

Проект №19455 "Решетчатые модели макромолекул"

Пчелинцев Илья Игоревич, БПМ-195

Содержание

1	Введение	2
1.1	Одномерная модель Изинга	2
1.2	Статсумма цепи Изинга общего случая ($h, J \neq 0$) : периодич. гран. условия и Трансфер-матрица	2
1.3	Диагонализация Трансфер-матрицы	3
1.4	Статсумма цепи Изинга общего случая ($h, J \neq 0$) : открытые гран. условия	3
1.5	Итоги	4
2	Средняя намагниченность случая $h = 0$	5
2.1	Периодические гран. условия	5
2.2	Открытые гран. условия	5
2.3	Магнитная восприимчивость	6
3	Средняя энергия	7
3.1	Проверка случая $J = 0$	7
3.2	Случай $h = 0$	8
3.3	Сравнение средней энергии моделей с периодичным и открытым гран. условиями	8
4	Теплоёмкость на спин при $h = 0$	9
4.1	Открытое гран. условие	9
4.2	Периодическое гран. условие	10
5	Свободная энергия	11
6	Разница между открытым и периодичным случаем	12
6.1	Средняя энергия системы (равное число спинов)	12
6.2	Средняя энергия системы (равное число рёбер)	13
6.3	Теплоёмкость системы (равное число рёбер)	13
6.4	Квадрат намагниченности системы (равное число рёбер)	14
7	Поведение модели Изинга вблизи крит. температуры	15
7.1	Расчёты крит. экспонент при наблюдении коллапса данных	16
7.2	Определение погрешностей измерений экспонент	16
8	Расчёт критических кумулянтов для модели прямоугольного Изинга	18

1 Введение

1.1 Одномерная модель Изинга

Модель Изинга представляет собой решетку, в узлах которой расположены магнитные моменты, направленные "вверх" или "вниз" чему соответствует значение "спина" на j -ом месте в решетке.

$$\sigma_j = \pm 1$$

Энергией взаимодействия внешнего поля с моделью будем считать сумму взаимодействий поля h с каждым из N моментов со спином σ_j

$$H_h = - \sum_{j=1}^N h \sigma_j \quad (1.1)$$

Внутренним взаимодействием между двумя соседними моментами считаем:

$$H_J = - \sum_{(i,j)} J \sigma_i \sigma_j \quad (1.2)$$

Тогда Гамильтонианом системы из N спинов будет:

$$H = -h \sum_{j=1}^N \sigma_j - J \sum_{(i,j)} (\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \dots + \sigma_{N-1} \sigma_N) \quad (1.3)$$

1.2 Статсумма цепи Изинга общего случая $(h, J \neq 0)$: периодич. гран. условия и Трансфер-матрица

Для поиска решения данного случая воспользуемся методом **трансфер-матриц**.

Для начала перепишем формулу (1.3) в другой форме:

$$H = -\frac{h}{2} \sum_{j=1}^N (\sigma_j + \sigma_{j+1}) - J \sum_{j=1}^N \sigma_j \sigma_{j+1} \quad (1.4)$$

Учитывая периодические гран. условия $(\sigma_{N+1} = \sigma_1)$, то формулы (1.3) и (1.4) тождественно равны.

Тогда статсумма такой модели будет равна:

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta H} = \sum_{\sigma} \prod_{j=1}^N \exp(\beta J \sigma_j \sigma_{j+1} + \frac{1}{2} \beta h (\sigma_j + \sigma_{j+1})) = \sum_{\sigma} \prod_{j=1}^N T(\sigma_j, \sigma_{j+1}) \quad (1.5)$$

Где $T(\sigma_j, \sigma_{j+1})$ - трансфер-матрица для двух соседних моментов. Поскольку один момент принимают лишь два значения (± 1) , а пара - уже четыре - $(1,1), (1,-1), (-1,1), (-1,-1)$ - то, их матрица представляет с собой матрицу с элементами, соответствующими этим парам значений:

$$T(\sigma_j, \sigma_{j+1}) = \begin{pmatrix} \exp(\beta J + \beta h) & \exp(-\beta J) \\ \exp(-\beta J) & \exp(\beta J - \beta h) \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

Если рассмотреть сумму произведений двух соседних матриц от $j-1$, j и $j+1$ внутри цепи при всевозможных значениях моментов, мы получим:

$$\sum_{\sigma=\pm 1} T(\sigma_{j-1}, \sigma_j) T(\sigma_j, \sigma_{j+1}) = T^2(\sigma_{j-1}, \sigma_{j+1})$$

1.3 Диагонализация Трансфер-матрицы

Попробуем диагонализировать Трансфер-матрицу ($T = RT^D R^{-1}$), тогда полное произведение матриц будет:

$$\sum_{\sigma} \prod_j^N T(\sigma_j, \sigma_{j+1}) = R(T^D)^N R^{-1}(\sigma_1, \sigma_{N+1} = \sigma_1)$$

Диагонализированная матрица будет выглядеть как:

$$T^D = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

$$(T^D)^N = \begin{pmatrix} \lambda_+^N & 0 \\ 0 & \lambda_-^N \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

Найдём собственные значения λ_{\pm} и их собственные вектора:

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J} \cosh(\beta h) \pm Q$$

$$Q = \sqrt{e^{2\beta J} \cosh^2(\beta h) - 2 \sinh(2\beta J)}$$

$$R = \begin{pmatrix} e^{\beta J} \lambda_{+2} & e^{\beta J} \lambda_{-2} \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

$$R^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2e^{\beta J} Q} & 1 - \frac{\lambda_{+2}}{2Q} \\ -\frac{1}{2e^{\beta J} Q} & \frac{\lambda_{+2}}{2Q} \end{pmatrix} \quad (1.10)$$

$$\lambda_{\pm 2} = e^{\beta J} \sinh(\beta h) \pm Q$$

Эти формулы понадобятся нам позднее.

