Miniproyecto # 2
2D Ising Model: Densidad de estados y función partición.

Johans Restrepo Cárdenas

Instituto de Física. Universidad de Antioquia.

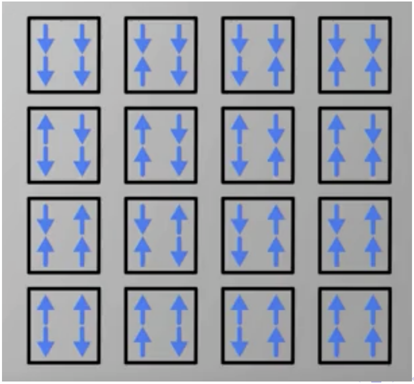
13 de julio de 2021

Planteamiento del problema.

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 $N = 2 \times 2$.



Planteamiento del problema.

Escriba un programa (con sus comentarios) que permita obtener todos los posibles microestados con sus correspondientes valores de energía según el siguiente Hamiltoniano de sistema el cual considera 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**. 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).

Planteamiento del problema.

Una forma de implementar las condiciones de frontera periódicas 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 $\Omega(E)$, i.e. agrupe 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 5 valores de N, ajústelos e infiera el comportamiento de la desviación estándar en función de N. Qué concluye?

Planteamiento del problema.

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 (ver figura en la siguiente diapositiva):

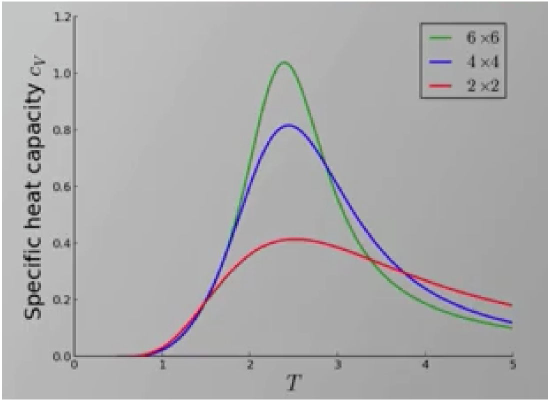
$$Z(\beta) = \sum_{\sigma} \exp(-\beta E(\sigma)) = \sum_{E} \Omega(E) \exp(-\beta E)$$

- 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 teóricamente la siguiente expresión del calor específico (a partir de su definición termodinámica) y de la definición de promedios en el ensamble canónico:

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

e impleméntela en su programa para obtener curvas del calor específico en función de la temperatura como se muestran en la figura de la siguiente diapositiva.

Planteamiento del problema.



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.

Planteamiento del problema.

Finalmente ...

- Haga un análisis del costo computacional (tiempo de CPU) para obtener las 3 curvas de calor específico de la figura anterior. Intente obtener la curva correspondiente al tamaño de sistema $L = 8$ siendo $N = L \times L$, o en su defecto una extrapolación de lo que sería dicho costo computacional.