Ising Model

Louis Servaes
Tweede Bachelor Fysica en Sterrenkunde

V&F Project 1
18 november 2023

Opgave[1]

In de statistische fysica leer je dat een (klassiek) systeem in evenwicht op een eindige temperatuur beschreven wordt door een probabiliteitsdistributie over de mogelijke configuraties waarin het zich kan bevinden, waarbij de probabiliteit van een configuratie c gegeven wordt door:

$$\mathcal{P}(c) \propto \exp(-\beta \mathcal{H}(c)) \tag{1}$$

met $\mathcal{H}(c)$ de energie van die configuratie, $\beta = 1/kT$ en k de constante van Boltzmann. Dit geldt zowel voor gassen van bewegende atomen en moleculen, maar ook voor bijvoorbeeld modellen voor magnetisme. Een heel eenvoudig (niet realistisch) model voor magnetisme is het zogenaamde **Ising model**, waarbij aan elke site van een rooster een binaire vrijheidsgraad wordt geassocieerd, wat we noteren als s_i, met dus i een label voor de roostersite, en s_i de waarde van de vrijheidsgraad op die site, die dus de waarden +1 of -1 kan aannemen. Een bepaalde configuratie c komt dan overeen met een specifieke keuze voor elk van de waarden s_i voor alle sites i in het rooster.

Voor de eenvoud beperken we ons nu tot een ééndimensionaal rooster met L sites, zodat we $i = 1, 2, ..., L$ kunnen kiezen. Voor de energie van een bepaalde configuratie $c = \{s_1, s_2, ..., s_L\}$, kiezen we:

$$\mathcal{H}(c) = \sum_{i=1}^{L-1} \epsilon_i = -J \sum_{i=1}^{L-1} s_i s_{i+1} \tag{2}$$

waarbij dus:

$$\epsilon_i = -J s_i s_{i+1} \tag{3}$$

Met andere woorden, voor elke twee naburige spins die dezelfde waarde aannemen, krijgt de totale energie een bijdrage $-J$ (waarbij $J > 0$ mag worden verondersteld), en wanneer twee naburige spins een tegenovergestelde waarde aannemen, genereert dit een energiebijdrage $+J$.

NORMALISATIE

In eerste instantie willen we de normalisatiefactor voor de kansverdeling berekenen, dus $Z = \sum_c \exp(-\beta \mathcal{H}(c))$, zodat dan:

$$\mathcal{P}(c) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta \mathcal{H}(c)) \tag{4}$$

De normalisatiefactor komt neer op:

$$Z = \sum_c \exp(\beta J \sum_{i=1}^{L-1} s_i s_{i+1}) = \sum_c \prod_{i=1}^{L-1} \exp(\beta J s_i s_{i+1}) \tag{5}$$

De sommatie over c gaat dus gewoon over de waarden $s_i = -1$ en $s_i = +1$ voor alle sites i in het rooster. Verder komt deze uitdrukking neer op de keuze van *vrije randvoorwaarden*, aangezien ook s_1 en s_L over beide waarden worden gesommeerd. We zouden ook kunnen kijken naar *vaste randvoorwaarden*, waarbij we de waarde van s_1 en s_L vast leggen, bijvoorbeeld $s_1 = s_L = 1$.

[1] De opgave is overgeschreven van Ufora, omdat enkele notaties zijn veranderd.

Door elk van deze sommaties te interpreteren als de sommatie die gegenereerd wordt door een matrix-vermenigvuldiging, kunnen we deze uitdrukking herschrijven[2] als:

$$Z = v_1^{\mathrm{T}} \mathsf{T} \cdot \mathsf{T} \cdot ... \cdot \mathsf{T} v_L = v_1^{\mathrm{T}} \mathsf{T}^{L-1} v_L \tag{6}$$

waarbij elke T een (2 x 2) matrix is, zodat de matrix T op plaats i in het product als matrixelementen de factoren $\exp(\beta J s_i s_{i+1})$ bevat. Hiertoe associëren we de eerste rij met $s_i = +1$, de tweede rij met $s_i =$ -1, de eerste kolom met $s_{i+1} = +1$ en de tweede kolom met $s_{i+1} =$ -1. Het matrixproduct zorgt er dan voor dat de kolomindex van de matrix op positie i wordt geassocieerd aan de rij-index van de matrix op positie $i + 1$. Aangezien elk van deze matrices gelijk zijn (door de specifieke structuur van de energiefunctie), herleidt zich dit tot een macht T^{L-1}. De vectoren v_1 en v_L beschrijven de randvoorwaarden voor de vrijheidsgraden s_1 en s_L. Ze worden gegeven door $v_1 = v_L = \left[\begin{smallmatrix} 1 \\ 1 \end{smallmatrix}\right]$ voor vrije randvoorwaarden, of $v_1 = v_L = \left[\begin{smallmatrix} 1 \\ 0 \end{smallmatrix}\right]$ voor de vaste randvoorwaarden $s_1 = s_L = 1$.

GEMIDDELDE ENERGIE

Stel nu dat we de gemiddelde energie willen berekenen:

$$\mathbb{E}[\mathcal{H}] = \sum_c \mathcal{H}(c)\mathcal{P}(c) = \sum_{i=1}^{L-1} \left\{ \sum_c \epsilon_i \mathcal{P}(c) \right\} = \sum_{i=1}^{L-1} \mathbb{E}[\epsilon_i] \tag{7}$$

In matrixvorm wordt dit:

$$\mathbb{E}[\mathcal{H}] = \frac{1}{Z} \begin{bmatrix} v_1^{\mathrm{T}} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \mathsf{A}^{L-1} \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ v_L \end{bmatrix} \tag{8}$$

waarbij:

$$\mathsf{A} = \begin{bmatrix} \mathsf{T} & \mathsf{M} \\ \mathsf{O} & \mathsf{T} \end{bmatrix} \tag{9}$$

en de elementen van M gegeven worden door $\epsilon_i \exp(\beta J s_i s_{i+1})$.