Поскольку нам нужен инвариантный след данной матрицы, т.к. матрица зависит от одного элемента, то достаточно $Z = Tr(T^D)^N$

Таким образом:

$$Z_{PBC} = \lambda_+^N + \lambda_-^N \quad (1.11)$$

1.4 Статсумма цепи Изинга общего случая ($h, J \neq 0$) : открытые гран. условия

Расчёт статсуммы в данном случае сложнее, т.к. система не замкнута, и крайние значения не имеют внутреннего взаимодействия между собой. Попробуем воспользоваться формулой (1.4) с корректировкой под открытые условия:

$$H = -\frac{h}{2} \sum_{j=1}^{N-1} (\sigma_j + \sigma_{j+1}) - J \sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j \sigma_{j+1} - \frac{h}{2} (\sigma_1 + \sigma_N) \quad (1.12)$$

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta H} = \sum_{\sigma} \prod_{j=1}^{N-1} \exp(\beta J \sigma_j \sigma_{j+1} + \frac{1}{2} \beta h (\sigma_j + \sigma_{j+1})) \exp(\frac{1}{2} \beta h (\sigma_1 + \sigma_N)) =$$

$$= \sum_{\sigma} \prod_{j=1}^{N-1} T(\sigma_j, \sigma_{j+1}) T'(\sigma_1, \sigma_N)$$

Где $T'(\sigma_1, \sigma_N)$ - трансфер-матрица для крайних моментов. От ранее рассмотренных матриц она отличается отсутствием внутреннего взаимодействия, поэтому она представима в виде:

$$T(\sigma_1, \sigma_N) = \begin{pmatrix} \exp(\beta h) & 1 \\ 1 & \exp(-\beta h) \end{pmatrix}$$

К полному произведению применимы те же рассуждения, что и в периодическом случае: воспользовшись диагонализацией трансфер-матрицы T , мы получим:

$$Z = \sum_{\sigma} \prod_j^{N-1} T(\sigma_j, \sigma_{j+1}) T'(\sigma_1, \sigma_N) = R(T^D)^{N-1} R^{-1} T'(\sigma_1, \sigma_N)$$

Просуммировав элементы матрицы, полученной из данного произведения, мы получим:

$$Z_{OBC} = \lambda_+^{N-1} \left(\frac{e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q} + \frac{1}{e^{\beta J} Q} + \cosh \beta h \right) - \lambda_-^{N-1} \left(\frac{e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q} + \frac{1}{e^{\beta J} Q} - \cosh \beta h \right) \quad (1.13)$$

1.5 Итоги

Нам известна статсумма модели для общего случая:

$$Z_{PBC} = \lambda_+^N + \lambda_-^N$$

- для периодического граничного условия

$$Z_{OBC} = \lambda_+^{N-1} \left(\frac{e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q} + \frac{1}{e^{\beta J} Q} + \cosh \beta h \right) - \lambda_-^{N-1} \left(\frac{e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q} + \frac{1}{e^{\beta J} Q} - \cosh \beta h \right)$$

- для открытого погран. случая, где

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J} \cosh(\beta h) \pm Q$$

$$Q = \sqrt{e^{2\beta J} \cosh^2(\beta h) - 2 \sinh(2\beta J)}$$

2 Средняя намагниченность случая $h = 0$

По предыдущим расчетам мы знаем формулу ср. намагниченности, с самого начала считая $J = 0$. С одной стороны, по определению среднего:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{ZN} \int S e^{-\beta H}, H = -h \sum_{j=1}^N \sigma_j = -hS \quad (2.1)$$

где S - сумма всех моментов в цепи. С другой стороны:

$$\frac{1}{ZN} \int S e^{-\beta H} = \frac{\partial \text{Log}[Z_{J=0}]}{\partial h} \frac{1}{\beta N} = \frac{1}{Z\beta N} \frac{\partial Z}{\partial h} \quad (2.2)$$

В этом случае Z берется сразу при условии ($J = 0$), её гамильтонианом для N спинов при периодичном и открытом гран. условии будет (1.1), а статсуммой будет формула (30.8) при (30.10) из учебника Свендсена [1]:

$$Z_{J=0} = (2 \cosh \beta h)^N \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial Z}{\partial h} = \beta N 2^N (\cosh \beta h)^{N-1} \sinh \beta h \quad (2.4)$$

Следовательно, при подстановке в (2.2), получим:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{Z\beta N} \frac{\partial Z}{\partial h} = \tanh(\beta h) \quad (2.5)$$

Применим эту операцию для статсуммы общего случая. Для упрощения задачи будем рассматривать случай $h = 0$.

2.1 Периодичные гран. условия

Перед этим для простоты найдём производные всех составляющих статсумм:

$$(Q)'_h = \frac{1}{2\sqrt{e^{2\beta J} \cosh(\beta h)^2 - 2 \sinh(2\beta J)}} (e^{2\beta J} 2 \cosh(\beta h) \sinh(\beta h) \beta) \quad (2.6)$$

и при ($h = 0$) = 0

Тогда:

$$(\lambda_{\pm})'_h = e^{\beta J} \sinh(\beta h) \beta \pm (Q)'_h \quad (2.7)$$

и при ($h = 0$) так же = 0

Таким образом:

$$\langle \sigma_{PVC} \rangle = \frac{1}{Z\beta N} \frac{\partial Z}{\partial h} = \frac{1}{Z\beta N} (N \lambda_+^{N-1} (\lambda_+)'_h + \lambda_-^{N-1} (\lambda_-)'_h) = 0 \quad (2.8)$$

2.2 Открытые гран. условия

Найдём дополнительные значения составляющих Z_{OVC}

$$Q_{h=0} = e^{-\beta J}$$

Также найдём значения λ_{\pm} при $h = 0$

$$\lambda_{\pm(h=0)} = e^{\beta J} \pm \sqrt{e^{2\beta J} - (e^{2\beta J} - e^{-2\beta J})} = e^{\beta J} \pm e^{-\beta J} \quad (2.9)$$

Тогда $\lambda_{+(h=0)} = 2 \cosh \beta J$ и $\lambda_{-(h=0)} = 2 \sinh \beta J$

Рассмотрим производную Z_{OVC} по h , учитывая дифференцирование произведения и все полученные ранее результаты ((2.6), (2.7), (2.9))

$$\begin{aligned} \frac{\partial Z}{\partial h} = & \lambda_+^{N-1} \left(\frac{e^{\beta J} 2 \sinh \beta h \cosh \beta h \beta Q - (Q)'_h e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q^2} - \frac{(Q)'_h}{e^{\beta J} Q^2} + \beta \sinh \beta h \right) - \\ & - \lambda_-^{N-1} \left(\frac{e^{\beta J} 2 \sinh \beta h \cosh \beta h \beta Q - (Q)'_h e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q^2} - \frac{(Q)'_h}{e^{\beta J} Q^2} - \beta \sinh \beta h \right) =_{h=0} 0 \quad (2.10) \end{aligned}$$

Следовательно, $\langle \sigma_{OBC} \rangle = 0$

2.3 Магнитная восприимчивость

Мы выяснили, что средняя намагниченность одномерной цепи при любом гран. условии равна нулю. Рассмотрим в таком случае магнитную восприимчивость $X = \frac{\partial \langle m \rangle}{\partial h}$

Учитывая формулу намагниченности (2.1) и то, что первая производная статсуммы (2.10) равна нулю:

$$X = \left(\frac{1}{Z\beta} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)'_h = \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial Z}{\partial \beta} \left(-\frac{1}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right) + \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial h^2} \right) = \frac{1}{Z\beta} \frac{\partial^2 Z}{\partial h^2}$$

После расчётов, представленных в .nb файле (раздел 21.10.2020 (поиск X)) получим:

$$X = \frac{\beta}{2} (2N e^{2\beta J} - e^{4\beta J} + 1) + \frac{\beta}{2} \tanh^{N-1} \beta J (e^{4\beta J} - 2e^{2\beta J} + 1)$$

Подстановка $T = 0, \infty$ приведёт к одинаковому результату и обратной зависимости от T , что говорит о парамагнетических свойствах одномерной модели Изинга.

