Física Teórica 3 − 2do. cuatrimestre de 2013

Relaciones de recurrencia para Ising en una dimensión

Un método alternativo para encontrar la función de partición en el modelo de Ising en una dimensión es el de las relaciones de recurrencia. La idea es escribir la función de partición de n espines en términos de las funciones de partición con un número menor de espines. Obtenida la relación de recurrencia, como resulta lineal en Z_n, puede resolverse fácilmente.

Los dos problemas típicos de Ising en una dimensión son la cadena con extremos abiertos y la cadena con extremos cerrados, también llamada cadena periódica. Uno termina encontrando que satisfacen la misma ecuación de recurrencia,

$$Z_n = 2e^{\beta J}\cosh(\beta\mu H)Z_{n-1} - e^{2\beta J}\left(1 - e^{-4\beta J}\right)Z_{n-2},$$

que sin campo se reduce a

$$Z_n = 2e^{\beta J}Z_{n-1} - e^{2\beta J}\left(1 - e^{-4\beta J}\right)Z_{n-2}.$$

Veremos que la cadena abierta sin campo satisface una ecuación de recurrencia todavía más simple,

$$Z_n = 2\cosh(\beta\mu H)Z_{n-1}.$$

Advertencia

Todas las cuentas son elementales pero bastante tediosas. El consejo es que vean muy por arriba qué es lo que hay que hacer y que traten de hacerlo ustedes mismos. Los casos están ordenados de menor a mayor dificultad. Muchos de los cálculos pueden seguir caminos alternativos, despejando una cosa u otra o tratando de reducir expresiones según tal o cual criterio. Valor.

Notación

Para una cadena lineal de n espines en un campo externo H, la energía es

$$E(s_1,\ldots,s_n) = -\mu H\sum_{i=1}^{n} s_i - J\sum_i s_i s_{i+1}.$$

Para la cadena con extremos abiertos, la última suma va de $i = 1$ hasta $n - 1$. Si la cadena es cerrada, va desde $i = 1$ hasta n, y por convención $s_{n+1} = s_1$. Defino además

$$x = e^{\beta\mu H}$$

$$y = e^{\beta J}.$$

Cadena abierta sin campo

La función de partición es

$$Z_n = \sum_{s_1,\ldots,s_n} y^{s_1 s_2 + \ldots + s_{n-1} s_n}.$$

Para simplificar la notación, defino la función $j(1,m)$ del siguiente modo:

$$j(1,m) = s_1 s_2 + s_2 s_3 + \ldots + s_{m-1} s_m.$$

También resumiré los índices bajo la sumatoria, de forma que

$$Z_n = \sum_{1,n} y^{j(1,n)}. \tag{1}$$

Separando todos los términos donde aparece el espín s_n y sumando explícitamente sobre este espín, queda

$$Z_n = \sum_{1,n} y^{j(1,n-1)} y^{s_{n-1} s_n} = \sum_{1,n-1} y^{j(1,n-1)} \left(y^{s_{n-1}} + y^{-s_{n-1}} \right).$$

La observación afortunada consiste en notar que el último paréntesis en realidad no depende de s_{n-1}, puesto que para $s_{n-1} = \pm 1$ siempre es igual a $y + 1/y$. Luego,

$$Z_n = \left(y + \frac{1}{y} \right) \sum_{1,n-1} y^{j(1,n-1)}.$$

Ahora bien, por comparación con la ec. (1), la última sumatoria es la función de partición de la cadena de $n-1$ espines. Entonces,

$$Z_n = \left(y + \frac{1}{y} \right) Z_{n-1}. \tag{2}$$

Como en realidad $y = e^{\beta J}$, puede escribirse

$$Z_n = 2 \cosh(\beta J) Z_{n-1}.$$

Bajando de a un n por vez y teniendo en cuenta que a un espín solo corresponde $Z_1 = 2$, se obtiene que

$$Z_n = 2^n \left[\cosh(\beta J) \right]^{n-1}. \tag{3}$$

El caso con campo es bastante más trabajoso.