GEMIDDELDE MAGNETISATIE

Tot slot zijn we ook geïnteresseerd in gemiddelde magnetisatie op een bepaalde site in het rooster:

$$\mathbb{E}[s_i] = \sum_c s_i \mathcal{P}(c) = \frac{1}{Z} v_1^{\mathrm{T}} \mathsf{T}^{i-1} \mathsf{S} \mathsf{T}^{L-i} v_L \tag{10}$$

waarbij:

$$\mathsf{S} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{11}$$

[2] Zie **Appendix** voor een meer gedetailleerde uitleg.

OPDRACHT

1. Stel expliciet de matrix T op en diagonaliseer deze als $\mathsf{T} = \mathsf{UDU}^{-1}$ om gemakkelijk T^{L-1} te kunnen berekenen.
2. Bereken nu Z als functie van βJ en van L, zowel voor vrije randvoorwaarden (Z_1) als voor vaste gelijke randvoorwaarden met $s_1 = s_L = +1$ (Z_2) alsook met vaste tegengestelde randvoorwaarden $s_1 = -s_L = +1$ (Z_3). Construeer dus ook de juiste vector v_L die bij de keuze s_L = -1 hoort.
3. Toon aan dat vergelijking 8 gelijk is aan vergelijking 7.
4. Bereken nu expliciet A^{L-1} en gebruik dit om de gemiddelde energie $\mathbb{E}[\mathcal{H}]_1$, $\mathbb{E}[\mathcal{H}]_2$ en $\mathbb{E}[\mathcal{H}]_3$ voor de drie soorten randvoorwaarden te berekenen.
5. Maak (numeriek) een grafiekje voor de gemiddelde magnetisatie $\mathbb{E}[s_i]$ voor $i = 1, ..., L$, en dit voor $\beta J = 1$ en $L = 30$, waarbij je opnieuw de drie verschillende randvoorwaarden beschouwt.

Bonus: Kan je verklaren waarom in het geval van vrije randvoorwaarden, $\mathbb{E}[s_i]_1 = 0$ voor alle i? Voor de magnetisatie met vaste randvoorwaarden, bijvoorbeeld $\mathbb{E}[s_i]_2$, daalt deze als functie van i (afstand tot de rand) tot in het midden van het rooster. Toon aan dat in de limiet voor grote L, deze daling exponentieel is, dus evenredig met $\exp(-i/l)$, en bepaal de parameter l als functie van βJ.

Vraag 1

$$\mathsf{T} = \begin{bmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{bmatrix} \tag{12}$$

Om T te diagonaliseren, vinden we eerst de eigenwaardes. Dit doen we a.d.h.v. de karakteristieke veelterm:

$$k_{\mathsf{T}}(z) = \det(z\mathsf{I} - \mathsf{T}) = (z - e^{\beta J})^2 - e^{-2\beta J}$$

De eigenwaardes van T zijn de wortels van $k_{\mathsf{T}}(z)$, en worden gegeven door:

$$\begin{cases} \lambda_+ = 2\cosh(\beta J) \\ \lambda_- = 2\sinh(\beta J) \end{cases} \tag{13}$$

De bijbehorende eigenruimtes vindt men door $(z\mathsf{I} - \mathsf{T})v = \mathbf{0}$ op de lossen. Stel eerst $z = \lambda_+$. Via rijoperaties geldt:

$$\begin{aligned} \lambda_+\mathsf{I} - \mathsf{T} &= \begin{bmatrix} e^{-\beta J} & -e^{-\beta J} \\ -e^{-\beta J} & e^{-\beta J} \end{bmatrix} \\ &\sim \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Dus de eigenruimte $V_+ = \mathbb{R}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$. We kiezen als basisvector $v_+ = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$. Analoog vinden we voor $z = \lambda_-$:

$$\begin{aligned} \lambda_-\mathsf{I} - \mathsf{T} &= \begin{bmatrix} -e^{-\beta J} & -e^{-\beta J} \\ -e^{-\beta J} & -e^{-\beta J} \end{bmatrix} \\ &\sim \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Dus de eigenruimte $V_- = \mathbb{R}\begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$. We kiezen als basisvector $v_- = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$. De matrix van basisovergang U heeft als kolommen de eigenvectoren v_+ en v_-:

$$\mathsf{U} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \tag{14}$$

De inverse[3] berekenen we door $\mathsf{U}^{-1} = \det(\mathsf{U})^{-1}\mathrm{adj}(\mathsf{U})$. Nu is voor een algemene (2 x 2) matrix:

$$\mathrm{adj}\left(\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}$$

zodat:

$$\mathsf{U}^{-1} = \det(\mathsf{U})^{-1}\mathrm{adj}(\mathsf{U}) = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{bmatrix} \tag{15}$$

De matrix D is een diagonaalmatrix met de eigenwaardes op de diagonaal:

$$\mathsf{D} = \begin{bmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\cosh(\beta J) & 0 \\ 0 & 2\sinh(\beta J) \end{bmatrix} \tag{16}$$

[3] Hierbij is natuurlijk $\det(\mathsf{U}) \neq 0$ noodzakelijk.

Dan wordt uiteindelijk T gegeven door $\mathsf{T} = \mathsf{UDU}^{-1}$. Deze vorm is gemakkelijk om machten van T uit te rekenen, aangezien:

$$\mathsf{T}^{L-1} = \mathsf{UDU}^{-1}\mathsf{UDU}^{-1}...\mathsf{UDU}^{-1} = \mathsf{UD}^{L-1}\mathsf{U}^{-1}$$

Nu is:

$$\mathsf{D}^{L-1} = \begin{bmatrix} \lambda_+^{L-1} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{L-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (2\cosh(\beta J))^{L-1} & 0 \\ 0 & (2\sinh(\beta J))^{L-1} \end{bmatrix}$$