3 Средняя энергия

Чтобы удостовериться в правильности полученной формулы для статсуммы общего случая открытого гран. условия (1.13), проверим её на предельных условиях ($h = 0$, $J = 0$), поскольку они были рассмотрены в учебнике [1].

Нам известна формула средней энергии:

$$\langle U \rangle = -\frac{\partial \text{Log}[Z]}{\partial \beta} = \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \quad (3.1)$$

Предварительно будет нелишним найти значения составных частей формулы и их производных по β

$$\begin{aligned} \lambda'_{\pm} &= e^{\beta J} J \cosh \beta h + e^{\beta J} \sinh \beta h \, h \pm \\ &\pm \frac{1}{Q} (e^{2\beta J} J \cosh \beta h + e^{2\beta J} \cosh \beta h \sinh \beta h \, h - \cosh 2\beta J \, 2J) \end{aligned}$$

В виду большого числа различных значений, составим таблицу всех составных значений в формуле.

	λ_+	$(\lambda_+)'_{\beta}$	λ_-	$(\lambda_-)'_{\beta}$	Q	$(Q)'_{\beta}$
$h = 0$	$2 \cosh \beta J$	$2J \sinh \beta J$	$2 \sinh \beta J$	$2J \cosh \beta J$	$e^{-\beta J}$	$-J e^{-\beta J}$
$J = 0$	$2 \cosh \beta h$	$2h \sinh \beta h$	0	0	$\cosh \beta h$	$h \sinh \beta h$

Таблица 1: Производные составных значений статсумм

3.1 Проверка случая $J = 0$

Теперь можно перейти к проверке по предельным случаям.

$$Z_{OBC}(h = 0) = 2^{N-1} \cosh \beta J^{N-1} (0 + 1 + 1) - 2^{N-1} \sinh \beta J^{N-1} (0 + 1 - 1) = 2^N \cosh \beta J^{N-1}$$

$$\begin{aligned} Z_{OBC}(J = 0) &= 2^{N-1} \cosh \beta h^{N-1} \left(\frac{(\sinh \beta h)^2 + 1}{\cosh \beta h} + \cosh \beta h \right) = \\ &= 2^{N-1} \cosh \beta h^{N-1} \left(\frac{(\cosh \beta h)^2}{\cosh \beta h} + \cosh \beta h \right) = \\ &= 2^N \cosh \beta h^N \end{aligned}$$

Как и ожидалось, статсуммы совпали с расчетами учебника [1], что говорит о правильности формулы. Чтобы сильнее убедиться в этом, найдём формулы средней энергии.

Для $J = 0$ заранее учтём, что правое слагаемое формулы статсуммы и её производной обнулится:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Z}{\partial \beta} &= \lambda_+^{N-1} \left(\frac{e^{\beta J} \sinh \beta h ((J \sinh \beta h + 2h \cosh \beta h) Q - (Q)'_{\beta} \sinh \beta h)}{Q^2} - \right. \\ &\left. - \frac{JQ + (Q)'_{\beta}}{e^{\beta J} Q^2} + h \sinh \beta h \right) + \lambda_+^{N-2} (\lambda_+)'_{\beta} (N-1) \left(\frac{e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q} + \frac{1}{e^{\beta J} Q} + \cosh \beta h \right) \end{aligned}$$

При подстановке $J=0$ мы получим $2^N (\cosh \beta h)^{N-1} N \sinh \beta h$

И в конечном счёте формула средней энергии системы при $J=0$:

$$\langle U_{J=0} \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -N h \tanh \beta h$$

Данная формула полностью совпадает с расчётами в учебнике [1], что говорит о правильности формулы для статсуммы обобщенного случая.

3.2 Случай $h = 0$

Из проделанных ранее расчётов для средней энергии системы при случае $h = 0$, используя соответствующую статсумму, мы получили следующую формулу:

$$\langle U_{h=0} \rangle = -J(N-1) \tanh \beta J$$

Попробуем вывести ту же формулу через статсумму общего случая.

Начнём со статсуммы:

$$Z_{OBC}(h=0) = \lambda_+^{N-1}(0+1+1) - \lambda_-^{N-1}(0+1-1) = 2^N (\cosh \beta J)^{N-1}$$

Поскольку формула производной статсуммы увеличится в два раза из-за ненулевых λ_- и $(\lambda_-)'_\beta$ рассмотрим их сомножители, заранее учитывая их отличие лишь в знаке правого $\cosh \beta h$. Назовём их A_+ и A_- .

Так, при подстановке в производную как $+$, так и $-$ $h=0$ получим ноль. А при подстановке $h=0$ в сами сомножители, получим:

$$A_{+(h=0)} = 2$$

$$A_{-(h=0)} = 0$$

Таким образом, наша формула $\frac{\partial Z}{\partial \beta}_{h=0}$ сократилась в 4 раза и равна:

$$\frac{\partial Z}{\partial \beta}_{h=0} = (N-1) \lambda_+^{N-2} (\lambda_+)'_\beta 2 = J(N-1) 2^N (\cosh \beta J)^{N-1} \sinh \beta J$$

Итоговая формула средней энергии будет:

$$\langle U_{h=0} \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -J(N-1) \tanh \beta J$$

3.3 Сравнение средней энергии моделей с периодичным и открытым гран. условиями

Найдём формулу средней энергии для случая с периодичным гран. условием для $h = 0$. Воспользовавшись формулой (1.11) для нахождения средней энергии через (3.1) и таблицей производных, получим:

$$\begin{aligned} \langle E_{PBC(h=0)} \rangle &= \frac{1}{Z_{PBC}(h=0)} \left(N \lambda_+^{N-1} (\lambda_+)'_\beta + N \lambda_-^{N-1} (\lambda_-)'_\beta \right) = \\ &= JN 2^N \sinh \beta J \cosh \beta J \frac{(\cosh \beta J)^{N-2} + (\sinh \beta J)^{N-2}}{(\cosh \beta J)^N + (\sinh \beta J)^N} = \\ &= JN 2^N \tanh \beta J \frac{1 + (\tanh \beta J)^{N-2}}{1 + (\tanh \beta J)^N} \approx JN 2^N \tanh \beta J \end{aligned}$$

$$\frac{1 + (\tanh x)^{N-2}}{1 + (\tanh x)^N} = \frac{1 + x^N \left(\frac{1}{x^2} + \left(\frac{2}{3} - \frac{n}{3} \right) + O(x) \right)}{1 + x^N \left(1 - \frac{nx^2}{3} + O(x^3) \right)} \approx 1, \quad x \rightarrow 0, \quad 1, \quad x \rightarrow \infty$$

4 Теплоёмкость на спин при $h = 0$

Теперь, поскольку наша формула статсуммы Z_{OBC} (для крайних случаев) и её производная (для средних наблюдаемых) полностью верна, проверим правильность статсуммы до второй производной по β для нахождения теплоёмкости на спин S в случае нулевого поля.

