{即 } \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) = -\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \dots), \text{ 即 } \chi_{12} = \pi \quad \Rightarrow \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) = \pi \# \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \dots)$$

对 Boson:

$$\lim_{\vec{r}_1 \rightarrow \vec{r}_2} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) = 0, \quad \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots)$$

$$\therefore 0. \quad \because \chi_{12} = 0 \pm 2n\pi.$$

互换空间, \vec{r}_2 交换 \vec{r}_1 时没有相移

障碍, 15 年由 Wigner 提出, 称为 phase

$$e^{i\phi} = e^{i2\pi n} \Rightarrow n = \text{odd, fermion} \quad \text{或} \quad n = \text{even, boson} \quad \text{只取 fermion or boson}$$

$$\ln \Sigma_\alpha = \pm \sum_\lambda g_\lambda \ln (\pm e^{-\alpha-\beta\epsilon_\lambda})$$

* 求 \bar{Z}_3 (互换 3 个单粒子)

$$\bar{Z}_3 = \sum_n \sum_m a_3 q_m$$

$$= \frac{1}{Z_2} \sum_{\lambda_1, \lambda_2} a_3 \left(\sum_\lambda a_\lambda W_\lambda e^{-(\alpha+\beta\epsilon_\lambda)a_\lambda} \right)$$

$$\prod_{\lambda+3} Z_\lambda$$

$$= \frac{1}{Z_2} \sum_\lambda a_\lambda W_\lambda \{ e^{-(\alpha+\beta\epsilon_\lambda)a_\lambda} \}$$

$$= -\frac{1}{Z_2} \frac{\partial}{\partial \alpha} Z_2 = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln Z_2.$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \alpha} (\pm g_\lambda \ln (\pm e^{-\alpha-\beta\epsilon_\lambda}))$$

$$= \frac{g_\lambda}{\alpha + \beta\epsilon_\lambda \pm 1}$$

§ 6.2 量子统计和波函数 (Fermion 和玻色子)

设 $\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ 是 N 粒子波函数。我们交换 \vec{r}_i, \vec{r}_j 的坐标, 根据假设进行 n 组操作

$$|\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2 = |\psi(\dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_{i-1}, \dots)|^2.$$

互换空间,

$$\circlearrowleft \neq Q \cdot \neq \circlearrowright, \dots$$

161 例

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \propto (z_1 - z_2)^\alpha, \quad z_1 \text{ 与 } z_2 \text{ 交换}$$

$$\Rightarrow (z_2 - z_1)^\alpha = (-1)^\alpha (z_1 - z_2)^\alpha. \quad \text{有一个任意数}$$

phase $\propto e^{i\alpha\pi}$. 下面将详细讨论之。
(互换为 anyon, 顶点子).

互换空间

$\frac{1}{2}$

二重交换的交换只能通过相位差, \therefore 一个波函数在空间位置与另一个空间位置相对应时, 只能简单地一阶化。

§ 6.3 路径积分和量 (泛函)
 对应于 $\beta = \frac{1}{kT}$, 热力学
 $\rho = \frac{e^{-\beta H}}{\text{Tr} e^{\beta H}}$ $\rho(\beta)$ 是温度 β 的分布.

$$\tilde{\rho} = e^{-Ht} \text{ 是 } t \text{ normalized in 应该这样写}
 - \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial \beta} = - \frac{\partial}{\partial \beta} (\tilde{\rho}_{ij}) \text{ 的表达式}
 = (- \frac{\partial}{\partial \beta} \delta_{ij} e^{-\beta E_i}) = (\delta_{ij} E_j e^{-\beta E_i})
 = (E_i \tilde{\rho}_{ij}) = H \tilde{\rho}.$$

$\therefore - \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial \beta} = H \tilde{\rho}, \quad (\tilde{\rho}(0) = 1).$
 这是守恒方程. 在任何状态都对, 在这个表示

$$- \frac{\partial \tilde{\rho}(x, x'; \beta)}{\partial \beta} = H x \tilde{\rho}(x, x'; \beta).$$

$$\tilde{\rho}(x, x'; 0) = \delta(x - x').$$

Formally: ~~$\tilde{\rho} = e^{-Ht}$~~ $\tilde{\rho} = e^{-Ht}$ redefined: $u = \beta t$.

$$\tilde{\rho} = e^{-Hu/k} = e^{-Ht \tilde{\rho}(u)}.$$

$$\text{Formally: } \tilde{\rho}(u) = e^{-Hu/k}.$$

以一维自由粒子为例, $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$,

$$\rho(x, x'; \epsilon) \approx \sqrt{\frac{m}{2\pi kT\epsilon}} e^{-(m/kT\epsilon)(x-x')^2} \quad (\text{Feynman's path integral})$$

$$\rho(x, x'; u) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int \frac{dx_1}{\sqrt{2\pi kT\epsilon}} \cdots \frac{dx_{n-1}}{\sqrt{2\pi kT\epsilon}} \text{ 为 } S \text{ 的表达式} \quad \text{如果想求出}$$

$$\cdot e^{-\frac{mu}{2\hbar}} [(x_{n-1})^2 + \dots + (x_1)^2] \quad \text{如果想求出}$$

$$\frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon} \rightarrow \frac{dx(x)}{dx} = \dot{x}(x) \quad \left[\begin{array}{l} \text{直接写} \\ - \frac{\partial \rho(x, x'; \epsilon)}{\partial x} \end{array} \right] \quad \text{在 } \text{Def.} \quad \left[\begin{array}{l} \text{直接写} \\ - \frac{\partial^2 \rho(x, x'; \epsilon)}{\partial x^2} \end{array} \right]$$

$$\rho(x, x'; u) = \int \mathcal{D}x e^{-S/\hbar} \quad \left[\begin{array}{l} \text{直接写} \\ \text{直接写} \end{array} \right]$$

其中 $S = \int_0^u dx L(x), \quad L(x) = \frac{m}{2} (\dot{x}(x))^2$
 自由粒子 L 动量.

$$Z = \text{Tr } \rho, \quad \text{为 } S \text{ 的泛函}$$

$$Z = \int dx \rho(x, x) = \int \mathcal{D}x e^{-\int_0^u dx L}$$

这时任何相空间子空间时, 对于正则子集

$$Z_A = \int \mathcal{D}x(u) e^{-S_A}, \quad S_A = S - \mu N.$$

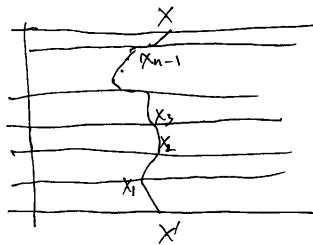
$$[t\beta] = [t], \quad \text{于是 } u = \hbar \epsilon$$

$$\rho(u) = e^{-H\epsilon/k} e^{-H\epsilon/k} \cdots e^{-H\epsilon/k}$$

$$= \rho_0 \rho_1 \cdots \rho_n.$$

在坐标表示:

$$\rho(x, x'; u) = \int \cdots \int \rho(x, x_{n-1}; \epsilon) \rho(x_{n-1}, x_{n-2}; \epsilon) \cdots \rho(x_2, x_1; \epsilon) \rho(x_1, x'; \epsilon) dx_{n-1} \cdots dx_1.$$



$$n \rightarrow \infty, \epsilon \rightarrow 0, \quad n\epsilon = u.$$

$$\rho(x, x'; u) = \int \mathcal{D}x \Phi[x(u)]$$

$$\Phi[x(u)] = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ u = \epsilon n}} \rho(x, x_{n-1}; \epsilon) \cdots \rho(x_1, x'; \epsilon).$$

~~$\mathcal{D}x(u)$~~ $\mathcal{D}x(u) = \lim_{n \rightarrow \infty} dx_1 \cdots dx_{n-1}.$

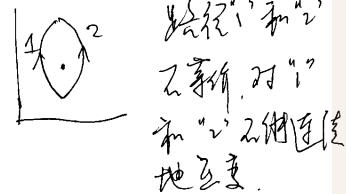
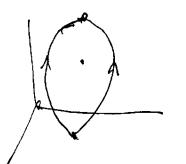
6.4 不确定、统计力学和基础: $d=2$. (2)

partition function Φ in $x \rightarrow it$, 把 x 看成场

中一个特定的传播子.

$$\rho(x, x'; t) = \int \mathcal{D}x e^{i \int_0^t dt' L}$$

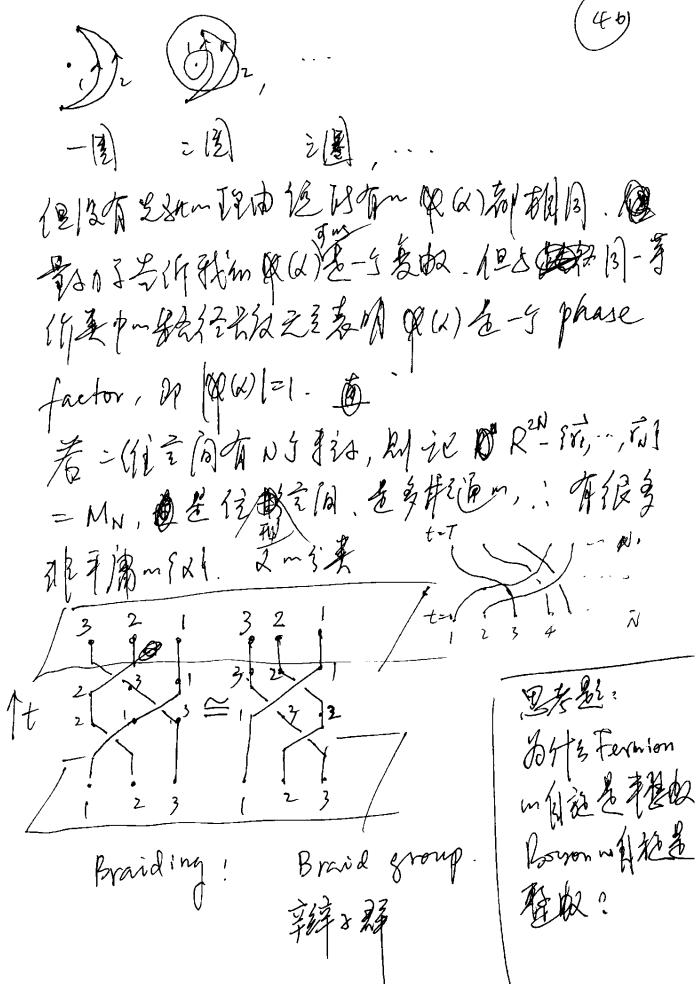
Φ 是对所有可能的路径积分. 在 (x, t) 空间,
 任何路径对系统热力学性质有贡献. 但至二阶空间



$$\therefore \mathcal{D}x \rightarrow \mathcal{D}\Phi \Phi(x) \mathcal{D}x$$

而 $\mathcal{D}x$ 中只有路径都可以直接互换. Φ 在
 (x, t) 空间中只有互换一个路径的等价类.





对 N 个粒子，有 $B_N(R^2)$. 通过，
 B_N 中一个元素有群之 (无限, nonabelian) 部
分叫 braiding 部分. 在 braiding 产生时，
记 σ_i 是 x_i 及 x_{i+1} 互换时的变换，且左乘以 σ_i
右乘以 σ_i^{-1} ：

$$\begin{array}{c} \sigma_i \\ x_i \quad x_{i+1} \end{array} = \sigma_i \quad \sigma_i^{-1} = \begin{array}{c} x_{i+1} \\ x_i \end{array}$$

$$\sigma_i \sigma_{i+1} \sigma_i = \sigma_{i+1} \sigma_i \sigma_{i+1}$$

从而有 $\sigma_i \sigma_j = \sigma_j \sigma_i$

解：

$$\begin{array}{c} \sigma_i \\ x_i \quad x_{i+1} \end{array} = \begin{array}{c} x_{i+1} \\ x_i \end{array}$$

群论
Non-abelian group
但一维表示
Abelian 三结
⇒ 量子力学基础

$$\sigma_i \sigma_k = \sigma_k \sigma_i \quad (k \neq i \pm 1)$$

这就是一个群论群的高维表示. 设
 $\phi_0(\sigma_i)$ 是生成元之一的表示. $\phi_0(\sigma_i) = e^{-i\theta}$
满足群的群关系. ($0 \leq \theta < 2\pi$). 当 $\theta = 0$, \Rightarrow Real
情形, 当 $\theta = \pi$, \Rightarrow Fermi (反粒子). $\theta = \pi/2$ 时.
类似 (统计).

(4c)

$$\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_{i+1} + \dots + \vec{r}_N$$

$$\therefore \phi_0(\sigma_i^{\pm 1}) = e^{\mp i\theta} = \exp\left(-i\frac{\theta}{\pi} \sum_{j \neq i} \Delta\phi_{ij}\right)$$

$$e^{-i\frac{\theta}{\pi}(\pm\pi)} = \exp\left[-i\frac{\theta}{\pi} \sum_{j \neq i} \Delta\phi_{ij}\right]$$

其中只有 $\Delta\phi_{i,i+1} = \pm\pi$, 其他 $\Delta\phi_{ij} = 0$.

推广到 $n - 2m$ 维:

$$\phi_0(\omega) = \exp\left(-i\frac{\theta}{\pi} \int dt \frac{d}{dt} \sum_{ij} \Delta\phi_{ij}\right), \quad \omega = (\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)$$

\therefore 传播 $K(r't'; rt)$

$$= \int \exp\left[i \int_r^{r'} dt \left[L - \frac{\theta}{\pi} \frac{d}{dt} \sum_{ij} \Delta\phi_{ij}\right]\right] d\vec{r}(t)$$

现在来考虑路径积分 $\int dr(t)$ 使积分有意义.

令 $f(r,t)$ 是 $r(t)$ 的单值函数.

由传播子 $\psi(r,t) = \int dr K(r't'; rt) \psi(r,t)$.

设 $\tilde{\psi}(r,t) = \exp\left(-i\frac{\theta}{\pi} \int dr \left[\sum_{ij} \Delta\phi_{ij}\right]\right) \psi(r,t)$.

现在考虑由路径积分的贡献.

如果没 braiding 项时，

$$\psi(r',t') = \int dr K(r't'; rt) \psi(r,t).$$

定义 $\tilde{\psi}(r',t') = \exp\left\{-i\frac{\theta}{\pi} \int_r^{r'} dt \left[\sum_{ij} \Delta\phi_{ij}\right]\right\} \psi(r',t')$, ③
若添上 braiding 项后 ψ 便非单值，(r' 是一个参数，
从 t 到 $t' = 0$).

$\tilde{\psi}(r',t') = \int dr \int dr' K(r't'; rt) \tilde{\psi}(r')$
 K 包括从 $t \rightarrow t'$ 时的 braiding 项. ④

若把 ψ 为

$$\tilde{\psi}(r,t) = \prod_{i < j} \frac{(z_i - z_j)^{\theta/\pi}}{|z_i - z_j|^{\theta/\pi}} \psi(z,t).$$

$$= \prod_{i < j} (z_i - z_j)^{\theta/\pi} f(z,t). \quad \text{其中 } f \text{ 是}$$

由 θ 所确定的复数系数. 与绝对称.

3.6.5 一级统计：玻尔兹曼统计 (5)

在一维空间，任意的粒子需占据位置 x_i 且
相互接触，所以除自由统计，统计与相互作用
相关。
 例 1. Fermi 统计：
~~首先找能级分布~~ N 个 particle 的概率分布。
 $W_{\text{tot}} = \frac{[G + (N-1)(1-s)]!}{N! [G - (N-1-s)!]} = W_B$
 $s=0, W_0 = \frac{[G+N-1]!}{N! [G-1]!} = W_F$

$0 < s < 1$, 则是 Bose 和 Fermi 之间的过渡。

如果 $s=1$ 如果有 N 个分布 $\{x_i\}$ ，则

$$N = \prod_{\alpha} N_{\alpha}! [G_{\alpha}-1 - \sum_{\beta \neq \alpha} S_{\alpha\beta} (N_{\beta} - S_{\alpha\beta})]$$

$$\text{取 } S_{\alpha\beta} = S \delta_{\alpha\beta}, \text{ 令 } s=0, \quad s=1$$

$$W_0 = \prod_{\alpha} \frac{(G_{\alpha}+N_{\alpha}-1)!}{N_{\alpha}! [G_{\alpha}-1]!}, \quad W_1 = \prod_{\alpha} \frac{G_{\alpha}}{N_{\alpha}! (G_{\alpha}-N_{\alpha})!} = W_B$$

这里 $S_{\alpha\beta}$ 表示不同“坐标”占据空间的重叠。

相互作用。

\Rightarrow 1D 例子。

例 1. 粒子作用波函数 ($C=0, 1D$)

$$H = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2C \sum_{i,j} \delta(x_i - x_j), \quad C > 0.$$

用 ~~能级分布~~ “Fourier” 展开，互动 \Rightarrow 能级 $E = \sum_k k_i^2$.

\rightarrow 在无限级数极限下， $\lambda \rightarrow k$

$$S_{\alpha\beta} \rightarrow S(k, k') = \delta(k-k') + \frac{1}{2\pi} \theta'(k-k')$$

$$\text{其中 } \theta = -2 \tan^{-1}(h/c). \quad (\text{Bothe Ansatz})$$

$$\theta'_{\alpha}(k-k') = \frac{-2c}{C + (k-k')^2}. \quad (\text{Yang-Yang})$$

$$\text{当 } C \rightarrow \infty, \theta' = 0, \quad S(k, k') = \delta(k-k').$$

$$\text{当 } C \rightarrow 0, \quad S(k, k') = -\delta(k-k').$$

一般 C , 并没有 h/c 的简单表达式。

3.6.6 Calogero-Sutherland (Fermion) (2)

$$H = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \sum_{i,j} \left(\frac{1}{2} \sin^{-2} \left(\frac{\pi(x_i - x_j)}{L} \right) \right)^2$$

$$\rightarrow \infty. \quad \text{并令 } \rightarrow \left(x_i - x_j \right)^2.$$

$$S(k, k') = \lambda \delta(k-k') = \delta(k-k') + (\lambda-1) \delta(k+k')$$

$$\therefore \theta = 2\pi(\lambda-1) \operatorname{sign}(k-k')$$

$$\lambda=1 \Rightarrow \text{Fermion}, \quad \lambda=\frac{1}{2} \Rightarrow \text{Semion}.$$

$$\lambda=2, \text{ dual semion.}$$

可以根据 Bethe Ansatz 写出“单粒子能级” $E(k)$ 。
这个 $E(k)$ 一般由一维 Schrödinger 方程得出 (但是对 CS model):

$$E(k) = \begin{cases} (k^2 - k_F^2)/\lambda, & |k| < k_F \\ k^2 - k_F^2, & |k| > k_F \end{cases}$$

只考虑 k_F :

$$Z_G = \prod_k \left(1 + e^{-E(k)/T} \right).$$

(~~只考虑~~)

第七章 相变、临界现象和量子化群论

物理学中不同物理性质的体系并不互相依赖，例如，固态、液体和气体。不同相可以相互转换，称为相变。在一些特殊条件下，两相或三相可以平衡。这些条件就是相变线。于是，可以根据这些画出相图。根据量子力学，在平行时的行为，可以求得相变。

一级相变：相变差，两相变化互不影响，但 ~~它们~~ 有一阶相变不相容，即

$$\mu^a = \mu^b = 0, \quad S^a - S^b = -\left(\frac{\partial \mu^a}{\partial T}\right)_P + \left(\frac{\partial \mu^b}{\partial T}\right)_P \neq 0, \dots$$

二级相变： $\Delta \mu = 0, \Delta S = 0, \Delta T = 0, \dots$ 但

$$\frac{\partial \mu}{\partial T} \neq 0, \quad \frac{\partial S}{\partial T} \neq 0 \text{ 不连续或发散。}$$

即 $\Delta \mu, \Delta S, \Delta T$ 不连续或发散。

同样可以定义一级相变，但二级相变 $\Delta \mu \neq 0$ 只有 BEC。三级相变 $\Delta S \neq 0$ 但 $\Delta T = 0$ 是最复杂。

($T \rightarrow 0$, 有无限级数项之差)

§7.1 朗道=假想度理论简介

朗道建立描述二级相变的假想理论，引入了
一个新概念：序参量和对称性破缺。

序参量是用于区分两个相的不同“物理量”，例如，在液体-固体中，有序破坏和铁磁性，至高温时，~~每个~~每个电子的自旋取向在空间是随机的，作为其平均值的物理量，序参量强度 $M = 0$ 。随着温度降低，由于电子之间的作用，铁磁性在其中开始趋于同向，平均来说 $M \neq 0$ 。 $M = 0$ 时 $M \neq 0$ 时这就是临界温度 T_c 。

$$\begin{array}{c} \nearrow \downarrow \\ \downarrow \uparrow \\ \vdots \end{array}$$

$$\begin{array}{c} \nearrow \downarrow \\ \downarrow \uparrow \\ \vdots \end{array}$$

对于 M 为铁磁体序参量

$$M = 0$$

$$M \neq 0$$

至高温相， $M = 0$ ，说明
电子自旋取向任一方向的几率都一样，~~这样~~这样

倒施有转动对称性（倒施的 $SU(2)$ 不对称）而至低温， $M \neq 0$ 表明电子自旋趋向取向某一方面，“转动不变性”破缺意味着“对称性破缺”。降温引起 $M \neq 0$ 是由下图中朗道图形成 $M \neq 0$ 的

把自由能极小化

朗道理论要先通过自由能互易定理

近似序参量展开，进而得出序参量对自由能泛函依赖。林恩哥书中举了 $H=0$ 时 M 的例子。请看家教书。这里再举一个简单的例子，即所谓 GL 理论。超导体 Gibbs 自由能为序参量（绝对零度时）的函数，至临界点 $g_s(\psi=0) = g_n$ 。 $g_n = f - B$ 是正考夫man Gibbs free energy。展开 $g_s(\psi)$

$$g_s(\psi) = g_n + A|\psi|^2 + \frac{B}{2}|\psi|^4 + \dots \quad (\text{4维复数})$$

当 $T < T_c$ ， $g_s < g_n$ ， $\therefore A(T) < 0$ ，($\because \lambda(T_c) = 0$)， \therefore

$$A(T) = (T - T_c) \left(\frac{\partial A}{\partial T} \right)_{T=T_c}$$

$B(T)$ 是 $|\psi|$ 的系数， \therefore 取 const. 即可。

$$B(T) = B(T_c) = B_c.$$

在物理上，需求自由能极小。

$$\frac{dg_s}{d\psi} = 0, \Rightarrow A + B_c|\psi|^2 = 0,$$

$$\Rightarrow |\psi|^2 = -\frac{A}{B_c}. \Rightarrow g_s = g_n - \frac{A^2}{2B_c}.$$

序参量“自发破缺”， $SU(2)$ 对称也由加一个外部场引起，序参量“明显破缺”。序参量是过弱时破缺的结果，这样叫“对称性”。序参量和“自发破缺”的例子有很多：

固液相变 平移不变性 DLRO

液体-液晶 转动不变性 液晶的各向异性

超导-金属 马约拉纳对称性 [绝对温度时]
玻璃-超导 $K=0$ 时对称性 ODLRO

~~液体-玻璃~~ ~~转动~~

$$\text{次类固相结构} \quad \text{滑脱层界时} \quad \frac{W_1 - W_2}{W_1 + W_2}, \quad \begin{matrix} W_1: \text{柱径} \\ W_2: \text{壁厚} \end{matrix}$$

也有一些不是二级相变，但“序参量”概念仍可用的例子：

(体积突变)

气-液相变 一级相变， $P_{\text{liquid}} - P_{\text{gas}} \neq 0$.

补偿超导-金属相变 一级相变，[绝对温度时] $|F_{\text{super}}|^2$
(电子气体和空壳)

理想玻色子起振 二级相变 $K=0$ 时波长变大。

$$\text{另一方面, } g_n - g_s = \mu_0 H_C^2(\tau)/2,$$

\therefore 在 T_c 附近

$$H_C^2(\tau) = \frac{A^2}{\mu_0 B_c} = \frac{(T_c - \tau)^2}{\mu_0 B_c} \left(\frac{\partial A}{\partial T} \right)_{T=T_c}^2.$$

$$\Rightarrow H_C \propto T - T_c.$$

GL 理论起源于原有 Landau 限低一地方差，假设序参量 $|\psi|^2 = n$ 有空间分布，这样， g_s 也有空间分布，

$$g_s = g_n + A|\psi|^2 + \frac{B}{2}|\psi|^4 + \frac{1}{2m^2} |(-i\hbar \nabla \psi)|^2$$

是 Gibbs 自由能为

$$|(-i\hbar \nabla - e\vec{A})\psi|^2$$

$$G_s = \int d\vec{r} g_s(\vec{r})$$

$$\frac{\delta G_s}{\delta \psi} = 0 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} A\psi + B|\psi|^2 + \frac{1}{2m^2} \vec{D}\psi = 0 \\ \vec{D}\psi = 0 \end{array} \right. \quad (\text{直接解出}).$$

GL 方程。一个简单应用 序参量的相变
考虑弱场 $|\vec{A}\psi| \ll |\psi|$ ，则可以立 GL 方程中忽略 A ，而 $\vec{D}\psi = \vec{D}\psi(0) = \vec{B}_0$ 很微弱。宜取 $f = \frac{\psi}{\psi_0}$ ，取 $\vec{f} = \vec{f}$ 。则

(b) 美丽指数, η (64)

平均场计算的美丽指数的指數

decay 立方根是正确的, 正确的结果是

$$\text{decay} \sim r^{-d+2-\eta} \quad \eta \text{ 是美丽指数}$$

$$\text{平均场解} \quad G(k) \sim k^{-2+\eta} \quad G(k) \propto \int dr \delta(r) e^{ikr}$$

这些临界指數都未实现于实验上 (见图), 但由于临界附近的时间很长, 通过达到平衡所需时间很长 (临界慢化), 则可接受之 (见书第 p480). 但分析这些结果发现, 石墨指數之间存在一些关系, 称为标度律

$$\begin{aligned} & 2 + 2\beta + \gamma = 2 \\ & \gamma = \beta(\beta-1) \\ & \gamma = \nu(2-\eta) \\ & \nu\alpha = 2 - \alpha \end{aligned} \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{由临界指數,} \\ \text{4个约束,} \\ \text{2个独立.} \end{array} \right.$$

3.3 量子变体和相变 (65)

量子相变是指 $T=0$ 时, 量子石墨相之间由于某一个参数的变化引起相变. 对于有限系统, 设 $H(g)$ 为哈密顿, g 为 coupling constant, 一般来说, $E(g)$ 是光滑函数, 不会发生相变. 有一种情况可能: $H = H_0 + gH_1$, $[H_0, H_1] \neq 0$. 这时, H_0 和 H_1 同时对角化, 有石墨特征根.

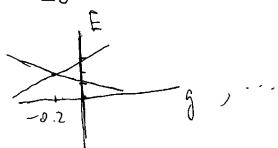
$$E_n = E_n^{(0)} + g E_n^{(1)}$$

$$E_0 = E_0^{(0)} + g E_0^{(1)}, \quad E_1 = E_1^{(0)} + g E_1^{(1)} \quad \text{若在某 } g=g_c.$$

$$E_0(g_c) = E_1(g_c), \quad \text{但 } \frac{E_1^{(0)} - E_0^{(0)}}{E_0^{(0)} - E_1^{(0)}} < 0. \quad \text{即}$$

从图

$$E_1 = 2 + g_3 \\ E_0 = 1 + g(-2), \quad g_c = \frac{1}{5}.$$



level crossing
一般相变

这些关系与具体系统和假设 (如无序) 有关.
具有一定的普遍性 (普遍性假设).

系统临界平行行为 (二阶过渡): 空间维数 d 和序参数维数 n. 具有相似 d 和 n 的序参 (属于 I)-一个普遍性. 具有相似 d 的临界行为. $n \neq d$ (非 I)

* 一个序参的序参数可以是实数、复数和复数.

如果它是实数, $n=1$, 复数 $n=2$, 三阶数, $n=3$.

$n=1$, 气液相变中的密度差, 金属中的磁化强度.

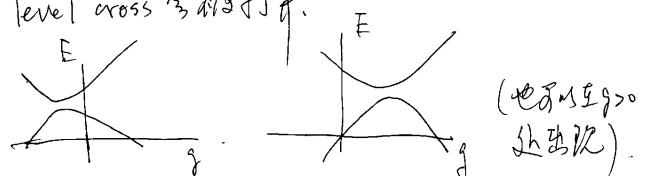
$n=2$, 平面自旋模型 (XY 模型), 超导、超辐射、超流起源于波函数.

$n=3$, 三维壁模型中的磁化强度.

* 普遍性背后的物理原因是临界点的连接线
无穷大, 同时, 描述子系统其他特性 (如散射、倒带, lattice spacing, 相互作用力程域) 及微观细节,
(晶格结构, 对称性) 都不重要, 被子系统的
合作所屏蔽掉.

在大多数情况下, $[H_0, H_1]$ 互可易, 这种

level cross 会自动打开.



(也可至 $g > 0$
处坐以).

在 infinite L 的情况下, 有可能出现两种情况,
(i) 简单 level cross. (ii) 打开 gap 无限接近于零.
这就是量子相变. 在相变前后, correlation function
会有变化 (见图).

由此可见, 量子相变发生于间隙 $\Delta \rightarrow 0$ 或是
在 $g \rightarrow g_c$ 时发生 gapless. 即

$$\Delta \sim \Gamma (g - g_c)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{非} \Gamma \rightarrow 0).$$

Δ 是 non-universal, 很难根据系统参数.

($g \rightarrow g_c$ 时 Δ 不一样).

类似地, 也有量子 correlation length ζ

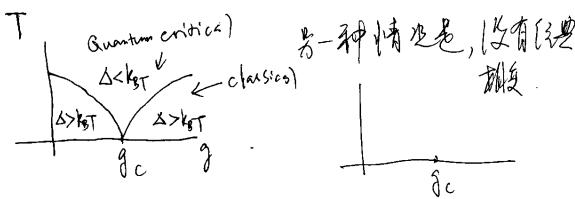
$$\zeta \sim \Gamma (g - g_c)^{-\nu},$$

$$\text{且 } \Delta \sim \zeta^{-2},$$

有限温度，分为两种情况，

① $k_B T > \Delta$ ，这时，量子效应比经典效应强。
（称为 Boltzmann regime）。

② $k_B T < \Delta$ ，这时，量子效应比经典效应弱。
（称为 Quantum regime）。这时，会发生经典相变。



§7.4 Ising model.