Dus vinden we voor T^{L-1}:

$$\begin{aligned} \mathsf{T}^{L-1} &= \mathsf{UD}^{L-1}\mathsf{U}^{-1} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_+^{L-1} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{L-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \lambda_+^{L-1} + \lambda_-^{L-1} & \lambda_+^{L-1} - \lambda_-^{L-1} \\ \lambda_+^{L-1} - \lambda_-^{L-1} & \lambda_+^{L-1} + \lambda_-^{L-1} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Definieer de volgende variabelen[4]:

$$\begin{cases} \Lambda_+^{(n)} = \frac{1}{2}(\lambda_+^n + \lambda_-^n) = 2^{n-1}[(\cosh(\beta J))^n + (\sinh(\beta J))^n] \\ \Lambda_-^{(n)} = \frac{1}{2}(\lambda_+^n - \lambda_-^n) = 2^{n-1}[(\cosh(\beta J))^n - (\sinh(\beta J))^n] \end{cases} \tag{17}$$

zodat:

$$\mathsf{T}^{L-1} = \begin{bmatrix} \Lambda_+^{(L-1)} & \Lambda_-^{(L-1)} \\ \Lambda_-^{(L-1)} & \Lambda_+^{(L-1)} \end{bmatrix} \tag{18}$$

Vraag 2

Voor vrije randvoorwaarden is $v_1 = v_L = \left[\begin{smallmatrix} 1 \\ 1 \end{smallmatrix}\right]$. De normalisatiefactor Z_1 is dan:

$$Z_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix} \mathsf{T}^{L-1} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = 2\Lambda_+^{(L-1)} + 2\Lambda_-^{(L-1)} = 2\lambda_+^{L-1} = 2^L(\cosh(\beta J))^{L-1} \tag{19}$$

Voor de vaste randvoorwaarden $s_1 = s_L = 1$, is $v_1 = v_L = \left[\begin{smallmatrix} 1 \\ 0 \end{smallmatrix}\right]$, dus:

$$Z_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \mathsf{T}^{L-1} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \Lambda_+^{(L-1)} = \frac{1}{2}(\lambda_+^{L-1} + \lambda_-^{L-1}) = 2^{L-2}[(\cosh(\beta J))^{L-1} + (\sinh(\beta J))^{L-1}] \tag{20}$$

Voor de vaste randvoorwaarden[5] $s_1 = -s_L = 1$, is $v_1 = \left[\begin{smallmatrix} 1 \\ 0 \end{smallmatrix}\right]$ en $v_L = \left[\begin{smallmatrix} 0 \\ 1 \end{smallmatrix}\right]$:

$$Z_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \mathsf{T}^{L-1} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \Lambda_-^{(L-1)} = \frac{1}{2}(\lambda_+^{L-1} - \lambda_-^{L-1}) = 2^{L-2}[(\cosh(\beta J))^{L-1} - (\sinh(\beta J))^{L-1}] \tag{21}$$

[4] Deze zullen later nog van pas komen.
[5] Zie **Appendix** voor een meer gedetailleerde uitleg.

Vraag 3

We onderzoeken eerst de structuur van machten van A (zie vergelijking 9):

$$\mathsf{A}^2 = \begin{bmatrix} \mathsf{T} & \mathsf{M} \\ \mathsf{O} & \mathsf{T} \end{bmatrix}^2 = \begin{bmatrix} \mathsf{T}^2 & \mathsf{TM}+\mathsf{MT} \\ \mathsf{O} & \mathsf{T}^2 \end{bmatrix}$$

$$\mathsf{A}^3 = \begin{bmatrix} \mathsf{T} & \mathsf{M} \\ \mathsf{O} & \mathsf{T} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathsf{T}^2 & \mathsf{TM}+\mathsf{MT} \\ \mathsf{O} & \mathsf{T}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathsf{T}^3 & \mathsf{T}^2\mathsf{M}+\mathsf{TMT}+\mathsf{MT}^2 \\ \mathsf{O} & \mathsf{T}^3 \end{bmatrix}$$

We zien dat voor de machten $n = 1, 2, 3$ van A het volgende geldt:

$$\mathsf{A}^n = \begin{bmatrix} \mathsf{T} & \mathsf{M} \\ \mathsf{O} & \mathsf{T} \end{bmatrix}^n = \begin{bmatrix} \mathsf{T}^n & \sum_{i=1}^{n} \mathsf{T}^{n-i}\mathsf{MT}^{i-1} \\ \mathsf{O} & \mathsf{T}^n \end{bmatrix} \tag{22}$$

De inductiehypothese is dat dit geldt voor een algemene macht n van A. We tonen aan dat dit ook zo is voor $n+1$:

$$\begin{aligned}
\mathsf{A}^{n+1} &= \begin{bmatrix} \mathsf{T} & \mathsf{M} \\ \mathsf{O} & \mathsf{T} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathsf{T} & \mathsf{M} \\ \mathsf{O} & \mathsf{T} \end{bmatrix}^n \\
&= \begin{bmatrix} \mathsf{T} & \mathsf{M} \\ \mathsf{O} & \mathsf{T} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathsf{T}^n & \sum_{i=1}^{n} \mathsf{T}^{n-i}\mathsf{MT}^{i-1} \\ \mathsf{O} & \mathsf{T}^n \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \mathsf{T}^{n+1} & \left(\sum_{i=1}^{n} \mathsf{T}^{n+1-i}\mathsf{MT}^{i-1}\right) + \mathsf{MT}^n \\ \mathsf{O} & \mathsf{T}^{n+1} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \mathsf{T}^{n+1} & \sum_{i=1}^{n+1} \mathsf{T}^{n+1-i}\mathsf{MT}^{i-1} \\ \mathsf{O} & \mathsf{T}^{n+1} \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

Nu is volgens vergelijking 8:

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[\mathcal{H}] &= \frac{1}{Z} \begin{bmatrix} v_1^{\mathrm{T}} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \mathsf{A}^{L-1} \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ v_L \end{bmatrix} \\
&= \frac{1}{Z} v_1^{\mathrm{T}} \left(\sum_{i=1}^{L-1} \mathsf{T}^{L-1-i}\mathsf{MT}^{i-1} \right) v_L \\
&= \sum_{i=1}^{L-1} v_1^{\mathrm{T}} \left(\frac{1}{Z} \mathsf{T}^{L-1-i}\mathsf{MT}^{i-1} \right) v_L \\
&= \sum_{i=1}^{L-1} v_1^{\mathrm{T}} \left(\frac{1}{Z} \mathsf{T}^{i-1}\mathsf{MT}^{L-1-i} \right)
\end{aligned}$$