4.1 Открытое гран. условие

Из учебника данная формула выглядит следующим образом:

$$c = \frac{1}{N} \frac{\partial U}{\partial T} = -\frac{1}{N k_B T^2} \frac{\partial U}{\partial \beta} \approx k_B \beta^2 J^2 (\text{sech} \beta J)^2 \quad (4.1)$$

Предыдущие вычисления уже показали правильность формулы средней энергии, однако для более полной проверки выразим U через статсумму, и следовательно:

$$-\frac{1}{N k_B T^2} \frac{\partial U}{\partial \beta} = -k_B \beta^2 \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(-\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right) = k_B \beta^2 \frac{1}{N} \left(-\frac{1}{Z^2} \left(\frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 + \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \right)$$

Теперь для определения второй производной статсуммы перейдём к той же замене, как в конце предыдущего раздела:

$$\begin{aligned} Z_{OBC} &= \lambda_+^{N-1} A_+ - \lambda_-^{N-1} A_- \\ (Z_{OBC})'_\beta &= (N-1) \lambda_+^{N-2} (\lambda_+)'_\beta A_+ + \lambda_+^{N-1} (A_+)'_\beta - (N-1) \lambda_-^{N-2} (\lambda_-)'_\beta A_- - \lambda_-^{N-1} (A_-)'_\beta \end{aligned}$$

Т.к. мы знаем, что первые производные $(A_\pm)'_\beta = 0$ и $A_- = 0, A_+ = 2$, то половина второй производной (вследствие производной произведения) обнулится. Будет лучше заранее найти значения вторых производных A и λ_\pm при $h = 0$.

$$\begin{aligned} (A_\pm)''_{\beta=h=0} &= 0 \\ (\lambda_\pm)''_{\beta=h=0} &= J^2 (e^{\beta J} \pm e^{-\beta J}) \end{aligned}$$

Таким образом, единственным необнулённым слагаемым второй производной будет первое и:

$$\begin{aligned} Z_{OBC} &= 2 \lambda_+^{N-1} \\ (Z_{OBC})'_\beta &= 2(N-1) \lambda_+^{N-2} (\lambda_+)'_\beta \\ (Z_{OBC})''_\beta &= 2(N-1) ((N-2) \lambda_+^{N-3} (\lambda_+)'_\beta{}^2 + \lambda_+^{N-2} (\lambda_+)'_\beta'') \end{aligned}$$

Раскрыв все λ_+ и подставив в формулу теплоёмкости на спин, получим:

$$\begin{aligned} c &= k_B \beta^2 \left(1 - \frac{1}{N} \right) \left(-(N-1) \left(\frac{(\lambda_+)'_\beta}{\lambda_+} \right)^2 + (N-2) \left(\frac{(\lambda_+)'_\beta}{\lambda_+} \right)^2 + \frac{(\lambda_+)'_\beta''}{\lambda_+} \right) = \\ &= k_B \beta^2 J^2 \left(1 - \frac{1}{N} \right) \left(1 - \left(\frac{\sinh \beta J}{\cosh \beta J} \right)^2 \right) \approx k_B \beta^2 J^2 (\text{sech} \beta J)^2 \end{aligned}$$

Формулы полностью совпали.

4.2 Периодическое гран. условие

Формула теплоёмкости на спин для данного условия отсутствует в учебнике, поэтому сравнить полученный результат с первоисточником не получится и к вычислениям данной формулы требуется особое внимание.

Начнём с формулы статсуммы:

$$Z_{PBC} = \lambda_+^N + \lambda_-^N = \lambda_+^N (1 + (\frac{\lambda_+}{\lambda_-})^N) =_{h=0} 2^N (\cosh \beta J)^N (1 + (\tanh \beta J)^N)$$

$$(Z_{PBC})'_\beta = N(\lambda_+^{N-1}(\lambda_+)'_\beta + \lambda_-^{N-1}(\lambda_-)'_\beta) = JN2^N (\cosh \beta J)^{N-1} \sinh \beta J (1 + (\tanh \beta J)^{N-2})$$

$$\begin{aligned} (Z_{PBC})''_\beta &= N(\lambda_+^{N-1}(\lambda_+)'')_\beta + (N-1)\lambda_+^{N-2}(\lambda_+)'_\beta{}^2 + \lambda_-^{N-1}(\lambda_-)'')_\beta + (N-1)\lambda_-^{N-2}(\lambda_-)'_\beta{}^2 = \\ &= 2^N NJ^2 (\cosh \beta J)^N (1 + (N-1)(\tanh \beta J)^2 + (N-1)(\tanh \beta J)^{N-2} + \tanh \beta J) \end{aligned}$$

Прошлые расчёты показали, что формула теплоёмкости на спин выражается через статсумму как:

$$c = \frac{k_B \beta^2}{N} \left(-\frac{1}{Z^2} \left(\frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 + \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \right)$$

В таком случае, при подстановке статсуммы и производных, мы получим:

$$c = k_B \beta^2 J^2 \left(1 + (N-1) \tanh^2 \beta J \left(\frac{1 + \tanh^{N-4} \beta J}{1 + \tanh^N \beta J} \right) - N \tanh^2 \beta J \left(\frac{1 + \tanh^{N-2} \beta J}{1 + \tanh^N \beta J} \right)^2 \right)$$

В случае термодинамического предела, все дроби вида $\frac{1+\tanh}{1+\tanh}$ стремятся к единице (есть небольшое отклонение, которое при увеличении N смещается вправо и одновременно уменьшается. Тогда в итоге:

$$c = k_B \beta^2 J^2 \operatorname{sech}^2 \beta J$$

5 Свободная энергия

Учитывая предыдущие вычисления, будет удобно проверить формулу другой величины - свободной энергии для случая $h = 0$. Для этого слегка преобразуем нашу статсумму:

$$Z_{OBC} = \lambda_+^{N-1} A_+ (1 - (\frac{\lambda_-}{\lambda_+})^{N-1} (\frac{A_-}{A_+}))$$

где

$$A_+ = \frac{e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q} + \frac{1}{e^{\beta J} Q} + \cosh \beta h$$
$$A_- = \frac{e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q} + \frac{1}{e^{\beta J} Q} - \cosh \beta h$$

Тогда свободная энергия для случая $h=0$ будет равна:

$$F_{h=0} = k_B T \ln Z = k_B (N-1) \ln \lambda_+ + k_B T \ln A_+ + k_B T \ln (1 - (\frac{\lambda_-}{\lambda_+})^{N-1} (\frac{A_-}{A_+}))$$

Ранее мы узнали все преобразования при $h = 0$: $A_+ = 2$, $A_- = 0$, следовательно:

$$F_{h=0} = k_B T (N-1) \ln (2 \cosh \beta J) + k_B T \ln 2$$

Результаты снова совпали с формулой из учебника [1].