为了对相变、临界指前，量相变有一个更直观的感受，我们讨论 Ising model。

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z - \sum_i B S_i^z$$

$$S_i^z = \pm \frac{1}{2} (h) \text{ or } S_i^z \rightarrow \sigma_i = \pm 1.$$

由题，

$$F = -k_B T \ln Z$$

$$= -N k_B T \left[\ln 2 + \ln \cosh \left(\frac{B}{k_B T} + \frac{2J}{k_B T} \bar{\sigma} \right) \right]$$

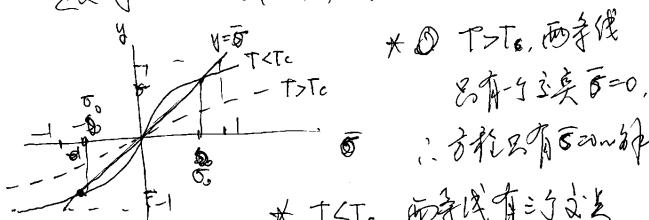
$$\therefore M = N \frac{\partial F}{\partial B} = -\frac{\partial F}{\partial B} = N \tanh \left(\frac{B}{k_B T} + \frac{2J}{k_B T} \bar{\sigma} \right)$$

$$\Rightarrow \bar{\sigma} = \tanh \left(\frac{B}{k_B T} + \frac{2J}{k_B T} \bar{\sigma} \right)$$

自然能。

$$\text{取 } B=0, \bar{\sigma} = \tanh \left(\frac{2J}{k_B T} \bar{\sigma} \right) = \tanh \left(\frac{I_c}{T} \bar{\sigma} \right).$$

$$\text{设 } y = \tanh \left(\frac{I_c}{T} \bar{\sigma} \right), y = \bar{\sigma}$$



即 $T > T_c$ 为无序相 $\Leftrightarrow \bar{\sigma} = \{ \}^\infty \Rightarrow \bar{\sigma} = \pm \frac{1}{2}$
 $T < T_c$ 为有序相。
 $\because \ln \cosh x \geq 0$ 且 $x=0$ 时 $\ln \cosh x = 0$ $\therefore \bar{\sigma} = \pm \frac{1}{2}$ 稳定！

§7.4.1 平均场近似。

首先让我介绍平均场近似。

$$H = - \sum_i \sigma_i \left(B + J \sum_j \sigma_{j+\delta} \right)$$

$$= - \sum_i \sigma_i (B + h_i).$$

用 $\bar{\sigma}_i$ 表示第 i 个格子的平均值，且认为 $\sum_i \bar{\sigma}_{i+\delta} = \frac{1}{8} \bar{\sigma} = \frac{1}{2} \bar{\sigma}$ 。

$$(H)_M = - \sum_i (B + h_i) \bar{\sigma}_i \quad h = \frac{1}{2} J \bar{\sigma}$$

$$\text{这样, } Z_N = \sum_{\sigma_1} \cdots \sum_{\sigma_N} \exp \left[\beta \left(B + h_i \right) \sigma_i \right]$$

~~$$= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \prod_{i=1}^N \exp \left(B + h_i \right) \sigma_i$$~~

~~$$= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \prod_{i=1}^N \exp \left(B + h_i \right) \sigma_i \cdots \sum$$~~

$$= \sum_{\sigma_1} \exp \beta (B + h) \sigma_1 \sum_{\sigma_2} \exp \beta (B + h) \sigma_2 \cdots$$

$$= \prod_{i=1}^N \left(\sum_{\sigma_i} \exp \beta (B + h) \sigma_i \right)$$

$$= \prod_{i=1}^N \left(\exp \beta (B + h) + \exp -\beta (B + h) \right)$$

$$= \left[2 \cosh \left(\frac{B + h}{k_B T} \right) \right]^N$$

显然, $H(\sigma_i) = H(\bar{\sigma}_i)$, 有无序特征,

这表示一个给定的 $\bar{\sigma}$ 或 $\bar{\sigma} = \pm \frac{1}{2}$ 或 $\bar{\sigma} = 0$ 时, \Rightarrow 相变破坏。

~~相变 = 温度 = 临界温度 = 临界点~~。

① $\bar{\sigma} = 0$

注意 $\bar{\sigma} = 0$ 是 T 的函数, 当 $T \sim T_c$ 时, $\bar{\sigma} \sim 0$.

$$\therefore \tanh \frac{I_c}{T} \bar{\sigma} \approx \frac{T_c}{T} \bar{\sigma} - \frac{1}{3} \left(\frac{T_c}{T} \bar{\sigma} \right)^3 = \bar{\sigma}$$

$$\Rightarrow \frac{T_c}{T} - \frac{1}{3} \left(\frac{T_c}{T} \bar{\sigma} \right)^2 = 1, \quad \bar{\sigma} = \frac{3(I_c)^2}{(T_c)^3} \left(\frac{T_c}{T} - 1 \right)$$

$$\bar{\sigma} = \sqrt{3} \left(\frac{T_c}{T} - 1 \right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{3} \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\Rightarrow M \sim (T_c - T)^{\frac{1}{2}}$$

$$\text{取 } F, \text{ 由方程 } C_B = \begin{cases} 0, & T \rightarrow T_c^+ \\ 3Nk_B T_c, & T \rightarrow T_c^- \end{cases}$$

$$\text{可证明: } M \sim (T - T_c)^{-1} B,$$

$$X = \frac{\partial M}{\partial B} \sim (T - T_c)^{-1}, \quad \boxed{1^{\text{阶}}}$$

$$M(T_c, B) \sim B^{\frac{1}{2}},$$

$$\Rightarrow \text{互易场场 } f, \quad \beta = \frac{1}{2}, \alpha = 0, \gamma = 1, \delta = 3. \quad T_c = \frac{\pi^2}{k_B} \underset{= \text{finite}}{=}$$

§7.4.2 一维伊辛模型的精确解.

(周期边界条件下的精确解)

$$\textcircled{2} \quad H = -J \sum_n \sigma_n \sigma_{n+1} - h \sum_n \sigma_n \quad (\underbrace{\sigma_i = \sigma_{N+i}}_{\text{PBC}})$$

$$\Sigma = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \frac{\exp \left\{ K \sum_n \sigma_n \sigma_{n+1} \right\}}{Z_{kT}} \exp \left\{ B \sum_n \sigma_n \right\}$$

$$= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \exp \left\{ B \sigma_1 \delta_{\sigma_0, 1} \exp \left\{ K \sigma'_1 \sigma'_2 \right\} \right. \\ \left. \exp \left\{ B \sigma_2 \delta_{\sigma_1, 2} \exp \left\{ K \sigma'_2 \sigma'_3 \right\} \dots \right. \right. \\ \left. \left. \dots \exp \left\{ B \sigma_N \delta_{\sigma_{N-1}, N} \exp \left\{ K \sigma_N \sigma'_1 \right\} \right. \right. \right.$$

$$\text{定义 } (V_1)_{\sigma_i \sigma_j} = \exp (K \sigma_i \sigma_j) \quad (\sigma_i = \pm 1) \\ (V_2)_{\sigma_i \sigma_j} = \exp (B \sigma_i) \delta_{\sigma_i \sigma_j} \quad (\sigma_j = \pm 1) \\ \text{且 } V_1 = \begin{pmatrix} \exp k & \exp (-k) \\ \exp (k) & \exp (-k) \end{pmatrix}, V_2 = \begin{pmatrix} \exp B & 0 \\ 0 & \exp (-B) \end{pmatrix}.$$

$$\Sigma = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} (V_1)_{\sigma_1 \sigma'_1} (V_1)_{\sigma'_1 \sigma_2} \dots (V_1)_{\sigma_N \sigma'_N} (V_1)_{\sigma'_N \sigma'_1} \\ = \text{Tr} (V_2 V_1 \dots V_2 V_1) = \text{Tr} (V_2 V_1)^N \quad \boxed{\text{PBC}} \\ = \text{Tr} (V_2^N V_1 V_1^N)^N = \text{Tr} (V^N).$$

§7.4.3 二维伊辛模型.

(10)

二维 Ising model 在 PBC, $h=0$ 时的精确解。
对四方格子，可以用转移矩阵的方法解。办法是先解一维链，然后用卷积。当 $h=0$ ，一维的转移矩阵

$$V = \exp(k) I + \exp(-k) \sigma_x \\ = \exp k (I + \exp(-2k) \sigma_x)$$

定义常数 $\alpha : \tanh \alpha = \exp(-2k)$.

$$\text{且 } \exp(\alpha \sigma_x) = I \cosh \alpha + \sigma_x \sinh \alpha$$

现在要把 V 变成一个单 spin 形式。

$$\Delta V = A \exp(\alpha \sigma_x).$$

$$= A \cosh \alpha (I + \tanh \alpha \sigma_x)$$

$$= A \cosh \alpha (I + \exp(-2k) \sigma_x)$$

$$\Rightarrow A \cosh \alpha = e^k = \frac{1}{\sqrt{\tanh \alpha}}$$

$$A = \frac{1}{\cosh \alpha \sqrt{\tanh \alpha}} = \frac{1}{\sqrt{\cosh \alpha \sinh \alpha}} = \sqrt{\frac{2}{3 \cosh \alpha}} \\ = \sqrt{\frac{2}{\sinh 2\alpha}}$$

$$\text{其中 } V = \begin{pmatrix} \exp(k+B) & \exp(-k) \\ \exp(-k) & \exp(k+B) \end{pmatrix} \quad (11)$$

$$\det(V - \lambda) = 0 \Rightarrow \lambda_{\pm} = e^k \cosh B \pm \sqrt{e^{2k} \sinh^2 B + e^{2k}}$$

$$\therefore \text{Tr } V^N = \text{Tr} \left[\left(\frac{\lambda_+}{\lambda_-} \right)^N \right] = \lambda_+^N + \lambda_-^N$$

$$= \lambda_+^N (1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \lambda_+^N$$

$$\therefore f = F/N = -\frac{1}{N} \ln \Sigma = -\beta^{-1} \ln \lambda_+ \\ (\text{free energy per spin})$$

$$M \propto -\frac{\partial f}{\partial h} = \beta^{-1} \frac{\partial \ln \lambda_+}{\partial B} = \frac{\partial \ln \lambda_+}{\partial B}$$

$$= \sinh B (\sinh^2 B + e^{-2k})^{-\frac{1}{2}} \\ \xrightarrow[B \rightarrow 0]{T \rightarrow 0} 0. \quad \therefore \text{在有限温度下有相变.}$$

$$\left(\text{而在场下, } T_c = \frac{2J}{k_B} \neq 0. \quad \therefore \text{有相变.} \right)$$

$$\text{当 } T \rightarrow 0, \quad M \xrightarrow{\sinh B \rightarrow 0} 1. \quad \text{是有序.}$$

$\therefore T_c = 0$. 这时，没有通常的 critical exponents
in 二维，见 Pathria 的相关讨论。

这节讲 2D

$$\Sigma = \sum_{\{\sigma_{m,n}\}} e^{K_1 \sum_{m,n} \sigma_{m,n}^3 \sigma_{m+1,n}^3 + K_2 \sum_{m,n} \sigma_{m,n}^2 \sigma_{m+1,n}^2}$$

$$\text{第一部式子 } \prod_j V_1(j, m), \quad \text{第二部式子 } \prod_j V_2(j, m)$$

$$= V(m) = (\sinh 2k_1)^{\frac{M}{N}} \exp(K_1 \sum_j \sigma_{j,x}^{(m)})$$

$$= \exp \frac{K_2}{2} \sum_j \sigma_{j,x}^2 \sigma_{j,y}^2 = V_2(m) \quad \left(\frac{2M \times 2N}{2N \times 2N} \right).$$

$$\text{这样 } \Sigma = \text{Tr} (V_2^M V_1 V_2^M)^N = \text{Tr } V^M.$$

V_1 和 V_2 都是 $2M \times 2N$ 矩阵。且 $V_1^M V_2^N$ 是 $2N \times 2M$ 矩阵。

V 为对角化：

$$C_j = \exp \left(\pi i \sum_{l=1}^{2N} \sigma_{j,l} + \sigma_{j,-l} \right) \cdot O_j^-$$

$$C_j^+ = \exp \left(\pi i \sum_{l=1}^{2N} \sigma_{j,l} + \sigma_{j,-l} \right) \cdot O_j^+$$

$$O_{j,\pm} = (\sigma_{j,x} + i \sigma_{j,y}) / \sqrt{2}$$

$$\{ C_j^+, C_j^-\} = \delta_{jj}, \quad \text{且 } k \neq 0, -1.$$

$$\text{Jordan-Wigner 变换. } C^+ C = O^+ O^-$$

$$\text{例題: } \hat{\sigma}_{j+} = \left[\exp\left(\beta \sum_{k=1}^{M-1} C_k^+ C_k^- \right) \right] C_j^+$$

$$\hat{\sigma}_{j-} = [\quad] C_j^+$$

注意: $\hat{\sigma}_x = \hat{\sigma}_y + i\hat{\sigma}_z$

~~由上式得~~ $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \rightarrow (\bar{\sigma}_x, \bar{\sigma}_y, \bar{\sigma}_z)$
 由以上 pauli matrix 互易关系, \therefore 有此式.
 \therefore 在 V_1 和 V_2 中引出此式. $\therefore \sigma_x \sigma_y = i \sigma_z$.

$$\text{这样, } V_1 = (\sinh 2k)^M \exp\left[-2k \sum_j (\bar{\sigma}_j + \bar{\sigma}_{j-\frac{1}{2}})\right]$$

$$= (\sinh 2k)^M \exp\left[-2k \sum_j (C_j^+ C_j^- - \frac{1}{2})\right]$$

至 V_2 , $\sigma_z \rightarrow \sigma_x$ $\therefore = \sigma_{x+} - \sigma_{x-}$, 得以下结果.

$$V_2 = \exp \left\{ k \sum_{j=1}^M (C_j^+ C_j^-) (C_{j+1}^+ + C_{j+1}^-) \right. \\ \left. - (-1)^j (C_1^+ C_1^-) (C_M^+ C_M^-) \right\}$$

$$\hat{n} = \sum_{j=1}^M C_j^+ C_j^-.$$

$V_1 V_2$ 是一个 ~~复数~~ ~~复数~~ 的表达式. 且为
 28 阶.

§7.4.4 1+1 维 Ising model. (i)

1+1 维 (时间+空间) ~~是~~ Ising model 又称
 横向 Ising model.

$$H = -k \sum_n \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x - h \sum_n \sigma_n^x.$$

由 $[\sigma_n^x, \sigma_m^x] = 0$, \therefore 互相独立, 由 $H \cdot \vec{\sigma} = h \sigma^x$,
 在 x 方向, 均匀垂直, 2D 磁场.

为证明 1+1 维的 Ising model 与 2D 的 1+1
 Ising model 相同, 请参考 ~~书~~ 之 150 页 1+1 维
 spin 模型与 1+1 维 Ising 模型部分.

$$\begin{aligned} Z_1 &\leftrightarrow \text{Tr } e^{-H_0/kT} \\ \downarrow & H_0 = -h_x \sigma_x, \quad \cancel{\text{由 } \sigma_x^2 = 1} \\ M \text{ site} & \quad h_x = \cancel{-h_x}, \quad (k \gg 1) \\ \text{lattice} & \quad \cancel{h_x^2 = M}, \quad h_x \beta/M = e^{-2kT} \end{aligned}$$

前面我们已证明了. \therefore 从 3D 的 1+1 维 Ising model

$$\begin{aligned} \cancel{Z_1} &= \text{Tr } V^M \\ &= \text{Tr } e^{kT} (1 + e^{-2kT} \sigma_x^2) \end{aligned}$$

结论

$$\frac{E}{N} = -\beta \left[\ln(2 \sinh 2k) + \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} E_q dq \right] \quad (16)$$

$$\cos E_q = \cosh 2k \cosh 2q - \sinh 2k \sinh 2q.$$

$$\therefore \sinh 2q \propto T_c \quad \sinh 2k \propto \frac{1}{T}$$

$$\therefore T_1 = T_2 \text{ 时, } \frac{k_B T_c}{J} \approx 2.27.$$

$$\star \text{ 注意 } C \propto \ln |1 - \frac{E}{T_c}|.$$

$$\star M(T) \propto \begin{cases} (1 - \frac{T}{T_c})^{\frac{1}{2}} & T < T_c \\ 0 & T > T_c. \end{cases}$$

$$\star g(r) \sim \begin{cases} (T_c - T)^{\frac{1}{4}} e^{-r/\lambda} / (V_3)^{\frac{1}{2}} & T > T_c \\ (T_c - T)^{\frac{1}{4}} e^{-2r/\lambda} / (V_3)^2, & T < T_c \end{cases}$$

$$\lambda \sim (T_c - T)^{\frac{1}{4}}$$

$$\star \chi \sim |T|^{-\frac{1}{4}}.$$

MF

$$\begin{array}{ll} \alpha = 0 \text{ (discontinuity)} & \alpha = 0 \text{ (discontinuity)} \\ \beta = \frac{1}{8} & \beta = \frac{1}{2} \\ \gamma = \frac{7}{4} & \gamma = 1 \quad \delta = 3. \quad \text{完全一样.} \\ \eta = \frac{1}{4} & \eta = \frac{1}{2} \end{array}$$

$$V = V_1 = e^{kT} (1 + e^{-2kT} \sigma_x)$$

$$= \sqrt{\frac{M}{\beta h_x}} (1 + \frac{h_x \beta}{M} \sigma_x)$$

$$V^M = \left(\frac{M}{\beta h_x} \right)^{M/2} \left(1 + \frac{h_x \beta}{M} \sigma_x \right)^M$$

$$= \left(\frac{M}{\beta h_x} \right)^{M/2} \left(1 - \Delta \tau H_0 \right)^{\frac{M}{2} \Delta \tau}, \quad (\Delta \tau = \frac{\beta}{M})$$

$$= \left(\frac{M}{\beta h_x} \right)^{M/2} \left[\left(1 - \Delta \tau H_0 \right)^{\frac{1}{\Delta \tau}} \right]^{\Delta \tau} = \left(\frac{M}{\beta h_x} \right)^{M/2} e^{-\beta H_0}.$$

$$\therefore M \rightarrow \infty, \quad \sum_{i=1}^M \frac{e^{-\beta H_i}}{\text{Tr } e^{-\beta H_i}}, \text{ up to a const.}$$

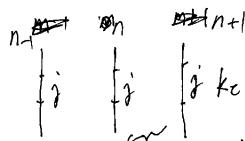
$$\therefore \text{Tr } e^{-\beta H}.$$

~~这~~ ~~是~~ = 1D Ising model

$$\begin{aligned} \text{Tr } e^{-\beta H} &= \text{Tr } e^{-\beta \sum_m \sigma_m^x} \\ V &= V_1 V_2 = \text{Tr } e^{-\beta \sum_m \sigma_m^x} \\ V &= e^{kT} (1 + e^{-2kT} \sigma_x^2) \cdot e^{-kT} \end{aligned}$$

$$\sum_{m,n} \sigma_m^x \sigma_n^x = \sum_m \sigma_m^x \sigma_{m+1}^x$$

= 1D Ising model



1D Ising chain, ~~with~~ - 1D Ising coupling

$$\rightarrow \text{H}(i) = \frac{M}{\beta h_x} \left(1 + \frac{h_x}{M} \sigma_i^x \right)$$

$$V_n(i) = \sqrt{\frac{M}{\beta h_x}} \left(1 + \frac{h_x}{M} \sigma_i^x \right)$$

$$V_n^M \sigma = \left(\frac{M}{\beta h_x} \right)^{M/2} e^{-\beta H_Q(n)} \quad H_Q(n) = -h_x \sigma_i^x, \quad \frac{h_x \beta}{M} = e^{-2K_x}$$

链间耦合:

$$e^{K_x \sum_{m \in n} \sigma_m^z \sigma_{m+1}^z} \approx e^{K_x \sum_n \sigma_m^z \sigma_{m+1}^z} \approx e^{\frac{K_x}{2C} \beta \sum_n \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z}$$

$$= e^{\beta K_x \sum_n \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z}$$

$$\therefore H_{2D} = -\beta \left(-K \sum_n \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z - h_x \sum_n \sigma_n^x \right)$$

$$Z_{2D} \Rightarrow Z = \text{Tr } e^{-\beta \left(-K \sum_n \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z - h_x \sum_n \sigma_n^x \right)}$$

§7.5 重叠算符

我们已经看到，用平均场理论研究相变，虽然可以得到一些定性的结果，但定量上计算的各种临界指数与实验相差甚远。精确的高能重整化群，但精确可解模型很少，且往往不能反映其实际物理。Kadanoff首先提出了利用关联函数互相关函数发散，子系统的宏观特征尺度已不再需要，可以通过格致变换离散化子系统变简单，但临界行为不变，从而计算出临界指数。Kadanoff并没有建立一个完整的理论，之后也不再继续变拉后，要想保持整个重整化理论与平均场一致不容易。Wilson推广 Hamiltonian 及重叠算子一致不容易。Wilson成功地完善了 Kadanoff 的思想，建立了重整化群理论，这要归功于 Kondo [1963]，取的非常好的成果。现在有各种不同的 RG theories, 例如 Jan. 1963.

空间 RG, 动力空间 RG, 算符 RG, 波函数 RG, PMRG, 其基本思想都是 (1) 作“粗粒化”从大更小。
 RG 实际也是子系统，粗粒化后，一些

$$h_{\Delta x} = e^{-2K_x}, \quad K_{\Delta x} = k_x \quad (84)$$

$$\sinh 2K_x \sinh 2K_x = 1, \quad K_x \gg 1$$

$$\Rightarrow \frac{2K_x C}{2h_{\Delta x}} = 1. \Rightarrow K = h. \quad \text{Quantum critical point.}$$

$K > h$, Ferromagnetic order

$K < h$, Quantum disorder.

$$\text{重叠, 有 } M_i^S = \prod_{j \in i} \sigma_j^x, \quad M_i^X = \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x,$$

$$\text{① } \text{Tr } e^{-\beta H} = \text{Tr } e^{-\beta H}$$

$$H = -h \sum_i (M_i^S M_{i+1}^S - K M_i^X).$$

当 $h = K M_i^S$, self-dual. ②

① ②, M^S order $\Leftrightarrow M^X$ disorder.

M^S disorder $\Leftrightarrow M^X$ order.

\therefore critical point $\not\equiv K = h$.

(1) “平均”掉了，不可微开圆弧。∴ RG 是 $\not\equiv$ 1 维连通“Group”。是子半群。), 找出 RG 变换。

(2) ~~且子半群的逆元不存在~~ (且子半群的逆元不存在). (2) 请自己动手, 找出临界点有线不闭合及相互影响。(3) 对线性 RG 变换。确定临界指数。

~~在这样~~ 在这样, 一些很复杂的物理量子力学中。在一些 RG 中, 通常 ~~没有~~ 有时不在确定 critical exponents. 例如, DMRG, 主要是能隙 (energy gap) 及低能激发。而不用一个体系的很多状态。

§7.5.1 Real space RG

最直观的 RG 是 RSRG. 例如, ~~Decimation~~

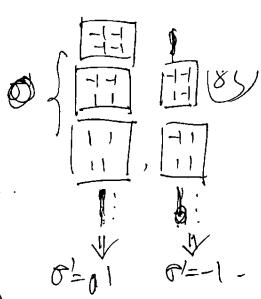
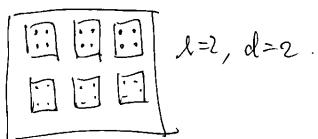
Kadanoff block of spins. 对 1D spin model.

把 ℓ^d (d 是空间 dimensions, ℓ 是 integer)

看成一起看作一个 spin. 即 ~~the~~ ^{the} spin & 2 个 ℓ^d spin 性质相同。从 $k_m, \sigma \rightarrow \sigma'$ 都是 1.

即 ℓ^d 个 sites, $\Rightarrow N' = \ell^{-d} N$. sites.

$$\tau' = \ell^{-1} \tau$$



2D decimation (1834)

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \{-\beta H_N \{\sigma_i\}\}$$

求解其中 $N-N'$ 个 spins 的初值，希望

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \{-\beta H_N \{\sigma_i\}\}$$

~~像~~ 例 Ising model ，求解 $N-N'$ 个 spins 的初值，希望

如果两个子区中自由能 H / 磁场 h 相等，则

$$(S) \quad \downarrow \quad N^1 \quad f^{(S)}(t', h') = N \tilde{f}^{(S)}(t, h) \quad (t = \frac{T-T_c}{T_c}), \\ \text{singular} \quad \text{和} \quad N^{l-d} \quad \text{和} \quad \text{所以} \quad h \leftarrow \frac{h}{\ell^d},$$

$$\Rightarrow f^{(S)}(t, h) = \ell^{-d} \tilde{f}^{(S)}(t', h').$$

~~因为~~ t 和 t' 有关系 $t' = \ell^d t$, $h' = \ell^{-d} h$

y_t 和 $y_{t'}$ 有关系。

$$(84) \quad \text{和} \quad (85) \quad \text{和} \quad (86) \quad \text{和} \quad (87) \quad \text{和} \quad (88) \quad \text{和} \quad (89) \quad \text{和} \quad (90)$$

$\gamma = \frac{1}{\beta} = y_t / (d-y_t)$, $\gamma = \beta(S+)$ $\Rightarrow (90)$

$$\gamma' = \ell^{-1} \gamma.$$

而我们又希望 $\gamma \sim |t|^{-\nu}$, $\gamma' \sim |t'|^{-\nu}$.

$$\ell^{-1} = \left(\frac{\gamma'}{\gamma}\right) = \left(\frac{|t'|}{|t|}\right)^{-\nu} = \ell^{-\nu} y_t, \quad \nu y_t = 1, \quad \nu = \frac{1}{y_t}.$$

$$\therefore \left(d\nu = \frac{1}{y_t} = 2-\alpha\right) \quad (\bar{r} = \bar{r}_1, \bar{r}_2)$$

$$\text{且 } g(r) = \langle \sigma(r) \sigma(r') \rangle \sim r^{-(d+2-\alpha)}$$

$$g(r) = \langle \sigma(r) \sigma(r') \rangle \sim r^{-(d+2-\alpha)}.$$

$$\therefore \sigma(r) = \ell^{(d+2-\alpha)/2} \sigma(\bar{r})$$

\therefore scaling relation: $\boxed{Y = (2-\alpha)^{\nu}}$

$$\nu = d+2-2y_t.$$

$$\sigma(r) = \ell^{y_t} \sigma(\bar{r})$$

即 σ 和 h 不一样 rescaling.

$\langle \sigma \rangle$ 和 h 一样. ✓

根据 scaling 假设, f 为:
不成立, $\therefore f$ 为

$$\frac{h'}{|t'|^{y_t/y_t}} = \frac{h}{|t|^{y_t/y_t}} =$$

$$(9) \text{ 所以, 为了满足 } h' \propto |t'|^{-\alpha}, \quad \therefore f^{(S)} \text{ 为 } f^{(S)}(t', h')$$

$$f^{(S)}(t', h') = |t'|^{y_t/y_t} f(h'/|t'|^{\alpha}).$$

$$\Rightarrow (85) \quad f^{(S)}(t, h) = |t|^{\frac{1}{d} y_t} \tilde{f}(h/|t|^{\alpha}).$$

$$f^{(S)}(t, h) = \ell^{-d} |t|^{\frac{1}{d} y_t} \tilde{f}(h/|t|^{\alpha})$$

$$= \ell^{-d} |t|^{\frac{1}{d} y_t} |t|^{\frac{1}{d} y_t} \tilde{f}(h/|t|^{\alpha})$$

$$= |t|^{\frac{1}{d} y_t} \tilde{f}(h/|t|^{\alpha}).$$

如果这些都成立的话， f 为 $f(h/|t|^{\alpha})$

$$C_h = \frac{\partial^2 f^{(S)}}{\partial t^2} \sim |t|^{-(2-\frac{1}{d} y_t)} \Rightarrow \alpha = 2 - \frac{d}{y_t}$$

$$M = \frac{\partial f^{(S)}}{\partial h} = |t|^{\frac{1}{d} y_t} |t|^{\alpha} \frac{d}{d(h/|t|^{\alpha})} \tilde{f}(h/|t|^{\alpha})$$

$$\sim |t|^{\frac{1}{d} y_t - \alpha} \Rightarrow \beta = \frac{(d-y_t)}{y_t} = 2-\alpha$$

$$\frac{\partial M}{\partial h} = \frac{\partial^2 f^{(S)}}{\partial h^2} = |t|^{\frac{1}{d} y_t} |t|^{-2\alpha} \frac{d^2}{d(h/|t|^{\alpha})^2} \tilde{f}(h/|t|^{\alpha})$$

$$\gamma = \frac{d-y_t}{y_t} = -\frac{(2-\alpha)}{\alpha}.$$

$$\boxed{\alpha+2\beta+\gamma=2}$$

3.2.5.2 算法: 1. 1D Ising model
具体做法, 1维 Ising model.

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left\{ \sum_{i=1}^N \left(K_0 + K \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{B}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right) \right\}$$

($K_0=0$, $K=\beta J$, $B=\beta \phi h$) 且 N 为偶数.

$\exp(-\beta E)$

$$= \prod_{i=1}^N \exp \left[K_0 + K \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} B (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right]$$

$$= \prod_{j=1}^{\frac{N}{2}} \exp \left\{ 2K_0 + K \left(\sigma_{2j-1} \sigma_{2j} + \sigma_{2j} \sigma_{2j+1} \right) + \frac{1}{2} B (\sigma_{2j-1} + 2\sigma_{2j} + \sigma_{2j+1}) \right\}$$

且 $\sigma_{2j} = \pm 1$ 取平均

$$= \prod_{j=1}^{\frac{N}{2}} \left[\exp \left\{ 2K_0 + K_0 (\sigma_{2j-1} + \sigma_{2j+1}) + \frac{1}{2} B (\sigma_{2j-1} + \sigma_{2j+1} + 2) \right\} \right.$$

$$\left. + \exp \left\{ 2K_0 + K_0 (\sigma_{2j-1} + \sigma_{2j+1}) + \frac{1}{2} B (\sigma_{2j-1} + \sigma_{2j+1} - 2) \right\} \right]$$

$$= \prod_{j=1}^{\frac{N}{2}} \exp [2K_0 + \frac{1}{2} B (\sigma_{2j-1} + \sigma_{2j+1})]$$

$$2 \cosh \left(K_0 (\sigma_{2j-1} + \sigma_{2j+1}) + B \right).$$

hyper scaling relation!!!!

是这样.

即 σ 和 h 不一样 rescaling.

$\langle \sigma \rangle$ 和 h 一样. ✓

$$\therefore Z_N(K, B) = e^{N' K'_0} \otimes Z_{N'}(K', B'). \quad (1)$$

Fix the form.

$$K' = \frac{1}{2} \ln [\cosh(2K+B) \cosh(2K-B)] - \frac{1}{2} \ln \cosh B.$$

$$B' = B + \frac{1}{2} \ln [\cosh(2K+B) / \cosh(2K-B)]$$

~~Fixed points~~: RG eqs.

$$\Rightarrow R(K) = K', \quad R(B) = B'.$$

Fixed points:

$$R(K^*) = K^*, \quad R(B^*) = B^*.$$

若 $K=0$, 对称 B , fixed point 为 $\sigma_j^* = \pm 1$.
若 $K \neq 0$, 则有 $\sigma_j^* = \pm 1$ 为 trivial fixed point.

另一个 fixed point 是 $K=\infty, B=0$.

它还说, 若 $h=0, T \rightarrow \infty$.

这两个 fixed point 为

$$K_0' = \frac{1}{2} \ln \cosh 2K \approx \frac{1}{2} \ln (e^{2K}/2) = K - \frac{1}{2} \ln 2.$$

$B' \approx B + \frac{1}{2} \ln e^{2B} = 2B$. (由 $K^*=\infty$, 且 $B^* \neq 0$)
这时, 反 $t = \exp(-\beta K)$, ($\beta > 0$),
 $\Rightarrow t^* = 0$.