De laatste stap werd bekomen door de sommatie om te draaien (van $i = L-1$ tot $i = 1$, de volgorde waarin gesommeerd wordt doet er niet toe). Dit is inderdaad gelijk aan vergelijking 7, aangezien[6]:

$$v_1^{\mathrm{T}} \left(\frac{1}{Z} \mathsf{T}^{i-1}\mathsf{MT}^{L-1-i} \right) v_L = \mathbb{E}[\epsilon_i] \tag{23}$$

Vraag 4

Twee symmetrische matrices X en Y commuteren, indien het product $\mathsf{Z} = \mathsf{XY}$ opnieuw symmetrisch is.

Bewijs:

$$\mathsf{XY} = \mathsf{Z} = \mathsf{Z}^{\mathrm{T}} = \mathsf{Y}^{\mathrm{T}}\mathsf{X}^{\mathrm{T}} = \mathsf{YX} \tag{24}$$

[6] Zie **Appendix** voor een meer gedetailleerde uitleg.

Toegepast op M en T:

$$\mathsf{MT} = -J\begin{bmatrix} e^{\beta J} & -e^{-\beta J} \\ -e^{-\beta J} & e^{\beta J}\end{bmatrix}\begin{bmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J}\end{bmatrix} = -2J\begin{bmatrix}\sinh(2\beta J) & 0 \\ 0 & \sinh(2\beta J)\end{bmatrix} = \mathsf{TM}$$

De matrices M en T commuteren, dus kan de volgende vereenvoudiging in A^{L-1} gemaakt worden:

$$\sum_{i=1}^{L-1} \mathsf{T}^{L-1-i}\mathsf{M}\mathsf{T}^{i-1} = (L-1)\mathsf{M}\mathsf{T}^{L-2} \tag{25}$$

Expliciet uitgewerkt:

$$\begin{aligned}
\mathsf{MT}^{L-2} &= -J\begin{bmatrix} e^{\beta J} & -e^{-\beta J} \\ -e^{-\beta J} & e^{\beta J}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\Lambda_+^{(L-2)} & \Lambda_-^{(L-2)} \\ \Lambda_-^{(L-2)} & \Lambda_+^{(L-2)}\end{bmatrix} \\
&= -\frac{J}{2}\begin{bmatrix} e^{\beta J} & -e^{-\beta J} \\ -e^{-\beta J} & e^{\beta J}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\lambda_+^{L-2}+\lambda_-^{L-2} & \lambda_+^{L-2}-\lambda_-^{L-2} \\ \lambda_+^{L-2}-\lambda_-^{L-2} & \lambda_+^{L-2}+\lambda_-^{L-2}\end{bmatrix} \\
&= -\frac{J}{2}\begin{bmatrix}\lambda_-\lambda_+^{L-2}+\lambda_+\lambda_-^{L-2} & \lambda_-\lambda_+^{L-2}-\lambda_+\lambda_-^{L-2} \\ \lambda_-\lambda_+^{L-2}-\lambda_+\lambda_-^{L-2} & \lambda_-\lambda_+^{L-2}+\lambda_+\lambda_-^{L-2}\end{bmatrix} \\
&= -J\lambda_+\lambda_-\begin{bmatrix}\Lambda_+^{(L-3)} & \Lambda_-^{(L-3)} \\ \Lambda_-^{(L-3)} & \Lambda_+^{(L-3)}\end{bmatrix} \\
&= -J\lambda_+\lambda_-\mathsf{T}^{L-3}
\end{aligned}$$

Dus:

$$\mathsf{A}^{L-1} = \begin{bmatrix}\Lambda_+^{(L-1)} & \Lambda_-^{(L-1)} & (L-1)(-J\lambda_+\lambda_-)\Lambda_+^{(L-3)} & (L-1)(-J\lambda_+\lambda_-)\Lambda_-^{(L-3)} \\ \Lambda_-^{(L-1)} & \Lambda_+^{(L-1)} & (L-1)(-J\lambda_+\lambda_-)\Lambda_-^{(L-3)} & (L-1)(-J\lambda_+\lambda_-)\Lambda_+^{(L-3)} \\ 0 & 0 & \Lambda_+^{(L-1)} & \Lambda_-^{(L-1)} \\ 0 & 0 & \Lambda_-^{(L-1)} & \Lambda_+^{(L-1)}\end{bmatrix} \tag{26}$$

Nu kan de gemiddelde energie $\mathbb{E}[\mathcal{H}]_1$, $\mathbb{E}[\mathcal{H}]_2$ en $\mathbb{E}[\mathcal{H}]_3$ voor de drie soorten randvoorwaarden berekend worden a.d.h.v. vergelijking 8. Voor vrije randvoorwaarden is $v_1 = v_L = \left[\begin{smallmatrix}1\\1\end{smallmatrix}\right]$. De gemiddelde energie $\mathbb{E}[\mathcal{H}]_1$ is dan:

$$\mathbb{E}[\mathcal{H}]_1 = \frac{1}{Z_1}\begin{bmatrix}1 & 1\end{bmatrix}(L-1)(-J\lambda_+\lambda_-)\mathsf{T}^{L-3}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix} = -J(L-1)\tanh(\beta J) \tag{27}$$

Voor de vaste randvoorwaarden $s_1 = s_L = 1$, is $v_1 = v_L = \left[\begin{smallmatrix}1\\0\end{smallmatrix}\right]$, dus:

$$\mathbb{E}[\mathcal{H}]_2 = \frac{1}{Z_2}\begin{bmatrix}1 & 0\end{bmatrix}(L-1)(-J\lambda_+\lambda_-)\mathsf{T}^{L-3}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} = (L-1)(-J\lambda_+\lambda_-)\frac{\Lambda_+^{(L-3)}}{\Lambda_+^{(L-1)}} \tag{28}$$

