Проект 20-21

Ilya Pchelintsev

1 Вступление

Нам известна статсумма модели для общего случая:

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

- для периодичного граничного условия

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

- для открытого погран. случая, где

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

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

2 Средняя намагнинченность случая h = 0

По предыдущим расчетам мы знаем формулу ср. намагниченности, с самого начала считая J = 0:

$$< \sigma >= \frac{\delta Log[Z_{J=0}]}{\delta h} * \frac{1}{\beta N} = \frac{1}{Z\beta N} * \frac{\delta Z}{\delta h} = \tanh(\beta h)$$

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

2.1 Периодичный пограничный случай

Перед этим для простоты найдём производные всех составляющих статсумм:

$$(Q)_h' = \frac{1}{2\sqrt{E^{2\beta J} * \cosh(\beta h)^2 - 2\sinh(2\beta J)}} * \left(E^{2\beta J} * 2 * \cosh(\beta h) * \sinh(\beta h) * \beta\right)$$

и при (h = 0) = 0

Тогда:

$$(\lambda_\pm)_h' = E^{\beta J} * \sinh(\beta h) * \beta \pm (Q)_h'$$

и при (h = 0) так же = 0

Таким образом:

$$< \sigma_{PBC} >= \frac{1}{Z * \beta * N} * \frac{\delta Z}{\delta h} = \frac{1}{Z * \beta * N} * \left(N * \lambda_+^{N-1} * (\lambda_+)_h' + *\lambda_-^{N-1} * (\lambda_-)_h'\right) = 0$$

2.2 Открытый пограничный случай

Найдём дополнительные значения составляющих Z_{OBC}

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

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

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

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

Рассмотрим производную Z_{OBC} по h, учитывая дифференцирование произведения и все полученные ранее результаты

$$\frac{\delta Z}{\delta h} = \lambda_{+}^{N-1}(\frac{e^{\beta J} 2\sinh \beta h \cosh \beta h * \beta * Q - (Q)_{h}^{'} e^{\beta J} \sinh \beta h^{2}}{Q^{2}} - \frac{(Q)_{h}^{'}}{e^{\beta J} Q^{2}} + \beta \sinh \beta h) -$$

$$-\lambda_{-}^{N-1}(\frac{e^{\beta J} 2\sinh \beta h \cosh \beta h * \beta * Q - (Q)_{h}^{'} e^{\beta J} \sinh \beta h^{2}}{Q^{2}} - \frac{(Q)_{h}^{'}}{e^{\beta J} Q^{2}} - \beta \sinh \beta h) =_{h=0} 0$$

2.3 Магнитная восприимчивость

Из прошлых расчетов, мы выяснили, что средняя намагниченность одномерной цепи при любом погран. условии равна нулю. Рассмотрим в таком случае магнитную восприимчивость $X = \frac{\delta \langle m \rangle}{\delta h}$

Учитывая формулу намагниченности и то, что первая производная статсуммы равна нулю:

$$X = (\frac{1}{Z\beta} \frac{\delta Z}{\delta \beta})_{h}^{'} = \frac{1}{\beta}(\frac{\delta Z}{\delta \beta}(-\frac{1}{Z^{2}} \frac{\delta Z}{\delta \beta}) + \frac{1}{Z} \frac{\delta^{2} Z}{\delta h^{2}}) = \frac{1}{Z\beta} \frac{\delta^{2} Z}{\delta h^{2}}$$

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

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

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, проверим её на крайних условиях (h = 0, J = 0), поскольку они были рассмотрены в учебнике именно при открытом гран. условии.

Нам известна формула средней энергии:

$$< U >= -\frac{\delta Log[Z]}{\delta \beta} = \frac{1}{Z} \frac{\delta Z}{\delta \beta}$$

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

$$\lambda_{\pm}^{'} = E^{\beta J} * J * \cosh \beta h + E^{\beta J} * \sinh \beta h * h \pm$$

$$\pm \frac{1}{Q} * (E^{2\beta J} * J * \cosh \beta h + E^{2\beta J} * \cosh \beta h * \sinh \beta h * h - \cosh 2\beta J * 2J)$$

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

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

3.1 Проверка случая J = 0

Теперь можно перейти к проверке по крайним случаям.