Cadena abierta con campo

La función de partición es ahora

$$Z_n = \sum_{s_1,\ldots,s_n} x^{s_1 + \ldots + s_n} \; y^{s_1 s_2 + \ldots + s_{n-1} s_n}.$$

Defino una nueva función $h(1,m)$ para escribir la interacción con el campo externo,

$$h(1,m) = \sum_{i=1}^{m} s_i = s_1 + \ldots + s_m.$$

Mediante esta función y la definida más arriba para llevar la interacción entre los espines, queda

$$Z_n = \sum_{1,n} x^{h(1,n)} y^{j(1,n)}.$$

Separando todos los términos en donde aparece s_n queda

$$Z_n = \sum_{1,n} x^{h(1,n-1)} y^{j(1,n-1)} x^{s_n} y^{s_{n-1}s_n}.$$

Ahora se suma sobre s_n para tratar de reducir todo a un caso con un menor número de espines:

$$Z_n = \sum_{1,n-1} x^{h(1,n-1)} y^{j(1,n-1)} \left[x y^{s_{n-1}} + \frac{1}{x} y^{-s_{n-1}} \right]. \tag{4}$$

Esta ecuación va a servir de referencia más adelante. Sumando ahora sobre s_{n-1} se obtiene

$$Z_n = \sum_{1,n-2} x^{h(1,n-2)} y^{j(1,n-2)} \left[x^2 y y^{s_{n-2}} + \frac{1}{y} y^{-s_{n-2}} + \frac{1}{y} y^{s_{n-2}} + \frac{y}{x^2} y^{-s_{n-2}} \right]$$

$$= \sum_{1,n-2} x^{h(1,n-2)} y^{j(1,n-2)} \left\{ y \left[x^2 y^{s_{n-2}} + \frac{1}{x^2} y^{-s_{n-2}} \right] + \frac{1}{y} \left[y^{s_{n-2}} + y^{-s_{n-2}} \right] \right\}$$

Esto todavía no tiene el aspecto de nada de lo escrito más arriba. Pero algo puede hacerse si dentro del primer corchete se suman y restan los términos adecuados para formar la combinación de potencias de x y de y que aparecen en la ec. (4):

$$x^2 y^{s_{n-2}} + \frac{1}{x^2} y^{-s_{n-2}} = x \left(x y^{s_{n-2}} + \frac{1}{x} y^{-s_{n-2}} \right) + \frac{1}{x} \left(x y^{s_{n-2}} + \frac{1}{x} y^{-s_{n-2}} \right) - \left(y^{s_{n-2}} + y^{-s_{n-2}} \right)$$

$$= \left(x + \frac{1}{x} \right) \left(x y^{s_{n-2}} + \frac{1}{x} y^{-s_{n-2}} \right) - \left(y^{s_{n-2}} + y^{-s_{n-2}} \right).$$

Luego

$$Z_n = \sum_{1,n-2} x^{h(1,n-2)} y^{j(1,n-2)} \left[y \left(x + \frac{1}{x} \right) \left(x y^{s_{n-2}} + \frac{1}{x} y^{-s_{n-2}} \right) - y \left(y^{s_{n-2}} + y^{-s_{n-2}} \right) + \frac{1}{y} \left(y^{s_{n-2}} + y^{-s_{n-2}} \right) \right]$$

$$= y \left(x + \frac{1}{x} \right) \sum_{1,n-2} x^{h(1,n-2)} y^{j(1,n-2)} \left(x y^{s_{n-2}} + \frac{1}{x} y^{-s_{n-2}} \right) + \left(\frac{1}{y} - y \right) \sum_{1,n-2} x^{h(1,n-2)} y^{j(1,n-2)} \left[y^{s_{n-2}} + y^{-s_{n-2}} \right] \tag{5}$$

La contribución del primer término es fácil de leer si se lo compara con la ec. (4):

$$Z_n = y\left(x+\frac{1}{x}\right)Z_{n-1} + \left(\frac{1}{y}-y\right)\sum_{1,n-2} x^{h(1,n-2)}y^{j(1,n-2)}\left[y^{s_{n-2}}+y^{-s_{n-2}}\right].$$

La última contribución puede simplificarse notando otra vez que $y^{s_{n-2}}+y^{-s_{n-2}}$ es siempre igual a $y+1/y$. Lo que queda luego es simplemente Z_{n-2}. Así, al final,

$$Z_n = y\left(x+\frac{1}{x}\right)Z_{n-1} - y^2\left(1-\frac{1}{y^4}\right)Z_{n-2}.$$

Es fácil demostrar que cuando el campo externo es cero, es decir, cuando $x=1$, esta relación de recurrencia es compatible con la obtenida más arriba, ec. (2). Cuando se la resuelve explícitamente, se obtiene de nuevo la ec. (3). Eso queda como ejercicio.