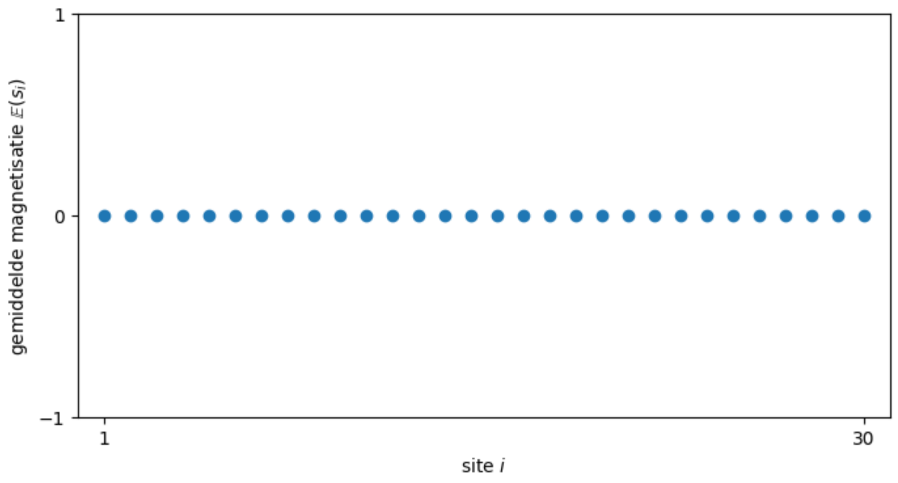
Voor de vaste randvoorwaarden $s_1 = -s_L = 1$, is $v_1 = \left[\begin{smallmatrix}1\\0\end{smallmatrix}\right]$ en $v_L = \left[\begin{smallmatrix}0\\1\end{smallmatrix}\right]$:

$$\mathbb{E}[\mathcal{H}]_3 = \frac{1}{Z_3}\begin{bmatrix}1 & 0\end{bmatrix}(L-1)(-J\lambda_+\lambda_-)\mathsf{T}^{L-3}\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} = (L-1)(-J\lambda_+\lambda_-)\frac{\Lambda_-^{(L-3)}}{\Lambda_-^{(L-1)}} \tag{29}$$

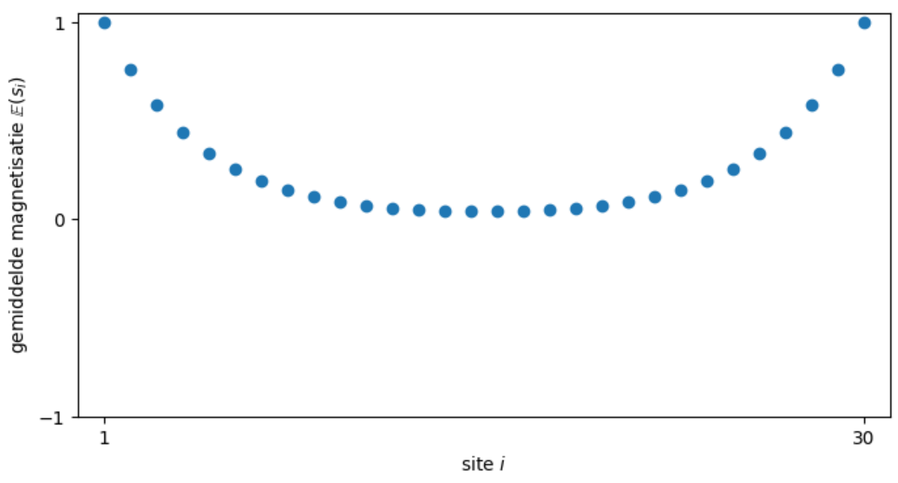
waarbij λ_+, λ_- gegeven wordt door 13 en $\Lambda_+^{(n)}$, $\Lambda_-^{(n)}$ door 17.

Vraag 5

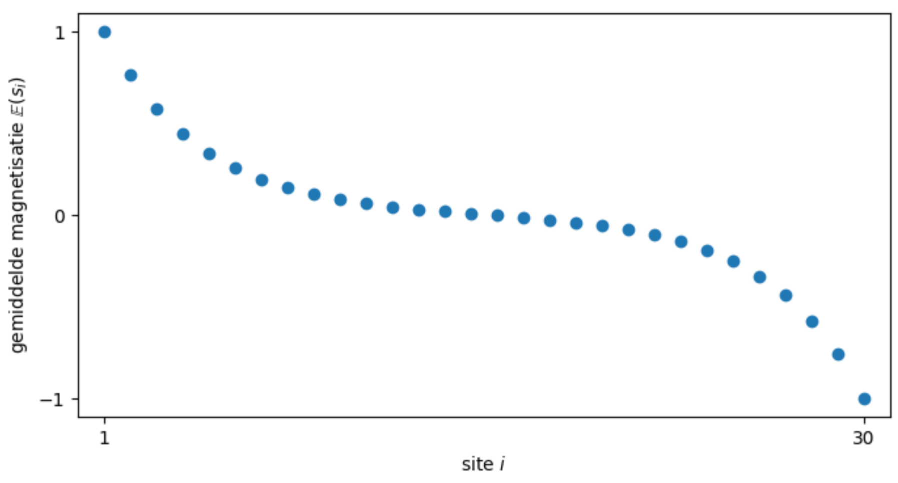
De gemiddelde magnetisatie $\mathbb{E}[s_i]_1$ voor vrije randvoorwaarden wordt hieronder weergegeven.