即 $t^* = 2^{1/2} t$.



$$\therefore \lambda = 2, \quad \gamma_t = \pi/2. \quad B' = 2B \Rightarrow y_h = 1.$$

$$\Rightarrow \lambda = 2 - 2/p, \quad \beta = 0, \quad \gamma = 2/p, \quad \delta = p, \quad \eta = 1.$$

5 Pathria 书上 exact 结果 -> (§13.2)

-维 Ising model 在一个非常特别的情况下 -般
no RG 可以由固定点方法. (包括 RG
方程得出: 对于 n 个 coupling constant 为
子项. 但 decimation: $N' = l^{-1} N, \beta' = l^{-1} \beta$
重叠化解方法)

$$\bar{K}' = R_\ell(\bar{K}). \quad (\bar{K}' = \bar{K}).$$

$$\bar{K}^{(n)} = R_\ell(\bar{K}^{(n-1)}) = \dots = R_\ell^n(\bar{K}^{(0)}), \quad n \geq 0, \dots$$

$$\text{correlation length } \bar{\zeta}^{(n)} = l^{-n} \bar{\zeta}^{(0)}$$

Singular free energy singular part of free energy / per site

$$f_s^{(n)} = l^{n\alpha} f_s^{(0)} \quad s - \text{singular}$$

$$\sigma_{j+1, 1, 3, \dots} \rightarrow \bar{\sigma}_j^*: 1, 2, 3, \dots \quad (1)$$

$$Z = \sum_{\sigma_j^*} \prod_{j=1}^N \exp(2k_0)^{\frac{1}{2}} \cosh \left(K(\sigma_j^* + \sigma_{j+1}^*) + B \right) \exp \left[\frac{1}{2} B(\sigma_j^* + \sigma_{j+1}^*) \right].$$

如果要找 ~~这个~~ Ising model, 那

$$Z = \sum_{\sigma_j^*} \exp \left\{ \sum_{j=1}^N \left[K_0' + K' \bar{\sigma}_j^* \bar{\sigma}_{j+1}^* + \frac{1}{2} B' (\bar{\sigma}_j^* + \bar{\sigma}_{j+1}^*) \right] \right\}$$

结论是说: $\sigma_j^* = \sigma_{j+1}^* = 1, \quad \sigma_j^* = \sigma_{j+1}^* = -1, \quad \sigma_j^* = -\sigma_{j+1}^* = \pm 1$
时, ~~这个~~ 和 ~~那个~~ 都相等.

$$\exp(K_0' + K' \bar{\sigma}_j^* \bar{\sigma}_{j+1}^* + \frac{1}{2} B' (\bar{\sigma}_j^* + \bar{\sigma}_{j+1}^*)) = \exp(2k_0 + B) \cosh(2K + B).$$

$$\exp(K_0' + K' - B') = \exp(2k_0 - B) \cosh(2K - B)$$

$$\exp(K_0' - B') = \exp(2k_0) 2 \cosh B.$$

$$\text{设 } \exp(K_0') = x, \quad \exp K' = y, \quad \exp B' = z$$

$$xy/z = 2 \exp(2k_0 + B) \cosh(2K + B)$$

$$xy/z = 2 \exp(2k_0 - B) \cosh(2K - B)$$

$$x/z = 2 \exp 2k_0 \cosh B. \quad \text{从第 10 页.}$$

$$e^{K_0'} = x = 2 e^{2k_0} [\cosh(2K + B) \cosh(2K - B) \cosh^2 B]^{\frac{1}{4}}$$

$$e^{K'} = y = [\cosh(2K + B) \cos(2K - B) / \cosh^2 B]^{\frac{1}{4}}$$

$$e^{B'} = z = [\cosh(2K + B) / \cosh(2K - B)]^{\frac{1}{2}}$$

$$R_\ell(K^*) = K^* \quad \begin{cases} \text{若 } K^* \neq 0 \\ \text{若 } K^* = 0 \end{cases} \quad \begin{cases} \text{若 } K^* \neq 0 \\ \text{若 } K^* = 0 \end{cases} \quad (1)$$

$$\text{fixed point.} \Rightarrow \bar{\zeta}(K^*) = l^{-1} \bar{\zeta}(K^*).$$

$$\Rightarrow \bar{\zeta}(K^*) = 0, \text{ or } \infty. \quad \text{对称 } \bar{\zeta}, \bar{\zeta}(K^*) = 0.$$

现在 ~~找~~ 我们看不对应的情况. 对 K^* 的

$$K = K^* + \delta K,$$

$$\Rightarrow K' = K^* + \delta K' = R_\ell(K^* + \delta K)$$

$$\Rightarrow K' = R_\ell(K^* + \delta K) - K^* = \delta K.$$

若 K 和 K' 都是 δK , 则

$$\delta K' = \frac{dR_\ell}{dK'}|_{K=K^*} \delta K \equiv A_\ell^* \delta K.$$

A_ℓ^* 是由 R_ℓ 通过 δK 得到的, 即

λ_i 是极值, ϕ_i 是极值. 在一个壳中

$$\delta K = \sum_i u_i \phi_i.$$

$$\delta K' = \sum_i u_i A_\ell^* \phi_i = \sum_i u_i \lambda_i \phi_i = \sum_i u_i' \phi_i.$$

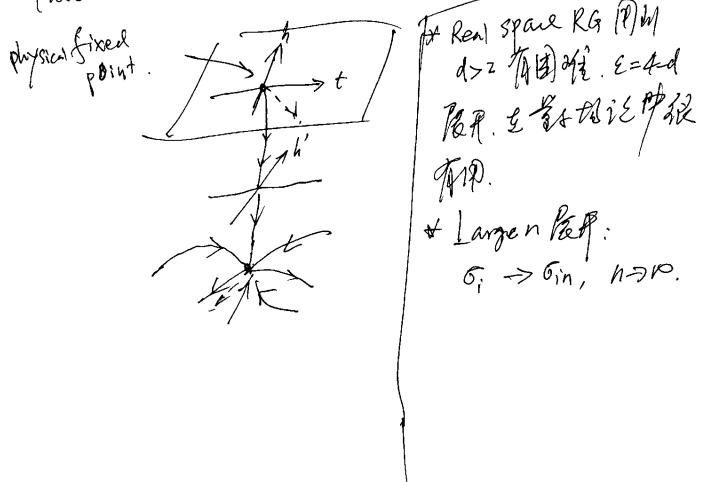
即 δK 中 ϕ_i

$$u_i^{(n)} = \lambda_i^n u_i^{(0)},$$

(1) 若 $\lambda_i > 1$, $u_i \uparrow$ as n , 無法達到極端重要, $u_i \rightarrow 0$ (16)
 "relevant variable". ~~帶~~ 帶 $\lambda_i > 1$ 越來
 越大, 標子距離越長*. 這取名為 λ_i 之 fixed
 point.

(2). 在 $\hat{y}_i = b_0 + b_1 x_i$, u_i 是 irrelevant variable. EK' 越
多, \hat{y}_i 越接近 K^* , 稳定运动量.

(3). $\lambda_i = 1$, ~~no marginal variable~~ logarithmic. \Rightarrow RG having simple power law - 与成正比.



动量空间的“Scaling”变换，即是~~是~~^是兰姆
长度为 $\lambda = 0$ m 不动变。 $(\mu \rightarrow \infty, \text{保持不变})$

当然在理论也可以用动量空间方法，但运动
量仍至“降阶”，即 $\vec{p} \rightarrow 0$ ， $p^2 \rightarrow 0$ 。
具体做法是在 k 空间引进一个 \vec{p} cut off，即
~~物理学家~~ 把 $|k| > \Lambda$ 的部分截掉而留下 $|k| \leq \Lambda$
部分。这相当于在实空间中引入粗粒化过程：把相
位空间 (k) 中大 m 部分平均掉，把其
平均部分留下 (k 小 m 部分)。rescaling $\Lambda \rightarrow \Lambda/b$ ，
 $b > 1$ ，~~物理学家~~ 在 k 空间中 m rescaling
 $N = \Lambda^{-d} N (\Lambda > 1)$ 动量空间的重积分部分就通
常把动量归一化。把物理模型归结到一个 effect
平均论。用路径积分的方法来做，通常又称为
泛函变分法。~~物理学家~~，这是神妙的微扰论。
它曾经被用于研究强弱相互作用，~~物理机~~。
方法选择。这也是数值重整化的一种。

\rightarrow Real space - $\{q\}$, $\{d\}$ diff critical expts.
 $\{d\}$ relevant, irr. for marginal.

§ 7.6 数值量化解和 DMRG 方法 (7/1)

在讨论 NRG 和 DMRG 之前，我们先 remark 动量空间重整化群。 报告

重整化这个概念~~起源于量子场论~~，~~或~~
最初由费曼提出，他指出空间
和时间有“紫外发散”($\mu \rightarrow 0$)。这些发散~~是相~~
应于高能物理的需要，这叫“正极化”。
引入抵消项将其去掉，即“重整化”。重整化至对电动力学中取以成功的成功。在此以
后，一般认为一个可以描述物理世界的理论必
须改称~~为~~为重整化。著名的标准模型
 $SU(3) \times SU(2) \times U(1)$ 被发现就是~~一个可重整化~~
理论。而现今四种基本相互作用中，没有的统
一时代~~的~~理论是引力理论：广泛相对论是
不可重整化。但和弦理论~~为什么~~是~~完全~~可重整化的，那时 Wilson RG
理论才认识清楚。

所有能被识别的子图是连通的

§7.6.2 Wilson's NRG.

RG 的基本思想就是保留我们想研究的 fixed point 附近的物理状态而把其它的高能无关物理状态“丢掉”，“抑制掉”。就准晶态物理而言，我们关心的低能物理状态就是 low-lying excitations. Wilson RG 在此基础上被发展出来；

1. 把一个 lattice 看成 m 个 sites 的系统，
做特征值问题。(H_L)
 2. 特征值问题 $H_L \psi_i = E_i \psi_i$, 其中 m 个 lowest eigenvalues
为 eigenstates ψ_i , (~~其中~~ $i=1, \dots, m$) .
 3. 由 H_L 的 transformation: $O_0^+ H_L O_0^-$, O_0^-

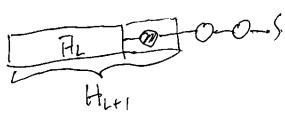
$$\bar{H}_L = O_L^+ H_L O_L = \begin{pmatrix} \psi_1^+ \\ \vdots \\ \psi_m^+ \end{pmatrix} (E_1 \psi_1, \dots, E_m \psi_m) = \begin{pmatrix} E_1 & \dots \\ & \ddots & E_m \end{pmatrix}$$

$$\bar{A}_L = O_L^+ A_L O_L = \left(\begin{array}{cccc} & & & \\ & & & \\ \cancel{\text{A}} & \cancel{\text{A}} & \cancel{\text{A}} & \cancel{\text{A}} \\ & & & \\ & & & \end{array} \right),$$

$$= \left(\begin{array}{cccc} \psi_1^+ A_L \psi_1 & \dots & \psi_1^+ A_L \psi_m \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_m^+ A_L \psi_1 & \dots & \psi_m^+ A_L \psi_m \end{array} \right) = (\bar{A}_{ij}^L)_{m \times m} \Rightarrow \bullet \quad \text{m} \times \text{m matrix}$$

4. 加 n -site, $\bar{H}_L \rightarrow H_{L+1}$. 这时需要
重构 L sites 与新 site 的相位图.

5. 用 H_{L+1} 代替 H_L , 重复 2.



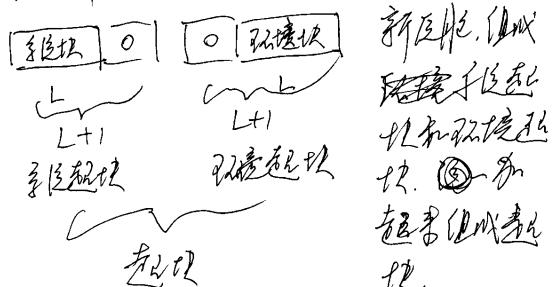
H_{L+1} 在空间倒映 L 为 $m \rightarrow s_m$. ~~这样~~

上步那个 site 在空间倒映. 由 6.3 DMRG 算 Wilson NRG 在 FT 是 $|\psi_i\rangle, i=1, \dots, n$ 是 L sites 子链的本征基底, 与外部的 m -site 有子链渐近. 例如, 用周期性条件或周期性边界. ①加上一个石墨烯子链在空间倒映与石墨烯子链是一样的. ②如何选择两个子链的 site 配对也很关键. White 在 n -site 子链中加一些 sites 适当, 在扩展的子链中 $(superblocks)$ 选择相对角化, 再投影到没扩大的子链中. 這樣, 新件立刻打在 n site 上, 对 n 选择 system blocks 在空间影响不大. 通过这种做法对之相位作用于选择常数, 及因选择投影而

~~选择~~ 选择 m 个子链在空间倒映. 但对有相位作用子链, 有 superblock 在子链, 投影的 m system blocks 有子链: $|14\rangle \rightarrow |14\rangle, |14\rangle \rightarrow |14\rangle$. 如何从中选出最佳子链呢? 这是 DMRG 方法的核心.

6.6.3 DMRG 方法

我们先写出一个简单子链. 基本的称为无穷长子链. 考虑一个子链, 为了更好的处理边界条件, 引入左之一模一样环境子链. 对称性和平行



左边的子链可以看成开边界子链.

DMRG 的计算过程如下, 首先设置一个
矩阵得由 m 由 m . 一般为 m .

一. 首先选择一个基本规则起过 m 为越快. 但
小则必须用精确对角化方法.

二. 精确对角化选择. 取出最低本征态(一般为
基态).

三. 这些占用 system 子链 $|i\rangle$ 和环境子链 $|j\rangle$

④ $|i\rangle$ 的展开是 $|i\rangle = \sum_j |\psi_{ij}\rangle |i\rangle$. 把投影
system 子链 $|i\rangle$ reduced 容易后就是

$$P_{ii} = \sum_{\text{环境}} |\psi_{ij}\rangle \langle \psi_{ij}|$$

$$= \sum_j |\psi_{ij}^*\rangle \langle \psi_{ij}|.$$

$$\text{Tr } P = \sum_i P_{ii} = 1.$$

对角化 P , 有本征值 $\lambda_{ij} \geq 0$, $\sum_i \lambda_{ij} = 1$, 本征向量.

四. 因第 $i=1, \dots, s$; $s < m$. 则得留有
 $|14\rangle$. 如果 $s > m$, 则得 $\tilde{|14\rangle}$.

OS 中 m 个子链. ④ $|14\rangle, |14\rangle, \dots, |14\rangle$

构造 $O = (|14\rangle, \dots, |14\rangle)$. 把 $H_{\text{sys}} \rightarrow \bar{H}_{\text{sys}} = O^\dagger H_{\text{sys}} O$.

$H_{\text{air}} \rightarrow \bar{H}_{\text{air}} = O^\dagger H_{\text{air}} O$. (为了对称美的要求).

五. 以 \bar{H} 代替 H , 在 system 子链 circumstance 模式下子链. 形成 m 个子链子链
在环境子链. 作循环. 直到精度满足.

例: spin 1/2 Heisenberg model

$$H = \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}.$$

偶数 $m=5$, $S_{\text{tot}}^z = \pm \frac{5}{2}$ 间.



$$B_L, S_L, S_R, B_R \quad \text{至令从 } \{1, 2, 3\}$$

$$H_{BL=1} = H_{SL=1} = H_{SR} = H_{BR=1} = 0 \quad \text{和种.}$$

$$S_{B_L=1}^z = S_{S_L}^z = S_{SR}^z = S_{B_R=1}^z = \left(\begin{array}{cc} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{array} \right)$$

$$S_{B_L=1}^+ = S_{S_L}^+ = S_{SR}^+ = S_{B_R=1}^+ = \left(\begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{array} \right)$$

$$S_{B_L=1}^- = S_{S_L}^- = S_{SR}^- = S_{B_R=1}^- = \left(\begin{array}{cc} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{array} \right)$$

4个格点 $S_{tot} = 0$ 的子系统.

$$\begin{pmatrix} (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}) \\ (\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}) \\ (\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \\ (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}) \\ (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \\ (-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \end{pmatrix}$$

$$H = \vec{S}_{B_1} \cdot \vec{S}_{B_2} + \vec{S}_{B_2} \cdot \vec{S}_{B_3} + \vec{S}_{B_3} \cdot \vec{S}_{B_4}.$$

左边的子子系统下:

$$H = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t & -\frac{3}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & t \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

~~解~~ 求出 $\psi = (0, 149429, -0.557678, 0.408248, 0.408248, -0.557678, 0.149429)$

$$= |\psi\rangle = (|\psi_i\rangle)^+$$

$$|\psi\rangle = \cancel{(|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + \dots)} + 0.149429$$

$$= \psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} + \dots$$

$$\Psi(i_1, i_2, i_3, i_4) = \sum_{j_1 j_2} \psi_{i_1 i_2 j_1 j_2}^* \psi_{i_3 i_4 j_1 j_2}$$

$$\{i_1, i_2, i_3, i_4\} = \{(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}), (\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}), (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}), (-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})\}. \text{ 简化 } 4 \times 4 \text{ RDM}$$

$$P = \begin{pmatrix} -0.022325 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.472671 & 0.455342 & 0 \\ 0 & 0.455342 & -0.472671 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0.022325 \end{pmatrix}$$

§7.7. K-T 相变简介 (10)

2016 年诺贝尔奖授予了三位研究拓扑相变的物理学家。

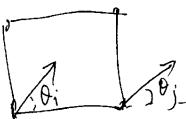
K-T 相变是通常的相变，即有序参量变化，但又不同于对称性破缺引起的相变，而是由自旋和拓扑缺陷激发引起的相变。这与我们在 ~~讨论~~ 中讨论的拓扑相变不同，拓扑相变不是一维的，且反拓扑相变 ~~存在~~ Thouless 在他的第一部分：IQHE 中的拓扑相变 ~~存在~~ 会议中，由于拓扑相变与统计物理的关系还不明确，我们只讨论 K-T 相变的一维。

K-T 相变是从研究二维 X-Y 模型入手的。设一个 = 行方格，每一条边上有一个 spin。设只有 X, Y



$$\text{这时: } \vec{s} = (s_x, s_y).$$

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j.$$



$$= -JS^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) = -JS \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j)$$

根据 Nagaoka-Mermin 定理，在低维情况下相变，但弦论/色散模型的性质和低维的

对角线 P : $w = (0.022325, 0.473303, 0.022325, 0.022325)$

$$\Rightarrow u^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, u^2 = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, u^3 = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, u^4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

~~所以~~ 全部特征向量。

$$D = (u^1, u^2, u^3, u^4).$$

把 system 转换为 \vec{S}_{tot}^2 之后，~~这个~~ 问题就变成了 $B_L=2$ ，~~5~~ 个 \vec{S}_i 的 system。
另一个表达式： $|B_{L=2}\rangle = D (|B_{L=1}\rangle \otimes |S_2\rangle)$ 。
~~注意~~ \vec{S}_i 的 \vec{S}_i^2 和 \vec{S}_i^+ 。

$$H_{B_{L=2}} = D (H_{B_{L=1}} + \vec{S}_{B_{L=1}} \cdot \vec{S}_{S_2}) D^+$$

$$S_{B_{L=2}}^3 = D (I \otimes \vec{S}_2^3) D^+, S_{B_{L=2}}^+ = D (I \otimes \vec{S}_2^+) D^+.$$

这样我们有了全部信息： $\vec{S}_i =$ ~~这个~~ 算符表示 \vec{S}_i 的值。
形成 \vec{S}_{tot}^2 和 $S_{R=2}$ ，总链长为 36 。即有了 \vec{S}_i 以及 $B_{L=2}$ 为 $\dim = 4$, System Superblock $\dim = 4 \times 2 = 8$,
链长链块 $\dim = 20$ 为 20×20 mH。
对角线，取最低能量，输出 ψ ，得到 \vec{S}_{tot}^2 的 $\dim = 8$ vectors。
 $(\psi_1, \dots, \psi_8) = D (I \otimes I \otimes \vec{S}_2^3) D^+$ 。
 $|B_{L=2}\rangle = D (|B_{L=1}\rangle \otimes |S_2\rangle)$ 。
输出 $H_{B_{L=3}}, S_{B_{L=3}}^3, S_{B_{L=3}}^+ = D (I \otimes \vec{S}_2^3) D^+$

这就是我们想要的 $2-1-2$ ， $2-1-2$ 的结果。

相。相 ~~相~~ ~~相~~ ~~相~~。

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_2}{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_n}{2\pi} e^{-\beta H(\theta_1, \dots, \theta_n)}$$

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_2}{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_n}{2\pi} e^{-\beta H(\theta_1, \dots, \theta_n)}$$

$$(P \ll 1) = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_2}{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_n}{2\pi} \left(1 + P \cos(\theta_1 - \theta_2) + O(P^2) \right)$$

spin-spin correlation function

$$\langle \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \rangle = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_2}{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_n}{2\pi} \left(1 + P \cos(\theta_1 - \theta_2) \right) \cos(\theta_i - \theta_j)$$

$$\sim \left(\frac{P}{2}\right)^{|i-j|} = \exp\left[-\frac{|i-j|}{2}\right],$$

$$= \exp\left(-\ln\left(\frac{2}{P}\right)^{|i-j|}\right) = \exp\left(-\frac{|i-j|}{2}\right)$$

ζ 是 correlation length。

另一方面，在低维极限， $(\theta_i - \theta_j)$ 是小的。 $\langle -J \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \rangle$ ：
 $\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \rangle \therefore \cos(\theta_i - \theta_j) = 1 - \frac{1}{2} (\theta_i - \theta_j)^2 \dots$

$$\therefore H = \frac{J}{2} \sum_i (\theta_i - \theta_{i+1})^2 \quad (1)$$

$$(\theta_i - \theta_{i+1})^2 + (\theta_i - \theta_{i+2})^2 \Rightarrow a^2 (\partial_x \theta_i)^2 + a^2 (\partial_y \theta_i)^2 = a^2 (\nabla \theta_i)^2.$$

左边是物理
 $\beta H = \beta E_0 - \frac{J}{2} \int d\vec{x} |\nabla \theta(\vec{x})|^2$

$$\beta E_0 = 2\beta J L^2 / a^2, \quad L \text{ is square lattice}$$

线性， a is lattice spacing

$$\text{这时, } \langle \cos(\theta_i - \theta_j) \rangle = \frac{1}{2\pi J}$$

$$\sim \left| \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{a} \right|$$

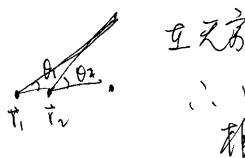
\propto exponential decay in (3), 这是
 一个代数 decay, 不符合代数衰减.

∴ 存在一个相变点.

这相变点对称性自发破缺的物理. 选择何
 么? 首先, 我们注意到一来, H 带起来
 像 θ 的梯度场. 但有 θ 的周期性
 即 $\theta + 2\pi \equiv \theta$, 选择 θ 很多.

我们不能用通常的 rescale 方式去 rescale θ .

∴ 在 zero-temperature, 这种 vortex 经不起
 单独存在. 但可以有一对带有 charge
 的 two vortices 依然有限: ~~由两个~~
~~两个方向, 互为反, constant~~
~~rescale~~.
~~由两个~~ \rightarrow ~~由两个~~ \rightarrow ~~由两个~~ \rightarrow ~~由两个~~.



在无穷远处, $\theta = \theta_\infty \approx 0$.

∴ $\theta_1 + \theta_2 = 0$ - vortex 互补 - vortex
 相互抵消.

对称性恢复

$$\Delta U = \int_a^R r dr d\theta (\nabla \theta)^2 + \int_R^{R+a} r dr d\theta (\nabla \theta)^2 = 2 \ln \frac{R}{a} + 2 J \ln \frac{R}{a}.$$

\rightarrow vortex 在有限尺寸.

是有限.

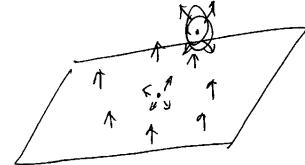
地托尼说, 这样幅度可能与这个有关.

$$\nabla \cdot \frac{\delta H}{\delta \theta} = 0 \Rightarrow \nabla^2 \theta = 0,$$

解得: ① $\theta = \text{const.}$ ② $\nabla \theta = (-\frac{1}{r}, \frac{1}{r})$.

$$\int \nabla \theta \cdot d\vec{r} = 2\pi \quad \text{一般地} \int \nabla \theta \cdot d\vec{r} = \int d\theta = 2\pi n.$$

∴ θ - vortex:



$$(\nabla \theta \cdot \nabla \theta) = \left(\frac{x^2 n^2}{r^2} \right) = \frac{1}{r^2}.$$

$$\therefore \text{单个 vortex} \sim \text{常数} \quad \frac{J}{2} \int d\vec{r} (\nabla \theta)^2 - E_0$$

$$= \frac{J}{2} \int_a^L r dr \int_0^{2\pi} d\theta \cdot \frac{1}{r^2} = J\pi \ln \left(\frac{L}{a} \right)$$

这是 log. 发散.

$$E_{\text{vortex}} = \int d\vec{r} (\nabla \theta)^2 + \int d\vec{r} (\nabla \theta)^2 \quad (1)$$

$$\simeq \int_{\text{core}} (\nabla \theta)^2 + \int_{\text{core}} (\nabla \theta)^2 + \int_a^R r dr (\nabla \theta)^2 d\theta$$

$$+ \int_a^R r dr d\theta (\nabla \theta)^2 = 2E_{\text{core}} + 2J\pi \ln \frac{R}{a}.$$

有限级数. ~~由 R 为有限 -> 由 R 为有限~~

这很容易二流体起量级, ∵ XY model dual to

2维带电流起量级. charge \leftrightarrow vorticity.

K-T 相变 in critical T_c : $F = -\frac{\partial E}{\partial R} \approx -\frac{1}{R}$

\rightarrow vortex 在有限尺寸 $a^2 \propto (L/a)$.
 在 L^2 的面积中, 可以 $(L/a)^2$ 个
 可能的 vortex 位置.

∴ 在有限尺寸, $\text{单个 vortex} \sim \text{有限尺寸} (S = \ln(\frac{L}{a})^2)$

$$F = U - TS = (J\pi \ln \frac{L}{a} - T \ln (\frac{L}{a})^2)$$

$$= (J\pi - \frac{2}{\beta}) \ln \frac{L}{a}. \quad \text{即 vortex 对应}$$

∴ 当 $J\pi - \frac{2}{\beta} < 0$ 时, 单个 vortex 为有限尺寸.

发生相变. $T_c = J\pi / 2k_B$.

~~非平衡统计物理~~

(111)

KT相变~ 手写:

① 从低温端 \rightarrow 高温端，起始速率，即序号有跃变。

$$\text{② } KT \text{附近 } F(T) = \begin{cases} \frac{1}{T} e^{-2B(T-T_K)^2}, & T \geq T_K \\ 0, & T \leq T_K \end{cases}$$

 \Rightarrow 此处及台阶级函数连续。③ \Rightarrow 宏观许相变。① \Rightarrow 一级相变。

KT相变~ 宏观论点:

D. J. Bishop and J. D. Reppy.

PRL 40, 1727 (1978)

起始速率 $P_s(0T_K) \sim$ 跃变。

第八章 非平衡统计物理

§ 8.1 引言

非平衡统计物理，在我们“课件”中，只讲授偏离平衡态的近平衡态。在这里耗散和涨落是一对主要矛盾。耗散包含弛豫和输运两种现象。

* 弛豫过程：当平衡态受到小扰动，则会偏离平衡，一旦扰动取消，系统（经过一定时间）（弛豫时间）后会回归平衡。在扰动中吸收的能量或物质会被耗散掉。

* 输运过程：适当控制外界条件，例如温差、浓度差、电位差（称为广义力或 potential），使系统维持在近平衡态，则系统内会产生扩散运动，外部力或正比于“层”（热流、扩散流、电流）。这反映能流、质流和电荷的转移，称为输运过程。这类过程消耗能量或物质，所以也是耗散过程。

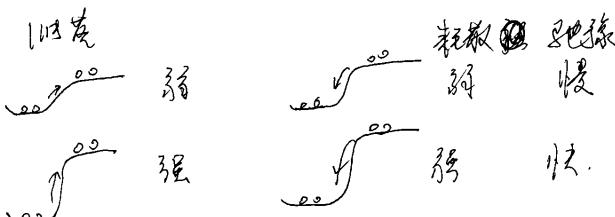
* 涨落过程：涨落是系统从平衡态向非平衡态的过程，可分为二类：(i) 由物质本身（或物理状态）不连续性引起，宏观物理量围绕平衡值（或量子基态）平均值的涨落。(ii) 随机外力作用于宏观小物体导致

导致“小物体”位置的涨落。例如布朗运动、电路中的热噪声等。

涨落与耗散是一对紧密联系，相辅相成的矛盾对立面。

(一) 三种弛豫过程：(1) 平衡至下限态引起一个瞬时过程；归结到平衡态。(2) 系统受外力扰动，导致非平衡态，撤掉外力，会回到平衡态。这两种弛豫过程本质上是一样的。

(3) 涨落越强，系统的耗散也越强。



涨落与耗散的联系由涨落—耗散定理反映。

(涨落—耗散定理表述：若有一个弛豫过程消耗能 δ ，系统做功 δ_{out} ，则存在一个与之相关的涨落有功的弛豫过程。例如

* 弛豫耗散功 \leftrightarrow 布朗运动 (把动能转化为功)

* 电阻耗散功 \leftrightarrow Johnson noise (电路中的热噪声)：电阻耗

电脉冲化成功 \leftrightarrow 电场中的热噪声转化为功

电流。(Nyquist 定理)

* 吸收和辐射：系统吸收之能 δ_{abs} \leftrightarrow 辐射时转化为电能 δ_{rad} 。

非平衡统计物理的研究方法：

* 最早发展的方法是 Boltzmann 方程：单粒子分布函数的方程，即 $f(p, r, t)$ 受外力和分子之间碰撞而随时间 t 变化。用了研究耗散、弛豫和理解黑体辐射率=定理 (H 定理)。

* 在近平衡态，Kubo 的线性响应理论成为研究输运过程描述性更好的框架。Boltzmann 方程与经典力学中的守恒律相结合，线性响应理论则与经典力学中的守恒律相结合。用 3D 体积元 dV ，因而，后者更容易应用量子问题。由坐标系出发，加上因果律该定理在时间方向可以“证明”或“导出” Boltzmann 方程。这样可以更好的地理解耗散从哪里来：对维方程是密度矩阵的海森堡方程。是时间反演不变的微分运动方程，没有耗散。耗散又来自哪里，对玻耳兹曼只有对维方程的推导是在超于平衡。

这就设定了一个固定的时间方向，破坏了时间反演不变性，造成了耗散。

* 研究非平衡统计更有效。里面的方法是用格林函数或由理论，耗散的存储与相空间坐标用 Green's function 在某点至 \vec{r} 的平面下半平面泛函。

- * 研究胜者问题则与系统驱动方式有关无关。从量子力学，情况一般是一种简单的随机过程，马尔可夫过程；分布函数随时间演化到 t 时刻的分布概率只与最近邻的前一时刻的体系状态有关。分布函数随时间演化的主要方程（Master 方程）中如果随机变量可以直接取值，则称为 Fokker-Planck 方程。
- * 如果在时间范围内直接研究随机运动的统计学，则可研究含随机力的牛顿方程：朗之万方程。
- * 从量子论来看，Master 方程研究在 Schrödinger 球壳上进行，朗之万方程研究在 Heisenberg 球壳上进行。
- * 还有平行的非平衡系综理论，称为非平衡非平衡统计物理。研究还不够成熟，我们不讲授。

3.8.2 Boltzmann 稀薄气体方程

非平衡统计要确定非平衡态的分布函数。在平衡态，分布函数 $f_0 = f_0(v) = f_0(E)$ 与速度 v 和时间无关。例如，玻色统计（量子统计）

$$f_0 = \frac{1}{e^{\beta E} + 1} \quad \text{但是非平衡态, } f = f(\vec{r}, \vec{v}, t).$$

Boltzmann 方程就是研究 ~~经典~~ 稀薄气体的统计物理和稀薄气体的 f 。

(i) 气体： $\lambda_T \ll \delta r$, $\lambda_T = \frac{\hbar}{(2\pi mk_B)^{1/2}}$ 一起增长，则对分子可忽略。 δr 是分子平均距离。

这时气体温度下 m 为 $(0^\circ\text{C}, 1 \text{ atm})$ 下 m 大量的气体构成。例如氢气 $n = 2.7 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$,

$$\delta r \sim \sqrt{n} \sim 3.3 \times 10^{-7} \text{ cm}$$

$$m \approx 6.7 \times 10^{-23} \text{ g}$$

$$\lambda_T = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi mk_B}} \sim 0.17 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$\therefore \frac{\delta r}{\lambda_T} \approx 0.190.$$

除了氢气之外，一般的气体（密致气体）都是经典。

在这一章，我们将讲解非平衡统计的全部内容。我们在这里主要讲的主要内容：

- (1) Boltzmann eqs.; H 定理，嫡这神义和绝对熵
- (2) 朗之万原理，嫡这神和扩散 DT.
- (3) 朗之万理论，布朗运动，Master 方程，Langmuir eq.; 嫉这神-扩散原理

参考书：林宗桂，苏汝铿；巨阳亮白；
程稼平和吴致仁。

(ii) 稀薄和短程力： $\delta r \gg \alpha$ (相作用力) (力程)，这样，气体在大部分时间内自由运动，发生碰撞的时间短，范围小。这样，可以把“短程力”和“碰撞”分开考虑。(即“运动”时无“碰撞”，“碰撞”时无“运动”。仍以氢气为例， $\delta r \sim 3.3 \times 10^{-7} \text{ cm}$ ，而相作用力在毫微库仑量级， $d \sim 10^{-8} \text{ cm}$ 。用 3.3cm 平均自由程估计， $\lambda \sim \frac{1}{n(\delta r)} \sim 0.12 \times 10^{-3} \text{ cm}$ ， $\lambda/d \sim 10^4$ 。

(iii) 稀薄和短程力地假设之作碰撞可忽略。

为了得出 Boltzmann 方程，还需要进一步简化：

(i). 忽略分子结构，用刚球模型代替连续分子模型。

(ii). 3/13 的滑滞修正修改，类似于碰撞过程中的速度分布相位修正。

下面我们将导出 $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ 随时间变化的方程：

$f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ 表示 t 时刻在相空间 (\vec{r}, \vec{v}) 附近体积元内的平均分子数。

$$t \rightarrow t+dt, \text{ 速度 } \vec{v} \text{ 和 } \vec{r} \text{ 都会变化}$$

$$[f(\vec{r}, \vec{v}, t+dt) - f(\vec{r}, \vec{v}, t)] d\vec{r} d\vec{v} = \frac{\partial f}{\partial t} d\vec{r} d\vec{v}$$

考虑“运动”和“碰撞”都写了

$$\frac{\partial f}{\partial t} = (\frac{\partial f}{\partial t})_d + (\frac{\partial f}{\partial t})_c$$

$d = \text{drift}$, 即力作用下 m 漂移.