Cadena cerrada sin campo

La función de partición es

$$Z_n = \sum_{s_1,\ldots,s_n} y^{s_1s_2+\ldots+s_{n-1}s_n+s_ns_1}.$$

Usando la función j definida más arriba y abreviando la notación de los índices bajo la sumatoria, queda

$$Z_n = \sum_{1,n} y^{j(1,n)}y^{s_ns_1} = \sum_{1,n} y^{j(1,n-1)}y^{s_{n-1}s_n+s_ns_1}.$$

Haciendo explícitamente la suma sobre el último espín, resulta

$$Z_n = \sum_{1,n-1} y^{j(1,n-1)}\left[y^{s_1+s_{n-1}}+y^{-(s_1+s_{n-1})}\right]. \tag{6}$$

Esta ecuación va a servir como referencia luego. Separando ahora los términos donde aparece s_{n-1} y sumando sobre ese espín queda

$$Z_n = \sum_{1,n-2} y^{j(1,n-2)}\left[yy^{s_1+s_{n-2}}+\frac{1}{y}y^{s_1-s_{n-2}}+\frac{1}{y}y^{-(s_1-s_{n-2})}+yy^{s_1+s_{n-2}}\right].$$

Separando según las potencias de y donde no aparecen los espines, se obtiene

$$Z_n = \sum_{1,n-2}\left\{y\left[y^{s_1+s_{n-2}}+y^{-(s_1+s_{n-2})}\right]+\frac{1}{y}\left[y^{s_1-s_{n-2}}+y^{-(s_1-s_{n-2})}\right]\right\}.$$

El término proporcional a y es, por comparación con la ecuación de referencia (6), igual a yZ_{n-1}. Entonces

$$Z_n = yZ_{n-1}+\frac{1}{y}\sum_{1,n-2} y^{j(1,n-2)}\left[y^{s_1-s_{n-2}}+y^{-(s_1-s_{n-2})}\right]. \tag{7}$$

Esta ecuación también va a servir de referencia un poco más adelante. Para llegar a escribir todo en términos de funciones conocidas, hay que sumar sobre un espín más, digamos s_{n-2}. Con esto resulta

$$Z_n = yZ_{n-1} + \frac{1}{y}\sum_{1,n-3} y^{j(1,n-3)} \left\{ \frac{1}{y}\left[y^{s_1+s_{n-2}} + y^{-(s_1+s_{n-2})}\right] + y\left[y^{s_1-s_{n-2}} + y^{-(s_1-s_{n-2})}\right] \right\}.$$

La primera contribución dentro de la sumatoria puede compararse nuevamente con la ecuación de referencia (6), y da Z_{n-2}/y^2. La segunda contribución, puede escribirse a partir de la ecuación (7), notando que hay un espín de diferencia en el largo de la cadena; en efecto,

$$\sum_{1,n-3} y^{j(1,n-3)} \left\{ \left[y^{s_1-s_{n-2}} + y^{-(s_1-s_{n-2})}\right] \right\} = y(Z_{n-1} - yZ_{n-2}).$$

Finalmente, sumando todas las contribuciones

$$Z_n = yZ_{n-1} + \frac{1}{y^2}Z_{n-2} + y(Z_{n-1} - yZ_{n-2}) = 2yZ_{n-1} - y^2\left(1 - \frac{1}{y^4}\right)Z_{n-2}. \tag{8}$$

Cadena cerrada con campo

La función de partición es

$$Z_n = \sum_{s_1,\ldots,s_n} x^{s_1+\ldots+s_n} y^{s_1s_2+\ldots+s_{n-1}s_n+s_ns_1}.$$

Separando los términos en donde aparece el último espín y usando las dos funciones definidas más arriba queda

$$Z_n = \sum_{1,n} x^{h(1,n-1)} y^{j(1,n-1)}\ x^{s_n} y^{s_{n-1}s_n+s_ns_1}.$$

Sumando explícitamente sobre el último espín queda

$$Z_n = \sum_{1,n-1} x^{h(1,n-1)} y^{j(1,n-1)} \left[xy^{s_1+s_{n-1}} + \frac{1}{x}y^{-(s_1+s_{n-1})}\right]. \tag{9}$$

Esta ecuación va a servir luego como referencia.