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

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

$$= 2^{N-1}\cosh\beta h^{N-1}(\frac{(\cosh\beta h)^2}{\cosh\beta h}+\cosh\beta h) =$$

$$= 2^N\cosh\beta h^N$$

Как и ожидалось, статсуммы совпали, 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:

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

$$-\frac{JQ+(Q)'_\beta}{e^{\beta J}Q^2}+h\sinh\beta h)+\lambda_+^{N-2}(\lambda_+)'_\beta(N-1)(\frac{E^{\beta J}\sinh\beta h^2}{Q}+\frac{1}{E^{\beta J}Q}+\cosh\beta h)$$

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:

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

Даннная формула полностью совпадает с расчётами в учебнике, 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 статсумму крайнего случая, 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 A_- 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 $\frac{\delta Z}{\delta \beta}_{h=0}$ уменьшилась в 4 раза и равна:

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

Итоговая формула средней энергии будет:

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

Расчёты снова совпали.

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 темплоёмкости на спин C в случае нулевого поля.

4.1 Открытое гран. условие

Из учебника данная формула выглядит следующим образом:

$$c = \frac{1}{N}\frac{\delta U}{\delta T} = -\frac{1}{Nk_BT^2}\frac{\delta U}{\delta \beta} \approx k_B\beta^2J^2(sech\beta J)^2$$

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

$$-\frac{1}{Nk_BT^2}\frac{\delta U}{\delta \beta} = -k_B\beta^2\frac{1}{N}\frac{\delta}{\delta\beta}(-\frac{1}{Z}\frac{\delta Z}{\delta \beta}) = k_B\beta^2\frac{1}{N}(-\frac{1}{Z^2}(\frac{\delta Z}{\delta\beta})^2 + \frac{1}{Z}\frac{\delta^2 Z}{\delta\beta^2})$$

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

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

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 $\lambda_\pm$ при h = 0.

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

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

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

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

$$c = k_B\beta^2(1-\frac{1}{N})(-(N-1)(\frac{(\lambda_+)'_\beta}{\lambda_+})^2 + (N-2)(\frac{(\lambda_+)'_\beta}{\lambda_+})^2 + \frac{(\lambda_+)''_\beta}{\lambda_+}) =$$

$$= k_B\beta^2J^2(1-\frac{1}{N})(1-(\frac{\sinh\beta J}{\cosh\beta J})^2) \approx k_B\beta^2J^2(sech\beta J)^2$$

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:

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

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

$$(Z_{PBC})''_\beta = N(\lambda_+^{N-1}(\lambda_+)''_\beta) + (N-1)\lambda_+^{N-2}{(\lambda_+)'_\beta}^2 + \lambda_-^{N-1}(\lambda_-)''_\beta) + (N-1)\lambda_-^{N-2}{(\lambda_-)'_\beta}^2) =$$

$$= 2^N NJ^2(\cosh\beta J)^N(1 + (N-1)(\tanh\beta J)^2 + (N-1)(\tanh\beta J)^{N-2} + \tanh\beta J)$$

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

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

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

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

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:

$$c = k_B\beta^2 J^2 sech^2\beta J$$

5 Свободная энергия

Учитывая предыдущие вычисления, будет удобно проверить формулу другой величины - свободной энергии дл я 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.

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:

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

6 Разница между открытым и периодичным случаем

Будем рассматривать разность между различными энергетическими величинами при разных случаев.

6.1 Средняя энергия системы

Найдём разность средней энергии открытого и периодичного случая:

$$< U_{OBC} > - < U_{OBC} >= -\frac{\delta Log[Z_{OBC}]}{\delta\beta} + \frac{\delta Log[Z_{PBC}]}{\delta\beta} = -\frac{\delta Log[\frac{Z_{OBC}}{Z_{PBC}}]}{\delta\beta}$$

Где $\frac{Z_{OBC}}{Z_{PBC}} = \frac{\left(E^{\beta J} * \lambda_{+2} + 1\right)^2 * \left(1 + (\frac{\lambda_-}{\lambda_+})^{N-1} * \frac{E^{\beta J} * \lambda_{-2} + 1}{E^{\beta J} * \lambda_{+2} + 1}\right)^2}{\lambda + * (1 + (\frac{\lambda_-}{\lambda_+})^N}$

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

$$< U_{OBC} > - < U_{PBC} >= -\frac{\delta(Log[\frac{Z_{OBC}}{Z_{PBC}}])}{\delta\beta} = -\frac{\delta Log[\frac{(E^{\beta J} * \lambda_{+2} + 1)^2}{\lambda +}] + O((\frac{\lambda_-}{\lambda_+})^{N-1})}{\delta\beta}$$

Здесь не имеет значения рассматривать правое слагаемое, т.к. при
$N \to \infty$ оно останется бесконечно малой.
Рассмотрим все значения и значения производных по β λ_+ и λ_{+2} при
h = 0 и J = 0
Путём подстановки в полученную формулу производной (ПОТОМ ДОБАВЛЮ), получим:
При $h = 0 : =$ -J
При $J = 0 := -(2h(\frac{E^{\beta h}}{1+E^{\beta h}} - h\tanh[\beta h])$