# Tarea # 3
# Densidad de estados, función partición y modelo de Ising.

Johans Restrepo Cárdenas

Instituto de Física. Universidad de Antioquia.

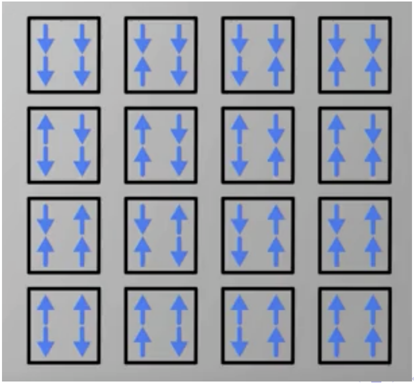
3 de abril de 2018

# 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 $N = 2 \times 2, 4 \times 4, 6 \times 6$ 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 $N = 16$ 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.

# 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.

```python
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)}
```

Modifique su programa para calcular la densidad de estados $\Omega(E)$, i.e. agrupar los microestados según el valor de la energía, como se muestra a continuación, y haga un análisis de la situación:

| | |
|---|---|
| 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 |

# Planteamiento del problema.

Con base en lo anterior es fácil ahora percatarse de la equivalencia entre la suma sobre estados de la función partición y la suma sobre energías:

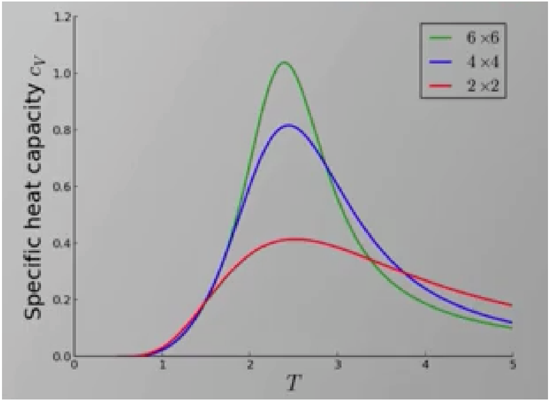
$$Z(\beta) = \sum_{\sigma} \exp(-\beta E(\sigma)) = \sum_{E} \Omega(E) \exp(-\beta E)$$

- Obtenga un histograma de $\Omega(E)\exp(-\beta E)$ en funcion de $E$ para dos tamaños distintos de sistema y haga el respectivo análisis.
- 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.