Separando ahora los términos en donde aparece s_{n-1}, resulta

$$\sum_{1,n-2} x^{h(1,n-2)} y^{j(1,n-2)}\ x^{s_{n-1}} y^{s_{n-2}s_{n-1}} \left[xy^{s_1+s_{n-1}} + \frac{1}{x}y^{-(s_1+s_{n-1})}\right].$$

Y luego de sumar explícitamente sobre s_{n-1},

$$Z_n = \sum_{1,n-2} x^{h(1,n-2)} y^{j(1,n-2)} \left\{ \left[x^2y^{s_1+s_{n-2}} + \frac{1}{x^2}y^{-(s_1+s_{n-2})}\right] y + \left[y^{s_1-s_{n-2}} + y^{-(s_1-s_{n-2})}\right]\frac{1}{y} \right\}. \tag{10}$$

Esta va a ser la segunda ecuación de referencia.

Aun hay que sumar sobre un espín más para que aparezcan las expresiones de referencia. Separando los términos en donde aparece s_{n-2} queda

$$Z_n = \sum_{1,n-3} x^{h(1,n-3)} y^{h(1,n-3)} x^{s_{n-2}} y^{s_{n-3}s_{n-2}} \left\{ \left[x^2 y^{s_1+s_{n-2}} + \frac{1}{x^2} y^{-(s_1+s_{n-2})} \right] y + \left[y^{s_1-s_{n-2}} + y^{-(s_1-s_{n-2})} \right] \frac{1}{y} \right\}.$$

Sumando sobre s_{n-2},

$$\begin{aligned} Z_n = \sum_{1,n-3} x^{h(1,n-3)} y^{h(1,n-3)} & \left\{ \left[x^3 y^{s_1+s_{n-3}} y^2 + x y^{s_1-s_{n-3}} + \frac{1}{x} y^{-(s_1-s_{n-3})} + \frac{1}{x^3} y^{-(s_1+s_{n-3})} y^2 \right] \right. \\ & \left. + x y^{s_1+s_{n-3}} \frac{1}{y^2} + \frac{1}{x} y^{s_1-s_{n-3}} + x y^{-(s_1-s_{n-3})} + \frac{1}{x} y^{-(s_1+s_{n-3})} \frac{1}{y^2} \right\}. \end{aligned}$$

Conviene agrupar según las potencias de y donde no aparece ningún espín,

$$\begin{aligned} Z_n = & \frac{1}{y^2} \sum_{1,n-3} x^{h(1,n-3)} y^{h(1,n-3)} \left[x y^{s_1+s_{n-3}} + \frac{1}{x} y^{-(s_1+s_{n-3})} \right] \\ & + y^2 \sum_{1,n-3} x^{h(1,n-3)} y^{h(1,n-3)} \left[x^3 y^{s_1+s_{n-3}} + \frac{1}{x^3} y^{-(s_1+s_{n-3})} \right] \\ & + \left(x + \frac{1}{x} \right) \sum_{1,n-3} x^{h(1,n-3)} y^{h(1,n-3)} \left[y^{s_1-s_{n-3}} + y^{-(s_1-s_{n-3})} \right]. \end{aligned} \tag{11}$$

El primer renglón es, por comparación con la ec. (9),

$$\frac{1}{y^2} Z_{n-2}.$$

La línea del medio la dejamos para después. En el último renglón sumamos y restamos lo necesario para formar la combinación de potencias de x y de y que aparecen en la ec. (10).