$\mathbb{E}[s_i]_2$ voor de vaste randvoorwaarden $s_1 = s_L = 1$ is:



Uiteindelijk $\mathbb{E}[s_i]_3$ voor de vaste randvoorwaarden $s_1 = -s_L = 1$:



Bonus

In het geval van vrije randvoorwaarden is $\mathbb{E}[s_i]_1 = 0$, aangezien het systeem volledig symmetrisch is. Er geldt[7] namelijk:

$$\mathcal{P}(c) = \mathcal{P}(-c) \tag{30}$$

waarbij $-c = -\{s_1, s_2, ..., s_L\} = \{-s_1, -s_2, ..., -s_L\}$ de spin van alle sites omdraait (de configuratie wordt *geflipt*). In het bijzonder wordt ook s_i omgedraaid, zodat:

$$\mathbb{E}[s_i]_1 = \sum_c s_i \mathcal{P}(c) = \frac{1}{2}\left[\sum_c s_i \mathcal{P}(c) - \sum_c s_i \mathcal{P}(-c)\right] = \frac{1}{2}\sum_c s_i \left[\mathcal{P}(c) - \mathcal{P}(-c)\right] = 0 \tag{31}$$

Voor vaste randvoorwaarden kan de configuratie echter niet geflipt worden, want dan zou de spin s_1 en s_L veranderen.

Om aan te tonen dat in de limiet voor grote L, $\mathbb{E}[\mathcal{H}] \propto \exp(-i/l)$, rekenen we $\mathsf{T}^{i-1}\mathsf{S}\mathsf{T}^{L-i}$ expliciet uit:

$$\mathsf{T}^{i-1}\mathsf{S}\mathsf{T}^{L-i} = \mathsf{U}\mathsf{D}^{i-1}\mathsf{U}^{-1}\mathsf{S}\mathsf{U}\mathsf{D}^{L-i}\mathsf{U}^{-1} \tag{32}$$

Nu is:

$$\begin{aligned}
\mathsf{U}^{-1}\mathsf{S}\mathsf{U} &= \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \\
&= -\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

zodat:

$$\begin{aligned}
\mathsf{T}^{i-1}\mathsf{S}\mathsf{T}^{L-i} &= -2^{L-2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\cosh(\beta J))^{i-1} & 0 \\ 0 & (\sinh(\beta J))^{i-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\cosh(\beta J))^{L-i} & 0 \\ 0 & (\sinh(\beta J))^{L-i} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \\
&= -2^{L-2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\cosh(\beta J))^{i-1} & 0 \\ 0 & (\sinh(\beta J))^{i-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & (\sinh(\beta J))^{L-i} \\ (\cosh(\beta J))^{L-i} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \\
&= -2^{L-2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & (\cosh(\beta J))^{i-1}(\sinh(\beta J))^{L-i} \\ (\cosh(\beta J))^{L-i}(\sinh(\beta J))^{i-1} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \\
&= -2^{L-2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\cosh(\beta J))^{i-1}(\sinh(\beta J))^{L-i} & (\cosh(\beta J))^{i-1}(\sinh(\beta J))^{L-i} \\ (\cosh(\beta J))^{L-i}(\sinh(\beta J))^{i-1} & -(\cosh(\beta J))^{L-i}(\sinh(\beta J))^{i-1} \end{bmatrix} \\
&= -2^{L-2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\cosh(\beta J))^{i-1}(\sinh(\beta J))^{L-i} & (\cosh(\beta J))^{i-1}(\sinh(\beta J))^{L-i} \\ (\cosh(\beta J))^{L-i}(\sinh(\beta J))^{i-1} & -(\cosh(\beta J))^{L-i}(\sinh(\beta J))^{i-1} \end{bmatrix} \\
&= -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} \lambda_+^{i-1}\lambda_-^{L-i} + \lambda_+^{L-i}\lambda_-^{i-1} & \lambda_+^{i-1}\lambda_-^{L-i} - \lambda_+^{L-i}\lambda_-^{i-1} \\ \lambda_+^{L-i}\lambda_-^{i-1} - \lambda_+^{i-1}\lambda_-^{L-i} & \lambda_+^{i-1}\lambda_-^{L-i} - \lambda_+^{L-i}\lambda_-^{i-1} \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

Dit evalueren voor grote L leidt tot het gezochte verband $\mathbb{E}[\mathcal{H}] \propto \exp(-i/l)$. Als we i namelijk interpreteren als de afstand tot de rand[8], worden de machten $L-i$, $i-1$. Dan is:

$$(\cosh(\beta J)\sinh(\beta J))^{i-1} = (\sinh(2\beta J))^{i-1}$$

en wordt de matrix:

$$\mathsf{E} = -\begin{bmatrix} (\sinh(2\beta J))^{i-1} & 0 \\ 0 & (\sinh(2\beta J))^{i-1} \end{bmatrix} \tag{33}$$

[7]Dit is gemakkelijk in te zien, omdat $\mathcal{P}(c)$ enkel afhangt van de energie en de energie enkel afhangt van hoe naburige sites van elkaar verschillen.

[8]Merk op dat assymetrische randvoorwaarden in E niet meer juist geïnterpreteerd kunnen worden.

Appendix

PROBABILITEIT

Aangezien de (ongenormaliseerde) probabiliteit van een configuratie c gegeven wordt door $p(c) = \exp(-\beta\mathcal{H}(c))$ en de totale energie $\mathcal{H}(c)$ door de som van de energieën ϵ_i van paren s_i, s_{i+1}, kan deze ook anders uitgedrukt worden:

$$p(c) = \prod_{i=1}^{L-1} \exp(-\beta\epsilon_i) = \prod_{i=1}^{L-1} p(\{s_i, s_{i+1}\}) \tag{34}$$

waarbij $p(\{s_i, s_{i+1}\})$ de (ongenormaliseerde) probabiliteit van een $L = 2$ configuratie $\{s_i, s_{i+1}\}$ voorstelt. Inderdaad, $p(\{s_i, s_{i+1}\}) = \exp(-\beta\epsilon_i)$ is volledig analoog aan $p(c) = \exp(-\beta\mathcal{H}(c))$, waarbij de totale energie van de $L = 2$ configuratie overeenkomt met ϵ_i. Een rooster met L sites kan dus gezien worden als een opeenvolging van $L - 1$ roosters met lengte 2. Om verwarring te vermijden, noemen we zo'n $L = 2$ rooster een *paar*. In die opeenvolging van $L - 1$ paren, overlapt de laatste site van paar i telkens met de eerste site van paar $i + 1$. Een bepaalde configuratie c kan dus beschouwd worden als $L - 1$ configuraties $\{s_i, s_{i+1}\}$ van paren, en de probabiliteit $p(c)$ als het product[9] van de $L - 1$ probabiliteiten $p(\{s_i, s_{i+1}\})$.

