Miniproyecto # 1. Densidad de Estados

Johans Restrepo Cárdenas

Instituto de Física. Universidad de Antioquia.

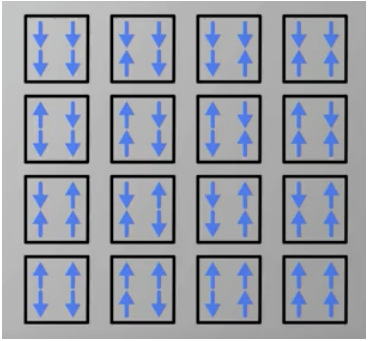
25 de agosto de 2023

Problema: Densidad de Estados

Considere inicialmente el problema de contar microestados, i.e. de conocer la dimensión de la suma que aparece en la expresión de la función partición canónica

$$Z(\beta, N) = \sum_r \exp(-\beta E_r(N))$$

para un modelo de Ising 2D donde los espines pueden estar en dos posibles estados $|\uparrow\rangle$ o $|\downarrow\rangle$. Ej.: La siguiente figura muestra las 2^4 configuraciones o microestados, para un sistema $N = 2 \times 2$. Cada configuración representa un r en la suma.



Problema: Densidad de Estados

Escriba un programa (comentado) para obtener todos los posibles microestados con sus correspondientes valores de energía según el siguiente Hamiltoniano de interacciones entre espínes primeros vecinos (con integral de intercambio $J = 1$)

$$\mathcal{H} = -\sum_{\langle k,l \rangle} \sigma_k \sigma_l$$

para sistemas $N = 2 \times 2, 4 \times 4, 6 \times 6$, etc. con **condiciones de frontera periódicas (p.b.c)**. Un ejemplo de lo que debe ser la salida (output) del programa se ilustra a continuación donde se muestran 5 microestados para un sistema con $N = 16$ espínes y en la columna final su correspondiente valor de energía.

```
-1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1 | -32
 1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1 | -24
 1,  1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1 | -20
-1,  1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1 | -24
-1,  1,  1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1 | -20
```

Figura: Nótese que cada configuración se distingue de la anterior en el cambio de signo de un solo sitio (Gray codes).

Problema: Densidad de Estados

Una forma de implementar las **p.b.c.** en Python es mediante el uso de diccionarios como se muestra a continuación. Si decide usarlo en el programa que debe adjuntar, es necesario entonces estudiar dicha implementación, entenderla y explicarla.

```
L = 2
N = L * L
nbr = {i : ((i // L) * L + (i + 1) % L, (i + L) % N,
            (i // L) * L + (i - 1) % L, (i - L) % N)
                                    for i in range(N)}
```

Calcule la densidad de estados $\Omega(E)$ agrupando los microestados por cantidad según el valor de la energía (degenerancia), como se muestra a continuación.

72	2
68	0
64	72
60	144
56	1620
52	6048
48	35148
44	159840
40	804078
36	3846576
32	17569080
28	71789328
24	260434986
20	808871328
16	2122173684
12	4616013408
8	8196905106
4	11674988208
0	13172279424
-4	11674988208
-8	8196905106
-12	4616013408
-16	2122173684
-20	808871328
-24	260434986
-28	71789328
-32	17569080
-36	3846576
-40	804078
-44	159840
-48	35148
-52	6048
-56	1620
-60	144
-64	72
-72	2
-68	0
-72	2

Construya varios gráficos de $\Omega(E)$ vs. E para al menos 10 valores diferentes de N, ajústelos a una Gaussiana e infiera el comportamiento de la desviación estándar de las Gaussianas en función de N. Qué concluye?

Problema: Densidad de Estados

- Con base en lo anterior demuestre la equivalencia entre la suma sobre estados de la función partición canónica y la suma sobre energías para un N dado y tres valores de β tomando $k_B = 1$ con $T =$2, 2.5 y 3:

$$Z(\beta) = \sum_{\sigma} \exp(-\beta E(\sigma)) = \sum_{E} \Omega(E) \exp(-\beta E)$$

- Para $N = 4 \times 4$, haga un barrido sobre un amplio rango de valores de β, para obtener una gráfica de $\langle E \rangle$ en función de T, usando $\langle E \rangle = -\partial \ln Z / \partial \beta$. Qué concluye?
- Demuestre numéricamente la siguiente relación vista en clase:

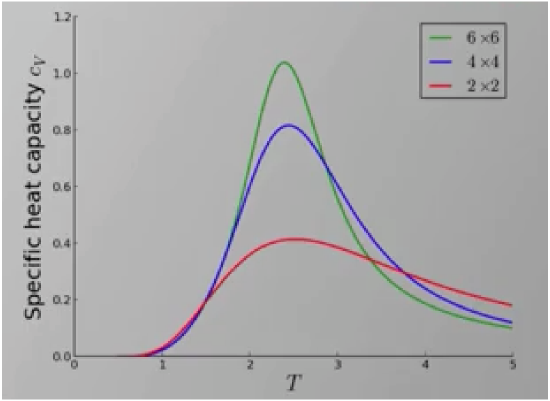
$$\sum_{E} \Omega(E) \exp(-\beta E) = \Omega(\bar{E}) \exp(-\beta \bar{E})$$

- Implemente en su programa el cálculo del calor específico:

$$c_V = \frac{\beta^2}{N} \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right)$$

usando la definición de promedios en el ensamble canónico para obtener curvas del calor específico en función de la temperatura como se muestran en la figura de la siguiente diapositiva.

Problema 1: Densidad de Estados



Los picos revelan la transición de un estado ferromagnético a uno paramagnético y la posición del pico se corresponde con la temperatura crítica o temperatura de Curie T_C. Compare $T_C(L)$ con el valor teórico $T_C(\infty)$ el cual debe averiguar y analice la dependencia de $T_C(L)$ con el tamaño y saque sus propias conclusiones.

Sobre el informe:

El informe en forma de artículo debe contener:

- Título
- Nombre autor, afiliación.
- Resumen y palabras claves.
- Introducción (de ejemplos de fenómenos que se pueden estudiar con el ensamble canónico)
- Marco teórico (haga alusión a los aspectos teóricos del problema: ensamble canónico, modelo de Ising, densidad de estados, función partición, distribución Gaussiana, desviación estándar.)
- Resultados y discusión (incluya las gráficas solicitadas).
- Conclusiones
- Bibliografía
- Agradecimientos

El informe en forma de artículo debe tener como anexo los códigos desarrollados con sus respectivos comentarios. Se debe enviar todo a johans.restrepo@udea.edu.co en un archivo .zip.