习题一 考虑次近邻的伊辛模型

考虑最近邻和次近邻相互作用下，无外场的伊辛模型的哈密顿量可以写成

$$H(\{\sigma_i\}) = -J_1 \sum_i \sigma_i\sigma_{i+1} - J_2 \sum_i \sigma_i\sigma_{i+2}$$

1. 令 $\tau_i = \sigma_i\sigma_{i+1}$，借助周期性边界条件求解体系的配分函数。
2. 求 $<\sigma_i\sigma_{i+1}>$ 和 $<\sigma_i\sigma_{i+2}>$，并揭示二者在 $J_2 \to 0$ 时的结果

习题二 朗道自由能与相变

考虑朗道自由能

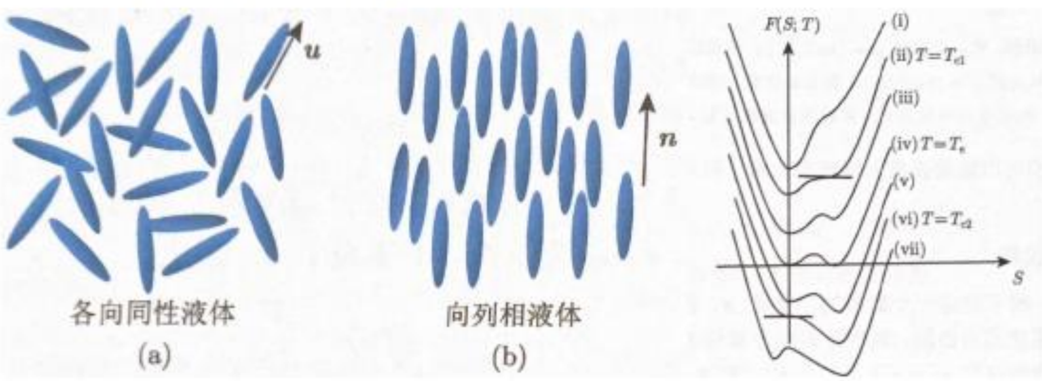
$$\psi(m) = \frac{1}{2}r_0 m^2 + s_0 m^3 + u_0 m^4$$

画出 r_0 取不同值时的 ψ（m）的形状，并讨论 ψ（m）的最小值 ψ_{min} 如何依赖 r_0 的取值。讨论在某些 r_0 下是否会出现一级相变。如果存在，请找到这些值并讨论 ψ_{min} 的连续性。

习题三 液晶的朗道 德热纳理论

液晶分子一般具有这样的特征：其呈现为长棒状，可以定义指向矢，指向矢是沿其长轴方向的单位矢量，记为$\vec{u}$，高温/低密度下，其指向矢分布随机，低温/高密度下，其整体有基本一致的取向，如下图所示。我们称低温下的这种状态为液晶相，其中单体质心排布无序，但指向有序。对于液晶到液体的相变，可以由朗道–德热纳理论来描写，所采用的序参量记为 S，定义为：$S = \frac{3}{2} < u_z^2 - \frac{1}{3} >$，这里 z 轴取为液晶相的平均指向方向，据此回答下列问题：

1. 证明 $< u_x^2 > = < u_y^2 > = \frac{1}{3}(1-S)$，据此理解，$S > 0$ 和 $S < 0$ 是等价的态吗?
2. 朗道自由能最普遍的形式为：$F(S;T) = a_1(T)x + a_2(T)x^2 + a_3(T)x^3 + a_4(T)x^4$，类比伊辛模型平均场理论的讨论，显然仍然有 $a_1(T) = 0$，$a_2(T) = A(T - T_c)$，$A > 0$，并且仍然可以假定 a_3，a_4 为常数，但根据第一问，此时还会有 $a_3 = 0$ 吗?
3. 经过计算可以得出：$F = \frac{1}{2}A(T-T_c)S^2 - \frac{1}{3}BS^3 + \frac{1}{4}CS^4$，其中 $A = Nk_B$，$B = Nk_BT_c$，$C = Nk_BT_c$（这个自由能形式就是朗道–德热纳理论的核心）。据此求解 $dF/dS = 0$ 的三个 S 的值，然后定性讨论从相当高温度下进行降温，体系会发生什么样的相变过程？（计算可以发现，不同温度下的自由能曲线如下图所示，上面所写的 T_c 对应图中的 T_{c2}。建议自己亲手算一下此自由能曲线试试）



习题四 溶液的格点模型

考虑一个二元混合系统，它原则上可以表示各种意义上的溶液，许多复杂情形也可以在它基础上修正得到。用 i 表示一个构型，那么能量可以写为：

$$E_i = \epsilon_{pp} N_i^{(pp)} + \epsilon_{ss} N_i^{(ss)} + \epsilon_{ps} N_i^{(ps)}$$

其中 p 表示溶质，s 表示溶剂，$N_i^{(pp)}$ 表示在该构型下 pp 近邻对数目。体系配分函数为 $Z_i = \sum_i \exp(-E_i/k_B T)$，单位体积自由能密度：$f(\phi, T) = -\frac{k_B T}{V} \ln Z$，其中 $\phi \equiv N_p/(N_p + N_s) \equiv N_p/N_{tot}$ 为溶质的粒子数浓度，我们可以借助平均场来对这一体系进行解析计算。平均场近似下，配分函数写作 $Z \approx W \exp(-\bar{E}/k_B T)$，其中 W 为状态数，$\bar{E}$ 为平均能量。

1. 显然，$W = \frac{(N_p+N_s)!}{N_p! N_s!}$，而对于 $\bar{E}$ 的估算则主要需要估计 $N^{(pp)}$，$N^{(ps)}$，$N^{(ss)}$ 这三个量，估计方法如下：晶格中的每个单元有 z 个近邻，平均而言，其中 $z\phi$ 个为 p，$z(1-\phi)$ 个为 s，那么例如 $N^{(pp)}$ 就可以估算为 $N_p \cdot \frac{1}{2} z\phi = zN_{tot}\phi^2/2$，照此方法，估计 $\bar{E}$，结果用 N_{tot}，z，ϵ_{ps}，ϵ_{ss} 以及 $\Delta\epsilon \equiv \epsilon_{pp} + \epsilon_{ss} - 2\epsilon_{ps}$ 表示；
2. 由此（注意运用斯特林近似）计算体系的单位体积自由能，结果用 $v_c \equiv V/N_{tot}$，ϕ，$\chi \equiv -\frac{z}{2k_B T}\Delta\epsilon$ 表示；
3. 当 $\partial^2 f/\partial^2\phi < 0$ 时均匀混合相失稳，体系发生两相分离，类比范德华方程，如何理解这一点？
4. 计算 χ_c，其定义类似气液相变临界点：当 $\chi > \chi_c$ 时，$\partial^2 f/\partial^2\phi = 0$ 有两根，当 $\chi < \chi_c$ 时，$\partial^2 f/\partial^2\phi = 0$ 无根；