Проект 20-21

Ilya Pchelintsev

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

$$H_h = -\sum_{j=1}^{N} h\sigma_j \tag{1.1}$$

Внутренним взаимодействией между двумя соседними моментами считаем:

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

Тогда Гамильтонианом системы из N спинов будет:

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

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:

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

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

Тогда статсумма такой модели будет равна:

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

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:

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

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:

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

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

Найдём собственные значения $\lambda_\pm$ и их собственные вектора:

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

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

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

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

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

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:

$$Z_{PBC} = \lambda_+^N + \lambda_-^N \tag{1.11}$$

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 с собой. Попробуем воспользоваться формулой (1.4) с корректировкой под открытые условия:

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

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

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

Где $T'(\sigma_1, \sigma_N)$ - трансфер-матрица для крайних моментов. От ранее расмотренных 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:

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

1.5 Итоги

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. С одной стороны, по определению среднего:

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

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

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

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]:

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

$$\frac{\partial Z}{\partial h}_{j=0} = \beta N 2^N(\cosh\beta h)^{N-1}\sinh\beta h \tag{2.4}$$

Следовательно, при подстановке в (2.2), получим:

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

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:

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

и при (h = 0) = 0
Тогда:

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

и при (h = 0) так же = 0
Таким образом:

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

2.2 Открытые гран. условия

Найдём дополнительные значения составляющих Z_{OBC}
$Q_{h=0} = e^{-\beta J}$
Также найдём значения $\lambda_\pm$ при h = 0

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

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 ((2.6), (2.7), (2.9))

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

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

2.3 Магнитная воприимчивость

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:

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

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

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

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 (1.13), проверим её на предельных условиях (h = 0, J = 0), поскольку они были рассмотрены в учебнике [1].

Нам известна формула средней энергии:

$$\langle U \rangle = -\frac{\partial Log[Z]}{\partial \beta} = \frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta} \tag{3.1}$$

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	$\cosh \beta h$	$h \sinh \beta h$

Таблица 1: Производные составных значений статсумм

3.1 Проверка случая J = 0

Теперь можно перейти к проверке по предельным случаям.

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

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

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

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

Как и ожидалось, статсуммы совпали 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:

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

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

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:

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

Даннная 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 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 $\frac{\partial Z}{\partial \beta}_{h=0}$ 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:

$$\begin{aligned}
\langle E_{PBC(h=0)} \rangle = \frac{1}{Z_{PBC}(h=0)} \left(N\lambda_+^{N-1}(\lambda_+)_\beta^{'} + N\lambda_-^{N-1}(\lambda_-)_\beta^{'} \right) = \\
= JN2^N \sinh \beta J \; \cosh \beta J \frac{(\cosh \beta J)^{N-2} + (\sinh \beta J)^{N-2}}{(\cosh \beta J)^N + (\sinh \beta J)^N} = \\
= JN2^N \tanh \beta J \frac{1 + (\tanh \beta J)^{N-2}}{1 + (\tanh \beta J)^N} \approx {}^{1} JN2^N \tanh \beta J
\end{aligned}$$

[1]

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

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 темплоёмкости на спин С в случае нулевого поля.

4.1 Открытое гран. условие

Из учебника данная формула выглядит следующим образом:

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

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

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

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:

$$Z_{OBC} = 2\lambda_+^{N-1}$$

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

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

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:

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

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

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

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

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

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

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

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

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:

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

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 [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 случаев.

6.1 Средняя энергия системы (равное число спинов)

Найдём разность средней энергии открытого и периодичного случая:

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

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

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

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

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

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

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

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:

$$(\frac{A_-}{A_+})'_\beta = \frac{(A_-)'_\beta A_+ - A_-(A_+)'_\beta}{A_+^2} = \frac{(A_0' - h\sinh\beta h)(A_0+\cosh\beta h) - (A_0-\cosh\beta h)(A_0'+h\sinh\beta h)}{A_+^2} =$$

$$= 2\frac{A_0'\cosh\beta h - A_0 h\sinh\beta h}{A_+^2}$$

Формулу A_0' и значения $A_\pm$ для предельных значении 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

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

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:

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

$$J = 0 : 0$$

6.2 Средняя энергия системы (равное число рёбер)

Рассмотрим теперь случай с равным числом ребёр - 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:

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

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

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

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

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

6.3 Теплоёмкость системы (равное число рёбер)

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

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

Так как мы рассматриваем случай равных ребёр, 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):

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

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

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

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

[2]

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

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

Все вспомогательные расчёты для предльных 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 намагничесности представима в виде:

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

где H - гамильтониан системы (1.3).