Тогда руководствуясь предыдущими расчётами для случая $J=0$, свободная энергия для данного случая (зная, что $\lambda_+ = 2 \cosh \beta h$, $\lambda_- = 0$, $A_+ = 2 \cosh \beta h$) будет равна:

$$F_{J=0} = k_B T N \ln (2 \cosh \beta h)$$

6 Разница между открытым и периодичным случаем

Будем рассматривать разность между различными энергетическими величинами при разных случаях.

6.1 Средняя энергия системы (равное число спинов)

Найдём разность средней энергии открытого и периодичного случая:

$$\langle U_{OBC} \rangle - \langle U_{PBC} \rangle = -\frac{\partial \text{Log}[Z_{OBC}]}{\partial \beta} + \frac{\partial \text{Log}[Z_{PBC}]}{\partial \beta} = -\frac{\partial \text{Log}[\frac{Z_{OBC}}{Z_{PBC}}]}{\partial \beta} \quad (6.1)$$

$$\frac{Z_{OBC}}{Z_{PBC}} = \frac{A_+ \left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1} \frac{A_-}{A_+}\right)}{\lambda_+ \left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\right)}$$

$$A_{\pm} = \frac{e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q} + \frac{1}{e^{\beta J} Q} \pm \cosh \beta h$$

Учитывая что мы рассматриваем системы при $N \rightarrow \infty$, все скобки вида $\text{Log}[1 + (<1)^N] \approx (<1)^N$
Тогда

$$\langle U_{OBC} \rangle - \langle U_{PBC} \rangle = -\frac{\partial (\text{Log}[\frac{Z_{OBC}}{Z_{PBC}}])}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left(\text{Log}[\frac{A_+}{\lambda_+}] + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1} \left(\frac{A_-}{A_+} - \frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right) + o\left(\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1}\right) \right) \quad (6.2)$$

Перед тем, как продолжить расчёты, стоит заранее найти производные отношений $\frac{\lambda_-}{\lambda_+}$ и $\frac{A_-}{A_+}$.
Тогда производная их частного будет выглядеть как:

$$\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)'_{\beta} = \frac{(\lambda_-)'_{\beta} \lambda_+ - \lambda_- (\lambda_+)'_{\beta}}{\lambda_+^2}$$

Все значения для крайних случаев можно легко взять из нашей таблицы.

$$h = 0 : \frac{J}{\cosh^2 \beta J}$$

$$J = 0 : 0$$

Теперь перейдём к A_{\pm} . Поскольку они имеют одинаковые слагаемые, отличающиеся по знаку, то для упрощения можно представить их как:

$$A_{\pm} = A_0 \pm \cosh \beta h$$

Тогда при дифференцировании частного половина слагаемых в числителе сократится, а другая сложится:

$$\begin{aligned} \left(\frac{A_-}{A_+}\right)'_{\beta} &= \frac{(A_-)'_{\beta} A_+ - A_- (A_+)'_{\beta}}{A_+^2} = \frac{(A'_0 - h \sinh \beta h)(A_0 + \cosh \beta h) - (A_0 - \cosh \beta h)(A'_0 + h \sinh \beta h)}{A_+^2} = \\ &= 2 \frac{A'_0 \cosh \beta h - A_0 h \sinh \beta h}{A_+^2} \end{aligned}$$

Формулу A'_0 и значения A_{\pm} для предельных значений можно взять из расчётов производной статсуммы и средней энергии. При предельных случаях производная частного A_- и A_+ обращается в ноль.

Теперь вернёмся к формуле (6.2) и продифференцируем всю скобку по β

$$\langle U_{OBC} \rangle - \langle U_{PBC} \rangle = -\frac{(A_+)'_{\beta}}{A_+} + \frac{(\lambda_+)'_{\beta}}{\lambda_+} + N \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1} \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)'_{\beta} - (N-1) \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-2} \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)'_{\beta} \left(\frac{A_-}{A_+}\right) - \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1} \left(\frac{A_-}{A_+}\right)'_{\beta} \quad (6.3)$$

Рассмотрим все значения и значения производных по β λ_+ и A_+ при $h = 0$ и $J = 0$ из таблицы. Путём подстановки в полученную формулу производной (6.3), получим:

$$h = 0 : J + JN \frac{(\tanh \beta J)^{N-1}}{(\cosh \beta J)^2} \approx_{N \rightarrow \infty} J^2$$

$$J = 0 : 0$$

6.2 Средняя энергия системы (равное число рёбер)

Рассмотрим теперь случай с равным числом рёбер - он достигается при сравнении моделей с периодическим гран. условием с N спинами и с открытым гран. условием с $N+1$ спинами, тогда формула (6.2) станет:

$$\langle U_{OBC} \rangle - \langle U_{PBC} \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left(\text{Log}[A_+] + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N \left(\frac{A_-}{A_+} - 1\right) + o\left(\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\right) \right) \quad (6.4)$$

Все дополнительные расчёты производных мы сделали в предыдущем подразделе, поэтому перейдём к изменённой формуле, аналогичной (6.3), и затем сразу к предельным случаям:

$$\langle U_{OBC} \rangle - \langle U_{PBC} \rangle = -\frac{(A_+)'_{\beta}}{A_+} - N \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1} \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)'_{\beta} \left(\frac{A_-}{A_+} - 1\right) - \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N \left(\frac{A_-}{A_+}\right)'_{\beta} \quad (6.5)$$

$$h = 0 : JN \frac{(\tanh \beta J)^{N-1}}{(\cosh \beta J)^2} \approx_{N \rightarrow \infty} 0$$

$$J = 0 : -h \tanh \beta h$$

6.3 Теплоёмкость системы (равное число рёбер)

Формулу для теплоёмкости системы возьмём из (4.1) без деления на N :

$$c = \frac{\partial U}{\partial T} = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial U}{\partial \beta} = \frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial^2 \text{Log}[Z]}{\partial \beta^2} \quad (6.6)$$

Так как мы рассматриваем случай равных рёбер, то как и в прошлый раз, возьмём систему из N спинов для модели с периодическим гран. условием и систему из $N+1$ спинов для модели с открытым гран. условием - таким образом мы получим вторую производную знакомого нам выражения из формулы (6.4):

$$c_{OBC}^{N+1} - c_{PBC}^N = \frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \text{Log}\left[\frac{Z_{OBC}}{Z_{PBC}}\right] = \frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \left(\text{Log}[A_+] + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N \left(\frac{A_-}{A_+} - 1\right) + o\left(\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\right) \right) \quad (6.7)$$