$c = \text{collision}$.

§8.2.1 原始波的计算

~~$$\frac{\partial f}{\partial t} = [f(\vec{r} + \vec{v} dt, \vec{v} + d\vec{v}, t+dt) - f(\vec{r}, \vec{v}, t)] dt = 0. \quad \text{在“运动”中}$$~~

$$\therefore \frac{\partial f}{\partial t} = (\frac{\partial f}{\partial t})_d + \sum_i (\vec{v}_i \frac{\partial f}{\partial \vec{v}_i} + \vec{v}_i \frac{\partial f}{\partial \vec{v}_i}) \Rightarrow \text{碰撞时}$$

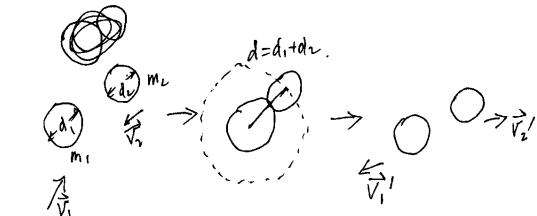
$$\Rightarrow (\frac{\partial f}{\partial t})_d = - \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} - \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}}$$
~~$$= - \cancel{\vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}}} = - \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} - \frac{\partial f}{\partial \vec{v}}$$~~

$\vec{v} = \vec{a} = \vec{0}$ (单位向量)

$$\therefore (\frac{\partial f}{\partial \vec{v}})_d dt d^3 \vec{r} d^3 \vec{v} = - \left(\vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} \right) dt d^3 \vec{r} d^3 \vec{v}$$

§8.2.2 碰撞波的计算

碰撞波 - 什么需要考虑.

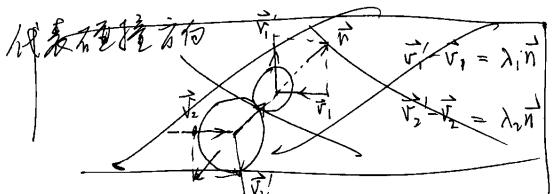


碰撞波: 什么, 动量守恒?

$$m_1 \vec{v}_1 + m_2 \vec{v}_2 = m_1 \vec{v}'_1 + m_2 \vec{v}'_2$$

$$\frac{1}{2} m_1 \vec{v}_1^2 + \frac{1}{2} m_2 \vec{v}_2^2 = \frac{1}{2} m_1 \vec{v}'_1^2 + \frac{1}{2} m_2 \vec{v}'_2^2$$

两个方程, 两个未知数. 还有二个任意数. 所以

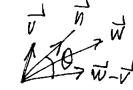


波尔兹曼方程的证明 (比较繁杂) 我会把证明过程讲又发给大家 (或见书本). (120')

现在, 我们解解

$$(\frac{\partial f}{\partial t})_{\text{coll.}} = \int (f'_v f'_w - f_v f_w) \Lambda d\vec{w} d\vec{v}$$

泊松括号:



$$\Lambda = \int (\vec{v} \cdot \vec{w}) d\vec{w} d\vec{v}$$

$$f'_v = f(\vec{r}, \vec{v}', t), \quad f'_w = \delta f(\vec{r}, \vec{w}', t)$$

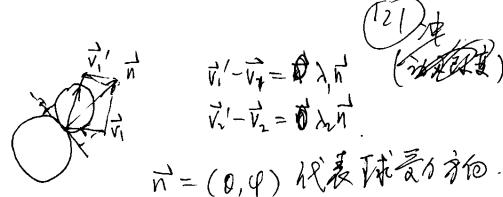
$$f_v = f(\vec{r}, \vec{v}, t), \quad f_w = f(\vec{r}, \vec{w}, t)$$

$$\vec{v}' = \vec{v} + \frac{2M_w}{m_v + M_w} [(\vec{w} - \vec{v}) \cdot \vec{n}] \vec{n}$$

$$\vec{w}' = \vec{w} - \frac{2M_w}{m_v + M_w} [(\vec{w} - \vec{v}) \cdot \vec{n}] \vec{n}$$

$$\vec{v}' = \vec{v} + \frac{2M_w}{m_v + M_w} [(\vec{w} - \vec{v}) \cdot \vec{n}] \vec{n}$$

$$\vec{w}' = \vec{w} - \frac{2M_w}{m_v + M_w} [(\vec{w} - \vec{v}) \cdot \vec{n}] \vec{n}$$



$$\vec{n} = (\theta, \phi) \text{ 代表球面方向.}$$

(1) 在与之垂直的方向, $v_{\perp} = v_{\perp}'$, 表示速度不变.
“1”没有运动.) (斜于 n 方向, 正对于 v1)

上, $\vec{v}_1 \cdot \vec{n} = \vec{v}'_1 \cdot \vec{n}$. 因为 $\vec{n} \perp \vec{e}$ (即 $m_1 \vec{v}_1$ 在 m_1 的运动方向, 且 $m_1 \vec{v}_1 - m_2 \vec{v}_2 \propto \vec{F}$).

(2) 在 n 相反时 - 于 m_1 的 \vec{v}_1 , 上面有的方程. (6 个方程, 除速度 $v_{\perp} = v_{\perp}'$, 有 6 个未知数 m)

(3) 与 n 相同时 - 于 m_1 的 \vec{v}_1 , 上面有的方程. (6 个方程, 除速度 $v_{\perp} = v_{\perp}'$, 有 6 个未知数 $(\vec{v}_1', \vec{v}_2', \lambda_1, \lambda_2)$. 可解.

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}_1 + \frac{2M_w}{m_1 + M_w} [(\vec{v}_2 - \vec{v}_1) \cdot \vec{n}] \vec{n}$$

$$\vec{v}'_2 = \vec{v}_2 - \frac{2M_w}{m_1 + M_w} [(\vec{v}_2 - \vec{v}_1) \cdot \vec{n}] \vec{n}$$

两边都减

$$\vec{v}'_2 - \vec{v}'_1 = \vec{v}_2 - \vec{v}_1 - 2 [(\vec{v}_2 - \vec{v}_1) \cdot \vec{n}] \vec{n}$$

$$\Rightarrow (\vec{v}'_2 - \vec{v}'_1)^2 = (\vec{v}_2 - \vec{v}_1)^2$$

$$(\vec{v}_2^2 = \vec{v}_1^2)$$

② 反过来说，如果 $(\vec{v}_1, \vec{v}_2) \rightarrow (\vec{v}'_1, \vec{v}'_2)$ 逆行
而碰撞后， $\vec{v}'_1 = \vec{v}_1 + \vec{v}_2$, $\vec{v}'_2 = \vec{v}_1 - \vec{v}_2$

$$\vec{v}'_1 - \vec{v}_1 = \lambda_1 \vec{n} \Rightarrow \vec{v}'_1 - \vec{v}_1 = \lambda'_1 \vec{n},$$

$$\lambda'_1 (-\vec{n}) \Rightarrow \lambda'_1 = -\frac{\lambda_1}{n'}$$

$$\therefore \vec{v}'_1 = \vec{v}'_1 + \frac{2m_2}{m_1+m_2} [(\vec{v}'_2 - \vec{v}'_1) \cdot (-\vec{n})] (-\vec{n})$$

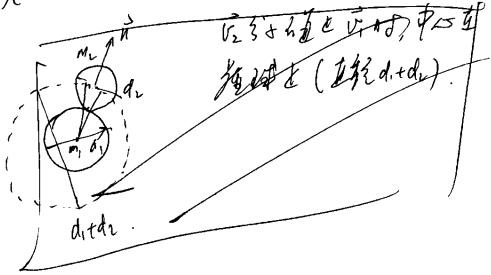
$$\vec{v}'_2 = \vec{v}'_1 - \frac{2m_2}{m_1+m_2} [(\vec{v}'_2 - \vec{v}'_1) \cdot (-\vec{n})] (\vec{n})$$

$$\text{即 } (\vec{v}'_2 - \vec{v}'_1) \cdot \vec{n} = -(\vec{v}'_2 - \vec{v}'_1) \cdot \vec{n} = (\vec{v}'_1 - \vec{v}'_2) \cdot \vec{n}$$

与正碰撞推论合。

VR速率计算 $(\frac{\partial f}{\partial t})_c$. 记 $f_i = f(\vec{r}, \vec{v}_i, t)$,
 $f'_i(\vec{r}, \vec{v}'_i, t)$. 记 $\Delta f_i^{(+)}$ 为至 dt 时间内立空间体积 d^3v_i 中
不通过 (\vec{r}, \vec{v}_i, t) 的分子，则速率为

$$(\frac{\partial f_i}{\partial t})_c dt d^3v_i = \Delta f_i^{(+)} - \Delta f_i^{(-)}$$



$\Delta f_i^{(+)}$ 为 \vec{v}_i 在 m_1 附近减少: $(\vec{v}_i, \vec{v}_2) \rightarrow (\vec{v}'_i, \vec{v}_2)$.

对立体角积分，即对 d^3v_i 积分，即是碰撞出 d^3v_i 中分子.

$$\Delta f_i^{(+)} = \left[\int f_i f_2 \Lambda_{12} d\Omega d^3v_i \right] dt d^3v_i d^3v_2$$

同样， $(\vec{v}_1, \vec{v}_2, -\vec{n}) \rightarrow (\vec{v}_1, \vec{v}_2)$ 得出

$$\Delta f_i^{(-)} = \left[\int f_i f'_2 \Lambda_{12} d\Omega d^3v_i d^3v_2 \right] d^3v'_i dt d^3v_2$$

Λ_{12} 为 Λ_n , $d\Omega$ 为 $d\Omega$ 是一样的。只是积分要反过来。

$$d^3v'_i d^3v_2 = |J| d^3v_i d^3v_2$$

$(\vec{v}_1, \vec{v}_2) \rightarrow (\vec{v}'_1, \vec{v}'_2)$ 是一个已知变换。 $|J|=1$.

$$\therefore (\frac{\partial f_i}{\partial t})_c dt d^3v_i d^3v_2 = \Delta f_i^{(+)} - \Delta f_i^{(-)}$$

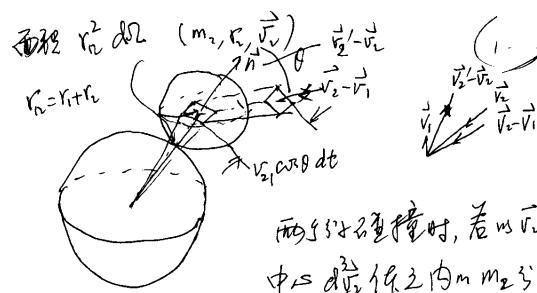
$$= \left[\int (f_i f'_2 - f_i f_2) d^3v_2 \Lambda_{12} d\Omega \right] dt d^3v_i d^3v_2$$

∴ Boltzmann 方程是

$$\frac{\partial f}{\partial t} - (\frac{\partial f}{\partial t})_c = (\frac{\partial f}{\partial t})_c$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \vec{f} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = \int (f'_v f_w - f_v f_w) \Lambda d^3w d\Omega$$

$$f'_v = f(\vec{r}, \vec{v}', t), \quad f_w = f(\vec{r}, \vec{v}'', t).$$



而当分子碰撞时，若 \vec{v}_1 为
中速 d^3v_1 作立空间 m_1 分子
碰撞时，则碰撞后，
碰撞方向通过的 \vec{n} 为立空间 m_1 立体角之 $d\Omega$ 内，
则由碰撞可得 \vec{v}_1 为底，以 $v_{12} \cos \theta dt$
为立空间作内，该立空间作积为 $v_{12}^2 d\Omega v_{12} \cos \theta dt$
其中包含处于 $d\Omega$ 中分子数为

$$(f_1 d^3v_1) v_{12}^2 d\Omega v_{12} \cos \theta dt.$$

并乘以 m_1 与 m_2 的比

$$(f_1 d^3v_1) (f_2 d^3v_2) v_{12}^2 d\Omega v_{12} \cos \theta dt$$

= dt 时内， d^3v_1 与 d^3v_2 为 m_1 分子数 $d\Omega$ 内 m_2
分子数立空间向量 $d\Omega$ 与 m_1 碰撞数。 $(f_1 f_2)$

$$S_f^{(+)} = f_1 f_2 d^3v_1 d^3v_2 \Lambda_{12} d\Omega dt d^3v$$

$$\Lambda_{12} = v_{12}^2 v_{12} \cos \theta.$$

$(f_1 f_2)$ 是相立空间。与 $(f_1 f_2)$ 退化无关

8.3 H 定理, H 定义和熵

在很多场合，我们用香农熵的表达式

$$H = - \sum_i p_i \ln p_i$$

例如信息论中 Shannon 熵。其实，这样“熵”
表达式起源于 Boltzmann H 定义：

$$H = \int f(\vec{r}, \vec{v}, t) \ln f(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3v d^3r$$

例如，对于平行于 \vec{n} 的子空间， $n = \frac{N}{V}$ 是常数，
平行于 \vec{n} 的子空间是 Maxwell 子空间

$$f = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp \left\{ - \frac{mv^2}{2k_B T} \right\}$$

$$\Rightarrow H = \int f \left(\ln n + \frac{3}{2} \ln \frac{m}{2\pi k_B T} - \frac{mv^2}{2k_B T} \right) d^3v d^3r$$

$$\left(\int f d^3r = n, \quad \frac{1}{n} \int \frac{mv^2}{2} f d^3r = \frac{3}{2} k_B T \right)$$

$$= N \left[\ln \frac{N}{V} + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right) - \frac{3}{2} \right]$$

而单粒子的平均热能为常数。

$$S = N k_B \left[\ln \frac{N}{V} + \frac{3}{2} \ln T + \frac{5}{2} + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right) \right]$$

$$\Rightarrow S = -k_B H + C$$

玻耳兹曼公式的 C ， $S \propto -H$ ，比例常数是 k_B

利用 Boltzmann 方程，可以证明

$\frac{dH}{dt} \leq 0$ ，称为 H 定理。（而且本节主要讨论的）这代表任何子系统都是“~~平衡~~”（统计物理里证明）。是 Boltzmann 方程物理意义的直接推论。

$$\frac{dH}{dt} = \int \left(\frac{\partial f}{\partial t} \ln f + f \frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial t} \right) d\vec{r} d\vec{p}$$

$$= \int (1 + \ln f) \frac{\partial f}{\partial t} d\vec{r} d\vec{p}$$

$$\text{B. eq. } = - \int (1 + \ln f) \left(\vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \right) d\vec{r} d\vec{p}$$

$$= - \int (1 + \ln f) \left(\vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} \right) d\vec{v} d\vec{r}$$

$$= - \int (1 + \ln f) (ff' - f'f') d\vec{v} d\vec{v} d\vec{r} d\vec{p}$$

~~1. 证~~
~~方法：~~ $\frac{\partial}{\partial \vec{p}} \cdot (\vec{v} \ln f) = \vec{v} \cdot (1 + \ln f) \frac{\partial f}{\partial \vec{p}}$

而 $\int d\vec{r} \nabla \cdot (\vec{v} f \ln f) = \oint \vec{n} \cdot (\vec{v} f \ln f) d\Sigma = 0$

方法： $\vec{n} \cdot \vec{p} = 0$. (~~且~~ $\vec{v} = \vec{p}/m$)

$$\therefore \int \frac{\partial}{\partial \vec{v}} (f \ln f) d\vec{v} = \oint d\Sigma \vec{v} \cdot \vec{f} f \ln f$$

§ 8.4 Boltzmann 方程的应用

这里我们简单介绍 Boltzmann 方程的一些应用。

首先，Boltzmann 方程可以推广到对气体，即 $\lambda_T \approx \bar{\lambda}_T$. 这时， $(\frac{\partial f}{\partial t})_c$ 需要修改。（参见 (10.4.10)）其次，不仅考虑经典和量子情形， $(\frac{\partial f}{\partial t})_c$ 是由 Boltzmann 方程导出的，一般来讲还要引入驰豫时间的近似。那就叫做耗散项。

$$(1) (\frac{\partial f}{\partial t})_c \approx - \frac{f - f^{(0)}}{\tau}$$

f 为非平衡分布函数， $f^{(0)}$ 为~~平衡~~（局域）平衡分布函数， τ 表示了平行的弛豫时间。

设 f 为矢量，即 $f^{(0)}$ 是基底平行态。这样仍保持 f 的意义：设外力为 0， \therefore

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{f - f^{(0)}}{\tau} \quad \because f \text{ 为矢量}, \therefore$$

$$\frac{df - f^{(0)}}{dt} = - \frac{f - f^{(0)}}{\tau}$$

$$f^{(0)(+)} \quad f(\vec{r}, t) - f^{(0)}(\vec{r}) = [f(\vec{r}, 0) - f^{(0)}(\vec{r})] e^{-\frac{t}{\tau}}$$

τ 是~~了平行~~需要的时间。

但 $\vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}}$ 为常数 $\vec{v} \rightarrow \infty$, $\frac{\partial f}{\partial v} \Big|_{v \rightarrow \infty} = 0$.

\Rightarrow ~~因为~~ $n = \int f d^3v = \text{finite}$.

\therefore dynamic 语义 对 $\frac{dH}{dt}$ 有意义。

$$\therefore \frac{dH}{dt} = - \int (1 + \ln f) (f_i f_i - f'_i f'_i) d\vec{v}_i d\vec{v}_i d\vec{p}_i$$

$\Rightarrow 1 \leftrightarrow 2$, 都是独立变量。∴

$$\frac{dH}{dt} = - \int (1 + \ln f_i) (f_i f_i - f'_i f'_i) d\vec{v}_i d\vec{v}_i d\vec{p}_i$$

$$\text{方法 1: } \frac{dH}{dt} = - \frac{1}{2} \int (2 + \ln f_i f_i) (f_i f_i - f'_i f'_i) d\vec{v}_i$$

$$v'_i \leftrightarrow v_i, \quad \& d(\cdots)' = d(\cdots)$$

$$\Rightarrow \frac{dH}{dt} = - \frac{1}{2} \int (2 + \ln (f'_i f'_i)) (f'_i f'_i - f_i f_i) d\vec{v}_i$$

方法 2:

$$\frac{dH}{dt} = - \frac{1}{4} \int \underbrace{[\ln(f_i f_i) - \ln(f'_i f'_i)]}_{\geq 0} (f_i f_i - f'_i f'_i) d\vec{v}_i$$

\therefore 且 $f_i f_i = f'_i f'_i$ 时成立。

$$\therefore \frac{dH}{dt} \leq 0 \Rightarrow \frac{ds}{dt} \geq 0.$$

$f_i f_i = f'_i f'_i$ 表示 f 为平行条件。

* 大高能和大产率 (质子, 重子)

$\frac{ds}{dt} \geq 0$

8.4 Boltzmann 方程中的电荷平衡

计算。用驰豫时间 τ_{fr} ，可以研究金属自由电子的电荷平衡过程。对金属中的自由电子， $f^{(0)}$ 为 Fermi 分布

$$f^{(0)}(\vec{p}) = \frac{1}{e(E(\vec{p}) - \mu)/k_B T + 1}$$

$E(\vec{p}) = \frac{p^2}{2m}$, μ 是化学势。单位体积内粒子数

同温度内平衡分布为

$$2 \times \frac{d^3p}{h^3} f^{(0)}, \quad 2 \text{ 来自 spin } \uparrow, \downarrow.$$

Boltzmann eq. reads

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} + \vec{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = - \frac{f - f^{(0)}}{\tau}$$

设在电场中运动时， $\vec{F} = -e\vec{E}$, \vec{E} 为电场强度。根据 $\frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \rightarrow 0$, $\vec{F} \cdot \vec{p} = 0$. \therefore

$$e\vec{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = \frac{f - f^{(0)}}{\tau}, \quad f = f^{(0)} + f^{(1)} + \dots;$$

代入得一式：

$$e\vec{E} \cdot \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \vec{p}} = \frac{f^{(1)}}{\tau} \Rightarrow f^{(1)} = e\vec{E} \cdot \vec{v} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \vec{v}}$$

$$\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \vec{p}} = \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \vec{E}} \frac{\partial \vec{E}}{\partial \vec{p}} = \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \vec{E}} \vec{v}$$

$f \approx f^{(0)} + e\vec{v} \cdot \vec{E} \cdot \vec{v} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \vec{v}}$

若把上式积分 $\int (f^{(0)} + e\vec{v} \cdot \vec{E} \cdot \vec{v}) dt$, 即能得到 $\rightarrow \text{J. m shift.}$

现在, 取运动方向为 x 轴, 则在 dt 时间内
速度沿 x 方向的 dA 在 E 层流

$$J_e dt dA = \int v_x dt dA + \frac{2dp}{h^3}$$

$$(J_e = nev_x = \frac{2dp}{h^3} f e^{v_x})$$

$$\text{即 } J_e = e \int v_x (f^{(0)} + f^{(1)}) \frac{2dp}{h^3},$$

$$v_x = p_x/m, f_0(-v_x) = f_0(v_x). \therefore f^{(1)}=0.$$

$$J_e = e^2 E \tau \int v_x^2 \frac{\partial f^{(0)}}{\partial E} \frac{2dp}{h^3}$$

$$\left(\begin{aligned} \int dp = & \int p d\phi \cdot \int d\theta \sin\theta d\psi \\ = & 2\pi E d\phi \sqrt{m/E} \cdot 4\pi \\ = & 4\pi \frac{(2m)^{3/2}}{2} \int E^k dE \\ = & e^2 E \tau \int v_x^2 \frac{\partial f^{(0)}}{\partial E} D(E) dE \\ D(E) = & 4\pi \frac{(2m)^{3/2}}{h^3} E^k \end{aligned} \right)$$

f 为 \vec{r} 和 t (振动)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla f + \frac{\vec{E}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = \frac{\partial f}{\partial t} \text{coll.}$$

$$\downarrow \quad \downarrow \quad \downarrow$$

$$\frac{d\langle v \rangle}{dt} = -\frac{eE}{m} + i\omega_c \langle v \rangle - \frac{\langle v \rangle}{\tau}$$

$$\langle v \rangle = -\frac{eE/m}{1-i\omega_c \tau} \quad (E = E_x + iE_y)$$

$$j = -ne\langle v \rangle = \sigma_0 E / (1-i\omega_c \tau), \sigma_0 = \frac{ne^2}{m}.$$

$$\vec{j} = \vec{v} \cdot \vec{E}, \quad \vec{v} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix}.$$

$$\Rightarrow \sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{\sigma_0}{1+i\omega_c \tau^2},$$

$$\sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = -\frac{nec}{B} + \frac{\sigma_0}{\omega_c \tau}.$$

* 当有吸收辐射时 (辐射), 在稳恒状态, H_0 可用
弛豫时间近似. 但 f 不依赖于 t , 用局域平均
值近似 $f^{(0)}$. 可得出速率. (见书)

选择 x, y, z 轴, (f 不变), $v_x \rightarrow v_f \rightarrow v_g$.

$$\therefore J_e = e^2 E \tau \int C(E) \frac{2p^2}{3} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial E} D(E) dE$$

$$= \frac{2e^2 E}{3m} \int C(E) E^3 \frac{\partial f^{(0)}}{\partial E} D(E) dE$$

对 Fermi gas, $\frac{\partial f^{(0)}}{\partial E}$ 只在 Fermi 面附近不为 0,
且 $T \rightarrow 0$, Fermi 面处 $\delta(E-\mu)$. \therefore

$$\frac{\partial f^{(0)}}{\partial E} = \delta(E-\mu) f^{(0)}$$

$$\therefore J_e = \frac{2e^2 \tau C(\mu)}{3m} n D(\mu) E$$

$$\therefore n = \int_0^\mu D(E) dE$$

$$= \frac{2}{3} \mu D(\mu).$$

$$\therefore J_e = \frac{ne^2 \tau}{m} E, \quad \sigma = \frac{ne^2}{m}$$

正向速率 n 纯粹由速率决定.

反向速率也时,

$$\vec{F} = -e \vec{E} - \frac{e}{c} \vec{v} \times \vec{B}$$

设 $\vec{v} = v_x + i v_y$ 考虑一维空间情况, 且

$$v = v_x + i v_y, \quad B \perp x-y 平面.$$

3.8.4.5 速率响应理论: 力学扰动

Boltzmann 方程只处理稀薄、短程相互作用气体.
这里还用到非平衡统计理论是 Kubo 提出的
线性响应理论. 该理论不仅可以用分子
动力学方法, 也可以用量子力学基态. 但是, 它仅限
于纯热力学可观察量, 也可用于计算量子力学可观察量.

线性响应理论~出发点是考虑 m 的磨擦力可以写成

$$H = H_0 + h(t)$$

H_0 是要研究的系统~磨擦机制, $H_0(t)$ 是一个 $\sim t$ 的扰动.
我们用力学方式研究问题. 研究 m 的磨擦力 \vec{f}

$$\text{Schrödinger eq.: } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = (H_0 + H_e) \Psi.$$

假定 Ψ 为 $\Psi(t)$,

$$\Psi(t) = e^{i\frac{H_0}{\hbar}t} \Psi(0), \quad \text{Sch. eq. true}$$

$$\therefore \left(-i\frac{H_0}{\hbar} \right) e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t} \Psi(0) + i\hbar e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t} \dot{\Psi}$$

$$= \text{在 } H_0 e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t} \Psi(0) + H_e e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t} \Psi$$

$$\Rightarrow \dot{\Psi} = \frac{1}{i\hbar} \left(e^{i\frac{H_0}{\hbar}t} H_e \Psi - e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t} \right) \Psi = \frac{1}{i\hbar} \tilde{H}_e e^{i\frac{H_0}{\hbar}t} \Psi$$

\tilde{H}_e 对 $t \rightarrow -\infty$ 时, $\Psi(t) = \Psi_m$, 是 Schrödinger eq.
 m -子宏表达式. ($t \rightarrow -\infty, H_e(t) = 0, H_0 \Psi_m = E_m \Psi$)

开始上,

$$\phi(t) = \phi_m + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t \tilde{H}_e(t') \phi(t') dt'$$

是 Schrödinger eq. 的解. 量力学守恒 A ①
在 t 时刻 n 能级值在物理上是确定的.

$$\bar{A}(t) = \int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) A(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)$$

$$= \int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) e^{i\frac{\tilde{H}_e}{\hbar}t} A e^{-i\frac{\tilde{H}_e}{\hbar}t} \psi(\vec{r}, t)$$

$$= \int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) A(t) \psi(\vec{r}, t)$$

② 代入

$$\phi(t) = \phi_m + \int_{-\infty}^t \tilde{H}_e(t') \left(\phi_m + \int_{-\infty}^{t'} \tilde{H}_e(t'') \phi(t'') dt'' \right) dt'$$

对 \tilde{H}_e 做线性近似, 就是 ② 上述的 ③ 和 ④ 的近似

$$\tilde{H}_e \sim \text{阶}: \phi(t) \approx \phi_m + \int_{-\infty}^t \tilde{H}_e(t') \phi_m dt'$$

$$\bar{A}_m = \bar{A}(t) \approx \int d\vec{r} \phi_m^* A(t) \phi_m$$

$$+ \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \int d\vec{r} d\vec{r}' [\bar{A}(t), \tilde{H}_e(t')] \phi_m$$

$$\bar{A}(t) - \bar{A}_m < m |A|_m > = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' < m |[A(t), \tilde{H}_e(t')]>$$

③ Fourier 变换

$$\int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} D(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} - i\omega(\vec{k}) t$$

$$\delta \alpha(\vec{r}, t) = eV_0 D(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega(\vec{k}) t}$$

对 \tilde{H}_e 中 H_0 , $D(\vec{k})$ 可以求出, 则冲击辐射率
密度函数可以求出.

例 2. 电导率. 假设我们用线性响应
理论求电导率的一般表达式:

$$H_e = - \int d\vec{r} \vec{j} \cdot \vec{A}, \quad \vec{A} \text{ 是外电场矢量}$$

$$\vec{j} = \vec{j}_1 - \frac{e^2}{m} \hat{n}(\vec{r}) \bar{A}(\vec{r}),$$

$$\vec{j}_1 = \frac{i e}{2m} \left((\nabla - \nabla') \Psi(\vec{r}) \Psi(\vec{r}') \right)_{\vec{r}=\vec{r}'}$$

在外场时, $\langle \vec{j} \rangle = \langle \vec{j}_1 \rangle = 0$.

根据经典物理学公式:

$$\langle j_a(\vec{r}, t) \rangle = \sum_{b=1}^3 \int d\vec{r} dt' K_{ab}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') A_b(\vec{r}', t')$$

如果 $\nu \sim k_F$, $\langle \vec{j}, \vec{j} \rangle \neq 0$, 会得到和时间相关的
电导率.

对统计系统

$$\langle \bar{A} \rangle_T = \sum_m \frac{1}{Z_G} e^{-(E_m - \mu)/k_B T} \bar{A}_m$$

$$(Z_G \text{ 是 } E \text{ 配分函数}, \frac{1}{Z_G} e^{-(E_m - \mu)/k_B T} = p_m)$$

$$= \sum_m p_m \bar{A}_m = \text{Tr} P \bar{A}$$

Kubo 在线性响应理论中推导出 (见书上推导)
程出发得出. (见苏进强书), 和那书一样.