С другой стороны:

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

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:

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

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:

$$t = \frac{T - T_C}{T_C} \tag{7.1}$$

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

$$\xi \sim\mid t \mid^{-\upsilon} \tag{7.2}$$

где υ - критическая экспонента

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

$$\chi \sim\mid t \mid^{-\gamma} \tag{7.3}$$

$$c \sim\mid t \mid^{-\alpha} \tag{7.4}$$

$$m \sim\mid t \mid^{-\beta} \tag{7.5}$$

Рассмотрим случай квадрата намагниченности:

$$m^2 \sim\mid t \mid^{-2\beta} \tag{7.6}$$

Воспользовавшись (7.2), избавимся от t:

$$m^2 \sim \xi^{2\beta/\upsilon} \tag{7.7}$$

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:

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

Где L - размер системы (для квадратной решётки кол-во спинов = L * L)

m_{02} обладает следующими свойствами:

$$\begin{aligned} m_{02}(x) &= C, \;\; x >> 1 \\ m_{02}(x) &\sim x^{-2\beta/\upsilon}, \;\; x \to 0 \end{aligned}$$

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

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

Тогда получим:

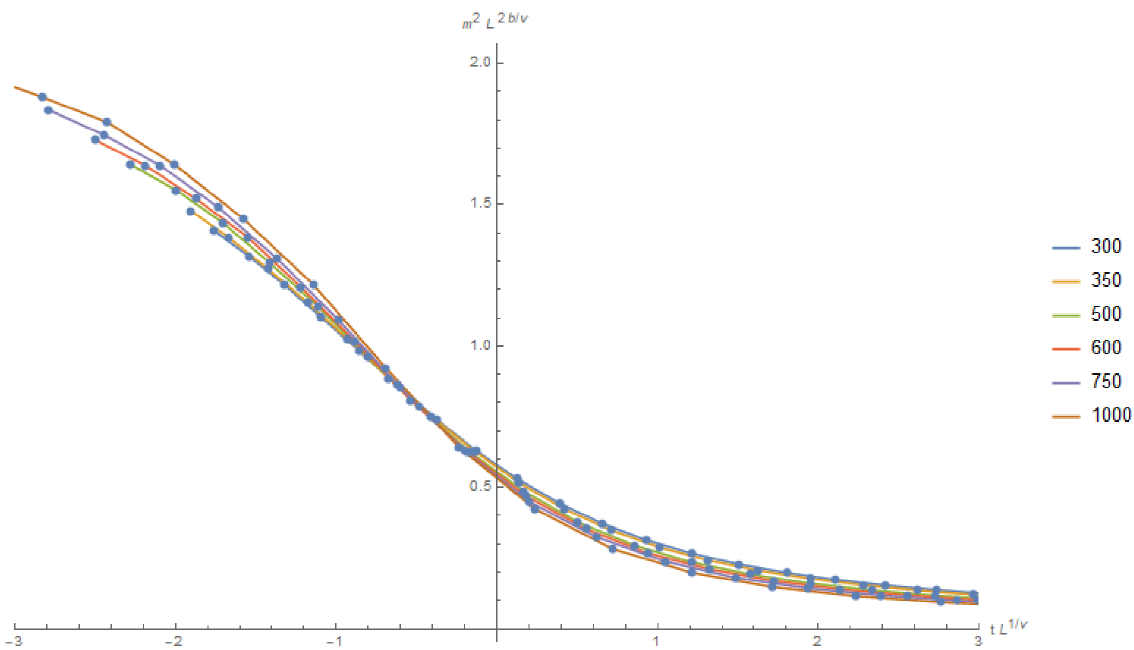
$$m^2 = L^{-2\beta/\upsilon} \tilde{m}_{02}(L^{1/\upsilon}|t|) \tag{7.10}$$

