Física Teórica 3 – 2do. cuatrimestre de 2014

Solución exacta del modelo de Ising 2D para redes finitas

Ahora que ya han avanzado bastante con las simulaciones de Metropolis–Monte Carlo pueden comparar sus resultados con la solución exacta para redes finitas y con condiciones de contorno periódicas. En principio, calcular la función de partición para una red finita es muy simple. Para una red cuadrada de $N \times N$ espines y sin campo magnético externo basta con hacer la suma

$$Z = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \ldots \sum_{s_{N^2}=\pm 1} \exp\left(\beta J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j\right).$$

El problema es que el número de términos en la suma crece de manera exponencial. Para una red cuadrada de lado N hay 2^{N^2} estados. Ahora bien, muchos estados corresponden a un mismo valor de la energía, y no hay tantos valores posibles de la energía como estados. En realidad hay muchos menos. La energía mínima de la red es

$$E_{\min} = -2JN^2,$$

y corresponde a los estados en que están todos los espines hacia arriba o todos los espines hacia abajo. Es decir, tiene multiplicidad 2. Para una red con un número par de espines por lado, la energía máxima se consigue alternando los espines. Resulta

$$E_{\max} = 2JN^2,$$

y también tiene multiplicidad 2. Para redes con un número impar de espines por lado es imposible alternar los espines satisfaciendo condiciones de contorno periódicas, de modo que la energía máxima satura en un valor menor a $2JN^2$. En todo caso, cada vez que modifican el estado de la red dando vuelta un espín, la energía cambia en saltos que pueden valer 0, $\pm 4J$ o $\pm 8J$, porque cada espín tiene cuatro vecinos y la suma de los cuatro vecinos sólo puede tomar los valores $0, \pm 2, \pm 4$. Cuando dan vuelta un espín la energía cambia en una cantidad que es igual al doble de la suma de sus cuatro espines vecinos. En otras palabras, la energía va de 4 en 4, en unidades de J. Finalmente, todo esto sirve para decir que la función de partición va a poder escribirse como

$$Z = \sum_{E_i} \Omega(E_i)\, e^{-\beta E_i} = \sum_{i=0}^{N^2} \Omega(i)\ e^{\beta J(2N^2-4i)}, \tag{1}$$

donde $\Omega(E_i)$ es el número de estados con energía

$$E_i = -(2N^2 - 4i).$$

El número de términos en la suma (1) es $N^2 + 1$, y crece linealmente con el número de espines de la red, en contraste con el crecimiento exponencial del número de términos de la primera suma que escribimos, que iba como 2^{N^2}. Obviamente, $\Omega(E_i)$ puede tomar el valor cero para ciertos E_i, pero siempre es

$$\sum_i \Omega(E_i) = 2^{N^2}.$$

El problema es que ahora necesitamos conocer los coeficientes $\Omega(E_i)$, lo que tiene el aspecto de un difícil cálculo de combinatoria. Este problema fue resuelto hace muchos años estudiando la expansión de la función de partición en potencias de $e^{-\beta J}$ para bajas temperaturas. Vean, por ejemplo, P.D. Beale, *Exact Distribution of Energies in the Two-Dimensional Ising Model*, Phys. Rev. Lett. **76**, 78 (1995). También pueden consultar la tercera edición del libro de Pathria (que en realidad ahora es el Pathria−Beale).

En archivos adjuntos figuran i) las listas de coeficientes $\Omega(E_i)$ para redes cuadradas desde 5×5 hasta 50×50, ii) el programa en *Mathematica* usado para generar los coeficientes, cuyo autor es Beale, y iii) el paper de Beale. Con las listas de coeficientes pueden construir las funciones de partición, la energía media, el calor específico, etc. Pueden graficar esas funciones junto con los resultados de sus simulaciones y compararlas. Creo que no les va a convenir graficar directamente las funciones exactas (que son funciones racionales con muchísimos términos), sino construir listas con pares de valores, por ejemplo $\{T, U(T)\}$, con T variando de pasos discretos, y luego graficar esas listas, tal como hicieron con los resultados de las simulaciones. Digo esto porque aunque pueden definir la función exacta $U(T)$ como cociente de funciones racionales, si intentan hacer un plot[$U(T)$], dejando a consideración del programa el paso entre valores de T consecutivos, lo más probable es que el programa elija un paso demasiado chico y tarde mucho en plotear las curvas. Por eso, es más práctico generar uno mismo una tabla, con un paso dT pequeño pero no mucho, y hacer que el programa grafique esos pares de valores.

Las listas de coeficientes $\Omega(E_i)$ están en archivos de texto que no deberían ser difíciles de leer, según el programa que usen. Abran con el Notepad alguno de los más pequeños para ver qué aspecto tienen. Los $\Omega(E_i)$ están ordenados de menor a mayor energía, con

$$E_i = -(2N^2 - 4i), \qquad i = 0, 1, \ldots, N^2.$$

Con esos coeficientes se construye directamente la función de partición (1). Por ejemplo, para la red de 8×8 los coeficientes $\Omega(E_i)$ son

```
                2
                0
              128
              256
             4672
            17920
           145408
           712960
          4274576
         22128384
        118551552
        610683392
       3150447680
      16043381504
      80748258688
     396915938304
    1887270677624
    8582140066816
   36967268348032
  149536933509376
  564033837424064
 1971511029384704
 6350698012553216
18752030727310592
50483110303426544
```

123229776338119424
271209458049836032
535138987032308224
941564975390477248
1469940812209435392
2027486077172296064
2462494093546483712
2627978003957146636
2462494093546483712
2027486077172296064
1469940812209435392
941564975390477248
535138987032308224
271209458049836032
123229776338119424
50483110303426544
18752030727310592
6350698012553216
1971511029384704
564033837424064
149536933509376
36967268348032
8582140066816
1887270677624
396915938304
80748258688
16043381504
3150447680
610683392
118551552
22128384
4274576
712960
145408
17920
4672
256
128
0
2