下面举二例.

例 1. 对电子气做冲击型脉冲扰动.

$$V(\vec{r}, t) = V_0 e^{i\vec{Q} \cdot \vec{r}} \delta(t)$$

$$H_e = -eV_0 \int d\vec{r} \hat{n} e^{i\vec{Q} \cdot \vec{r}} \delta(t).$$

\hat{n} 是粒子数密度算符. 接前面讨论

$$\delta \bar{h}(\vec{r}, t) = i e V_0 \int d\vec{r}' \langle [\hat{h}(\vec{r}, t), \hat{h}(\vec{r}', 0)] \rangle_{t=0} e^{i\vec{Q} \cdot \vec{r}'}$$

$$i \langle [\hat{h}(\vec{r}, t), \hat{h}(\vec{r}', 0)] \rangle_{t=0}$$

是描述跃迁概率矩阵, 如果考虑平均场,
它在 $\vec{r} - \vec{r}', t \rightarrow 0$ 时

$$K_{ab} = -\frac{e^2 n}{m} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t') \delta_{ab}$$

$$+ i \langle [j_a(\vec{r}, t), j_b(\vec{r}', t')] \rangle \delta(t - t')$$

④ Fourier 变换

$$\langle j_a(\vec{r}, t) \rangle = \int \frac{d^3 k dv}{(2\pi)^4} j_a(\vec{k}, v) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - ivt}$$

$$\boxed{K_{ab}(\vec{r} - \vec{r}', t - t')} = \int \frac{d^3 k dv}{(2\pi)^4} K_{ab}(\vec{k}, v) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') - iv(t - t')}$$

$$A_b(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3 k dv}{(2\pi)^4} A_b(\vec{k}, v) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - ivt}$$

$$\boxed{j_a(v)} = \sum_{b=1}^3 K_{ab}(\vec{k}, v) A_b(\vec{k}, v)$$

看电场是空间均匀的

$$A_b(\vec{k}, v) = \frac{1}{\sqrt{v}} E_b(v) \delta(\vec{k})$$

$$\boxed{j_a(v)} = \sum_{b=1}^3 K_{ab}(0, v) E_b(v) / \sqrt{v}$$

$$\boxed{\sigma_{ab}(v) = \frac{1}{v} K_{ab}(0, v)} \text{ 是电导率张量.}$$

$$\text{波动分析: } \sigma_e = \frac{e^2}{3\sqrt{v}} \int_0^\infty dt \int_0^B d\vec{x} \text{Tr} \vec{J} \cdot \vec{J} e^{-iLt} \rho_0.$$

3.8.6 线性响应理论：热力学扰动

前面讲的是直接外加扰动后线性响应，这里由于是微扰，波函数和扰动不能用一个 ψ 表示，由 $\psi = \psi_0 + \delta\psi$ 表示，这时，体系状态是 ψ_0 和 $\delta\psi$ 的线性组合， ψ_0 与 $\delta\psi$ 平行。我们称体系受到热力学扰动（ β 和 μ ）作用时 Hamiltonian 是

$$\begin{aligned} H &= \int H(\vec{r}) d\vec{r} \\ (\text{或 } \vec{p} = m\vec{v}, \vec{p} = -i\hbar\nabla) \quad H(\vec{r}) &= \sum_{i=1}^N E_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \\ E_i &= \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} U(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \end{aligned}$$

(S) 表示的由 $\int d\vec{r} N(\vec{r})$

$d\vec{r}$ 是一个微元，宏观上代表之，在 $d\vec{r}$ 内，体系是 ψ_0 和 $\delta\psi$ 的线性组合， ψ_0 对每一个 local， $\delta\psi$ 对每一个 $d\vec{r}$ 都是平行的。

$$\psi(\vec{r}) \sim \psi_0(\vec{r}) + \delta\psi(\vec{r})$$

$$P(\vec{r}) \sim e^{-\beta(\vec{r})} H_0(\vec{r})$$

$$H_0(\vec{r}) = H(\vec{r}) - \mu(\vec{r}) N(\vec{r})$$

系统处于局域平衡态的密度矩阵为 (14)

$$\rho_L = N_L^{-1} e^{-\beta S_Q}$$

$$S_Q = \int \beta(\vec{r}) [H(\vec{r}) - \mu(\vec{r}) N(\vec{r})] d\vec{r}$$

N_L 是归一化常数， $\beta(\vec{r}) = 1/k_B T(\vec{r})$ ， $N(\vec{r})$ 是 local 波函数。 $T(\vec{r})$ ， $\mu(\vec{r})$ 在空间各处的值保证了 ψ_0 和 $\delta\psi$ 平行。但局域平衡态 ρ_L 不能直接求出它的密度矩阵， ρ_L 不是密级矩阵的元素，还需要加修正项：

$$\rho = \rho_L + \delta\rho,$$

P 流通列微方程。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \dots, [H_0, \rho] = L\rho$$

//

$$\frac{\partial \delta\rho}{\partial t} = L\rho_L + L\delta\rho$$

$$\therefore \delta\rho(t) = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{-iL(t-t')/\hbar} \delta\rho(0) e^{iL(t-t')/\hbar} \quad (\text{取 } \hbar=1).$$

$$[H, \rho_L] = [H, \frac{1}{N_L} e^{-S_Q}]$$

$$= \frac{1}{N_L} [H, -S_Q] + \frac{1}{N_L} [H, (S_Q)_{h.c.}] + \dots$$

$$= -LS_Q + \frac{1}{N_L} [LS_Q] S_Q + \dots$$

$$= -LS_Q \left(\frac{1}{N_L} (1 - S_Q + \dots) \right) = -LS_Q \rho_L.$$

(由于 LS_Q 和 $\frac{\partial \beta}{\partial t}$ 是小量， $\therefore \rho_L \approx \rho_0$)

$$\simeq -LS_Q \rho_0$$

$$= - \int d\vec{r} \left[[H(\vec{r}) - \beta(\vec{r}) \mu(\vec{r})] N(\vec{r}) \right] \rho_0.$$

$$\rho_0 = e^{-\beta(H - \bar{\mu}N)} / \text{Tr} e^{-\beta(H - \bar{\mu}N)}$$

$\bar{\mu}$ 和 $\bar{\mu}$ 是 $\beta(\vec{r})$ 和 $\mu(\vec{r})$ 在空间平均值。

由能守恒： $\frac{\partial H(\vec{r})}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}) = 0$

守恒律： $\frac{\partial N}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}(r) = 0$.

$$\Rightarrow -\frac{i}{\hbar} L H(\vec{r}) = -\nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}), -\frac{i}{\hbar} L N(\vec{r}) = -\nabla \cdot \vec{J}(\vec{r})$$

$\vec{J}(\vec{r})$ 和 $\vec{J}(\vec{r})$ 是能流和守恒流。

(14)

$$\delta\rho = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' (L\rho_L + L\delta\rho(t'))$$

(14) 时代入

$$\delta\rho = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' L\rho_L + -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \left(\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t'} dt'' L \delta\rho_L + L\delta\rho(t') \right)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' L\rho_L + \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^t dt' L \left(\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t'} dt'' L \delta\rho_L \right) + L\delta\rho(t')$$

$$+ \left(\frac{i}{\hbar} \right)^3 \int_{-\infty}^t dt' L \int_{-\infty}^{t'} dt'' L \int_{-\infty}^{t''} dt''' L \delta\rho_L + \dots$$

$$\equiv -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{-\frac{i}{\hbar} L(t-t')} L \delta\rho_L = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{-\frac{i}{\hbar} L(t-t')} L \delta\rho_L dt'$$

$$\cancel{\frac{i}{\hbar} L \delta\rho} \quad \dot{S}_Q = -\frac{i}{\hbar} LS_Q$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \left[H, \int \beta(\vec{r}) (H(\vec{r}) - \mu(\vec{r}) N(\vec{r})) d\vec{r} \right]$$

$$= -\frac{i}{\hbar} [H, \bar{\beta} S_Q] + -\frac{i}{\hbar} \left[H, \int \frac{\partial \beta(\vec{r})}{\partial \vec{r}} \cdot \nabla (H - \bar{\mu} N) d\vec{r} \right]$$

$$= \cancel{\frac{i}{\hbar} L \delta\rho} = -\frac{i}{\hbar} L \int \frac{\partial \beta}{\partial \vec{r}} \cdot \nabla (H - \bar{\mu} N) d\vec{r}$$

β , 正比于 β 或 βM 的梯度。

$$\therefore L_{\vec{B}} = \frac{1}{i} \int d\vec{r} \vec{B}$$

$$\begin{aligned} L_{\vec{B}, L} &= -i \int d\vec{r} [\beta(\vec{r}) \nabla \cdot \vec{Q}(\vec{r}) - \beta^{\mu} \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r})] \rho_0 \\ &\Rightarrow i \int d\vec{r} [\vec{Q} \cdot \nabla \beta(\vec{r}) - \vec{J} \cdot \nabla (\beta^{\mu})] \rho_0 \\ &= i \int d\vec{r} [\vec{J}_e \cdot \nabla \beta - \beta \left(\frac{\partial \mu}{\partial n} \right) \vec{J} \cdot \nabla n] \rho_0 \\ &\quad \vec{J}_e = \vec{Q}(\vec{r}) - h \vec{J}(\vec{r}), h = \mu - T \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_n. \end{aligned}$$

$h(\vec{r})$ 是 local 项, n 是平均密度.

对 \vec{J} 的积分 $\vec{B}(\vec{r})$, 例如在 \vec{J} 层的区域层, 在平均场时 $\text{Tr } \vec{B}(\vec{r}) \rho_0 = 0 \dots$

$$\begin{aligned} \langle \vec{B}(\vec{r}) \rangle &= \text{Tr} (\vec{B}(\vec{r}) \rho_0) \\ &= -i \int_0^\infty dt' \text{Tr} \vec{B}(\vec{r}) e^{-iL't'} L_{\vec{B}} \rho_0 \\ &= \int_0^\infty dt' d\vec{r}' \text{Tr} \vec{B}(\vec{r}') e^{-iL't'} \left[\vec{J}_e(\vec{r}') \cdot \nabla \beta \right. \\ &\quad \left. - \beta \left(\frac{\partial \mu}{\partial n} \right) \vec{J}(\vec{r}'). \nabla n \right] \rho_0 \end{aligned}$$

若 $T(\vec{r})$ 是平均场, $\frac{\partial n}{\partial r} \neq 0$, 则 $\vec{J} \neq 0$.

$$\langle \vec{J} \rangle = -D \nabla n, \text{ 扩散系数}$$

$$\begin{aligned} D &= \beta \left(\frac{\partial \mu}{\partial n} \right)_T \frac{1}{3V} \int_0^\infty dt \text{Tr} \vec{J} \cdot \vec{J} e^{-iL't} \rho_0 \\ &= \frac{1}{e^2} \left(\frac{\partial n}{\partial r} \right) \cancel{\text{扩散系数}} e^2 \beta \sigma_e \\ \sigma_e &= \frac{e^2 \beta}{30V} \int_0^\infty dt \text{Tr} \vec{J} \cdot \vec{J} e^{-iL't} \rho_0. \quad (S.2.10) \end{aligned}$$

是电导率. ($\propto \sigma_{ab}(v) = \frac{1}{iV} K_{ab}(0, v)$ 为 v^2)

$$\cancel{\text{扩散系数}} = \frac{1}{e^2} \beta \sigma_e. \quad ; V \rightarrow \frac{1}{\beta} = T.$$

热力学运动量的 $1/V$ 约数系数与电荷系数 (即电荷率、扩散系数) 的 $1/V$ 约数有时称为第一系数-温度系数. ($\because 1/V$ 约数是电荷系数-温度系数). 布朗运动 (热力学系数) \propto [电荷率 \times 扩散系数 \sim 电子数 (N_e)]. 热力学运动量的 $1/V$ 约数系数 \sim 电荷率 \times 温度系数.

若 $\vec{J} \neq 0$, \vec{n} 是平均密度. (1.1)

$$\langle \vec{B} \rangle = \frac{1}{V} \int_0^\infty dt \text{Tr} \vec{B} e^{-iL't} \left[\vec{J}_e \cdot \nabla \beta - \beta \left(\frac{\partial \mu}{\partial n} \right) \vec{J} \cdot \nabla n \right] \rho_0.$$

$$\vec{B} = \int d\vec{r} \vec{B}(\vec{r}), \vec{J} = \int d\vec{r} \vec{J}(\vec{r}), \vec{J}_e = \int d\vec{r} \vec{J}_e(\vec{r}).$$

若只有扩散系数, 但 $\vec{J} \neq 0$, 则 $\vec{J}_e = \vec{J}$, $\vec{J} = \vec{Q}$, 则 $\vec{B} = \vec{Q}$, 则 $\langle \vec{B} \rangle = \frac{1}{V} \int_0^\infty dt \cancel{\text{扩散系数}} \text{Tr} (\vec{X} \beta \cdot \vec{Q}) \vec{Q} e^{-iL't} \rho_0.$

$$\begin{aligned} \langle \vec{Q} \rangle &= \cancel{K \nabla T} = \cancel{K \nabla \frac{\partial \mu}{\partial n}} + \cancel{K \nabla \frac{\partial \mu}{\partial T}} \vec{Q} \\ &= K \nabla^2 \vec{P} \end{aligned}$$

$$\langle \vec{Q} \rangle = -K \nabla T = -K \nabla \frac{\partial \mu}{\partial n} = +K \nabla^2 \vec{P} \quad (k_B = 1)$$

另一方面, $(\nabla \cdot \vec{Q}) \vec{Q} = \vec{Q} \cdot (\vec{A} \cdot \vec{Q}) \vec{Q} = (A_x Q_x \delta_{xy} + A_y Q_y \delta_{xy} + A_z Q_z \delta_{xy})$
因为 $Q_x Q_y Q_z \neq 0$. $= A_x Q_x Q_y \Rightarrow A_x \cancel{Q_x Q_y + Q_y Q_z + Q_z Q_x} \frac{1}{3}$

$$\therefore \langle \vec{Q} \rangle = \underbrace{\left(\frac{1}{3} \frac{1}{k_B T^2 V} \int_0^\infty \text{Tr} \vec{Q} \cdot \vec{Q} e^{-iL't} \rho_0 dt \right)^{\frac{1}{2}}}_{K \text{ 扩散}} \vec{P}$$

§ 8.4 速度观察: ~~物理量~~ 153

因为在一般近代物理学中都是单独讲一章. 但在热力学和统计物理学中却常常是单独立一章. 因为热力学和统计物理学是近代物理学的一部分, 而且其作用偏重于平行和驰豫有内在联系. 同时, 我们把热力学放在第二章. 因为第三章, 一是热力学接于前面的力学. 由物系状态的不连续性引起. ~~物理量~~ 153
另一类是随机外力引起的热力学. 这一章是研究热力学. 在讲热力学时, 我们说正则系综与大通量接触, 多态的热力学接于前面的力学:

$$\sqrt{E-E_0}/E \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$$

至多子系统 ($n = \frac{N}{V}$ fixed when N and $V \rightarrow \infty$).
这种广泛的讨论 n/V 的意义. 至多子系统, 可以同时有能级系, 扩散系数 $\sim 1/V$.
这些系数用分子有能级近似 n/V 广泛地使用时, 这些计算很直接, 但一些没有物理意义, 例如熵和强度 n/V 中, 不适用. 在这里我们介绍 ~~热力学接于前面的力学~~ 及讨论化 19 世纪的偏差理论.

§8.4.1 活塞热力学

(Smoluchowski-Einstein 方程)

对于处于平衡态的分子系，玻尔兹曼分布平衡态
概率是 $S = k_B \ln W_{\max}$, 且 $W_{\max} = e^{S/k_B}$

$$\text{偏离平衡: } W = e^{S/k_B}$$

$$\therefore W = W_{\max} e^{(\bar{S}-S)/k_B} = W_{\max} e^{\Delta S/k_B}$$

满足 $\frac{\partial}{\partial E} \ln W = 0$ 的条件 $\Delta E = 0, \Delta V = 0$.

对已知系统，条件变为 $\Delta E + \Delta E_e = 0, \Delta V + \Delta V_e = 0$.

$e^{\Delta F}$ 表示外部功 ΔF . ($E = V + V_e$ 和 $E = E_e + E_e$ 为 ΔF)

$$\therefore W_T = W_{T,\max} = e^{(\Delta S + \Delta F) / k_B T}$$

$$= W_{\max} e^{(\Delta S + \frac{\Delta E_e + \frac{\partial}{\partial V} \Delta V_e}{T}) / k_B T}$$

$$= W_{\max} e^{(\Delta S - \Delta E - \frac{\partial}{\partial V} \Delta V) / k_B T}$$

$$= W_{\max} e^{-(\Delta F + \frac{\partial}{\partial V} \Delta V) / k_B T}$$

$$\Delta F = \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T \Delta V + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2} \right)_T (\Delta V)^2 + \dots$$

$$- \frac{\partial}{\partial V}$$

$$- \frac{\partial^2 F}{\partial V^2}$$

由 $N \neq \infty$ 且 $M = \text{const}$, 则 $M = \rho V$ 且 $\Delta M = \Delta \rho V + \rho \Delta V = 0$.

$$\Rightarrow \Delta M = \Delta \rho V + \rho \Delta V = 0 \Rightarrow \frac{\Delta \rho}{\rho} = -\frac{\Delta V}{V}$$

$$\therefore \overline{\left(\frac{\Delta \rho}{\rho} \right)^2} = \overline{\left(\frac{\Delta V}{V} \right)^2} = -\frac{k_B T}{V^2} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T$$

$$\rho = \frac{N \cdot a}{V}, \text{且 } V \text{ 固定, 且 } \Delta \rho \propto \Delta N.$$

$$\therefore \overline{\left(\frac{\Delta N}{N} \right)^2} = \overline{\left(\frac{\Delta \rho}{\rho} \right)^2} = -\frac{k_B T}{V^2} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T$$

一般

$$\Delta \rho = \frac{\Delta N}{V} - \frac{N \Delta V}{V^2}$$

$$\overline{\left(\Delta \rho \right)^2} = \left(\frac{\Delta N}{V} \right)^2 - 2 \frac{\Delta N \Delta P}{V^3} N + \frac{N^2 (\Delta V)^2}{V^4}$$

$$\overline{\left(\Delta \rho \right)^2} = \frac{\overline{(\Delta N)^2}}{V^2} + \frac{N^2 \overline{(\Delta V)^2}}{V^4}$$

$$\overline{\left(\frac{\Delta \rho}{\rho} \right)^2} = \overline{\left(\frac{\Delta N}{N} \right)^2} + \overline{\left(\frac{\Delta N}{N} \right)^2} = 2 \overline{\left(\frac{\Delta N}{N} \right)^2}$$

对理想气体, $\left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T = -\frac{1}{P} = -\frac{V^2}{N k_B T}$

$$\Rightarrow \overline{\left(\frac{\Delta N}{N} \right)^2} - \frac{k_B T}{V^2} \left(-\frac{V^2}{N k_B T} \right) \propto \frac{1}{N}.$$

与玻尔兹曼分布一致.

$$W_T \approx W_{\max,T} \exp \left(\frac{1}{2k_B T} \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T (\Delta V)^2 \right)$$

这就是玻尔兹曼分布概率. ① $\frac{\partial}{\partial V}$ 增加子的偏移可以忽略

$$\overline{(\Delta A)^2} = \int (\Delta A)^2 W d(\Delta A) / \int W d(\Delta A) \text{ 和 } 1.$$

$$\text{则 } \overline{(\Delta V)^2} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} (\Delta V)^2 \exp \left[-\frac{1}{2k_B T} \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T (\Delta V)^2 \right] d(\Delta V)}{\int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[-\frac{1}{2k_B T} \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T (\Delta V)^2 \right] d(\Delta V)}$$

$$= \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} (\Delta V)^2 \frac{k_B T}{(\frac{\partial P}{\partial V})_T} \frac{1}{2\pi} d(\exp \left(-\frac{1}{2k_B T} \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T (\Delta V)^2 \right))}{\int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-\frac{1}{2k_B T} \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T (\Delta V)^2 \right) d(\Delta V)}$$

$$= \Rightarrow \frac{\Delta V (k_B T)}{(\frac{\partial P}{\partial V})_T} \exp \left(-\frac{1}{2k_B T} \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T (\Delta V)^2 \right) \Big|_{\Delta V=0}$$

$$- k_B T \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T = - k_B T \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T$$

$$\therefore \overline{\left(\frac{\Delta V}{V} \right)^2} = - \frac{k_B T}{V^2} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T$$

以上计算得到的结果是正确的. ∵ 在活塞
上, $\left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T = \left(\frac{\partial^2 P}{\partial V^2} \right)_T = 0$, ∴ $\Delta F \propto \Delta V$ 且 $(\Delta V)^2$.

$$\Delta F = -P \Delta V - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 P}{\partial V^2} \right)_T (\Delta V)^2 + \dots$$

$$\therefore W = W_{\max} \exp [-\alpha X^2],$$

$$\alpha = \frac{1}{24k_B T} \left| \left(\frac{\partial^3 P}{\partial V^3} \right)_T \right|, X = \Delta V.$$

$$\overline{(\Delta V)^2} = \frac{\int_0^\infty X^2 e^{-\alpha X^2} dX}{\int_0^\infty e^{-\alpha X^2} dX} = \frac{\Gamma(\frac{3}{2})}{\Gamma(\frac{1}{2})} \frac{1}{\alpha^{\frac{1}{2}}} = 0.338 \left[\frac{1}{24k_B T} \left(\frac{\partial^3 P}{\partial V^3} \right)_T \right]^{-\frac{1}{2}}$$

对实际气体而言,

$$P_C = \frac{a}{27b^2}, V_C = 3b, T_C = \frac{8a}{27bR}.$$

$$\text{理想气体方程: } (P + \frac{a}{V}) (V - b) = RT$$

$$\Rightarrow P = \frac{3RT}{3V - V_C} - \frac{9RT_C V_C}{8V^2}$$

$$\therefore V = \frac{N}{N_A} V, (V_C = \frac{N}{N_A} V_C), N_A = 6.02 \times 10^{23}$$

$$P = \frac{3NkT}{3V - V_C} - \frac{9NkT_C V_C}{8V^2}$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V^3} \right)_T = -\frac{48NkT}{(3V - V_C)^4} + \frac{27NkT_C V_C}{V^5}, \left(\frac{\partial P}{\partial V^2} \right)_{TC} = -\frac{27NkT_C}{8V_C^4}$$

$$\left(\frac{\Delta V}{V}\right)_c = 0.338 \left[-\frac{V^4}{24kT_c} \left(\frac{\partial^3}{\partial V^3} \right)_{T_c} \right]^{-k}$$

$$= 0.901 / \text{km}$$

一般情况 $\frac{\Delta V}{V} \propto$ 高度，然而随高度
变大很多。∴临界层厚度要到至深入分子 phase
的内部才足够。

8.4.1. 色散和吸收
两点应用：

① 由于空气中存在分子振动能级，可以解释为什么
云天是蓝色的。我们考虑空气是干净的
情况，这时，漫射光强度不会引起吸收
时，散射的强度

$$\langle I \rangle \propto \frac{1}{x^2} \frac{\Delta V^2}{V^2},$$

没有吸收的话，则没有散射光。光的强度
会越强，散射越强。蓝色波长短，∴我们看到
漫射强度最大的是蓝色的 \Rightarrow 蓝天。② 来自，互作用
太阳光中 中子辐射时，杂质散射占优，所以
称它为太阳蓝天了。

天空颜色是由穿过大气层
的光散射决定的。

(在太空中是黑色的)

④ ④ 天空，但在清晨和傍晚，太阳
光穿过滤较厚的大气层才能发生散射，
但蓝光早被大气吸收，只有很长的
红色穿透过来，∴太阳 \Rightarrow 红色。

⑤ 对液体，立临界层处

$$\langle I \rangle \propto \frac{1}{x^2} V \left[-\frac{V^4}{24kT} \left(\frac{\partial^3}{\partial V^3} \right)_T \right]^{-k}$$

与漫射的比正常情况下大很多倍。

液体透明的液体由于光散射变成乳白色。

8.4.2 高斯分布

对任意粒子 x , X , $\Delta x = X - \bar{x}$; 高斯是
单独立子 x 的 S : $S = S(x)$.

$$\Delta S = S - \bar{S} = S(x) - S(\bar{x}) = \Delta S(x).$$

类似于体积情况 x 出现偏差的几率

$$W(x) dx \approx e^{\frac{\Delta S(x)}{k_B T}} dx.$$

∴ x 是子场。

$$\Delta S = \Delta S(0) + \frac{\partial S}{\partial x} \Big|_{x=0} x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_{x=0} x^2 + \dots$$

8.4.3 液体空间关联

立临界层，我们看到，粒子和立临界层的浓度差
以很慢的速度，事实上，由于立临界层，关联长度很长，不
同空间的粒子数之间的关联可叫做远场的关联。
我们在经典统计力学中已经看到立临界层的
相关性引起的二阶关联函数与非平衡平均值的关系。
但经典统计力学理论没有考虑到临界层附近。
立线的用经典统计力学理论方法到临界层附近
的关联函数。

$$\text{定义 density-density correlation function}$$

$$C(\vec{r}, \vec{r}') = \langle (n(\vec{r}) - \langle n(\vec{r}) \rangle)(n(\vec{r}') - \langle n(\vec{r}') \rangle) \rangle$$

$$= \langle \Delta n(\vec{r}) \Delta n(\vec{r}') \rangle.$$

$$\langle \Delta n(\vec{r}) \rangle = 0.$$

∴ $\Delta n(\vec{r})$ 与 $\Delta n(\vec{r}')$ 独立，即 $C(\vec{r}, \vec{r}')$

$$= \langle \Delta n(\vec{r}) \rangle \langle \Delta n(\vec{r}') \rangle = 0 \Rightarrow \text{无关联}.$$

$C(\vec{r}, \vec{r}') \neq 0$, 则立临界层附近的浓度有关联。

考虑均勻液体， $\langle \Delta n(\vec{r}) \rangle = \bar{n}$, 与无关联。由平均
意义， $C(\vec{r}, \vec{r}') = C(\vec{r}-\vec{r}')$, 浓度空间相关性。

$$C(\vec{r}-\vec{r}') = C(|\vec{r}-\vec{r}'|), \text{且随距离有关}.$$

∴ $x=0$ 时 S 取极大值,

(b)

$$\therefore \frac{\partial S}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, \quad \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_{x=0} < 0.$$

$$\therefore W(x) dx \approx A e^{-\frac{3x^2}{2k_B T}}, \quad 3 = -\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_{x=0} > 0.$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} W(x) dx = 1, \Rightarrow A = \sqrt{\frac{3}{2\pi k_B T}}.$$

$$W(x) dx = \sqrt{\frac{3}{2\pi k_B T}} e^{-\frac{3x^2}{2k_B T}} dx$$

即在 x 出现偏差的几率服从高斯分布, Gauss 分布。

$$\text{则 } 3: \quad \bar{x}^2 = \sqrt{\frac{3}{2\pi k_B T}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\frac{3x^2}{2k_B T}} dx = \frac{k_B T}{3}.$$

$$\therefore 3^2 = k_B T / \bar{x}^2, \quad \therefore$$

$$W(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi k_B T}} e^{-\frac{x^2}{2k_B T}} dx.$$

* 高斯分布可以推广到多维。

* 高斯分布对小体积中 $n \gg \bar{n}$.

-般情况下, 用泊松分布。

且 $\Delta n(\vec{r}) = 0$,

$$C(\vec{r}) = \langle \Delta n(\vec{r}) \Delta n(0) \rangle$$

$$\text{设 } \Delta n(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_i \tilde{n}_i e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}$$

$$\Delta n^*(\vec{r}) = \Delta n(\vec{r}) \Rightarrow \tilde{n}_i^* = \tilde{n}_i$$

$$|\tilde{n}_i|^2 = \int d\vec{r} d\vec{r}' \langle \Delta n(\vec{r}) \Delta n(\vec{r}') \rangle e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r}-\vec{r}')}}$$

$$\begin{aligned} \langle |\tilde{n}_i|^2 \rangle &= \int d\vec{r} d\vec{r}' \langle \Delta n(\vec{r}) \Delta n(\vec{r}') \rangle e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r}-\vec{r}')} \\ &= V \int d\vec{R} \langle \Delta n(\vec{R}) \Delta n(0) \rangle e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} = V C(\vec{q}). \end{aligned}$$

$$\therefore C(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_i \langle |\tilde{n}_i|^2 \rangle e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}$$

$$\begin{aligned} \text{由 } f(\vec{r}) &= -\frac{(AF + pV)}{kT} \\ \text{由 } W &= W_{\max} e^{-\frac{(AF + pV)}{kT}} = W_{\max} e^{-\frac{AF}{kT}} \\ AF &\sim \int (f - \bar{f}) d\vec{r}. \end{aligned}$$

$f(\vec{r})$ 是单位体积 local Free energy. 若 T 固定,

则 Δf 可视作 Δn 的函数:

$$\Delta f = \frac{a}{2} (\Delta n)^2 - \frac{b}{2} (\Delta n). \quad \left(\int_{n=0}^{\infty} (n - \bar{n})^2 = \frac{1}{2} \bar{n}^2 \right)$$

(~~由 $\Delta f = \frac{1}{2} (\Delta n)^2$~~ , 由 $\Delta f = \frac{1}{2} (\Delta n)^2$ 取得 Δn)

$\langle \Delta n \rangle$ 为零时 Δf 为零. 而 Δn 为零.

这叫 Landau 二极模型理论.

$$\begin{aligned} \langle |\tilde{n}_i|^2 \rangle &= \int d\vec{q} \tilde{n}_i^* \tilde{n}_i d\vec{v} / \int d\vec{q} \tilde{n}_i d\vec{v}. \quad (16) \\ &\stackrel{\text{Gauss}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{n}_i |\tilde{n}_i|^2 w / \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{n}_i w \quad (\text{Gauss}) \\ &= \frac{V k T}{a + b \tilde{n}_i^2}. \\ \therefore C(\vec{r}) &= \frac{k T}{V} \sum_i \frac{1}{a + b \tilde{n}_i^2} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \\ &= \Rightarrow k T \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \frac{1}{a + b \tilde{n}_i^2} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \\ &= \frac{k T}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} dq \frac{1}{a + b \tilde{n}_i^2} \int_0^\pi d\theta e^{iqr \cos\theta} \\ &= \frac{k T}{4\pi b} \frac{1}{r} e^{-r/\sqrt{a}}, \quad \tilde{n}_i = \sqrt{\frac{a}{b}}, \sim (T - T_c)^{-1/2}. \end{aligned}$$

这叫 mean field 说法. 然后讲.

至 ~~前~~ 讲过 Δn 的名时, 我们讲了冲高型和低型振动能, $D(\vec{q})$ 在对 ~~冲高型~~ 时, ~~至~~ ~~低~~ 型振动能是低能, 这可叫 $\langle |\tilde{n}_i|^2 \rangle$ 为低.

