Vybrané kapitoly zo štatistickej fyziky
Príklady z cvičenia

cviko bolo 24.3.2022 *entropie, spinové modely*

Akékoľvek otázky smelo smerujte na `juraj(a)tekel(b)gmail(c)com`

Entropia

Príklad 1 (■ O entropií informačného zdroja.). Príklad je vypočítaný vo videou.

Príklad 2 (O entropií čiernej diery.).

Príklad 3 (Extremalizovanie entropie bez väzieb.). Podobne ako v prvej úlohe, kľúčom je počítanie s Lagrangeovym multiplikátorom. Budeme hľadať extrém lagrangiánu

$$L = -k\sum p_i \log p_i + \alpha\left(1 - \sum_i p_i\right) \ ,$$

kde "pohybová" rovnice pre α zariadi platnosť väzby. Z Euler-Lagrangeovych rovníc dostávame

$$-k\left(\log p_i + 1\right) - \alpha = 0$$

z čoho $\log p_i = const$ a z normalizácie $p_i = 1/N$. Z definičného vzťahu pre entropiu dostávame, že $S = k + \alpha$.

Príklad 4 (Extremalizovanie entropie s väzbou na strednú energiu.). Podobne ako v prechúcej úlohe. Funkciu Lagrangeovho multiplikátora prezradí jeho pozícia vo výslednom rozdelení pravdepodobnosti.

Príklad 5 (Extremalizovanie entropie s väzbou na strednú energiu a disperziu energie.). Opäť počítame s Lagrangeovými multiplikátormi.

Isingov Model

Príklad 6 (■ Malá štvorcová mriežka). Riešenie príkladu vo videu.

Príklad 7 (Explicitný rozvoj štatistickej sumy). V oboch prípadoch potrebujeme násjť malý parameter, ktorý bude charakterizovať zodpovedajúcu limitu.

Pre nízkoteplotný rozvoj je, ako uvidíme, dobrým parametrom $x = e^{-2\beta J}$, a rozvoj nízkej teploty je rozvojom v malom x. Pre $T = 0$ je základným stavom pre akúkoľvek mriežku konfugurácia všetkých spinov orientovaných rovnako, nech má takýto stav energiu E_0. Potom je rozumné zapísať štatistickú sumu nasledovne

$$Z = e^{-\beta E_0}\sum\left(e^{-2\beta J}\right)^f = e^{-\beta E_0}\sum x^f \ ,$$

kde f je počet linkov v mriežke, ktoré majú na svojich koncoch spin s rôznou orientáciou (terminus technikus je "frustrovaný", preto f). Teraz treba prechádzať cez konfigurácie v mriežke a počítať, koľko rôznych existuje s jedným otočeným spinom, s dvomi, tromi atď. Jeden otočený spin dá až štyri frustrované linky, dva otočené spiny dajú šesť alebo osem frustrovaných linkov podša toho, či sú vedľa seba alebo nie. Výsledok bude tiež závisieť od toho, aká veľká je mriežka, tj. koľko spinov sa v nech nachádza.

Pre vysokoteplotný rozvoj sa ukáže byť vhodný parameter

$$v = \tanh\beta J \ .$$

Pre parametre s_i, s_j rovné ± 1 platí

$$e^{-s_i s_j \beta J} = \cosh\beta J + s_i s_j \sinh\beta J$$

a teda štatistická suma sa dá napísať ako

$$Z = \sum\left(\prod_{i\sim j} e^{-s_i s_j \beta J}\right) = $$
$$= \cosh\beta J \sum\left(\prod_{i\sim j}(1 + s_i s_j v)\right) \ ,$$

kde sumujeme cez všetky možné kofigurácie spinov a súčin ide cez všetky dvojice susedných spinov (to zodpovedá štandardnému označeniu $i \sim j$). Teraz ostáva si rozmyslieť, ktoré konfigurácie prežijú sumovanie. Keď roznásobíme všetky zátvorky, prvý dostávame

$$Z \sim (\cosh \beta J)^M \sum \big(1 + v \sum_{i\sim j} s_i s_j + \\ + v^2 \sum_{i\sim j} \sum_{k\sim l} s_i s_j s_k s_l + \dots\big) \ .$$

Ostáva si rozmyslieť, ktoré z členov prežijú sumovanie cez všetky kofigurácie spinov. Pre veľa z nich totiž bude platiť, že dve konfigurácie dajú rovnaký výsledok s opačným znamienkom a teda sa odčítajú. Napríklad pre kubickú mriežku bude prvý netriviálny príspevok až rádu v^4.