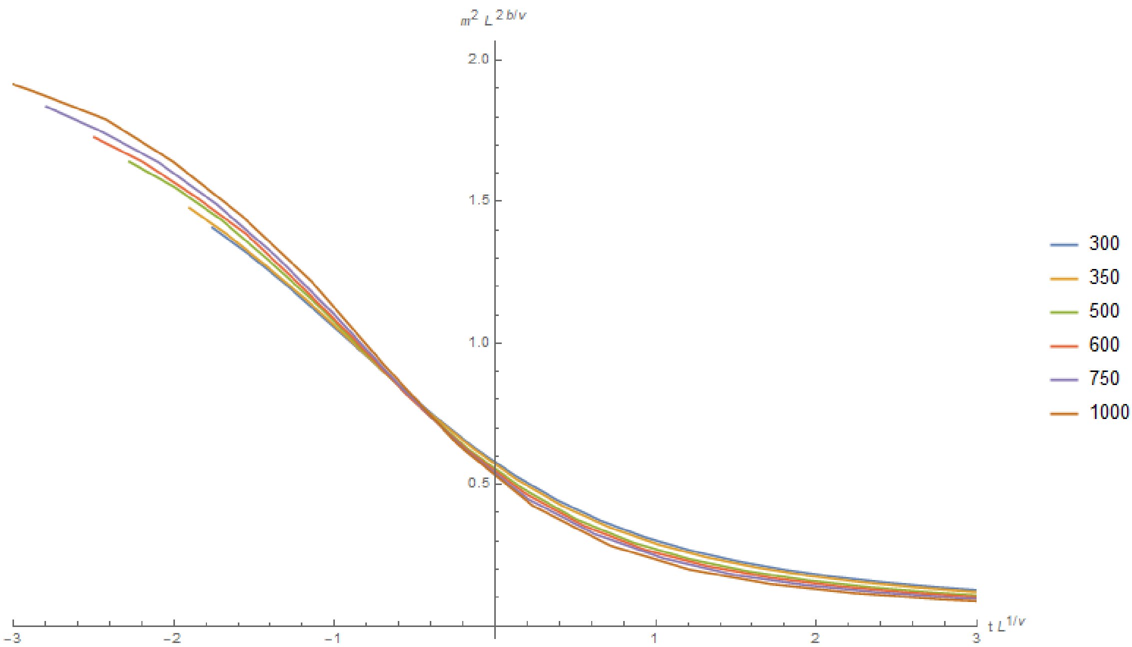
Для того, чтобы найти крит. экспоненты β и υ, а также крит. температуру модели, достаточно определить, при каких их значениях графики шкалирующих функций $\tilde{m}_{02}$ для разных размеров L системы сливаются к как можно более однородному графику. Для этого значение шкал. функции расчитывается из (7.10):

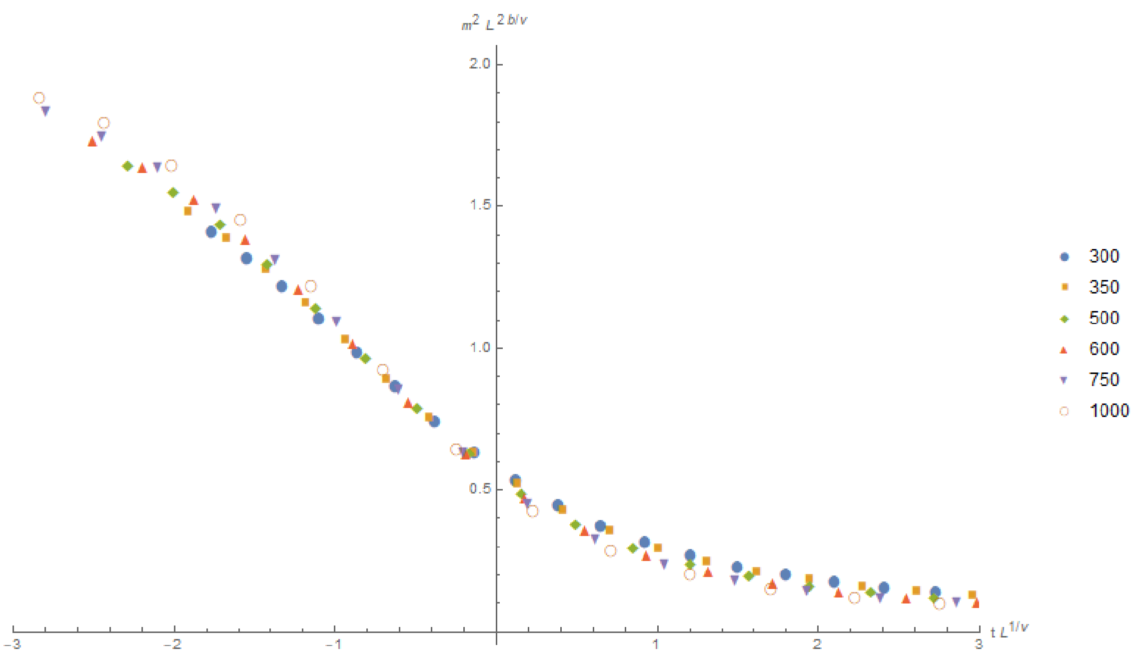
$$\tilde{m}_{02} = L^{-2\beta/\upsilon} m_L^2(t) \tag{7.11}$$

В случае квадрата намагниченности наилучший коллапс данных наблюдался при:

$$T_C = 1.1976$$
$$\beta = 0.12$$
$$\upsilon = 1.01$$




$m^2\ L^{2\,b/v}$
2.0
1.5
1.0
0.5
−3
−2
−1
1
2
3
$t\ L^{1/v}$
300
350
500
600
750
1000


$m^2\ L^{2\,b/v}$
2.0
1.5
1.0
0.5
−3
−2
−1
1
2
3
$t\ L^{1/v}$
300
350
500
600
750
1000

Список литературы

[1] Swendsen R. An introduction to statistical mechanics and thermodynamics. – Oxford University Press, USA, 2020.

[2] Github Repository: Chpel/ProjectMagnet

[3] M. E. J. Newman, G. T. Barkema Monte Carlo Methods in Statistical Physics - Clarendon Press, 1999.