

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

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

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:

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

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

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:

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

1.5 Итоги

Нам известна статсумма модели для общего случая:

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

- для периодичного граничного условия

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

- для открытого погран. случая, где

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

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:

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

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]:

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

$$\frac{\partial Z}{\partial h} \Big|_{h=0} = \beta N 2^N (\cosh \beta J)^{N-1} \sinh \beta J \quad (2.4)$$

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:

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

2.2 Открытые гран. условия

Найдём дополнительные значения составляющих Z_{OBC}

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

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

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

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))

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

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:

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

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:

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

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:

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

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:

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

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.

4.1 Открытое гран. условие

Из учебника данная формула выглядит следующим образом:

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

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

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

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:

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

1

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

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

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

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:

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

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:

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

где

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

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 (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:

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

$$= 2 \frac{A'_0 \cosh \beta h - A_0 h \sinh \beta h}{A_+^2}$$

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

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

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:

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

$$J = 0 : 0$$

Список литературы

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

$$\begin{aligned} \frac{(\tanh x)^{N-1}}{(\cosh x)^2} &= x^{N-1} + o(x^N) \approx 0, \quad x \rightarrow 0 \\ &= \frac{\rightarrow 1}{\rightarrow \infty} \approx 0, \quad x \rightarrow \infty \end{aligned}$$