Príklad 8 (3-stavový Pottsov model)**.** Toto je vcelku štandardný príklad a k jeho riešeniu by nemal byť problém dogoogliť sa.

Teória stredného poľa

Príklad 9 (■ Hyperkubická mriežka)**.** Riešenie príkladu vo videu.

Príklad 10 (■ Isingove kritické koeficienty zo stredného poľa)**.** Riešenie príkladu vo videu.

Príklad 11 (Widom scaling)**.** Pripomeňme si, že Widomovo škálovanie predpokladá, že voľná energia sa v okolí kritického bodu rozpadne na regulárnu časť, ktorá je konečná a na singulárnu časť, ktorá je homogénna a teda

$$f_s(\lambda^p \varepsilon, \lambda^q B) \sim \lambda^d f_s(\varepsilon, B) \ ,$$

kde d je rozmer priestoru, ε je relatívna kritická teplota a B je všeobecný parameter usporiadania, napríklad magnetické pole. V tomto vzťahu sú p a q parametre modelu. Správnym derivovaním tohto vzťahu získame potrebné správanie funkcie odozvy v okolí kritického bodu a z neho požadovaný kritický koeficient.

Napríklad pre magnetizáciu pri nulovom poli dostaneme

$$\lambda^q M(\lambda^p \varepsilon, \lambda^q B) = \lambda^d M(\varepsilon, H) \ .$$

Tento vzťah má platiť všeobecne pre ľubovoľné hodnoty B a λ. Ak zvolíme nulové pole a $\lambda = (-\varepsilon)^{-1/p}$, dostaneme

$$M(\varepsilon, 0) \sim (-\varepsilon)^{\frac{d-q}{p}} \ ,$$

odkiaľ odčítame kritický koeficient

$$\beta = \frac{d-q}{p} \ .$$

Z toho istého vzťahu sa dá získať koeficient $\delta = q/(d-q)$.

Pre kritické koeficienty γ, γ' bude dôležitá susceptibilita pri konštantnej teplote

$$\lambda^{2q} \chi(\lambda^p \varepsilon, \lambda^q B) = \lambda^d \chi(\varepsilon, B) \ ,$$

odkiaľ

$$\gamma = \gamma' = \frac{2q-d}{p} \ .$$

Pre koeficienty α, α' je zas podstatná tepelná kapacita pri konštantnom B, pre ktorú dostaneme

$$\lambda^{2p} c(\lambda^p \varepsilon, \lambda^q B) = \lambda^d c(\varepsilon, B)$$

a potom

$$\alpha = \alpha' = 2 - \frac{d}{p} \ .$$

Podstatné je najmä to, že aj bez vedomosti parametrov p a q dostávame medzi kritikými koeficientami netriválne vzťahy, ktoré sa dajú experimentálne overiť.

Betheho aproximácia

Betheho aproximácia je rozírenie metódy stredného poľa, kde spin na ktorý sa pozeráme interaguje s okolitými spinmi plnohodnotne, ale tie už cítia iba stredné pole. Čo presne sa berie ako okolité spiny závisí od toho, ako presne spravíte aproximáciu. Aj táto metóda vedie na selfkonzistentnú rovnicu, ktorá bude komplpikovaná, ale informácia o kritickej teplote sa z nej bude dať aj tak získať.

Viac o Betheho aproximácii sa dozviete napríklad v poznámkach od Matúša Meda.

Príklad 12 (1D a 2D Ising model)**.** Riešenie je spomínaných poznámkach.

Príklad 13 (Hyperkubická mriežka)**.** Toto je priamočiare zovšeobecnenie prechádzajúceho výsledku, jediné, čo sa mení je počet susedov a podmienka bude

$$\coth \beta_c J = 2d - 1 \ .$$

Príklad 14 (Hexagonálna mriežka)**.** Keď si to dobre rozmyslíte, v prechádzajúcom príklade sa $2d$ objavilo ako počet susedov v klastri. Tým pádom stačí položiť $d = 3/2$.