$$\begin{aligned} & y \left(x + \frac{1}{x} \right) \sum_{1,n-3} x^{h(1,n-3)} y^{h(1,n-3)} \left[\frac{1}{y} \left(y^{s_1-s_{n-3}} + y^{-(s_1 s_{n-3})} \right) + y \left(x^2 y^{s_1+s_{n-3}} + \frac{1}{x^2} y^{-(s_1+s_{n-3})} \right) \right] \\ & \qquad - y^2 \left(x + \frac{1}{x} \right) \sum_{1,n-3} x^{h(1,n-3)} y^{h(1,n-3)} \left(x^2 y^{s_1+s_{n-3}} + \frac{1}{x^2} y^{-(s_1+s_{n-3})} \right). \end{aligned}$$

El primer renglón es lo que buscábamos

$$y \left(x + \frac{1}{x} \right) Z_{n-1},$$

y en el último están los términos que hay que sustraer. Distribuyendo el prefactor $(x + 1/x)$ en este último renglón, se forma, por un lado, la combinación que aparece en la ec. (9), nada más que para una cadena de

$n-2$ espines, y por otro lado se forma la línea que había quedado pendiente en la ec. (11), pero con signo menos:

$$-y^2 \sum_{1,n-3} x^{h(1,n-3)} y^{h(1,n-3)} \left[xy^{s_1+s_{n-3}} + \frac{1}{x} y^{-(s_1+s_{n-3})} + x^3 y^{s_1+s_{n-3}} + \frac{1}{x^3} y^{-(s_1+s_{n-3})} \right]$$

$$= -y^2 Z_{n-2} - y^2 \sum_{1,n-3} x^{h(1,n-3)} y^{h(1,n-3)} \left[x^3 y^{s_1+s_{n-3}} + \frac{1}{x^3} y^{-(s_1+s_{n-3})} \right].$$

La última contribución entonces cancela los términos donde aparecen x^3 y x^{-3} en la ec. (11). Finalmente, sumando todas las contribuciones, queda

$$Z_n = y\left(x + \frac{1}{x}\right) Z_{n-1} - y^2 \left(1 - \frac{1}{y^4}\right) Z_{n-2}.$$

Esta expresión se reduce a la ec. (8) cuando el campo es cero, es decir, cuando $x = 1$.

Solución de la relación de recurrencia

El método estándar para resolver una relación de recurrencia lineal,

$$a_n = 2ba_{n-1} - ca_{n-2},$$

consiste en proponer soluciones de la forma $a_n = \lambda^n$. Reemplazando en la relación de recurrencia se obtiene una ecuación cuadrática para λ,

$$\lambda^2 - 2b\lambda + c = 0.$$

Si hay dos soluciones distintas, podrá escribirse*

$$a_n = C_1 \lambda_+^n + C_2 \lambda_-^n,$$

donde

$$\lambda_\pm = b^2 \pm \sqrt{b^2 + c}.$$

Las constantes C_i se fijan con dos valores conocidos de a_n, usualmente a_1 y a_2, pero hay que tener cuidado, porque sucede también que la relación de recurrencia haya sido deducida asumiendo implícitamente que n es mayor o igual que un dado entero.

Definiendo $b = \mu H \beta$, de modo que $x = e^b$, la relación de recurrencia para la cadena de Ising en una dimensión es

$$Z_n - 2y \cosh b + y^2 \left(1 - \frac{1}{y^4}\right) Z_{n-2}.$$

*Si hay sólo una raíz, el par de soluciones independientes es λ^n y $n\lambda^n$. Compárese con el caso análogo para una ecuación diferencial lineal con coeficientes constantes.

Aquí no importa si la cadena es abierta o cerrada. La ecuación cuadrática que hay que resolver es

$$\lambda^2 - 2y\cosh b + y^2\left(1 - \frac{1}{y^4}\right).$$

Las soluciones son

$$\lambda_\pm = y\left(\cosh b \pm \sqrt{(\sinh b)^2 + \frac{1}{y^4}}\right).$$

Las condiciones iniciales requieren cierto cuidado. Al deducir las relaciones de recurrencia se asumió que, dado Z_n, también existían y compartían las misma definición general Z_{n-1} y Z_{n-2}. Pero para 2 espines la cadena cerrada ya da problemas, puesto que para cerrar la cadena habría que incluir un segundo acoplamiento entre el único par de espines que hay, $s_1s_2 + s_2s_1$. La cadena cerrada con un sólo espín debería, siguiendo el mismo razonamiento, incluir un acoplamiento del espín consigo mismo, es decir, un término de interacción $s_1^2 = 1$. Si Z_1 y Z_2 se definen por convención de esa manera, fácilmente se encuentra que