由热力学, $a = \frac{1}{h} \left(\frac{\partial P}{\partial n} \right)_T$ (见教书 57 页)

而到常温 $\left(\frac{\partial P}{\partial n} \right)_T = 0 \Rightarrow a = a_0 (T - T_c)$.

$$\begin{aligned} \nabla n(\vec{r}) &= \nabla \Delta n(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_i \tilde{n}_i^* \tilde{n}_i e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \\ &= \frac{1}{V} \sum_i \tilde{n}_i^* \tilde{n}_i e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} = \frac{1}{V} \sum_i \tilde{n}_i^* (-\vec{q}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \\ \langle \nabla n(\vec{r}) \rangle &= \frac{1}{V} \sum_i \tilde{n}_i^* \tilde{n}_i e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \end{aligned}$$

$$\therefore \Delta f = \frac{1}{V} \sum_i \tilde{n}_i^* \tilde{n}_i \left(\frac{a}{2} + \frac{b}{2} \vec{q} \cdot \vec{q} \right) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}}.$$

$$\begin{aligned} \Delta F &= \int d\vec{q} d\vec{r} \Delta f = \frac{1}{2V} \left| \sum_i \tilde{n}_i^* \tilde{n}_i \left(\frac{a}{2} + \frac{b}{2} \vec{q} \cdot \vec{q} \right) \delta_{\vec{q}, \vec{0}} \right|^2 \\ &= \frac{1}{2V} \sum_i (a + b \vec{q} \cdot \vec{q}) |\tilde{n}_i|^2. \end{aligned}$$

$$\therefore W = W_{\max} \exp \left(-\frac{1}{2kT} \sum_i (a + b \vec{q} \cdot \vec{q}) |\tilde{n}_i|^2 \right)$$

$$= W_{\max} \exp \left(-\frac{a + b \vec{q} \cdot \vec{q}}{2kT} |\tilde{n}_i|^2 \right).$$

(~~由~~ 表明, 宏观性质在微观上是 local 的. 不同 \vec{q} 间是独立的. 是 Gauss 分布. (小 \vec{q} 也行)).

3.8.1 液体模型: 随机运动和布朗运动

关于布朗运动, 我们已经了解不少故事. 说的是在 \vec{q} 时随机运动, 微观上叫做 Brownian 随机运动. 爱因斯坦在 1905 年正确地解释了布朗运动. 对分子的相互性, 或说物化序子之间有吸引作用. 现在, “布朗运动”代表 ~~广义~~ “微粒”在广义的随机 “场”~~中~~下随机运动. 是一美丽的物理学现象.

3.8.1.1 布朗方程

用布朗方程可以对布朗运动 \vec{r} 作很多直接的预测. ~~由~~ 布朗方程 $\vec{r} \sim 10^{-5} \text{--} 10^{-4} \text{ cm}$

~~由~~ 大于 10^{-5} cm 两种力作用

① 线性阻力 F_r , 制动, 动力, 引力, 波阻, 粘滞力, 等.

② 用用 \vec{q} 的强度、颗粒半径, 例如 10^{-4} cm 时, 流体 \vec{q} 的密度 10^{-2} g/cm^3 , 颗粒半径 10^{-4} cm , \vec{q} 的强度 $10^{-18} \text{ Sec}^{-1}$ 为布朗运动时间. 可以这种力为随机 \vec{q} 的 10^{-5} cm .

∴ 布朗运动满足牛顿第二定律

$$m \frac{d\vec{u}}{dt} = \vec{F}_1 + \vec{F}_2(t). \quad (\text{由牛顿第二定律})$$

例如，考虑在水平方向 (x) 上投影，运动和速度只有粘滞力 $-\alpha u_x = -\alpha u$, $F_2(t) = X(t)$.

$$m \frac{du}{dt} = -\alpha u + X(t)$$

这是二阶方程.

$$m \frac{dx}{dt} = -\alpha x \frac{dx}{dt} + X(t),$$

$$\frac{m}{2} \frac{d^2x}{dt^2} - m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - \frac{\alpha}{2} \frac{d^2x}{dt^2} + X(t)$$

对大数布朗运动求解可得

$$\frac{m}{2} \frac{d^2}{dt^2} \langle x^2 \rangle - m \langle \dot{x}^2 \rangle = -\frac{\alpha}{2} \frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} + \langle x \dot{x} \rangle = 0.$$

由能的泛定, $m \bar{v}^2 = kT$.

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle x^2 \rangle + \frac{1}{\tau} \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle - \frac{2kT}{m} = 0, \quad \tau = \left(\frac{\alpha}{m} \right)^{-1}$$

$$\Rightarrow \langle x^2 \rangle = \frac{2kT}{m} t + C_1 e^{-t/\tau} + C_2.$$

若至 $t=0$, $\langle x^2 \rangle$ 和 $\frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle = 0$. 则

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2kT}{m} \left(\frac{t}{\tau} - (1 - e^{-t/\tau}) \right)$$

$$\therefore n(x, t+\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x-x', \tau) n(x', t) dx' =$$

$$\begin{array}{l} x \\ \downarrow \\ x' \\ \downarrow \\ x-x' \\ \downarrow \\ x \\ \downarrow \\ x \\ \downarrow \\ x \end{array} \quad \text{且} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x, \tau) = 1$$

$$f(x, \tau) = f(-x, \tau).$$

又很慢, 则

$$n(x, t+\tau) = n(x, t) + \tau \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{2} \tau^2 \frac{\partial^2 n}{\partial t^2} + \dots$$

$$\text{若} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(z, \tau) dz = 1, \quad n(x, t+\tau) = n(x, t) - 3 \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \dots$$

设 $\frac{\partial}{\partial t} n(x, t)$ 在 t 处很快, 则

$$n(x, t+\tau) \approx n(x, t) + \tau \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{2} \tau^2 \frac{\partial^2 n}{\partial t^2} + \dots$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(z, \tau) \left(n(x, t) - \frac{3}{2} \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \right) dz$$

$$= n(x, t) + \frac{1}{2} \langle z^2 \rangle \frac{\partial n}{\partial x}$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}, \quad D = \frac{\langle z^2 \rangle}{2\tau} \quad \text{扩散系数.}$$

∴ 布朗运动是一个扩散过程.

$$\text{若 } t \ll \tau, \text{ 则 } \langle x \rangle = \int \frac{2kTz}{m} dz$$

$$\left(\frac{2kT}{m} - (x - x + \frac{2kT}{m} \cdot \frac{1}{2} \tau^2) \right) = \frac{kT}{m} \tau^2 = \langle v \rangle \tau^2$$

这就是说, 在观察时间 $t \ll \tau$ 时, 布朗运动满足

运动学.

$$\langle x^2 \rangle \approx 2 \frac{kT}{m} t = \frac{2kT}{\alpha} t \equiv 2Dt.$$

爱因斯坦通过计算 $\langle x^2 \rangle \propto t$ 来推导扩散系数. (可以估算, 对水中大分子 $\sim 10^{-5} \text{ cm m}^{-2}$, $\tau \sim 10^{-7} \text{ s}$, 这些速率比记录一个粒子位置所需要的时间要小得多.)

8.8.2 布朗运动的扩散

布朗运动用微粒扩散解释地讲可以更好地推广到其他类似的过程, 而且可以推广到扩散过程.

设 $n(x, t) dx$ 是在时刻 t 在 x 和 $x+dx$ 之间单位垂直面上的 Brownian 粒子数, 则 $n(x, t)$ 是随时间变化的, 从 t 时刻到 $t+\tau$ 时刻被移进 $(x, x+dx)$ 内的几率. 称为扩散率.

上面方程也可写成

$$\frac{\partial}{\partial t} n(x, t+\tau) = -D \frac{\partial^2}{\partial x^2} n(x, t+\tau) = 0$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{\partial}{\partial t} f(x-x', t') - D \frac{\partial^2}{\partial x'^2} f(x-x', t') \right] n(x', t) dx' = 0$$

$$\therefore \frac{\partial}{\partial t} f(x-x', t) - D \frac{\partial^2}{\partial x'^2} f(x-x', t) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} f(z, t) - D \frac{\partial^2}{\partial z^2} f(z, t) = 0.$$

设 $f(z, 0) = 0$, 则 $\lim_{z \rightarrow \infty} f(z, t) = 0$

由 $\int_{-\infty}^{+\infty} f(z, t) dz = 1$, 则 $f(z, 0) = 0$, if $z \neq 0$,

$$\therefore f(z, t) = 8(z).$$

$$\therefore f(z, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D t}} e^{-z^2/4Dt}.$$

$\Rightarrow \langle z^2 \rangle = 2Dt$. 这正是爱因斯坦的结果.

以后将证明, 这方程是随机过程 Master 方程对 Brown 运动的解.

朗之万方程 \Leftrightarrow Master 方程, 从力学来看, 一个量子力学系统, 一次可观测的运动过程, 一个是 Schrödinger 方程, 对于经典或宏观系统~运动方程. 后者更易于推广出扩散方程.

~~§8.8.3 布朗运动中时间函数~~

在讲线性布朗运动时，我们看到是能选取时间轴和空间轴的。在 Brownian 运动中，随机力 $\vec{F}(t)$ 被设成随时间无关联。但布郎运动与 $\vec{F}(t)$ 无关吗？为什么呢？为此，我们考虑 $\langle u(t) \rangle$ 。

用方程中取 $u(t) = g(t) e^{-t/\tau}$

$$\frac{dg(t)}{dt} e^{-t/\tau} = -\frac{g(t)}{\tau} + \frac{x(t)}{m}$$

$$\Rightarrow \frac{dg(t)}{dt} = e^{t/\tau} (x(t)/m) = A(t)$$

$$\begin{aligned} u(t) &= e^{-t/\tau} = e^{-t/\tau} \int_0^t e^{t'/\tau} A(t') dt' \\ u(t) &= e^{-t/\tau} \int_0^t dt' \int_0^{t'} e^{(t-t'')/\tau} A(t') A(t'') \end{aligned}$$

$$u(t) = u(0) e^{-t/\tau} + e^{-t/\tau} \int_0^t e^{t'/\tau} A(t') dt'$$

$$\begin{aligned} \tilde{u}(t) &= u^2(0) e^{-2t/\tau} + 2u(0) e^{-t/\tau} \int_0^t e^{t'/\tau} A(t') dt' \\ &\quad + e^{-t/\tau} \int_0^t dt' dt'' e^{(t-t'')/\tau} A(t') A(t''). \end{aligned}$$

(1)

$$\langle u^2(t) \rangle = u^2(0) e^{-2t/\tau}$$

$$+ e^{-2t/\tau} \int_0^t dt' dt'' e^{(t-t'')/\tau} \langle A(t') A(t'') \rangle.$$

① $\tilde{t} = t + t_0$, $s = \frac{t-t''}{\sqrt{2}}$, 以 t'' 为坐标轴。
平移坐标轴。

$$e^{(t-t'')/\tau} \langle A(t) A(t'') \rangle = e^{t/\tau} C(s)$$

$$dt' dt'' = ds$$

∴ 有

$$\begin{aligned} I &= \int dt' dt'' \dots \\ &= \int_0^{t/\tau} dt' \int_{-\sqrt{2}s}^{\sqrt{2}s} C(s) ds \\ &\quad + \int_{t/\tau}^{t/\tau} dt' \int_{-\sqrt{2}(t-t')}^{\sqrt{2}(t-t')} C(s) ds \end{aligned}$$

对 Brownian 运动, $C(s)$ 是常数。

瞬时, (Markov 性质), $C(s) = C(s)$.

$$\therefore I = \int_0^{t/\tau} dt' e^{-\sqrt{2}s/\tau} = C \frac{t}{\sqrt{2}} (e^{-2t/\tau} - 1)$$

运动过程中扩散系数 (见书)

$$D = kT/\tau = \frac{1}{2} \int_0^{t/\tau} ds \langle u(t) u(t+s) \rangle$$

在连续性布朗运动中 D 由层-层运动决定的速率, 即时速度 $u(t)$ 是时间函数。

在 Kubo 线性布朗运动中, 扩散系数可以是时间和平均值。

~~§8.8.4 Markov 性质~~

§8.8.5 布朗运动类别的过程:

电路中的电压和电流性质。



$$L \frac{dI(t)}{dt} = -RI(t) + V(t)$$

若外电压为 0, 即电池关闭,

在一定条件下, 仍存在正弦交流电源和电压, $\langle I(t) \rangle = 0, \langle V(t) \rangle = 0$.

§8.8.6 电压-电流定律。

我们在前面已经讨论过扩散系数与电荷无关的讨论。电荷的储存是空间的。因此, 我们可以在时间上讨论扩散系数的性质, 对 Brownian motion, $\tau = (\frac{m}{k})^2 \Rightarrow \alpha = \frac{m}{\tau} = \frac{m^2}{2kT} C$.

$$= \frac{m^2}{2kT} \int_0^{t/\tau} dt C(s)$$

$$= \frac{m^2}{2kT} \int_0^{t/\tau} dt \langle A(t) A(t) \rangle$$

$$= \frac{m^2}{2kT} \int_0^{t/\tau} ds \langle A(t) A(t) \rangle$$

即扩散系数与随时间相关的波动无关。

这时电流声可以用波动方程表示
有布朗运动形式

$$I(t) \leftrightarrow U(t)$$

$$L \leftrightarrow m$$

$$R \leftrightarrow \omega$$

$$V(t) \leftrightarrow X(t).$$

作练习, 请参考复教材 (II.6.6)-(II.6.7).

在电路中, 请将即时间 Fourier 变换需要的 Brownian 运动中方便很多. 由 $V(t)$ 在 Fourier 变换.

$$\tilde{V}(w) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} V(t) e^{-iwt} dt$$

(电场强度的频谱)

$$\langle V(t) V(t+s) \rangle = \int dw \int dw' \tilde{V}(w) \tilde{V}(w') e^{iwt+iw'(t+s)}$$

$$\begin{aligned} & \left\langle V(t) V(t+s) \right\rangle = C \delta(s) \\ & \frac{1}{4\pi} \int dw dw' \langle \tilde{V}(w) \tilde{V}(w') \rangle e^{iwt+iw'(t+s)} = C \delta(s) \\ & = C \frac{1}{2\pi} \int dw' e^{iws} \end{aligned}$$

(1) $\propto T$, = 逆噪声

(2) $\propto R$, 逆噪声无逆噪声. (3) $\langle \bar{V}^2 \rangle \neq 0$, 即 $\langle \bar{V} \rangle \neq 0$, (4) $S(v) \propto v$ 无关, 即 $\delta(w)$ 为白 noise. (类似于白光, 各种频率成分随机分布).

这种噪声又称为 Johnson noise, $S(v) = 4kTR$ 称为 Nyquist 定律

§8.8.7 Shot noise (散粒噪声)

另一种逆噪声称为 shot noise. 由灯丝发射电子到达阳极引起的噪声. (见图)

* 电子发射是随机的.
* 电子从发射到阳极的时间极短, 相当于瞬时电流.

$n(t)$ 为单位时间内的发射的电子数. 此时 $i(t-t')$ 为单位时间内的发射的电子数. $i(t-t')$ 在 $t-t'$ 大时很快衰减到 0. 且积分

只有 $i(t-t')$ 才能引起电流. 电子发射引起电流是

$$I(t) = \int_0^{+\infty} dt n(t) G(t-t').$$

$$\begin{aligned} \textcircled{1} \quad \langle \tilde{V}(w) \tilde{V}(w') \rangle &= \langle |\tilde{V}(w)|^2 \delta(w+w') \rangle \\ &= \frac{1}{4\pi} \int dw dw' \langle |\tilde{V}(w)|^2 \rangle \delta(w+w') e^{iws} \\ &= \frac{1}{4\pi} \int dw \langle |\tilde{V}(w)|^2 \rangle e^{iws} \\ \textcircled{2} \quad \langle |\tilde{V}(w)|^2 \rangle &= C. \propto w^2. \end{aligned}$$

$$\text{即 } K(s) = \langle V(t) V(t+s) \rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dw \tilde{K}(w) e^{iws}$$

$$\Rightarrow \tilde{K}(w) = \frac{C}{2\pi} = \frac{2kTR}{2\pi} = \frac{kTR}{\pi}$$

$$\therefore \bar{V}^2 = \overline{V^2} = K(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{K}(w) dw$$

$$= 2 \int_0^\infty \tilde{K}(0) dw = \int_0^\infty 4\pi \tilde{K}(0) dw$$

$$(w=2\pi v) \Rightarrow \int_0^\infty dv S(v)$$

$$\therefore S(v) = 4kTR \text{ 是电场的 } \frac{1}{2} kT/m$$

(1) $\langle n \rangle$ 为平均值, 则

$$\langle I(t) \rangle = \int_0^{+\infty} \langle n \rangle \delta(t-\tau) d\tau$$

$$= \bar{n} \int_0^{+\infty} \delta(t-\tau) d\tau = \bar{n} \cdot e$$

($\delta(t-\tau) = \frac{d\delta(t-\tau)}{dt}$ 对于 δ 积分, 因为 $\delta(t-\tau) = 0$,
集中至 $t-\tau$ 附近, \therefore 积分后有一个电子 δ 电荷)

$$\Delta I = I(t) - \langle I \rangle = \int_0^{+\infty} [n(\tau) - \bar{n}] \delta(t-\tau) d\tau$$

$$\langle \Delta I^2 \rangle = \int dt dt' \langle \Delta n(t) \Delta n(t') \rangle$$

对于 shot noise, 电流发的都是随机的

$$\therefore \langle \Delta n(t) \Delta n(t') \rangle \propto \delta(t-t')$$

(严格地, $\langle \Delta n(t) \Delta n(t') \rangle = \langle n \rangle \delta(t-t')$, $\langle n \rangle$ 为理论值, 从 $\Delta n^2 = \bar{n}$ 得出 $\langle n^2 \rangle = \bar{n}$)

$$\langle \Delta I^2 \rangle = \bar{n} \int_0^{+\infty} |G(t-\tau)|^2 d\tau = \bar{n} \int_0^{+\infty} |G(t)|^2 dt$$

Campbell 定律

请教导:

$$G(t) = \int S(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |G(t)|^2 dt = 4\pi \int_{-\infty}^{+\infty} |S(\omega)|^2 d\omega$$

$$\therefore \langle \langle I \rangle \rangle = 4\pi \bar{n} \int_0^{+\infty} |S(\omega)|^2 d\omega.$$

2. 2-3 (注意 m 仪因, 例因放大器, $S(\omega)$ 只在 (注意 m 放大器为 0), \therefore

$$\langle \langle I \rangle \rangle = 4\pi \bar{n} |S(\omega)|^2 d\omega.$$

另一方面, $S(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G(t) e^{-i\omega t} dt$

若 $\omega t \ll 1$, $e^{-i\omega t} \approx 1$.

$$S(\omega) \approx \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G(t) dt = \frac{G}{2\pi}$$

$$\therefore \langle \langle I \rangle \rangle = 4\pi \bar{n} e^2 \Delta \nu \quad (\Delta \nu = 2\pi \Delta \omega). \\ = 2eI \Delta \nu \quad \langle \bar{I} \rangle = \bar{n} e.$$

由 $\langle I \rangle$, $\langle \langle I \rangle \rangle$ 和 $\Delta \nu$ 在实验中是确定的, 所以用 I 表示 \bar{n} . 在随机粒子数 n 中, shot noise 中发射带电粒子是 quasi-particle, n 及 e 都应由 n 及 e 代替.

可以叫 n 带电荷.

(ii) 作子推定时, $P_n(x_i, t_i; t_n)$ 为时间

$$\text{元}, P_n(x_i, t_i; t_n) = P_n(x_i, t_i|t_n).$$

$$(iv) P_1(x_i, t_i) P_{11}(x_i, t_i|x_n, t_n) = P_2(x_i, t_i; x_n, t_n).$$

$$(v) \int P_{11}(x_i, t_i|x_n, t_n) dx_n = 1.$$

注: $\int P_2(x_i, t_i)$

$$\begin{aligned} & \int \int P_1(x_i, t_i) P_{11}(x_i, t_i|x_n, t_n) dx_n dx_i \\ &= \int \int P_2(x_i, t_i; x_n, t_n) dx_i = \int P_2(x_n, t_n) dx_n = 1 \\ &= \int P_1(x_i, t_i) dx_i \end{aligned}$$

$$\therefore \int P_1(x_i, t_i) \left[\int dx_n P_{11}(x_i, t_i|x_n, t_n) \right] dx_i$$

由 $\int P_1(x_i, t_i)$

$$\begin{aligned} & P_3(x_i, t_i; x_n, t_n; x_3, t_3) \\ &= P_2(x_i, t_i; x_n, t_n) P_{21}(x_i, t_i|x_n, t_n|x_3, t_3) \\ &= P_1(x_i, t_i) P_{11}(x_i, t_i|x_n, t_n) P_{11}(x_n, t_n|x_3, t_3) \end{aligned}$$

3.8.4 主方程和福克-普朗克方程

3.8.4.1 Master eq. and Fokker-Planck eq.

主方程是分布函数 (也是一般性方程). Generally, 它是一个很复杂的方程. 这里我们只研究 Markov 过程中的方程. Markov 过程是指分子在 t 时刻的位置只是从 t 时刻最初到 t 时刻的物理过程, 没有历史. 而更早的演化过程都没有影响. 例如, 电子运动中的速度 $u(t)$, Johnson noise 中的电流 $I(t)$. 设 $x(t)$ 为随机变量 ($u(t), I(t), \dots$), $P_i(x_i, t_i)$ 表示在 t_i 时刻取 x_i 的概率. $P_{ij}(x_i, t_i; x_j, t_j)$ 表示在 t_i 时刻取值 x_i 在 t_j 时取值 x_j 的概率. $P_{ijk\dots k}(x_i, t_i; x_j, t_j; \dots; x_k, t_k)$ 表示在 t_i 时取值 x_i 在 t_j 时取值 x_j 在 t_k 时取值 x_k 的概率.

$$(i) \int P_i(x_i, t_i) = 1.$$

$$(ii) \int P_{ij}(x_i, t_i; x_j, t_j) dx_i = P_{ji}(x_j, t_j; x_i, t_i)$$

找话用对分子语言来理解 - 1:

$$P_i(x_i, t_i) = |\psi_i(x_i, t_i)|^2$$

(见前面
m 161(2))

$$P_{ij}(x_i, t_i; x_j, t_j) = |\psi_j(x_j, t_j; x_i, t_i)|^2 \dots$$

条件几率: $P_{ij}(x_i, t_i; x_j, t_j)$ 可以理解为 $\psi_j(x_j, t_j)$ 在 x_i, t_i 时的值

$$\rightarrow = |\psi_j(x_j, t_j)| \rightarrow \psi_j(x_j, t_j) = |\psi_j(x_j, t_j)|$$

初态 $\psi_i(x_i, t_i)$ 是 $\psi_i(x_i, t_i)$

$$P_{ij}(x_i, t_i; x_j, t_j) = \left| \psi_j(x_j, t_j; x_i, t_i) \right|^2 \propto \left| \psi_i(x_i, t_i) \right|^2$$

$$\psi_j(x_j, t_j) \propto \psi_i(x_i, t_i)$$

即 $|\psi_j(x_j, t_j)| \sim \text{常数}$ (与 $\psi_i(x_i, t_i)$ 线性相关).

这样, 我们把很容易理解的推论 (i) - (v).

~~由 $\int P_1(x_i, t_i)$~~

$$P_3(x_i, t_i; x_n, t_n; x_3, t_3)$$

$$= P_2(x_i, t_i; x_n, t_n) P_{21}(x_i, t_i|x_n, t_n|x_3, t_3)$$

$$= P_1(x_i, t_i) P_{11}(x_i, t_i|x_n, t_n) P_{11}(x_n, t_n|x_3, t_3).$$

$\int_{t_n < t_i < t_3} dx_n$

$$P_2(x_i, t_i; x_3, t_3) = \int_{t_n < t_i < t_3} dx_n P_{11}(x_i, t_i|x_n, t_n) P_{11}(x_n, t_n|x_3, t_3)$$

以 $P_{k|x}(x_1, t_1, \dots, x_k | t_k | x_{k+1}, \dots)$ 表明
在 t_{k+1}, \dots, t_n 时刻 x_{k+1}, \dots, x_n 已知时， x_1, \dots, t_k 时刻 x_1, \dots, t_k 的条件概率。

② 马尔可夫过程：

$$P_{n-1|1}(x_1, t_1, \dots, x_{n-1} | t_{n-1} / x_n | t_n) \\ = P_{Y_1}(x_{n-1} | t_{n-1} / x_n | t_n), \text{ 若 } t_n \text{ 时刻 } x_n \text{ 已知} \\ t_{n-1} \text{ 时刻 } x_{n-1}. \text{ 即 } -\text{Markov 过程} \Leftrightarrow P_i(x_i, t)$$

$$P_3(x_1, t_1; x_2, t_2; x_3, t_3) \\ = P_2(x_1, t_1; x_2, t_2) P_{Y_1}(x_3, t_3 | x_2, t_2) \\ = P_1(x_1, t_1) P_{Y_1}(x_2, t_2) P_{Y_1}(x_3, t_3). \quad \text{由 Markov} \\ \text{性质, 只看第 3 步}$$

$$P_2(x_1, t_1; x_3, t_3) = \frac{P_1(x_1, t_1)}{P_1(x_1, t_1)} \int dx_2 P_{Y_1}(x_1, t_1; x_2, t_2) P_{Y_1}(x_2, t_2; x_3, t_3) \\ P_2(x_1, t_1; x_3, t_3) = \int dx_2 P_{Y_1}(x_1, t_1; x_2, t_2) P_{Y_1}(x_2, t_2; x_3, t_3)$$

Markov (物理) Smoluchowski-Chapman-Kolmogorov 方程。

$x_1 \rightarrow$ 第一状态取值 m 概率。 $[1 - \tau \int W(x_1, x) dx]$ 表示
不发生跃迁的概率。~~第二步~~
 $\therefore [1 - \tau \int W(x_1, x) dx] \delta(x_1, x_2)$ 表示从 x_1 m
概率。该概率 $x_1 \rightarrow$ 第二状态取值 m 在 t 时刻的
概率。 $[1 - \tau \int W(x_1, x) dx] \delta(x_1, x_2)$ 表示不发生从 x_1 m
跃迁至 $x_2 = x_1$ m 概率， $\delta \tau W(x_1, x_2)$ 表示，若 $x_1 = x_2$
和 $x_1 \neq x_2$ m 概率之和。

$$P(x_1, t | x_2, t+\tau) = [1 - \tau \int W(x_1, x) dx] \delta(x_1, x_2) + W(x_1, x_2) \tau \\ = \delta(x_1, x_2) - \tau \int W(x_1, x) dx \cdot \delta(x_1, x_2) + W(x_1, x_2) \tau. \\ \text{代入 } \frac{\partial P(x_1, t)}{\partial t} = \frac{1}{\tau} \left[\int P(x_1, t) \delta(x_1, x_2) dx_1 \right. \\ \left. - \int P(x_1, t) \delta(x_1, x_2) dx_1 \right] \\ = \int P(x_1, t) W(x_1, x_2) dx_1 - \int P(x_2, t) W(x_2, x_1) dx_1 \\ = \int [W(x_1, x_2) P(x_1, t) - P(x_2, t) W(x_2, x_1)] dx.$$

Master eq.

定理 23 Markov chain, 我们有 $P_j(x, t+\tau)$ 在时
间 τ 后

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{P(x, t+\tau) - P(x, t)}{\tau} \\ \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \left\{ \int P(x, t) \right. \\ \left. P(x+t, t+\tau) d\tau \right\} \quad \text{由 (iv),} \\ P(x, t+\tau) = \int P(x, t) P(x+t, t+\tau) d\tau$$

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \int P(x, t) \frac{\partial P(x+t, t+\tau)}{\partial t} d\tau$$

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{P(x, t+\tau) - P(x, t)}{\tau} \\ \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \int P(x, t) \left[P(x+t, t+\tau) - P(x, t+\tau) \right] d\tau$$

$$\text{若 } \tau = 0, \quad P(x, t+\tau) = \int P(x, t) P(x+t, t+\tau) d\tau \\ \Rightarrow P(x+t, t) = \delta(x-x').$$

即 $W(x_1, x_2) \approx \tau \rightarrow t+\tau$ time interval, x_1 取值 x_1
至 x_2 m 经过中单位时间 m 跃迁概率密度。

$\therefore \lim_{\tau \rightarrow 0} \int W(x_1, x) dx$ 是 $\tau \rightarrow 0$ 的概率密度

主方程的一般表示从其他方法证明
 x_1 m 概率密度；第二表示从 x_1 m 跃迁到 x_2 m
m 概率密度。在链子中，没有用到跃迁 m 动
力学机制，也未涉及分子尺寸运动。是普遍的。

下面举一个例子：对一维系统。
(F. Schwabl)
密度矩阵： $P(t) = \sum_i W_i(t) |i\rangle \langle i|$

$$H = H_0 + V, \quad H_0 |i\rangle = E_i |i\rangle, \quad F_i |i\rangle$$

$F_i |i\rangle = F_i |i\rangle$ 是守恒量。V 是微扰哈密顿。

$U(t)$ 是时间 t 的演化算符

$$P(t+\tau) = \sum_i W_i(t) U(t) |i\rangle \langle i| U^\dagger(t) \quad (\sum_j |j\rangle \langle j| = 1) \\ = \sum_i \sum_j W_j(t) \delta(j) \langle j | U(t) |i\rangle \times \delta(i | U^\dagger(t) | k) \\ = \sum_i \sum_k W_k(t) |j\rangle \langle k| U_j(t) U_k^\dagger(t)$$

$$\therefore U_j(t) = \langle j | U(t) | i \rangle$$

取随机相近点，即忽略非对角项贡献，

$$P(t+\tau) \approx \sum_i \sum_j W_j(t) \delta(j) \langle j | U_j(t) U_j^\dagger(t)$$

$$= \sum_j W_j(t+\tau) |U_{j,i}(t)|^2,$$

$$\text{即 } W_j(t+\tau) = \sum_i W_i(t) |U_{j,i}(t)|^2$$

$$\therefore W_j(t+\tau) - W_j(t) = \sum_i (W_i(t) - W_j(t)) |U_{j,i}(t)|^2$$

$(\because \sum_i |U_{j,i}(t)|^2 = 1)$ ($i=j$, $|U_{i,i}(t)|^2$ 出现重叠.)

由 $|U_{j,i}|^2$, 用微扰论, (Fermi Golden rule)

$$|U_{j,i}|^2 = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\sin \omega_{ij} \tau}{\omega_{ij}/\hbar} \right)^2 |K_j V |^2$$

$$\approx \tau \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_i - E_j) |\langle j | V | i \rangle|^2$$

$$W_{ij} = E_i - E_j / \hbar. \quad (\cancel{E_i - E_j / \hbar} \rightarrow \frac{1}{\hbar})$$

$$(\simeq (E_i - E_j) \tau \ll 1, \tau \gg 1/\Delta E \text{ 考虑})$$

$$\text{由 } \frac{W_j(t+\tau) - W_j(t)}{\tau} \Big|_{\tau \gg 0} = \frac{dW_j(t)}{dt}$$

$$\sum_i (W_i(t) - W_j(t)) \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_i - E_j) |K_j V |^2.$$

得:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{+\infty} W(x, z) P(x, t) dz$$

$$- \int z \frac{\partial}{\partial x} [W(x, z) P(x, t)] dz + \frac{1}{2} \int z^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} [W(x, z) P(x, t)] dz$$

$$- \int_{-\infty}^{+\infty} W(x, -z) P(x, t) dz$$

$$- \int_{+\infty}^{-\infty} W(x, z') P(x, t) dz' (-z')$$

$$\therefore \frac{\partial P(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [d_1(x) P(x,t)] = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (d_2(x) P(x,t))$$

$$(d_n(x) = \int z^n W(x, z) dz. - n \text{ 阶矩.})$$

Fokker-Planck eq.

如果 $d_1(x) = 0, d_2(x) = \text{const.}$ 则 F-P 方程

相当于 ~~扩散~~ Brownian motion in ~~扩散~~ 空间.