Рассмотрим первые два слагаемых выражения в скобках по отдельности, чтобы не запутаться в расчётах:

$$(\text{Log}[A_+])''_{\beta} = \frac{(A_+)'_{\beta}}{A_+} - \left(\frac{(A_+)'_{\beta}}{A_+}\right)^2$$

$$\left(\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N \left(\frac{A_-}{A_+} - 1\right)\right)''_{\beta} =$$

2

$$\frac{(\tanh x)^{N-1}}{(\cosh x)^2} = x^{N-1} + o(x^N) \approx 0, x \rightarrow 0$$

$$= \frac{\rightarrow 1}{\rightarrow \infty} \approx 0, x \rightarrow \infty$$

$$= N(N-1)\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-2}\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)'^2\left(\frac{A_-}{A_+} - 1\right) + N\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1}\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)''_{\beta}\left(\frac{A_-}{A_+} - 1\right) + 2N\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{N-1}\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)'_{\beta}\left(\frac{A_-}{A_+}\right)'_{\beta} + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\left(\frac{A_-}{A_+}\right)''_{\beta}$$

Все вспомогательные расчёты для предельных случаев были сделаны в Wolfram Mathematica (Проект2.pdf, Теплоёмкость) [2], поэтому пропустим этот шаг и перейдём к итоговым выражениям:

$$h = 0 : -N(N-1)J^2 \frac{(\tanh \beta J)^{N-2}}{(\cosh \beta J)^2}$$

$$J = 0 : 0$$

6.4 Квадрат намагниченности системы (равное число рёбер)

Формула среднего квадрата намагниченности во многом схожа с формулой теплоёмкости при предельных случаях. С одной стороны, по определению средней наблюдаемой величины, квадрат намагниченности представима в виде:

$$\langle M^2 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} M^2 e^{-\beta H}, \quad (6.8)$$

где H - гамильтониан системы (1.3).

С другой стороны:

$$\frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} M^2 e^{-\beta H} = \frac{1}{\beta^2} \left(\frac{\partial^2 \log Z}{\partial h^2} + \left(\frac{\partial \log Z}{\partial h} \right)^2 \right) = \langle M^2 \rangle \quad (6.9)$$

Правое слагаемое в скобке является квадратом средней намагниченности, который при предельных случаях равна нулю, поэтому нам достаточно только левого. Это значит, что в формуле разности будет то же самое выражение под знаком дифференцирования, что и в формулах (6.4) и (6.7). Опять же, мы берём $N+1$ спин для открытого условия, и N для периодического. Тогда:

$$\langle M_{OBC}^2 \rangle - \langle M_{PBC}^2 \rangle = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2}{\partial h^2} \text{Log} \left[\frac{Z_{OBC}}{Z_{PBC}} \right] = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2}{\partial h^2} \left(\text{Log}[A_+] + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \left(\frac{A_-}{A_+} - 1 \right) + o\left(\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right) \right) \quad (6.10)$$

Воспользуемся расчётами Wolfram Mathematica (Проект2.pdf, Квадрат намагниченности), и получим:

$$h = 0 : \frac{1}{2}(2e^{2\beta J} - e^{4\beta J} + 1) + 2N(\tanh \beta J)^N - 2e^{2\beta J}(\sinh \beta J)^2(\tanh \beta J)^N$$

$$J = 0 : 1 - (\tanh \beta J)^2$$

7 Поведение модели Изинга вблизи крит. температуры

Критическая область - одна из сложнейших областей для изучения поведения любой термодинамической модели, как для теоретическим, так и экспериментальным способом. В частности, есть предположение, что модель Изинга вблизи крит. температуры показывает схожесть в поведении с фазовым переходом жидкой/парообразной системы в области тройной точки, что даёт интересный повод для изучения данной области и расчётов критических экспонент с помощью симуляций Монте-Карло.

Определим приведённую температуру t как "расстояние" от критической температуры:

$$t = \frac{T - T_C}{T_C} \quad (7.1)$$

T - текущая температура модели, T_C - критическая температура. Тогда корреляционная длина при термодинамическом пределе (системе бесконечной длины) в критической области будет:

$$\xi \sim |t|^{-\nu} \quad (7.2)$$

где ν - критическая экспонента

Также мы можем определить другие экспоненты - к примеру, в нормальной модели Изинга определяются экспоненты γ , α и β для магнитной восприимчивости, теплоёмкости и намагниченности соответственно:

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \quad (7.3)$$

$$c \sim |t|^{-\alpha} \quad (7.4)$$

$$m \sim |t|^{-\beta} \quad (7.5)$$

Рассмотрим случай квадрата намагниченности:

$$m^2 \sim |t|^{-2\beta} \quad (7.6)$$

Воспользовавшись (7.2), избавимся от t :

$$m^2 \sim \xi^{2\beta/\nu} \quad (7.7)$$

учитывая поведение корреляционной длины в конечноразмерных системах (книга "Monte Carlo Methods in Statistical Physics график 4.1 и стр. 232-233) [3], мы можем представить функцию квадрата намагниченности в виде:

$$m^2 = \xi^{-2\beta/\nu} m_{02}(L/\xi) \quad (7.8)$$

Где L - размер системы (для квадратной решётки кол-во спинов = $L * L$)
 m_{02} обладает следующими свойствами:

$$\begin{aligned} m_{02}(x) &= C, \quad x \gg 1 \\ m_{02}(x) &\sim x^{-2\beta/\nu}, \quad x \rightarrow 0 \end{aligned}$$

Так как (7.8) содержит неизвестную нам корреляционную длину, преобразуем её с новой безразмерной функцией:

$$\tilde{m}_{02}(x) = x^{-2\beta} m_{02}(x^\nu) \quad (7.9)$$

Тогда получим:

$$m^2 = L^{-2\beta/\nu} \tilde{m}_{02}(L^{1/\nu} |t|) \quad (7.10)$$

7.1 Расчёты крит. экспонент при наблюдении коллапса данных

Для того, чтобы найти крит. экспоненты β и ν , а также крит. температуру модели, достаточно определить, при каких их значениях графики шкалирующих функций \tilde{m}_{02} для разных размеров L системы сливаются к как можно более однородному графику. Для этого значение шкал. функции рассчитывается из (7.10):