$$\begin{aligned}
Z_1 &= \sum_{s_1} x^{s_1} y^{s_1^2} = \left(x + \frac{1}{x}\right) y, \\
Z_2 &= \sum_{s_1,s_2} x^{s_1+s_2}\; y^{s_1s_2+s_2s_1} = \left(x^2 + \frac{1}{x^2}\right) y^2 + \frac{2}{y^2}, \\
Z_3 &= \sum_{s_1,s_2,s_3} x^{s_1+s_2+s_3}\; y^{s_1s_2+s_2s_3+s_3s_1} = \left(x + \frac{1}{x}\right)\frac{3}{y} + \left(x^3 + \frac{1}{x^3}\right) y^3.
\end{aligned} \tag{12}$$

Además cumplen la relación de recurrencia, lo que es importante verificar porque esto quiere decir que Z_1 y Z_2 pueden usarse para encontrar C_1 y C_2, sin tener que recurrir, por suerte, a Z_3. El resultado es muy simple,

$$C_1 = C_2 = 1 \qquad\qquad \text{(cadena cerrada)}$$

Para la cadena abierta Z_1 y Z_2 se calculan sin ninguna redefinición. También es importante calcular Z_3 y verificar que Z_1, Z_2 y Z_3 satisfacen la relación de recurrencia, lo que en efecto ocurre. Entonces es posible calcular C_1 y C_2 a partir de Z_1 y Z_2. El resultado es bastante engorroso:

$$\begin{aligned}
C_1 &= \frac{1 + x^2 + xy^2R}{xRy\,(1+y^2)}, \\
C_2 &= \frac{y}{1+y^2}\left[1 - \frac{x\,(1+x^2)\,y^2R}{4x^2 + (-1+x^2)^2\,y^4}\right], \qquad \text{(cadena abierta)}
\end{aligned}$$

donde

$$R = \sqrt{\left(x + \frac{1}{x}\right)^2 + \frac{4}{y^4}}.$$

Como comentario al margen: si se intenta definir $Z_0 = 1$ para no tener que recurrir a Z_2, lo que involucra calcular $\lambda_\pm^2$, se encuentra que Z_2, Z_1 y Z_0 no cumplen con la relación de recurrencia, y esto vale tanto para la cadena abierta como cerrada.

En el límite en que $n \gg 1$ muchas expresiones se simplifican y pierde importancia si la cadena es cerrada o abierta. Este hecho depende de que $0 < \lambda_- < \lambda_+$, supuestos μH y J mayores que cero. En tal caso

$$Z_n = C_1\lambda_+^n + C_2\lambda_-^n = C_1\lambda_+^n \left[1 + \frac{C_2}{C_1}\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^n\right] \longrightarrow C_1\lambda_+^n.$$

Luego,

$$\frac{1}{n}\log Z_n \longrightarrow \lambda_+ + \mathcal{O}(1/n).$$

Vemos que las constantes C_1 y C_2 carecen de relevancia, mientras no se anulen.

Como caso especial consideremos $H = 0$, lo que implica $x = 1$ y

$$\lambda_\pm = y \pm \frac{1}{y}.$$

Para la cadena cerrada resulta

$$Z_n = \left(y + \frac{1}{y}\right)^n + \left(y - \frac{1}{y}\right)^n = 2^n\Big\{\,[\cosh(\beta J)]^n + [\sinh(\beta J)]^n\,\Big\}.$$

Para la cadena abierta se encuentra que $C_1 = 2y/(1+y^2)$ y $C_2 = 0$. Luego,

$$Z_n = \frac{2y}{1+y^2}\left(y + \frac{1}{y}\right)^n = 2\left(y + \frac{1}{y}\right)^{n-1} = 2^n\left[\cosh(\beta J)\right]^{n-1},$$

según lo que habíamos obtenido en un principio.