

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

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

Внутренним взаимодействием между двумя соседними моментами считаем:

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

Тогда Гамильтонианом системы будет:

$$H = -h \sum_{j=1}^N \sigma_j - J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j \quad (1.1)$$

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 (1.1) в другой форме:

$$H = -\frac{h}{2} \sum_{j=1}^N (\sigma_j + \sigma_{j+1}) - J \sum_{j=1}^N \sigma_j \sigma_{j+1} \quad (1.2)$$

Учитывая периодические гран. условия ($\sigma_{N+1} = \sigma_1$), то формулы (1.1) и (1.2) тождественно равны.

Тогда статсумма такой модели будет равна:

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta H} = \sum_{\sigma} \prod_{j=1}^N \exp(\beta J \sigma_j \sigma_{j+1} + \frac{1}{2} \beta h (\sigma_j + \sigma_{j+1})) = \sum_{\sigma} \prod_{j=1}^N T(\sigma_j, \sigma_{j+1}) \quad (1.3)$$

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:

$$T(\sigma_j, \sigma_{j+1}) = \begin{pmatrix} \exp(\beta J + \beta h) & \exp(-\beta J) \\ \exp(-\beta J) & \exp(\beta J - \beta h) \end{pmatrix} \quad (1.4)$$

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:

$$T^D = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} \quad (1.5)$$

$$(T^D)^N = \begin{pmatrix} \lambda_+^N & 0 \\ 0 & \lambda_-^N \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

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

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

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

$$R = \begin{pmatrix} e^{\beta J} \lambda_{+2} & e^{\beta J} \lambda_{-2} \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

$$R^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2e^{\beta J} Q} & 1 - \frac{\lambda_{+2}}{2Q} \\ -\frac{1}{2e^{\beta J} Q} & \frac{\lambda_{+2}}{2Q} \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

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

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:

$$Z_{PBC} = \lambda_+^N + \lambda_-^N \quad (1.9)$$

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 (1.2) с корректировкой под открытые условия:

$$H = -\frac{h}{2} \sum_{j=1}^{N-1} (\sigma_j + \sigma_{j+1}) - J \sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j \sigma_{j+1} - \frac{h}{2} (\sigma_1 + \sigma_N) \quad (1.10)$$

$$\begin{aligned}
Z &= \sum_{\sigma} e^{-\beta H} = \sum_{\sigma} \prod_{j=1}^{N-1} \exp(\beta J \sigma_j \sigma_{j+1} + \frac{1}{2} \beta h (\sigma_j + \sigma_{j+1})) \exp(\frac{1}{2} \beta h (\sigma_1 + \sigma_N)) = \\
&= \sum_{\sigma} \prod_{j=1}^{N-1} T(\sigma_j, \sigma_{j+1}) T'(\sigma_1, \sigma_N)
\end{aligned}$$

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:

$$Z_{OBC} = \lambda_+^{N-1} \left(\frac{e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q} + \frac{1}{e^{\beta J} Q} + \cosh \beta h \right) - \lambda_-^{N-1} \left(\frac{e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q} + \frac{1}{e^{\beta J} Q} - \cosh \beta h \right) \quad (1.11)$$

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

$$\begin{aligned}
\lambda_{\pm} &= e^{\beta J} \cosh(\beta h) \pm Q \\
Q &= \sqrt{e^{2\beta J} \cosh(\beta h)^2 - 2 \sinh(2\beta J)}
\end{aligned}$$

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:

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

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

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

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:

$$(Q)'_h = \frac{1}{2\sqrt{e^{2\beta J} \cosh(\beta h)^2 - 2 \sinh(2\beta J)}} (e^{2\beta J} 2 \cosh(\beta h) \sinh(\beta h) \beta) \quad (2.3)$$

и при $(h = 0) = 0$

Тогда:

$$(\lambda_{\pm})'_h = e^{\beta J} \sinh(\beta h) \beta \pm (Q)'_h \quad (2.4)$$

и при $(h = 0)$ так же $= 0$

Таким образом:

$$\langle \sigma_{PBC} \rangle = \frac{1}{Z\beta N} \frac{\partial Z}{\partial h} = \frac{1}{Z\beta N} (N\lambda_+^{N-1}(\lambda_+)'_h + \lambda_-^{N-1}(\lambda_-)'_h) = 0 \quad (2.5)$$

2.2 Открытые гран. условия

Найдём дополнительные значения составляющих Z_{OBC}

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

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

$$\lambda_{\pm(h=0)} = e^{\beta J} \pm \sqrt{e^{2\beta J} - (e^{2\beta J} - e^{-2\beta J})} = e^{\beta J} \pm e^{-\beta J} \quad (2.6)$$

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 ((2.3), (2.4), (2.6))

$$\begin{aligned} \frac{\partial Z}{\partial h} = & \lambda_+^{N-1} \left(\frac{e^{\beta J} 2 \sinh \beta h \cosh \beta h \beta Q - (Q)'_h e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q^2} - \frac{(Q)'_h}{e^{\beta J} Q^2} + \beta \sinh \beta h \right) - \\ & - \lambda_-^{N-1} \left(\frac{e^{\beta J} 2 \sinh \beta h \cosh \beta h \beta Q - (Q)'_h e^{\beta J} \sinh \beta h^2}{Q^2} - \frac{(Q)'_h}{e^{\beta J} Q^2} - \beta \sinh \beta h \right) =_{h=0} 0 \end{aligned} \quad (2.7)$$

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 (2.7) 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 (1.11), 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

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

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:

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

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 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 (1.9) для нахождения средней энергии через (3.1) и таблицей производных, получим:

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

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 C в случае нулевого поля.

1

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

4.1 Открытое гран. условие

Из учебника данная формула выглядит следующим образом:

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

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

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

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

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

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

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 λ_\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:

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

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

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:

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

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

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

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

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

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

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:

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

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:

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

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

Найдём разность средней энергии открытого и периодического случая:

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

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

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

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

Здесь не имеет значения рассматривать правое слагаемое, т.к. при $N \rightarrow \infty$ оно останется бесконечно малой. Тогда формула примет вид

$$\langle U_{OBC} \rangle - \langle U_{PBC} \rangle = \frac{(A_+)'_{\beta}}{A_+} - \frac{(\lambda_+)'_{\beta}}{\lambda_+} \quad (6.1)$$

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 (6.1), получим:

При $h = 0 : = -J$

При $J = 0 : = 0$

Список литературы

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