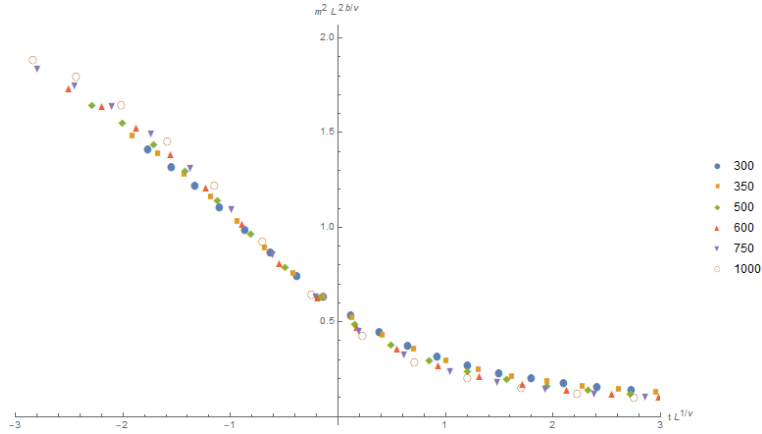
$$\tilde{m}_{02} = L^{-2\beta/\nu} m_L^2(t) \quad (7.11)$$

В случае квадрата намагниченности наилучший коллапс данных наблюдался при:

$$T_C = 1.1976$$

$$\beta = 0.12$$

$$\nu = 1.01$$



7.2 Определение погрешностей измерений экспонент

Разумеется, поскольку мы не можем численно определить качество коллапса данных, а лишь визуально определить при каких значениях он будет лучше, необходимо задать погрешность - область значений критических экспонент и температур, при которых качество коллапса данных наблюдаемой величины при измерении "на глаз" не меняется.

Таким образом, мы уточняем возможные критические значения для сравнения с расчётов в других источниках, для определения модели по её поведению.

Для начала рассмотрим погрешность измерений критической температуры при зафиксированных значениях крит. экспонент, взятых из лекций Янке [4]: $\beta = 1/8$, $\nu = 1$

Последующие изменения значения крит. температуры вне данных граничных значений приводят к заметному разветвлению графиков и, следовательно, к ухудшению качества коллапса данных.

Теперь рассмотрим погрешность для экспоненты при фиксированных T_c и β ($T_c = 1.195$)

Изменение ν ведёт к тому, что коллапс данных наблюдается всё дальше и дальше от области критической температуры. Крайние значения для β , в свою очередь:

(Рекомендуется оставить один вид графиков и трёх предложенных)

Таким образом, крит. экспоненты и температура имеют вид:

$$T_C = 1.195 \pm 0.005$$

$$\beta = 0.12 \pm 0.01$$

$$\nu = 1.00 \pm 0.05$$

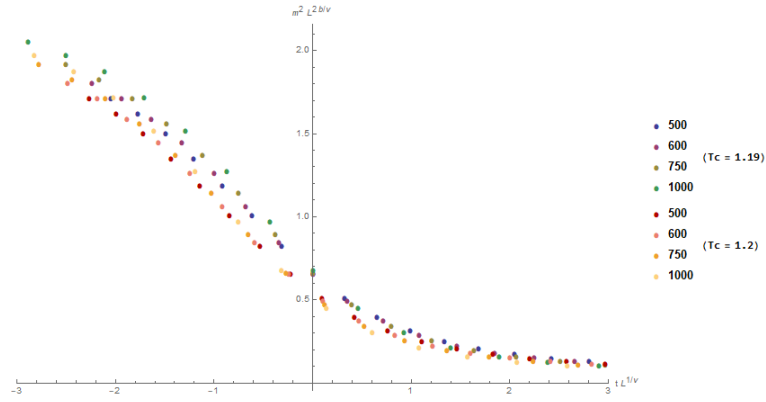


Рис. 1: Графики масштабирующих функций при найденных крайних значениях критической температуры для решеток со сторонами 500-1000

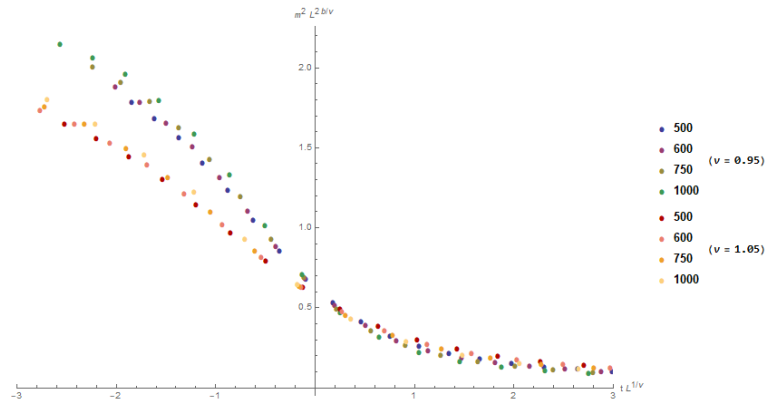


Рис. 2: Графики масштабирующих функций при найденных крайних значениях критической экспоненты ν для решеток со сторонами 500-1000

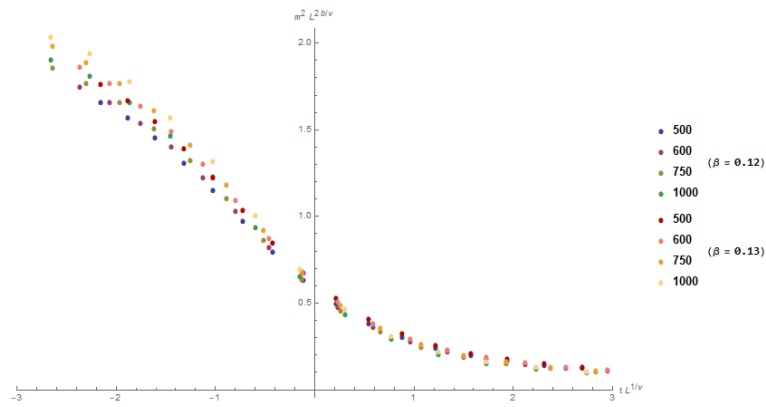


Рис. 3: Графики масштабирующих функций при найденных крайних значениях критической экспоненты β для решеток со сторонами 500-1000

8 Расчёт критических кумулянтов для модели прямоугольного Изинга

Кумулянт Биндера для модели Изинга в критической точке рассчитывается по формуле:

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3 * (\langle m^2 \rangle)^2} \quad (8.1)$$

где $\langle m^2 \rangle$ - средний квадрат удельной намагниченности, $\langle m^4 \rangle$ - средняя удельная намагниченность в четвертой степени.

Для сравнения значения кумулянтов модели прямоугольного Изинга с разными размерами, но одинаковым отношением сторон (так же Aspect Ratio или r), так, что число спинов составляет $L * rL$ были проведены симуляции модели на основе алгоритма из проектной работы Сорокина Никиты [5] и Камиллы Файзулиной [6] - для этого были взяты длины 50, 100, 200 и 400 и отношения сторон 1/4, 1/2, 3/4 при $2 * 10^6$ итераций.