这里 \sum_i 表示对 E_i 和 f_i 求和.

$$\sum_i \rightarrow \int dE_i \delta(n(E_i)). \quad n(E_i) = D(E)$$

$$\text{由 } \cancel{\frac{dW_{E_i, F_i}(t)}{dt}} = \sum_{F_i} \left(W_{E_j, F_i} - W_{E_j, F_i} \right) \\ \left(\frac{2\pi}{\hbar} n(E_i) |\langle E_j, F_i | V | E_j, F_i \rangle|^2 \right) \\ P_{E_j, F_i} \quad P_{E_j, F_i} = P_{E_j}(F_i, F_i).$$

§8.1.2 Fokker-Planck eq.

易于看出 x 可以适当取值, $W(x', x)$ 是随 $|x' - x|$ 很快衰减的函数. 取 $z = x - x'$ 是小数, $W(x', x) = W(x-z, x')$ $= W(\frac{x+x'}{2}, x'-x) \approx W(x; -z)$.

$$\text{于是 } \frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \int \left[W(x', x) P(x', t) - W(x, x') P(x, t) \right] dx$$

$$= \int \left[W(x-z, z) P(x-z, t) - W(x, z) P(x, t) \right] dz$$

$$\text{展开 } W(x-z, z) P(x-z, t) = W(x, z) P(x, t) - z \frac{\partial}{\partial x} [W(x, z) P(x, t)] \\ + \frac{1}{2} z^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} [W(x, z) P(x, t)] + \dots$$

1

第九章 统计物理中计算方法简介

- Numerical Simulation in Statistical Physics, Pascal Viot

<http://www.lptmc.jussieu.fr/user/viot/COURS/simulation.pdf>

- 分子模拟 陈正隆
- 统计物理中的蒙特卡罗模拟方法, Binder等
- 以密度泛函为代表的第一性原理计算是计算物理课的主要内容, 这里不讲
- AI正在深刻地影响计算物理, 但由于我学识的原因, 本课程不讲
- 量子计算: 经典-量子计算混合算法, 我们不讲

2

Outline

- 本章引言
- 分子动力学简介
- 经典 Monte Carlo 方法
- 量子 Monte Carlo 方法

3

引言

- 计算机技术的进步各位可能比我了解更多。这使得计算物理已经成为连接理论物理和实验物理的**桥梁或独立检验的第三方**
- 计算物理方法可以作为一个**独立研究工具**。例如，很多重要的物理模型是没有解析严格解或可控近似解的。数值模拟可以提供对模型物理性质定量或定性的了解，例如，**密度矩阵重整化群**计算可以非常精确地计算一些凝聚态一维强关联电子系统的基态；**精确对角化**计算可以得到较小的有限体系精确性质；**变分 Monte Carlo**方法可以在系统中各种可能的基态变分波函数形式已知的情况下比解析方法更好地确定相图。**Quantum Monte Carlo**可以用于玻色多体系统和无符号问题的费米多体系统的无偏向性的定量计算。

4

引言

- 一些直观物理认为不可能的物理现象经常是通过数值模拟首先实现，然后在理论上或实验上验证的。一个著名例子是仅有强的短程排斥作用而无任何吸引的球状粒子是否可以形成晶体？最早计算模拟得到Yes被普遍怀疑，现在已经是一个常识。
- 在高能物理中，计算物理从方法发展成一个独立的物理研究领域。格点规范理论是了解非微扰强相互作用物理的唯一理论方法。主要模拟手段是量子Monte Carlo方法。由于4维空间的计算量非常大，需要超级计算机和为格点规范计算特别设计的计算机。

5

引言

- 在量子化学、材料物理和凝聚态物理中，我们要了解组成物质的大量原子、分子及其电子的性质。
- 在凝聚态材料设计和固态量子化学中，基于量子力学的从头计算(***ab initio***)和第一性原理计算，包括能带论中以Hartree-Fock自洽场计算为基础的*ab initio*从头计算，和密度泛函理论(**DFT**)计算可以计算电子性质。已经有很多商用软件，例如 VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package)。考虑弱的关联效应，发展了一些改进的平均场方法：**DMF+U**，动力学平均场(**DMFT**)，等
- 在凝聚态物理中，计算物理方法已经成为预言新电子态的重要手段，例如，量子自旋霍尔效应，三维拓扑绝缘体，量子反常霍尔效应，Weyl半金属，三分量费米子等都是第一性原理计算先预言精准或相关的材料，再由实验证实的
- **AI**加持的计算方法正在改变整个计算物理

6

引言

- 由于符号问题，一些重要的二维强关联电子模型，如 Hubbard 模型，和有阻错的自旋模型是不能用 Quantum Monte Carlo 去计算的。DMRG 对二维体系不适用。人们正在发展 DMRG 方法的推广：张量网络算法。
- 分子动力学方法** 是用计算模拟的方法解相互作用牛顿粒子（经典力学）的运动方程，确定原子或分子的轨迹。用于计算化学物理、材料科学和模拟生物分子，特别是气体和非晶固体（生物分子、聚合物、金属和非金属。对晶体，晶格动力学方法和声子可以较好描述之）
- 与分子动力学模拟类似地一种方法是**布朗动力学模拟**，适用于大分子溶液体系
- 用经典力学 Hamilton 描述代替牛顿方程，用保辛结构的**辛算法**研究分子动力学最近得到了极大的发展。辛算法在整体性、结构性、精确性和长期跟踪稳定性方面都超过了传统的方法。（冯康）

7

引言

- 原则上，以上提到的计算模拟方法都涉及大量粒子体系，属于统计物理相关领域。
- ✓ 在讲重整化群时，已经提了 DMRG 计算的基本原理，但实际操作、编程技术难度较高。
- ✓ 第一性原理计算是计算凝聚态物理课的内容
- ✓ 现行**狭义的统计物理计算方法** 主要包括分子动力学方法和蒙特卡罗方法。前者用于分子体系，后者则可以广泛地应用于各种物理体系，特别是凝聚态相互作用多电子系统。我们下面将对它们做简介。

8

分子动力学简介

- 历史上把 Monte Carlo (MC) 模拟用到统计物理问题要早于分子动力学 (MD) 方法。采用先讲 MD 完全是因为我个人的原因：MD 我以前几乎没有接触过，而 MC 方面多少接触。所以，MD 放在前面讲，只作一些简介，MC 则讲得稍微多点。
- MD 的基本假设：原子的 Schrodinger equation

$$H\psi(R, r) = E\psi(R, r)$$

9

分子动力学简介

- Born-Oppenheimer 近似，即绝热近似：电子运动如此之快，以致它们感受不到原子核在动。它们只感受到原子核的势场，电子的 Schrodinger 方程是
- $$(H_e + V_{NN})\psi_e(R, r) = E_e\psi_e(R, r) \quad (1)$$
- V_{NN} 是 effective potential。把 R 看作慢变参数，把 V_{NN} 看作外力场，作经验拟合，这构成量子化学中分子力学的基础。固体物理中电子结构也是由此方程出发做计算的（多体，周期势，相互作用，等等）

10

分子动力学简介

- 原子核的Schrodinger方程是
$$(T_\alpha + E_e)\psi_N(R) = E_N\psi_N(R) \quad (2)$$
- 用经典的牛顿方程代替(2)，势能Ee用力场拟合，就构成了分子力学的基础。
- 历史上最早用计算机解多体问题是“曼哈顿计划”的需要。Monte Carlo方法首先被使用（下面会讲）。但Monte Carlo方法只能计算统计平均值，无法得到体系的动力学性质。

11

分子动力学简介

- MD计算，典型地，有 10^4 个粒子。这样，在一条线上平均有 $10000^{1/3} = 21 \sim 22$ 。
- 这意味着若要得到热力学性质，应该取周期边条件。（边界效应）。
- 远离临界点的气体的关联长度远小于21个粒子的间距。但在相变区域，关联长度会很长。MD不太适合于研究相变

12

分子动力学简介

- 我们设质量为m的分子间的van der Waals力由Lennard-Jones potential给出

$$u(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right]$$

- σ 是分子直径， ϵ 是微观能量scale，则系统的特征时间为

$$\tau = \sigma \sqrt{\frac{m}{\epsilon}}$$

13

分子动力学简介

- 对分子气体 $\tau \sim 10^{-14}$ sec, 例如, 氖气 $\sigma = 3\text{\AA}$, $m = 6.63 \cdot 10^{-23} \text{ kg}$ and $\epsilon = 1.64 \cdot 10^{-20} \text{ J}$, $\tau = 2.8 \cdot 10^{-14} \text{ s}$
- 解牛顿运动方程, 对微分方程的积分step应比 τ 小得多, 如 $\Delta t = 10^{-15} \text{ sec}$.
- 在一次simulation run中, 总的时间steps为 $10^4 \sim 10^7$. 所以, 对一个原子, duration是 10^{-8} .
- 多数原子系统的弛豫时间要远小于 10^{-8} . 所以, MD是对于研究其动力学和热力学性质是很好的工具。
- 但对某些glass体系的glass transition, 弛豫时间 10^{-3} sec . 这时, 就要coarse-grain一些微观自由度

14

分子动力学简介

- 分子间的作用力或分子的总势能包括范德瓦尔斯非键结合能+键伸缩势能+键角弯曲势能+双面角扭曲势能+离平面振动势能+库伦静电能
- MD的一个重要步骤是根据分子结构决定有效力场。Typical Example: 除van der Waals力(Lennard-Jones potential)外，其他的力都很小。
- 确定一个正确的计算方法。

15

分子动力学简介

- Equations of motion

$$\frac{d^2\mathbf{r}_i}{dt^2} = - \sum_{j \neq i} \nabla_{\mathbf{r}_i} u(\mathbf{r}_{ij}).$$

- Periodic boundary condition in order to simulate an infinite system
- 对一个给定的粒子，用truncated potential with in distance r_c

$$u^{trunc}(r) = \begin{cases} u(r) - u(r_c) & r < r_c \\ 0 & r \geq r_c. \end{cases}$$

16

分子动力学简介

- 选择Verlet algorithm: 数值解，第一步是连续变量的离散化。一个crucial的要求是，对一个孤立系统，在simulation中，总能量要保持守恒。（这是一个微正则系综）The Verlet's algorithm one of first methods and remains one most used nowadays. 但在能量守恒上有点问题。

17

分子动力学简介

- 考虑N个全同粒子， $\mathbf{r}=(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ 是 $3N$ vector, \mathbf{r}_i 是第*i*个粒子位置。
- Formally, 系统演化方程是

$$m \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{f}(\mathbf{r}(t)).$$

- 精确到 $O(\Delta t^4)$,

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t + \frac{\mathbf{f}(\mathbf{r}(t))}{2m}(\Delta t)^2 + \frac{d^3\mathbf{r}}{dt^3}(\Delta t)^3 + O((\Delta t)^4)$$

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) + \mathbf{r}(t - \Delta t) = 2\mathbf{r}(t) + \frac{\mathbf{f}(\mathbf{r}(t))}{m}(\Delta t)^2 + O((\Delta t)^4).$$

18

分子动力学简介

- 离散化后，速度定义是

$$\mathbf{v}(t) = \frac{\mathbf{r}(t + \Delta t) - \mathbf{r}(t - \Delta t)}{2\Delta t} + \mathcal{O}((\Delta t)^2)$$

- Verlet algorithm的计算精度是

$$\Delta t^4 N_t$$

N_t 是总的积分steps. 总的simulation时间为 $\Delta t N_t$.

19

分子动力学简介

- Verlet algorithm是时间反演不变的。这是微观理论的要求，但round-off errors也会积累。
- 对一个Hamilton系统，相空间的体积是不变的。Numerical simulation也必须如此，否则能量就不守恒。Verlet algorithm满足能量守恒吗？

20

分子动力学简介

- 要计算能量，我们首先来看速度，根据速度定义，我们有

$$\begin{aligned}\mathbf{v}(t + \Delta t/2) &= \frac{\mathbf{r}(t + \Delta t) - \mathbf{r}(t)}{\Delta t}, \\ \mathbf{v}(t - \Delta t/2) &= \frac{\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t - \Delta t)}{\Delta t},\end{aligned}$$

- 为什么是 $\Delta t/2$?

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t + \Delta t/2)\Delta t$$

$$\mathbf{r}(t - \Delta t) = \mathbf{r}(t) - \mathbf{v}(t - \Delta t/2)\Delta t.$$

21

分子动力学简介

- 用 $\mathbf{r}(t + \Delta t) + \mathbf{r}(t - \Delta t)$ 有

$$\mathbf{v}(t + \Delta t/2) = \mathbf{v}(t - \Delta t/2) + \frac{\mathbf{f}(t)}{m}\Delta t + \mathcal{O}((\Delta t)^3).$$

- 所以，velocities are calculated on half-integer time intervals, and positions are obtained on integer time intervals

22

分子动力学简介

- 但这会造成问题：在计算热力学量时，平均势能是按 Δt 整数计算的，而动能是按 Δt 半整数计算的。这造成能量不守恒。
- 需要更严格的算法
- 辛算法：可以保相空间体积，从而总能量守恒。（数学理论上，冯康的贡献）

23

分子动力学简介

- 辛算法的出发点是刘维定理（§ 3.2）
- 设 $f^{(N)}(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N, t)$ 是 N 粒子几率分布函数，刘维定理
$$\frac{\partial f^{(N)}(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N, t)}{\partial t} = -i\mathcal{L}_f^{(N)}$$
- 形式解

$$f^{(N)}(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N, t) = \exp(-i\mathcal{L}t)f^{(N)}(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N, 0).$$

24

分子动力学简介

- 任何 $A=A(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N)$ ，
- 只是一个形式解， explicit 解一般是写不出来的
- 定义 $\mathcal{L} = \mathcal{L}_r + \mathcal{L}_p$

$$i\mathcal{L}_r = \sum_i \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \quad i\mathcal{L}_p = \sum_i \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i}$$

25

分子动力学简介

- 设 $i\mathcal{L}_p = \sum_i \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} = 0$
- A 的时间演化为
$$A(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t)) = \exp(i\mathcal{L}_r^0 t) A(\mathbf{r}(0), \mathbf{p}(0))$$
- 作指数展开

$$\begin{aligned} A(\mathbf{r}^N(t), \mathbf{p}^N(t)) &= A(\mathbf{r}^N(0), \mathbf{p}^N(0)) + i\mathcal{L}_r^0 A(\mathbf{r}^N(0), \mathbf{p}^N(0)) + \frac{(i\mathcal{L}_r^0)^2}{2!} A(\mathbf{r}^N(0), \mathbf{p}^N(0)) + \dots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_i \frac{\left(\frac{d\mathbf{r}_i}{dt}(0)t\right)^n}{n!} \left(\frac{\partial^n}{\partial \mathbf{r}_i^n}\right) A(\mathbf{r}(0), \mathbf{p}(0)) \end{aligned}$$

26

分子动力学简介

- 这相当于空间平移

$$A(\mathbf{r}^N(t), \mathbf{p}^N(t)) = A\left(\left(\mathbf{r}_i + \frac{d\mathbf{r}_i}{dt}(0)t\right)^N, \mathbf{p}^N(0)\right)$$

- 这正是无相互的自由粒子
- 如果 $\mathcal{L}_r^0 = 0$, 则得到动量空间的“平移”

27

分子动力学简介

- 为了做数值模拟, 我们也要离散化刘维方程
- Trotter identity ($\exp(\mathcal{L}t) \neq \exp(\mathcal{L}_r t) \exp(\mathcal{L}_p t)$)

$$\exp(B + C) = \lim_{P \rightarrow \infty} \left(\exp\left(\frac{B}{2P}\right) \exp\left(\frac{C}{P}\right) \exp\left(\frac{B}{2P}\right) \right)^P.$$

- For a finite P

$$\exp(B + C) = \left(\exp\left(\frac{B}{2P}\right) \exp\left(\frac{C}{P}\right) \exp\left(\frac{B}{2P}\right) \right)^P \exp\left(\mathcal{O}\left(\frac{1}{P^2}\right)\right)$$

28

分子动力学简介

- 取

$$\Delta t = t/P, \quad \frac{B}{P} = \frac{i\mathcal{L}_p t}{P}, \quad \frac{C}{P} = \frac{i\mathcal{L}_r t}{P}$$

- 用于刘维方程的解, 对每一步

$$e^{i\mathcal{L}_p \Delta t / 2} e^{i\mathcal{L}_r \Delta t} e^{i\mathcal{L}_p \Delta t / 2}$$

- Again, 我们看到坐标是1步, 动量是半步

- 由于 \mathcal{L}_r 和 \mathcal{L}_p 是厄米的, 相应的指数算子是幺正的。由此可以得到保相空间体积的算法, 即辛算法

29

分子动力学简介

- By definition, 指数算子的作用

$$e^{i\mathcal{L}_p \Delta t / 2} A(\mathbf{r}^N(0), \mathbf{p}^N(0)) = \\ A\left(\mathbf{r}^N(0), \left(\mathbf{p}(0) + \frac{\Delta t}{2} \frac{d\mathbf{p}(0)}{dt}\right)^N\right)$$

$$e^{i\mathcal{L}_r \Delta t} A\left(\mathbf{r}^N(0), \left(\mathbf{p}(0) + \frac{\Delta t}{2} \frac{d\mathbf{p}(0)}{dt}\right)^N\right) =$$

$$A\left(\left(\mathbf{r}(0) + \Delta t \frac{d\mathbf{r}(\frac{\Delta t}{2})}{dt}\right)^N, \left(\mathbf{p}(0) + \frac{\Delta t}{2} \frac{d\mathbf{p}(0)}{dt}\right)^N\right)$$

30

分子动力学简介

- $e^{i\mathcal{L}_p\Delta t/2} e^{i\mathcal{L}_r\Delta t} e^{i\mathcal{L}_p\Delta t/2}$. 作用后 $\mathbf{A}(\mathbf{r}^N(0), \mathbf{p}^N(0))$ 变为

$$\mathbf{A} \left(\left(\mathbf{r}(0) + \Delta t \frac{d\mathbf{r}(\Delta t/2)}{dt} \right)^N, \left(\mathbf{p}(0) + \frac{\Delta t}{2} \frac{d\mathbf{p}(0)}{dt} + \frac{\Delta t}{2} \frac{d\mathbf{p}(\Delta t)}{dt} \right)^N \right)$$

- Summary:

这recovers
Verlet算法
的结果

$$\begin{aligned} \mathbf{p}(\Delta t) &= \mathbf{p}(0) + \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{f}(\mathbf{r}(0)) + \mathbf{f}(\mathbf{r}(\Delta t))) \\ \mathbf{r}(\Delta t) &= \mathbf{r}(0) + \Delta t \frac{d\mathbf{r}(\Delta t/2)}{dt} \end{aligned}$$

分子动力学简介

- 但刘维定理得到的结果是通过幺正变换得到的，所以，变换的Jacobi 行列式为1. 这样，这些变换是保相空间体积的，所以，能量是守恒的。这个算法称为symplectic algorithm.
- Symplectic form: $\omega = \sum_i d\mathbf{p}_i \wedge d\mathbf{q}_i$ 在幺正变换下不变。

31

分子动力学简介

- 其他算法: Andersen algorithm; Nose-Hoover algorithm
- 布朗力学: 对两种分子的混合体, 如果分子体积相差很大, 大分子的运动可以看作是布朗运动。例如, 生物分子的水溶液; 稀释纳米颗粒 (铁电液体等)
- 离散化朗之万方程。
- 用解随机微分方程的Euler algorithm

蒙特卡罗方法: 概说

- 计算配分函数是统计物理的出发点

$$Z = \sum_i \exp(-\beta U(i))$$

- 求和指数i run all over all configurations. 对一个线度为10, a lattice gas with two degrees of freedom per site has the configuration number $2^{100} \sim 10^{30}$. 对一个连续模型, 离散化后, 选10点for每一个坐标点in 3-D, 对100个particles, 这样一共有 10^{300} 个点数。
- 做精确计算是不可能的。用Monte Carlo方法可以 evaluates这个“高维积分”。

32

33

蒙特卡罗方法：概说

- Monte Carlo方法就是随机地从configuration space取出有限的点，在给定的精度内，估算要做的积分。
- 取样的方法会很大程度上决定计算的有效性和精度。

34

蒙特卡罗方法：Uniform and weighted sampling

- 一维积分

$$I = \int_a^b dx f(x).$$

- 重写

$$I = (b - a) \langle f(x) \rangle$$

- 随机地，均匀地在[a,b]中取N_r个点，积分可用以下公式估计

$$I_{N_r} = \frac{(b - a)}{N_r} \sum_{i=1}^{N_r} f(x_i).$$

35

蒙特卡罗方法：均匀或权重取样

- 这个方法的收敛性可以通过方差估算

$$\sigma^2 = \frac{1}{N_r} \langle f(x)^2 \rangle - \langle f(x) \rangle^2.$$

- 收敛度1/N_r是很慢的，但对uniform取样，似乎没有好的改进办法。

- 重写积分

$$I = \int_a^b dx \frac{f(x)}{w(x)} w(x).$$

w(x)dx意味着取样有权重

36

蒙特卡罗方法：均匀或权重取样

- 设w(x)>0, defining du=w(x)dx with u(a)=a, u(b)=b, 则

$$I = \int_a^b du \frac{f(x(u))}{w(x(u))},$$

- Randomly

$$I \simeq \frac{(b - a)}{N_r} \sum_{i=1}^{N_r} \frac{f(x(u_i))}{w(x(u_i))}$$

- 方差是

$$\sigma^2 = \frac{1}{N_r} \left(\left\langle \left(\frac{f(x(u))}{w(x(u))} \right)^2 \right\rangle - \left\langle \frac{f(x(u))}{w(x(u))} \right\rangle^2 \right)$$

37

蒙特卡罗方法：对平衡体系的马尔可夫链取样

- 统计物理中，我们要计算

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i A_i \exp(-\beta U_i)}{Z} = \sum_i A_i p_i$$

$$p_i = \frac{\exp(-\beta U_i)}{Z} \quad p_i \text{ is strictly positive and } \sum_i p_i = 1$$

- 如果由 p_i 这个权重产生 N_r 个 configurations,

$$\langle A \rangle \simeq \frac{1}{N_r} \sum_i A_i$$

- 这样，热平均变成了算术平均。

38

蒙特卡罗方法：对平衡体系的马尔可夫链取样

- At time $t = 0$, the system is in an initial configuration i_0 : The initial probability distribution is $p(i) = \delta_{i_0, i}$, which means that we are far from the equilibrium distribution.
- 在平衡态， $p(i, t)$ 与时间无关，Master eq 变成

$$\sum_j W(j \rightarrow i) p_{eq}(j) = p_{eq}(i) \sum_j W(i \rightarrow j)$$

- 一个简单的解是（细致平衡条件）

$$W(j \rightarrow i) p_{eq}(j) = W(i \rightarrow j) p_{eq}(i)$$

40

蒙特卡罗方法：对平衡体系的马尔可夫链取样

- Metropolis 等发展了所谓的重要性取样。他们引入一个 stochastic Markovian process between 相继的 configurations, 可以收敛到平衡的 distribution p_{eq} .
- 记 $p(i, t)$ 是 t 时刻有 i configuration 的几率。正如我们上一章讲的， $p(i, t)$ 满足 Master eq.

$$p(i, t + dt) = p(i, t) + \sum_j (W(j \rightarrow i) P(j, t) - W(i \rightarrow j) p(i, t)) dt$$

$W(i \rightarrow j) dt$ 是条件几率或转移几率。

39

蒙特卡罗方法：对平衡体系的马尔可夫链取样

- 等价地

$$\frac{W(i \rightarrow j)}{W(j \rightarrow i)} = \frac{p_{eq}(j)}{p_{eq}(i)} = \exp(-\beta(U(j) - U(i))).$$

$W(i \rightarrow j)$ 与 partition function 无关，而只与 Boltzmann 因子有关。

41

蒙特卡罗方法：Metropolis algorithm

- 要求满足detailed balance的转移矩阵，注意到Monte Carlo的动力学是两步的序列：

(1) 从一个configuration i 出发, 根据某一个事先给定的几率 $\alpha(i \rightarrow j)$ 随机地得到一个新的configuration j.

(2) This new configuration is accepted with a probability $\Pi(i \rightarrow j)$.

- Thus

$$W(i \rightarrow j) = \alpha(i \rightarrow j)\Pi(i \rightarrow j).$$

42

蒙特卡罗方法：Metropolis algorithm

- Originally, Metropolis et al 等选择

$$\alpha(i \rightarrow j) = \alpha(j \rightarrow i)$$

- Then $\frac{\Pi(i \rightarrow j)}{\Pi(j \rightarrow i)} = \exp(-\beta(U(j) - U(i)))$

- 一个特解是

$$\Pi(i \rightarrow j) = \begin{cases} \exp(-\beta(U(j) - U(i))) & \text{if } U(j) > U(i) \\ 1 & \text{if } U(j) \leq U(i) \end{cases}$$

- 重要性抽样：从i构型到j构型发生的概率由上式给出。第二行表示绝对变，而第一行由能量差给出一个变构型的几率（实际执行中，变与不变由这个几率与一个随机数比较确定）。

43

蒙特卡罗方法：Metropolis algorithm

- 初始构型总是远离平衡的，所以，MC总是分两步，(1) 预热，让初始构型弛豫到平衡，也就是说，预热阶段得到构型不记录。

(2) 到平衡附近，再记录每一个构型，用于计算热力学量。

$$\langle A \rangle \simeq \frac{1}{N_r} \sum_i^{N_r} A_i$$

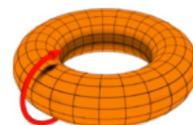
44

蒙特卡罗方法：Ising model

- Two-dimensional Ising model with $S_i = \pm 1$

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^N S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i$$

- Periodic boundary condition: two-dimensional lattice torus



45

蒙特卡罗方法: Ising model

- Metropolis algorithm: initial 构型 (1) the ground state。 (2) 有限温度, 对每个site, 赋予一个随机数 $r(i)$. $0 < r(i) < 0.5$, spin=+1, $0.5 < r(i) < 1$, spin=-1

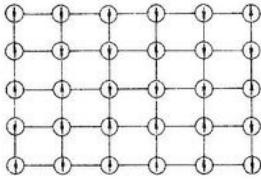
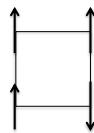


图 1 二维伊辛点阵模型



46

蒙特卡罗方法: Ising model

- Metropolis algorithm: 更新构型。如果构型与前一个差别太大, 很有可能由于几率太小 “跑不出去”。所以, 通常是随机地选一个格点, 翻转其spin。
- 计算新构型的能量
- 若 $U_{\text{new}} < U_{\text{old}}$, 接受这个新构型
- 若 $U_{\text{new}} > U_{\text{old}}$, 产生一个随机数 r (在0和1之间), 若 $r < \exp[-\beta(U_{\text{new}} - U_{\text{old}})]$, 接受新构型, 反之, 拒绝接受, 留在旧构型。
- 继续, 迭代。
- 在足够多个平衡态构型 (除去“预热”构型) 后, 用这些构型计算热力学量
- 通常, Metropolis algorithm MC 在远离相变点是有效的。

$$\langle A \rangle \simeq \frac{1}{N_r} \sum_i^{N_r} A_i$$

47

蒙特卡罗方法: Ising model

- 我这里非常粗糙地讲了 Metropolis algorithm for Ising model. 实际计算中为了提高效率、缩短时间、减小误差、提高精度, 由很多技术。我不去细讲。大家可以参考有关参考文献。

48

49

相变和蒙特卡罗模拟

- Monte Carlo 模拟在临界点附近可以计算各种临界指数
- Review: For 2-D Ising model, near the critical point $t = (T - T_c)/T_c$, 磁化强度

$$m(t, h) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle$$

$$m(t, h=0) = \begin{cases} 0 & t > 0 \\ A|t|^\beta & t < 0 \end{cases}$$

$$m(t=0, h) = \begin{cases} -B|h|^{1/\delta} & h < 0 \\ B|h|^{1/\delta} & h > 0 \end{cases}$$

相变和蒙特卡罗模拟

- 比热

$$c_v(t, h=0) \begin{cases} C|t|^{-\alpha} & t < 0 \\ C'|t|^{-\alpha'} & t > 0 \end{cases}$$

- 磁化率

$$\chi_T(h=0) \sim |t|^{-\gamma},$$

- 关联函数

$$g(r) \sim \frac{\exp(-r/\xi)}{r^{d-2+\eta}}, \quad \xi \sim |t|^{-\nu},$$

关联长度

50

相变和蒙特卡罗模拟

- 四个约束: 6个临界指数只有2个独立

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2.$$

$$\beta\delta = \beta + \gamma.$$

$$2 - \alpha = d\nu,$$

$$\gamma = (2 - \eta)\nu.$$

51

相变和蒙特卡罗模拟

- 有限尺寸标度理论: 重整化群理论表明, 在临界点附近, 有限线度L系统的热力学量与t和h的关系是与线度L/ℓ的系统的热力学量 for $t\ell^y_t$ 和 $h\ell^y_h$ 的关系一样的。

- 在相变点附近

$$f_s(t, h, \dots, L^{-1}) = l^{-d} f_s(tl^{y_t}, hl^{y_h}, \dots, (l/L)^{-1})$$

- 对零场($h=0$)比热

$$c_v(t, L^{-1}) = |t|^{-\alpha} F_c^\pm(|t|^{-\nu}/L)$$

52

相变和蒙特卡罗模拟

- 由于是finite size, t趋于0时, 无发散, 要求

$$F_c^\pm(|t|^{-\nu}/L) = (|t|^{-\nu}/L)^{-\kappa} D^\pm(Lt^\nu)$$

with $D^\pm(0)$ finite $\kappa = \alpha/\nu$

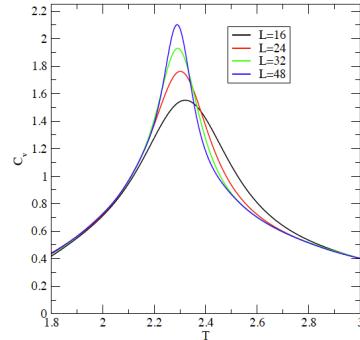
- 所以

$$c_v(t, L^{-1}) = L^{\alpha/\nu} D(L|t|^\nu).$$

53

相变和蒙特卡罗模拟

- Monte Carlo simulation for finite systems



54

相变和蒙特卡罗模拟

- 在 $T_c(L)$,

$$T_c(L) - T_c \sim L^{-1/\nu}$$

- 此时比热最大

$$C_v(T_c(L), L^{-1}) \sim L^{\alpha/\nu}$$

55

相变和蒙特卡罗模拟

- The absolute value of magnetization, the isothermal susceptibility, the second susceptibility, Binder's parameter are defined by

$$\langle |m| \rangle = \frac{1}{N} \langle \left| \sum_{i=1}^N S_i \right| \rangle$$

$$k_B T \chi = N(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2).$$

$$k_B T \chi' = N(\langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2)$$

$$U = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}$$

56

相变和蒙特卡罗模拟

- The scaling laws are

$$\begin{aligned} \langle |m(t, 0, L^{-1})| \rangle &= L^{-\beta/\nu} F_m^\pm(tL^{1/\nu}) \\ k_B T \chi(t, 0, L^{-1}) &= L^{\gamma/\nu} F_\chi^\pm(tL^{1/\nu}) \\ k_B T \chi'(t, 0, L^{-1}) &= L^{\gamma/\nu} F_{\chi'}^\pm(tL^{1/\nu}) \\ U(t, 0, L^{-1}) &= F_U^\pm(tL^{1/\nu}) \end{aligned}$$

57

相变和蒙特卡罗模拟

- 这样，我们可以确定critical temperature和所有critical exponents.
- MC模拟与有效尺寸效应不但可以计算普适量，例如，临界指数，还能计算非universal量，例如，临界温度
- 临界慢化：上面我们假设MC在临界点可用。但Metropolis algorithm在临界点还是一个好的算法吗？