Definiëren we de matrix T_i nu als volgt:

$$\mathsf{T}_i = \begin{bmatrix} p_i(\{1, 1\}) & p_i(\{1, -1\}) \\ p_i(\{-1, 1\}) & p_i(\{-1, -1\}) \end{bmatrix} \tag{35}$$

waarbij de notatie $p_i(\{\sigma_1, \sigma_2\})$ de probabiliteit van configuratie $\{\sigma_1, \sigma_2\}$ in paar i voorstelt. We zien echter dat alle $L - 1$ paren identiek zijn (aangezien de energie ϵ_i voor elk paar op dezelfde manier is gedefinieerd), waardoor de subscript i kan weggelaten worden. Daarom is $\mathsf{T}_i \equiv \mathsf{T}$ voor elk paar i. Hier laten we de subscript i staan om alles overzichtelijk te houden.

T_i rechts vermenigvuldigen met T_{i+1} heeft dan een duidelijke betekenis:

$$\mathsf{T}_i\mathsf{T}_{i+1} = \begin{bmatrix} p(s_i = 1; s_{i+2} = 1) & p(s_i = 1; s_{i+2} = -1) \\ p(s_i = -1; s_{i+2} = 1) & p(s_i = -1; s_{i+2} = -1) \end{bmatrix} \tag{36}$$

waarbij opnieuw een nieuwe notatie is ingevoerd:

$$p(s_i = \sigma_1; s_{i+2} = \sigma_3) = p_i(\{\sigma_1, 1\})p_{i+1}(\{1, \sigma_3\}) + p_i(\{\sigma_1, -1\})p_{i+1}(\{-1, \sigma_3\}) \tag{37}$$

De paren i en $i+1$ zijn als het ware samengevoegd tot een $L = 3$ rooster (of, equivalent, is paar i uitgebreid tot een $L = 3$ rooster met paar $i + 1$). Op een analoge manier zal nogmaals rechts vermenigvuldigen met T_{i+2} leiden tot een $L = 4$ rooster[10]. Over het algemeen geldt het volgende:

$$\mathsf{T}_i\mathsf{T}_{i+1}...\mathsf{T}_{i+n} = \begin{bmatrix} p(s_i = 1; s_{i+n+1} = 1) & p(s_i = 1; s_{i+n+1} = -1) \\ p(s_i = -1; s_{i+n+1} = 1) & p(s_i = -1; s_{i+n+1} = -1) \end{bmatrix} \tag{38}$$

waarbij de probabiliteit $p(s_i = \sigma_1; s_{i+n+1} = \sigma_{n+1})$ als volgt betekenis krijgt. Het paar i is samengevoegd met de volgende n paren tot een $L = n + 1$ rooster. De probabiliteit $p(s_i = 1; s_{i+n+1} = 1)$ bijvoorbeeld, is dan de kans dat de eerste site $\sigma_1 = 1$ en de laatste site $\sigma_{n+1} = 1$ in dit $L = n + 1$ rooster. Wat met de sites daartussen gebeurt, doet er niet toe: elke configuratie $\gamma = \{\sigma_1 = 1, \sigma_2, ..., \sigma_n, \sigma_{n+1} = 1\}$ wordt in rekening gebracht in de som.

[9] Alsof de $L - 1$ paren zich onafhankelijk van elkaar gedragen.
[10] Let echter op, de definitie geïntroduceerd in 37 is niet langer geldig voor $L = 4$.

De matrix $\mathsf{T}^{L-1} = \mathsf{T}_1\mathsf{T}_2...\mathsf{T}_{L-1}$ is dus een matrix van (ongenormaliseerde) probabiliteiten die elke randvoorwaarde (dit zijn er 4 in totaal) in rekening neemt. Op die manier kunnen ook specifieke randvoorwaarden aan het systeem opgelegd worden. Indien er geen (= vrije) randvoorwaarden zijn, moet elk element uit T^{L-1} opgeteld worden. Het opleggen van randvoorwaarden wordt gedaan door de vectoren v_1 en v_L.

GEMIDDELDE ENERGIE

De gemiddelde totale energie $\mathbb{E}[\mathcal{H}]$ wordt gegeven door een sommatie van de gemiddelde energie $\mathbb{E}[\epsilon_i]$ van de interactie tussen s_i en s_{i+1}, waarbij:

$$\mathbb{E}[\epsilon_i] = \frac{1}{Z}\sum_c \epsilon_i p(c) \tag{39}$$

met Z een normalisatiefactor voor de probabiliteit $p(c)$. Analoog aan T definiëren we nu een matrix M_i:

$$\mathsf{M}_i = \begin{bmatrix} \mathbb{E}[\epsilon_i](\{1,1\}) & \mathbb{E}[\epsilon_i](\{1,-1\}) \\ \mathbb{E}[\epsilon_i](\{-1,1\}) & \mathbb{E}[\epsilon_i](\{-1,-1\}) \end{bmatrix} \tag{40}$$

waarbij $\mathbb{E}[\epsilon_i](\{\sigma_1,\sigma_2\}) = \epsilon_i(\{\sigma_1,\sigma_2\})p_i(\{\sigma_1,\sigma_2\})$ is en $\epsilon_i(\{\sigma_1,\sigma_2\}) = -J\sigma_1\sigma_2$ de energie van paar i in configuratie $\{\sigma_1,\sigma_2\}$. $\mathbb{E}[\epsilon_i](\{\sigma_1,\sigma_2\})$ is dus de (ongeschaalde) gemiddelde energie van paar i. Ook hier is $\mathsf{M}_i \equiv \mathsf{M}$ en blijven we de subscript noteren. Rechts vermenigvuldigen met T_{i+1} geeft:

$$\mathsf{M}_i\mathsf{T}_{i+1} = \begin{bmatrix} \mathbb{E}[\epsilon_i](s_i = 1; s_{i+2} = 1) & \mathbb{E}[\epsilon_i](s_i = 1; s_{i+2} = -1) \\ \mathbb{E}[\epsilon_i](s_i = -1; s_{i+2} = 1) & \mathbb{E}[\epsilon_i](s_i = -1; s_{i+2} = -1) \end{bmatrix} \tag{41}$$

met een analoge notatie:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[\epsilon_i](s_i = \sigma_1; s_{i+2} = \sigma_3) = \epsilon_i(\{\sigma_1, 1\})p_i(\{\sigma_1, 1\})p_{i+1}(\{1, \sigma_3\}) \\ +\epsilon_i(\{\sigma_1, -1\})p_i(\{\sigma_1, -1\})p_{i+1}(\{-1, \sigma_3\}) \end{aligned} \tag{42}$$

Opnieuw zijn de paren i en $i+1$ samengevoegd tot een $L = 3$ rooster, waarbij $\mathbb{E}[\epsilon_i](s_i = \sigma_1; s_{i+2} = \sigma_3)$ de (ongeschaalde) gemiddelde energie van de interactie tussen s_i en s_{i+1} voorstelt met randvoorwaarden $s_i = \sigma_1$ en $s_{i+2} = \sigma_3$. Dit kan ook uitgebreid worden tot grotere roosters[11], maar op deze manier kan enkel de gemiddelde energie van de interactie tussen de eerste en tweede site berekend worden. Daarom wordt hier ook linkse vermenigvuldiging geïntroduceerd:

$$\mathsf{T}_{i-1}\mathsf{M}_i = \begin{bmatrix} \mathbb{E}[\epsilon_i](s_{i-1} = 1; s_{i+1} = 1) & \mathbb{E}[\epsilon_i](s_{i-1} = 1; s_{i+1} = -1) \\ \mathbb{E}[\epsilon_i](s_{i-1} = -1; s_{i+1} = 1) & \mathbb{E}[\epsilon_i](s_{i-1} = -1; s_{i+1} = -1) \end{bmatrix} \tag{43}$$

waarbij:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[\epsilon_i](s_{i-1} = \sigma_1; s_{i+1} = \sigma_3) = \epsilon_i(\{1, \sigma_3\})p_{i-1}(\{\sigma_1, 1\})p_i(\{1, \sigma_3\}) \\ +\epsilon_i(-1, \sigma_3\})p_{i-1}(\{\sigma_1, -1\})p_i(\{-1, \sigma_3\}) \end{aligned} \tag{44}$$

opnieuw de (ongeschaalde) gemiddelde energie van de interactie tussen s_i en s_{i+1} voorstelt met randvoorwaarden $s_{i-1} = \sigma_1$ en $s_{i+1} = \sigma_3$. Opnieuw kan dit uitgebreid worden tot grotere roosters, maar op deze manier kan enkel de gemiddelde energie van de interactie tussen de voorlaatste en laatste site berekend worden. We moeten dus de twee combineren:

$$\mathsf{T}_{i-m}...\mathsf{T}_{i-1}\mathsf{M}_i\mathsf{T}_{i+1}...\mathsf{T}_{i+n} = \begin{bmatrix} \mathbb{E}[\epsilon_i](s_{i-m} = 1; s_{i+n+1} = 1) & \mathbb{E}[\epsilon_i](s_{i-m} = 1; s_{i+n+1} = -1) \\ \mathbb{E}[\epsilon_i](s_{i-m} = -1; s_{i+n+1} = 1) & \mathbb{E}[\epsilon_i](s_{i-m} = -1; s_{i+n+1} = -1) \end{bmatrix} \tag{45}$$

Het paar i is samengevoegd met de vorige m en de volgende n paren tot een $L = m + n + 1$ rooster. De (ongeschaalde) gemiddelde energie $\mathbb{E}[\epsilon_i](s_{i-m} = 1; s_{i+n+1} = 1)$ bijvoorbeeld, is dan de gemiddelde energie van de interactie tussen s_i en s_{i+1} met de randvoorwaarden $s_{i-m} = \sigma_1 = 1$ en $s_{i+n} = \sigma_{m+n+1} = 1$.

[11] Definitie 42 is hier dan opnieuw niet langer geldig, maar moet uitgebreid worden.

De matrix $\mathsf{T}^{i-1}\mathsf{M}\mathsf{T}^{L-1-i} = \mathsf{T}_1 ... \mathsf{T}_{i_1}\mathsf{M}_i\mathsf{T}_{i+1} ... \mathsf{T}_{L-1}$ is dus een matrix van (ongeschaalde) gemiddelde energieën van de interactie tussen s_i en s_{i+1} die elke mogelijke randvoorwaarde in rekening neemt. Dit is dus precies $\mathbb{E}[\epsilon_i]$, waarbij randvoorwaarden op configuratie c zijn gelegd. De precieze randvoorwaarden die opgelegd zijn, worden opnieuw bepaald door v_1 en v_L.

Nu zijn de probabiliteiten ongenormaliseerd, waardoor de schaling van $\mathbb{E}[\epsilon_i]$ verkeerd is. Er moet dus nog gedeeld worden door de normalisatiefactor Z:

$$\mathbb{E}[\epsilon_i] = v_1^{\mathrm{T}} \left(\frac{1}{Z} \mathsf{T}^{i-1}\mathsf{M}\mathsf{T}^{L-1-i} \right) v_L \tag{46}$$

Het feit dat de matrices M en T commuteren, vertaalt zich in de eigenschap dat $\mathbb{E}[\epsilon_i]$ voor alle s_i, s_{i+1} gelijk is. Vandaar dat we kunnen schrijven:

$$\mathbb{E}[\mathcal{H}] = (L-1)\mathbb{E}[\epsilon] \tag{47}$$

met $\mathbb{E}[\epsilon_i] \equiv \mathbb{E}[\epsilon]$.