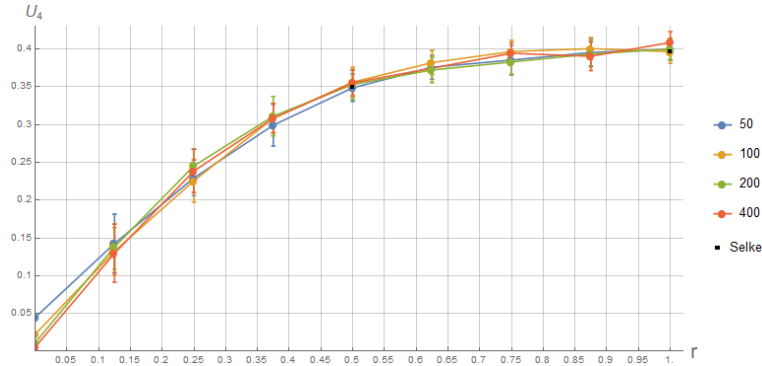


Рис. 4: График зависимости значения кумулянта Биндера в крит. точке от Aspect Ratio при открытых граничных условиях

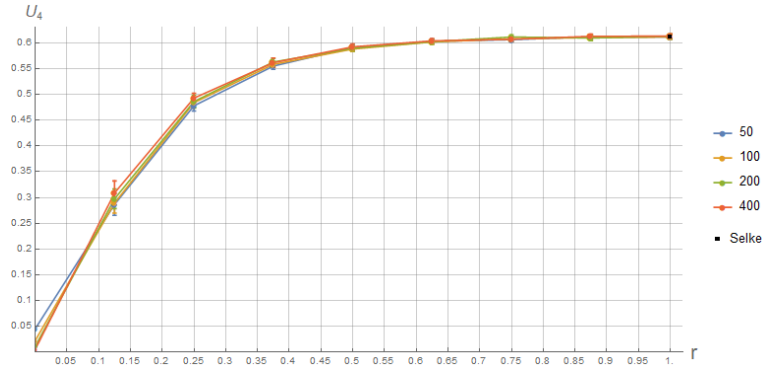


Рис. 5: График зависимости значения кумулянта Биндера в крит. точке от Aspect Ratio при периодических граничных условиях

Крайние левые точки в отметке нуля являются расчётами для модели одномерного Изинга (где длина цепочки равна соответствующей стороне в двумерном изинге). Так, в случае открытых граничных условий (рис. 4) и периодических (рис. 5) значения кумулянта стремятся к нулю с увеличением длины цепочки (см. Проект6.pdf [2]). Черными точками отмечены значения критического кумулянта из работы Уолтера Сельке - 0.396 ± 0.002 для квадратной модели и 0.349 ± 0.002 для прямоугольной с отношением сторон $r = 1/2$ при открытых граничных условиях. Для периодического случая квадратной модели критический кумулянт равен 0.61069 [7].

Эти же значения отмечены в графиках 6 и 7 зависимости крит. кумулянта от обратной длины стороны как крайние левые (в нуле - так обозначен случай термодинамического предела).

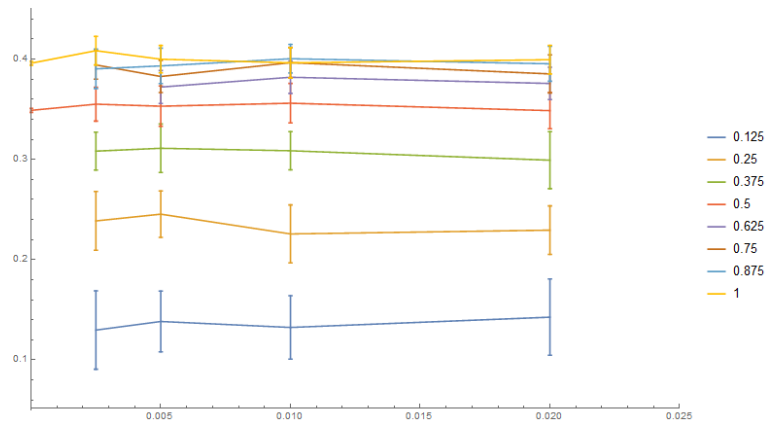


Рис. 6: График зависимости значения кумулянта Биндера в крит. точке от обратной длины стороны при открытых гран. условиях

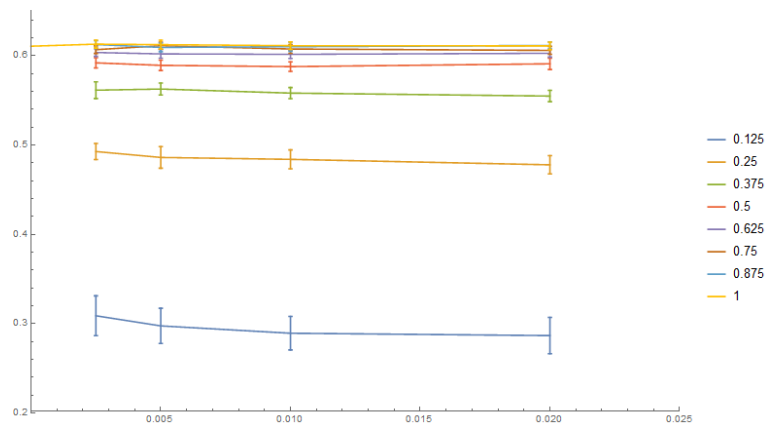


Рис. 7: График зависимости значения кумулянта Биндера в крит. точке от обратной длины стороны при периодических гран. условиях

Учитывая погрешность в расчётах симуляций, зависимость от обратной длины прямоугольника $1/L$ не наблюдается.

Список литературы

- [1] Swendsen R. An introduction to statistical mechanics and thermodynamics. – Oxford University Press, USA, 2020.
- [2] Github Repository: Chpel/ProjectMagnet (<https://github.com/Chpel/ProjectMagnet>)
- [3] M. E. J. Newman, G. T. Barkema Monte Carlo Methods in Statistical Physics - Clarendon Press, 1999.
- [4] Wolfhard Janke Monte Carlo Methods in Classical Statistical Physics (from Lecture Notes in Physics - Springer) - Institut für Theoretische Physik and Centre for Theoretical Sciences, Universität Leipzig, 04009 Leipzig, Germany
- [5] Github Repository: ShroedingerCat/Self-learning-Monte-carlo-algorithms (<https://github.com/ShroedingerCat/Self-learning-Monte-carlo-algorithms>)
- [6] Github Repository: kamilla0503/SAWs (<https://github.com/kamilla0503/SAWs>)
- [7] W. Selke Critical Binder cumulant of two-dimensional Ising models - Institut für Theoretische Physik, Technische Hochschule RWTH Aachen, 52056 Aachen, Germany