58

相变和蒙特卡罗模拟

- 在临界点附近，很大标度的涨落存在，弛豫时间 τ 变长。由于关联长度是唯一的scale，有一个新的临界指数出现

$$\tau \sim (\xi(t))^z$$

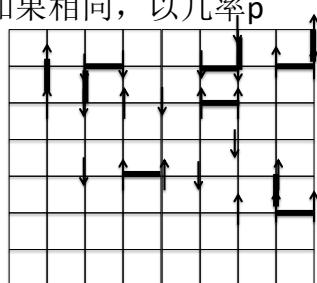
- z 称为动力学临界指数，typically, $z=2\sim 5$ 。
 $\xi \sim |t|^{-\nu} \sim |t|^{-\nu z}$
- For finite system, $\tau \sim L^z$; 随 L 变大，算法失效。这称为临界慢化

59

60

相变和蒙特卡罗模拟

- 改进办法：Cluster algorithm(Wang-Landau algorithm)把spins bond起来：如果最邻近自旋相反，不bond。如果相同，以几率 p bond, 几率 $(1-p)$ 不bond. (对反铁磁，相反)。



相变和蒙特卡罗模拟

- 变化构型时随机地翻转一个 bonded cluster. Swendsen and Wang发现可以克服临界慢化。
- 可以进一步改进，例如，小的cluster没贡献，用Wolff算法。
- Monte Carlo method with multiple Markov chains

61

变分蒙特卡罗

参考书: Morten Hjorth-Jensen, Computational Physics
<http://vdisk.weibo.com/s/DdqkzLldy1Rb>

62

变分蒙特卡罗

- 量子力学问题。猜一个带参数的波函数, (如 α), 能量期待值:

$$\langle \hat{\mathbf{E}} \rangle = \frac{\int d\mathbf{R} \Psi^*(\mathbf{R}) H(\mathbf{R}) \Psi(\mathbf{R})}{\int d\mathbf{R} \Psi^*(\mathbf{R}) \Psi(\mathbf{R})} = \int P(\mathbf{R}; \alpha) \hat{\mathbf{E}}_L(\mathbf{R}; \alpha) d\mathbf{R}.$$

$$P(\mathbf{R}; \alpha) = \frac{|\psi_T(\mathbf{R}; \alpha)|^2}{\int |\psi_T(\mathbf{R}; \alpha)|^2 d\mathbf{R}}.$$

$$\hat{\mathbf{E}}_L(\mathbf{R}; \alpha) = \frac{1}{\psi_T(\mathbf{R}; \alpha)} \hat{\mathbf{H}} \psi_T(\mathbf{R}; \alpha)$$

63

变分蒙特卡罗

- 我们用MC来计算积分: 用 $P(\mathbf{R}, \alpha)$ 作为抽样的几率, 得到configurations

$$\langle \hat{\mathbf{E}}_L \rangle = \int P(\mathbf{R}) \hat{\mathbf{E}}_L(\mathbf{R}) d\mathbf{R} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E_L(x_i),$$

$$\langle \hat{\mathbf{E}}_L^2 \rangle = \int P(\mathbf{R}) \hat{\mathbf{E}}_L^2(\mathbf{R}) d\mathbf{R} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E_L^2(x_i).$$

- 对不同的 α , 计算积分, 找能量的minimum, 就是变分过程。

64

变分蒙特卡罗

- 一维谐振子 (自然单位) 精确基态

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2, \quad \Psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2} \quad E_0 = 1$$

- 猜变分波函数是

$$\Psi_T(x) = \frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}} e^{-x^2 \alpha^2/2}.$$

$$E_L(x) = \alpha^2 + x^2(1 - \alpha^4).$$

65

变分蒙特卡罗

- 变分能量

$$\langle E_L \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2/\alpha^2} \alpha^2 + x^2(1 - \alpha^4)}{\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2/\alpha^2}}.$$

- 因为积分可以解析算出

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2/\alpha^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}}, \quad \langle E_L \rangle = \frac{\alpha^2}{2} + \frac{1}{2\alpha^2}, \quad \sigma^2 = \frac{(\alpha^4 - 1)^2}{2\alpha^4}.$$

- Exactly, $\alpha=1$ 是minimal, 与精确解一致。

66

变分蒙特卡罗

- 我们也可用MC来计算积分: 用 $P(\mathbf{R}, \alpha)$ 作为抽样的几率, 得到configurations

$$\langle \hat{E}_L \rangle = \int P(\mathbf{R}) \hat{E}_L(\mathbf{R}) d\mathbf{R} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E_L(x_i),$$

$$\langle \hat{E}_L^2 \rangle = \int P(\mathbf{R}) \hat{E}_L^2(\mathbf{R}) d\mathbf{R} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E_L^2(x_i).$$

- 对不同的 α , 计算积分, 找能量的minimum, 就是变分过程。

67

变分蒙特卡罗

- 氢原子—电子和质子, 2粒子系统。六维。在质心坐标系, 三维:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r}$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p$$

$$m = m_e m_p / (m_e - m_p)$$

68

变分蒙特卡罗

- 想求基态: 角动量守恒和基态波函数球对称, 在球坐标

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] - \frac{e^2}{r}$$

- 问题是精确可解的:

$$E_0 = -\frac{e^2}{2a_0}, \quad \psi_0(r) \sim e^{-r/a_0} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

69

变分蒙特卡罗

- 变分计算: trial ground state wave function

$$\psi_{T,\alpha}(r) = e^{-\alpha r}$$

- Local energy: (自然单位)

$$E_L(r) = \frac{1}{\psi_{T,\alpha}} H \psi_{T,\alpha}(r) = -\frac{1}{2} \left[\alpha^2 - \frac{2\alpha}{r} \right] - \frac{1}{r}$$

- 与谐振子一样, 可以用MC计算 E_L 的期待值, 得到 $\alpha=1$ 的极小值。解析地作积分, 求极值, 也可得同样的结果。
- 也可以根据角动量守恒用VMC求激发态。

70

变分蒙特卡罗

- 氦原子, M_N 是 m_e 的7300多倍, 所以, 可以认为是不动的, 电子的哈密顿是 (自然单位)

$$H = -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}$$

71

变分蒙特卡罗

- 若电子间无相互作用, 则就是两个简单的类氢原子问题

$$E_0 = -\frac{Z^2}{2}, \quad \psi_0 \sim e^{-Zr}$$

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \sim e^{-2r_1} e^{-2r_2}$$

- 取变分波函数为

$$\Psi_{T,\alpha} = e^{-\alpha r_1} e^{-\alpha r_2}$$

72

变分蒙特卡罗

- 由此可得

$$\left\langle -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} \right\rangle = 2 \times \frac{\alpha^2}{2} - 2 \times \alpha,$$

- 直接解, minimum at $\alpha=1, E_0=-1$. 实验测量是 $E_0=-2.904$. 这个近似不好。

73

变分蒙特卡罗

- 把电子电子相互作用加上

$$\left\langle -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \right\rangle = \alpha^2 - \frac{27}{8}\alpha$$

- 直接解, minimum at $a=27/16$, $E_0=-2.8477$. Much better! 电子间的排斥相互作用 lowers ground state energy.

74

变分蒙特卡罗

- 更好的变分波函数: Pade-Jastrow wave function (加一个Jastrow factor)

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= e^{-2r_1} e^{-2r_2} e^{\frac{r_{12}}{2(1+\alpha r_{12})}} \\ E_L(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= -4 + \frac{\alpha}{(1+\alpha r_{12})} + \frac{\alpha}{(1+\alpha r_{12})^2} + \frac{\alpha}{(1+\alpha r_{12})^3} \\ &\quad - \frac{1}{4(1+\alpha r_{12})^4} + \frac{\hat{\mathbf{r}}_{12} \cdot (\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2)}{(1+\alpha r_{12})^2}. \end{aligned}$$

- 这时, 解析求积分就难点了, 但用MC做变分, 难度并不增加。

75

变分蒙特卡罗

- 蒙特卡罗方法也可处理量子多体系统。如果可以猜到量子多体系统的基态变分波函数的形式, 通过MC方法最优化变分参数, 可以得到变分基态波函数。用这种办法, 可以决定量子相图。
- 考虑相互作用 N_e 电子体系, 一个多体量子态 $|\psi\rangle$ 和可观察量 O
- 参考文献: arXiv 0707.1020

76

变分蒙特卡罗

- The expectation value of O is

$$\langle O \rangle = \frac{\langle \psi | O | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \sum_{\alpha, \beta} \langle \alpha | O | \beta \rangle \frac{\langle \psi | \alpha \rangle \langle \beta | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

where α and β are 具有确定电子自旋构型。例如, 两个sets

$\{R_1, \dots, R_{N_e/2}\}$ and $\{R'_1, \dots, R'_{N_e/2}\}$
这两个sets的交就是double occupied sites

$$\{R_1, \dots, R_{N_e/2}\} \cap \{R'_1, \dots, R'_{N_e/2}\} = \{R_1^d, \dots, R_D^d\}$$

变分蒙特卡罗

- The state $|\alpha\rangle$ is given by

$$|\alpha\rangle = c_{R_1,\uparrow}^\dagger \cdots c_{R_{N_e/2},\uparrow}^\dagger c_{R'_1,\downarrow}^\dagger \cdots c_{R'_{N_e/2},\downarrow}^\dagger |0\rangle$$

- 重写 $\langle O \rangle$

$$\sum_{\alpha} \left(\sum_{\beta} \frac{\langle \alpha | O | \beta \rangle \langle \beta | \psi \rangle}{\langle \alpha | \psi \rangle} \right) \frac{|\langle \psi | \alpha \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} = \sum_{\alpha} f(\alpha) \rho(\alpha)$$

$$f(\alpha) = \sum_{\beta} \frac{\langle \alpha | O | \beta \rangle \langle \beta | \psi \rangle}{\langle \alpha | \psi \rangle}, \quad \rho(\alpha) = \frac{|\langle \psi | \alpha \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

$$\rho(\alpha) \geq 0, \quad \sum_{\alpha} \rho(\alpha) = 1.$$

78

变分蒙特卡罗

- 对这样一个系统，在电子构型空间sample $|\alpha\rangle$ 态，做Metropolis algorithm，就可以算出 $\langle O \rangle$.

- The error bars are given by

$$\sqrt{\frac{1}{N_r - 1} \sum_{l=1}^{N_r} (\langle O \rangle_l - \overline{\langle O \rangle})^2}$$

79

变分蒙特卡罗

- There is a given expression of $|\psi\rangle$ with several free parameters. For example, $|\psi\rangle$ is a d-wave pairing state with gap parameters Δ_d . It can also be a generalized pairing wave function with Δ_d and antiferromagnetic order parameter Δ_{ad} . (用于Hubbard model 或t-J model, 见参考文献 arXiv 0707.1020).
- 变化 Δ_d 和 Δ_{ad} , 用MC, 可以画出 $E(\Delta_d, \Delta_{ad})$ 。这样, 就可以确定supercond-AF相图。

80

扩散蒙特卡罗

- Diffusion Monte Carlo: 把Schrodinger equation写成虚时, 这时, 与粒子的扩散方程比较, 波函数就象扩散粒子的密度。用MC解这个扩散方程, 所以叫DMC。这实际上是粒子的随机行走问题, 所以, 又叫随机行走MC。

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = -\hat{\mathbf{H}}\psi,$$

81

扩散蒙特卡罗

- 用一组本征态展开

$$\psi = \sum_i^{\infty} c_i \phi_i, \quad \hat{H} \phi_i = \epsilon_i \phi_i,$$

- 形式解 $\psi(\tau_1 + \delta\tau) = e^{-\hat{H}\delta\tau}\psi(\tau_1)$

$$\psi(\delta\tau) = \sum_i^{\infty} c_i e^{-\epsilon_i \delta\tau} \phi_i.$$

- 长时间演化后

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \psi(\delta\tau) = c_0 e^{-\epsilon_0 \tau} \phi_0.$$

扩散蒙特卡罗

- 把空间坐标明显写出来($\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)$)

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \psi(\mathbf{R}, \delta\tau) = c_0 e^{-\epsilon_0 \tau} \phi_0(\mathbf{R}).$$

- 设哈密顿量是动能加势能, 得到“扩散方程”

$$-\frac{\partial \psi(\mathbf{R}, \tau)}{\partial \tau} = \left[\sum_i^N -\frac{1}{2} \nabla_i^2 \psi(\mathbf{R}, \tau) \right] + (V(\mathbf{R}) - E_T) \psi(\mathbf{R}, \tau).$$

$$E_0 - E_T \approx 0$$

82

83

扩散蒙特卡罗

- 引进了一个试探波函数 (可以用VMC或其他办法得到) $\psi_G(\mathbf{R})$ 定义分布

$$f(\mathbf{R}, t) = \psi_G(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{R}, t)$$

$$-\frac{\partial f(\mathbf{R}, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \nabla^2 f(\mathbf{R}, t) + \nabla \cdot [\mathbf{V}(\mathbf{R}) f(\mathbf{R}, t)] - S(\mathbf{R}) f(\mathbf{R}, t)$$

$$\mathbf{V}(\mathbf{R}) = \frac{\nabla \psi_G(\mathbf{R})}{\psi_G(\mathbf{R})} \quad S(\mathbf{R}) = E_T - E_L(\mathbf{R})$$

$$E_L(\mathbf{R}) = -\frac{\nabla^2 \psi_G(\mathbf{R})}{2 \psi_G(\mathbf{R})} + \mathcal{V}(\mathbf{R})$$

84

扩散蒙特卡罗

- 分布的扩散方程的形式解

$$f(\mathbf{R}', t + \tau) = e^{\tau E_T(t + \tau)} \int d\mathbf{R} \tilde{G}(\mathbf{R}', \mathbf{R}, \tau) f(\mathbf{R}, t)$$

- \tilde{G} 是 $E_T=0$ 时的Green's function

$$\begin{aligned} \tilde{G}(\mathbf{R}', \mathbf{R}, \tau) &= \frac{1}{(2\pi\tau)^{3n/2}} \int d\mathbf{R}'' e^{-[(\mathbf{R}' - \mathbf{R}'')^2 / 2\tau]} \\ &\times \delta(\mathbf{R}'' - \mathbf{R} - \mathbf{V}(\mathbf{R})\tau) \\ &\times e^{-(1/2)[E_L(\mathbf{R}') + E_L(\mathbf{R})]\tau} + \mathcal{O}(\tau^2). \end{aligned}$$

85

扩散蒙特卡罗

- 用一个n-粒子随机行走来迭代解上面的方程，即由一个 $f(R)$ 出发，diffuse到 $f(R')$ ，随机行走是否do，即是否接受 R' 由重要性抽样决定。经过这样的MC，最后可以得到 ground state 的分布。
- 扩散MC，又称Green函数MC的short time近似。
J. Chem. Phys. 77, 349 (1982). J. Chem. Phys. 77, 5593 (1982).
- 与VMC比较，DMC可以修正f的形式，求基态比VMC好，但无法求激发态。

86

扩散蒙特卡罗

- 基态波函数 $H\Psi_0(x) = E_0\Psi_0(x)$ ，
 $HG(x,y) = \delta(x-y)$ ，
 $G(x,y) = G(y,x)$ ，
- 用MC方法求解以下方程称为Green函数MC
 $\Psi_0(y) = E_0 \int \Psi_0(x) G(x,y) dx$ 。
- 扩散MC是一个例子，其他的，如贝塞尔函数MC，库仑格林函数MC，等等，主要是用的Green函数不同

87

量子蒙特卡罗

- QMC方法是simulating强相互作用玻色和费米多体问题的强有力工具。
- 变分蒙特卡罗是QMC的一种，但只考虑了某些特定的量子构型，是有明显偏向的。DMC是求基态用加强版的VMC。
- 无偏向的QMC是要在整个量子态空间做抽样。但MC的权重是经典的，这会在处理量子问题时遇到很多麻烦。
- 对相互作用玻色体系，主要问题是抽样的效率问题。对相互作用费米子体系，几乎对实际物理上重要的系统，都会有所谓的经典权重的负符号问题，甚至是phase问题，即对某些构型，经典权重是负的或者是复的，这使MC算法失效。

88

量子蒙特卡罗

- Sign problems: QMC有两类sign problems
- 一类是相互作用费米子体系，由费米子的反对易关系引起（见以后讨论）
- 另一类是spin或玻色子系统中lattice几何引起的。反铁磁耦合会导致负的MC几率。对双子格lattice，总可使spin flip为偶数，所以，没有符号问题，但对有阻错的格子，例如，三角、Kagome等会有奇数spin flip的update从而出现负几率存在，求和会出现零配分函数。

89

量子蒙特卡罗：相互作用玻色子， SSE算法

- 我们首先介绍对玻色子随机扩展数序列(SSE)展开的原理。要计算

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}\{\hat{A} e^{-\beta \hat{H}}\}$$

- 为简单，我们考虑一个XXZ model

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\Delta S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right] - h \sum_i S_i^z.$$

- 记 $\langle i,j \rangle = b$ 为一个bond，对2维方格子，bond数M=2N.

90

量子蒙特卡罗：相互作用玻色子， SSE算法

- 重写H

$$H = -J \sum_{b=1}^M [H_{1,b} - H_{2,b}]$$

$$H_{1,b} = C - \Delta S_{i(b)}^z S_{j(b)}^z + \frac{h}{2J} (S_{i(b)}^z + S_{j(b)}^z),$$

$$H_{2,b} = \frac{1}{2} (S_{i(b)}^+ S_{j(b)}^- + S_{i(b)}^- S_{j(b)}^+).$$
- 在一个无阻错的lattice (如2D square lattice)，任何常数C都是允许的。取C>0.

91

量子蒙特卡罗：相互作用玻色子， SSE算法

- 展开配分函数

$$Z = \sum_{\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \langle \alpha | H^n | \alpha \rangle,$$

$$\{|\alpha\rangle\} = \{|S_1^z, S_2^z, \dots, S_N^z\rangle\}$$

- 由于 $(-\beta)^n$ ，一般情况下，即使玻色（或自旋）系统也存在符号问题。Sandvik发现，对无组错系统，这个符号问题不存在。

92

量子蒙特卡罗：相互作用玻色子， SSE算法

- 重新arrange求和

$$Z = \sum_{\alpha} \sum_{S_L} \frac{\beta^n (L-n)!}{L!} \left\langle \alpha \left| \prod_{i=1}^L H_{a_i, b_i} \right| \alpha \right\rangle (-1)^{n_2}$$

$H_{0,0} = 1$ $S_L = [a_1, b_1]_1, [a_2, b_2]_2, \dots, [a_L, b_L]_L$
 with $a_i \in \{1, 2\}$ and $b_i \in \{1, \dots, M\}$, or $[a_i, b_i] = [0, 0]$
 n denotes the number of non-[0,0] elements in S_L
 n_2 is the total number of [2,b] elements in S_L

对无组错lattice, $n_2=\text{even}$. 取做够大的C，没有符号问题

量子蒙特卡罗：相互作用玻色子， SSE算法

- 于是，量子问题转化为一个经典问题

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\sum_{\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{SL} A(\alpha, S_L), W(\alpha, S_L)}{\sum_{\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{SL} W(\alpha, S_L)}$$

$$W(\alpha, S_L) = \frac{\beta^n (L-n)!}{L!} \left\langle \alpha \left| \prod_{i=1}^L H_{a_i, b_i} \right| \alpha \right\rangle$$

94

量子蒙特卡罗：相互作用玻色子， SSE算法

- A. Sandvik, PRB 59, R14157 (1999), Stochastic series expansion method with operator-loop update
- 这个算法解决了很多玻色子和自旋模型的计算问题。但对有阻错的格子，仍会有负符号问题。
- 有些有阻错的格子，例如三角格子，也会有无负符号问题的模型

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} [J_z S_i^z S_j^z - \frac{J_{\pm}}{2} (S_i^+ S_j^- + h.c.) - \frac{J_{\pm\pm}}{2} (S_i^+ S_j^+ + h.c.)] + J_b \sum_i^z S_i^z$$

量子蒙特卡罗：相互作用费米子

- 对费米子，也可做类似的展开，但可以发现，一般情况下存在负符号问题。如果负符号“几率”与正符号几率出现的次数几乎相等，配分函数就会非常小，造成MC概率发散，从而引起极大的误差。

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i A_i W_i}{\sum_i W_i} = \sum_i A_i \rho_i$$

96

量子蒙特卡罗：相互作用费米子

- 举二个例子，Determinantal QMC and continuous time MC .
- Determinant MC: 以量子杂质模型为例，

$$H = \sum_s \epsilon_0 c_{0\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + U n_{0\uparrow} n_{0\downarrow} + \sum_{p>0\sigma} [V_{0p} c_{0\sigma}^\dagger c_{p\sigma} + V_{0p}^* c_{p\sigma}^\dagger c_{0\sigma}] + \sum_{p>0,\sigma} \epsilon_p c_{p\sigma}^\dagger c_{p\sigma}$$

- 除了第二项，杂质on-site 库伦相互作用，其他都是二次型，可精确解。U=0，杂质的 Green's function 是 $G^0 = (\omega - \epsilon_0 - \sum_{p>0} \frac{V_{0p}^* V_{p0}}{\omega - \epsilon_p})^{-1}$

97

量子蒙特卡罗：相互作用费米子

- 把 H 分为两项 $H = H^0 + H^i$

三个重要步骤：

- (1) 把 β 分为很多小间隔 $\Delta\tau L = \beta$

$$Z \approx \text{Tr} \left[\prod_{l=0}^{L-1} e^{-\Delta\tau H^0} e^{-\Delta\tau H^i} \right] + O(\Delta\tau^2 U)$$

- (2) Discrete Hubbard-Stratonovich 变换

$$e^{-\Delta\tau U[n_{0\uparrow}n_{0\downarrow} - \frac{1}{2}(n_{0\uparrow}+n_{0\downarrow})]} = \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} e^{\lambda s(n_{0\uparrow}-n_{0\downarrow})}$$

98

量子蒙特卡罗：相互作用费米子

- (3) 把费米子自由度求和掉，只留下 $s=\pm 1$ 的自由度，Ising 自由度，full Green's function

$$G = \frac{\sum_{\{s\}} \text{Det}[g^{-1}] g}{\sum_{\{s\}} \text{Det}[g^{-1}]}, \quad g^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & B_{L-1} \\ -B_0 & 1 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & -B_1 & 1 & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & 1 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & -B_{L-2} & 1 \end{pmatrix}$$

$$B_l = e^{-\Delta\tau h^0} e^{\lambda s_l \sigma \delta_{l=j=0}}$$

99

量子蒙特卡罗：相互作用费米子

- DQMC, $\det g^{-1}$ 不能保证是非负的，sign problem!!

对给定的电子自旋 σ ,

$$G_\sigma = \frac{\sum_{\{s\}} \rho g_\sigma}{\sum_{\{s\}} \rho}$$

$$\rho = \text{Det}[g_\uparrow^{-1}] \text{Det}[g_\downarrow^{-1}]$$

- 已严格证明对单杂质问题，两个行列式的成积 ρ 总是正的。No sign problem

100

量子蒙特卡罗：相互作用费米子

- 对 Hubbard model, DQMC 也可用，

$$H = -t \sum_{(ij),\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i (n_{i+} - \frac{1}{2})(n_{i-} - \frac{1}{2}) - \mu \sum_i (n_{i+} + n_{i-})$$

- 当 $U < 0$ 时，无 sign problem

- 当 $U > 0$ ，只有 $\mu = 0$ ，即 Hubbard band 半满时才没有 sign problem

- 很遗憾，物理上最感兴趣的 $U > 0$, finite μ , 存在 sign problem, 且 U 越大越严重。

101

量子蒙特卡罗：相互作用费米子

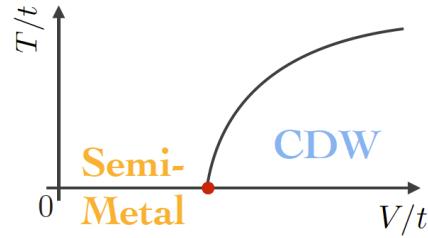
- 连续时间QMC: 六角格子

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \\ \hat{H}_0 &= -t \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j + \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i) = \sum_{i,j} \hat{c}_i^\dagger K_{ij} \hat{c}_j, \\ \hat{H}_1 &= V \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\hat{n}_i - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_j - \frac{1}{2} \right).\end{aligned}$$

102

量子蒙特卡罗：相互作用费米子

- Phase diagram



103

量子蒙特卡罗：相互作用费米子

- CT-QMC, Z_0 is non-interacting partition function

$$\begin{aligned}Z &= Z_0 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-V)^k}{k!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_0^{\beta} d\tau_2 \dots \int_0^{\beta} d\tau_{2k} \delta(\tau_1 - \tau_2) \dots \delta(\tau_{2k-1} - \tau_{2k}) \times \\ &\quad \left\langle \left(\hat{n}_{i_1}(\tau_1) - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{i_2}(\tau_2) - \frac{1}{2} \right) \dots \left(\hat{n}_{i_{2k-1}}(\tau_{2k-1}) - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{i_{2k}}(\tau_{2k}) - \frac{1}{2} \right) \right\rangle_0 \\ &= Z_0 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-V)^k}{k!} \int_0^{\beta} d\tau_2 \int_0^{\beta} d\tau_4 \dots \int_0^{\beta} d\tau_{2k} \det(G^k),\end{aligned}$$

$$\langle \dots \rangle_0 = \mathcal{T} \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}_0} \dots) / Z_0$$

$$G_{pq}^k = G_{i_p i_q}^0(\tau_p - \tau_q) - \delta_{pq}/2, \quad G_{ij}^0(\tau) = \langle \hat{c}_i(\tau) \hat{c}_j^\dagger \rangle_0$$

104

量子蒙特卡罗：相互作用费米子

- G 是 $2k \times 2k$ matrix.
- 由于 $(-V)^k$, 在 k 为 odd, $V > 0$, 一般情况下, 有 sign problem.
- 对六角格子, 可以证明, 对 $V > 0$

$$w(\mathcal{C}) = \frac{(-V)^k}{k!} \int_0^{\beta} d\tau_2 \int_0^{\beta} d\tau_4 \dots \int_0^{\beta} d\tau_{2k} \det(G^k) > 0$$

$$\mathcal{C} = \{i_1, i_2; \tau_2\}, \{i_3, i_4; \tau_4\} \dots \{i_{2k-1}, i_{2k}; \tau_{2k}\}$$

$$Z = Z_0 \sum_{\mathcal{C}} w(\mathcal{C})$$

105

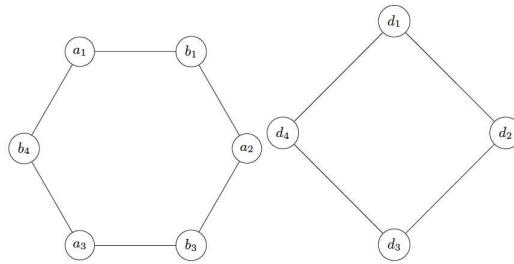
量子蒙特卡罗：相互作用费米子

- 无自旋费米子 no sign problem 似乎很奇怪。因为DQMC中的经验是两个自旋相反的费米子 determinants 互为复共轭才导致无 sign problem. 而且是 negative U.
- 事实上，这是与 negative U Hubbard model 相关的：把六角格子 spinless fermion model with positive V 可以映射到一个四方格子上 厥自旋1/2费米子模型 with Hubbard U=-V.

106

量子蒙特卡罗：相互作用费米子

- Mapping



107

路径积分蒙特卡罗

- 路径积分蒙特卡罗（顾昌鑫—计算物理学）
 - 把泛函积分在欧氏空间写出
- $$Z_{fi} = \int e^{-S[x]/\hbar} [dx], \quad S = \int_0^T \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + V(x) \right] dt$$
- 离散化 $Z_{fi} = \sum_{\text{paths}} e^{-S[x]/\hbar}$,
 - 与求配分函数类似，在一下边界条件下用 MC 求泛函积分

$$x(0) = x_i, x(T) = x_f$$

108

路径积分蒙特卡罗

- 作为路径积分 MC 中的一个重要例子，简介一下格点规范理论。粒子物理中的强相互作用理论 SU(3)QCD，在高能端相互作用耦合常数趋于零，即所谓的渐近自由，可以用微扰论处理，即微扰 QCD。
- 色自由度在强如 LHC 这样的加速器（相比渐近自由能标，仍是低能）中也没有显现出来，表明在低能下色是禁闭的，即所谓的夸克禁闭。所以，低能是强相互作用区。

109

路径积分蒙特卡罗

- 强相互作用只能用非微扰方法处理，格点规范是唯一行之有效的方法：把4维时空离散化，通常先研究虚时问题，即在4维离散欧氏空间，或四维格子中研究SU(3)规范理论。
- 最早是Wilson提出了LGT的规范不变的Wilson作用量

$$S = \beta \sum_{\text{plaquette}} \left[1 - \frac{1}{2N} \text{Tr}(\Omega_p + \Omega_p^*) \right] \quad 110$$

路径积分蒙特卡罗

$$S = \beta \sum_{\text{plaquette}} \left[1 - \frac{1}{2N} \text{Tr}(\Omega_p + \Omega_p^*) \right]$$

- 这个作用量在 $a \rightarrow 0$ (连续极限)，回到通常我们熟悉的SU(3)Yang-Mill作用量

$$\beta = \frac{2N}{g^2}$$

$$\Omega_p = U_{n,\mu} U_{n+\mu,\nu} U_{n+\nu,\mu}^{-1} U_{n,\nu}^{-1}$$

111

$$U_{n,\mu} = e^{i a g A_\mu \tau_i}$$

路径积分蒙特卡罗

- 路径积分量子化

$$Z = \int D A_\mu e^{-S(U_\mu)}$$

- 离散化

$$Z = \sum_{\{U_\mu\}} e^{-S(U_\mu)}$$

路径积分蒙特卡罗

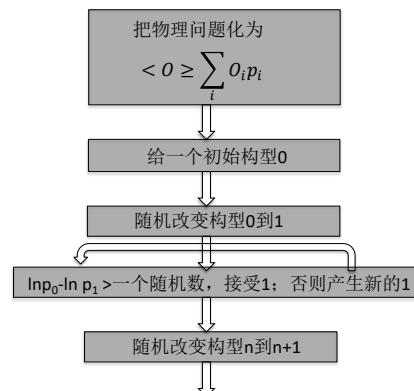
- 有多种LGT作用量的选择，都可以回到连续极限
- 4维lattice, Hilbert空间的维数是 4^N ，还不包括内部自由度。计算量超大。
- 放夸克，有符号问题。
- 要重整化到红外临界点，要求LGT有正确的scaling行为。计算上要克服临界慢化。

路径积分蒙特卡罗

- Wilson证明在 $\beta \rightarrow 0, (g \rightarrow \infty)$, 即强耦合极限, 任何规范理论都是禁闭的。
- 所以, 要证明, U(1)LGT理论用confinement-deconfinement相变, 电荷不禁闭。
- SU(3)色规范理论是禁闭的, 没有相变。

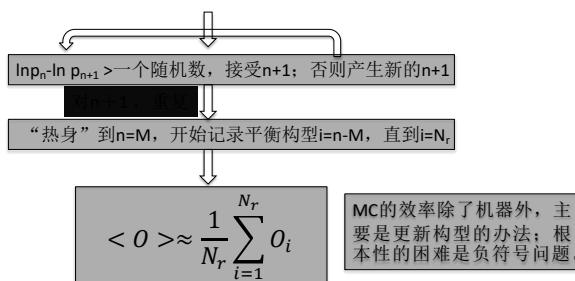
114

蒙特卡罗模拟框图



115

蒙特卡罗模拟框图



116

Error Bar $\sqrt{\frac{1}{N_r - 1} \sum_{l=1}^{N_r} (\langle O \rangle_l - \overline{\langle O \rangle})^2}$



117