

Física Teórica 3 – 2do. cuatrimestre de 2014

Guía 8: Modelo de Ising

Problemas

1. (Huang §14.6, Pathria §12.1) En una dimensión, el modelo de Ising puede ser resuelto en forma exacta. El método que se usa en este problema es el de la *matriz de transferencia*.

(a) Considere una cadena cerrada de N espines. Muestre que la función de partición canónica es

$$Q_N(b, K) = \sum_{\substack{s_1, \dots, s_N \\ = \pm 1}} \exp \left[\sum_{i=1}^N (bs_i + K s_i s_{i+1}) \right],$$

donde $b = \beta\mu B$, $K = \beta J$, y $s_{N+1} = s_1$.

(b) Muestre que $Q_N = \text{Tr} (q^N)$, donde q es la matriz de 2×2 con elementos

$$q_{ss'} = \exp \left[\frac{b}{2} (s + s') + K s s' \right] \quad (s, s' = \pm 1).$$

Ayuda: los exponentes en Q_N pueden ser reescritos de manera simétrica como

$$\sum_{i=1}^N (bs_i + K s_i s_{i+1}) = \sum_{i=1}^N \left(b \frac{s_i + s_{i+1}}{2} + K s_i s_{i+1} \right).$$

(c) Muestre que la función de partición puede escribirse en la forma $Q_N = \lambda_+^N + \lambda_-^N$, donde $\lambda_{\pm} = e^K \left(\cosh b \pm \sqrt{\sinh^2 b + e^{-4K}} \right)$ son los autovalores de la matriz q .

(d) Muestre que $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln Q_N}{N} = \ln \lambda_+$.

(e) Calcule la magnetización media $M = M(T, B)$ y muestre que no hay magnetización espontánea cuando $B \rightarrow 0^+$. *Ayuda:* la magnetización media por espín es

$$\mu \bar{s} = \mu \frac{1}{N} \frac{\partial \ln Q_N}{\partial b} \Big|_K.$$

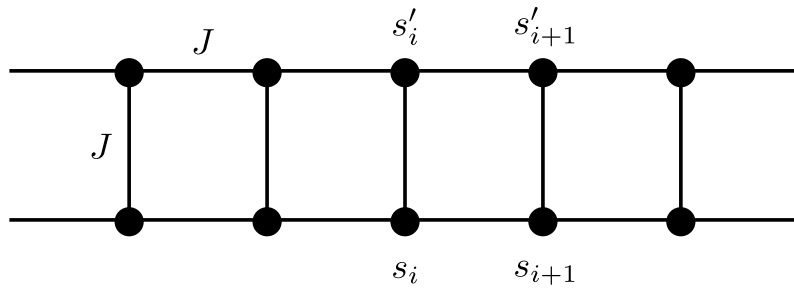
2. Use el método de la matriz de transferencia para resolver el problema de una doble cadena Ising cerrada y sin campo externo,

$$H = -J \sum_{i=1}^N (s_i s_{i+1} + s'_i s'_{i+1}) - J \sum_{i=1}^N s_i s'_i.$$

Muestre que para $N \gg 1$

$$\frac{1}{2N} \log Q_N \simeq \frac{1}{2} \log \left[2 \cosh K \left(\cosh 2K + \sqrt{1 + 4 \sinh^4 K} \right) \right],$$

donde $K = \beta J$. *Ayuda:* reescribir el término de interacción entre las cadenas de manera simétrica, $\sum_{i=1}^N s_i s'_i = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (s_i s'_i + s_{i+1} s'_{i+1})$. La matriz de transferencia será de 4×4 .



3. La aproximación de campo medio más simple para el modelo de Ising con condiciones periódicas consiste en escribir un hamiltoniano efectivo para un solo espín, s , reemplazando la interacción con sus γ primeros vecinos por un término efectivo de la forma $E_1 = -J\gamma s\bar{s}$, donde \bar{s} es el valor medio de cualquier espín. La interacción lineal con un campo magnético externo sigue siendo $-B\mu s$. Escriba la ecuación de autoconsistencia para el valor medio del espín y encuentre la temperatura crítica, T_c , por debajo de la cual hay magnetización espontánea. Para el caso $\gamma = 4$, compare esta solución con el valor exacto, $kT_c = -2J/\log(\sqrt{2} - 1)$.
4. En la aproximación de campo medio para un solo espín del problema anterior, halle los exponentes críticos de las siguientes magnitudes termodinámicas:
- La magnetización media a campo nulo, que se comporta como $M(T, B = 0) \sim (T_c - T)^\beta$ para $T \rightarrow T_c^-$.
 - La magnetización media en la temperatura crítica, que se comporta como $M(T_c, B) \sim B^{1/\delta}$ para $B \rightarrow 0$.
 - La susceptibilidad magnética $\chi_T(T, B = 0)$, la cual diverge como $(T_c - T)^{-\gamma}$ para $T \rightarrow T_c^-$.
5. (Dalvit, prob. 5.22) Considere una red cuadrada bidimensional formada por dos tipos de sitios A y B con momentos magnéticos μ_A y μ_B , respectivamente. El hamiltoniano es del tipo Ising, pero con interacción a primeros y segundos vecinos. Las constantes de acoplamiento son:

$$\begin{aligned} J_1 &> 0 && \text{entre sitios vecinos de la red } A \\ J_1 &> 0 && \text{entre sitios vecinos de la red } B \\ J_2 &< 0 && \text{entre sitios vecinos } A \text{ y } B \end{aligned}$$

- Escriba el hamiltoniano en términos de s_i^A y s_i^B .
- En la aproximación de campo medio más simple, calcule el campo magnético efectivo que ven los espines de la red A . Ídem para la red B .
- Halle las ecuaciones para $\langle s_i^A \rangle$ y $\langle s_i^B \rangle$.
- Muestre que la susceptibilidad magnética a campo nulo obedece la ley de Curie

$$\chi(T, B \rightarrow 0) \sim \frac{1}{T - T_c}.$$

(Computacional): Modelo de Ising y Método Monte Carlo

Se propone escribir el código para una simulación Monte Carlo del Modelo de Ising en 2D con condiciones de contorno periódicas, implementando el algoritmo de Metropolis. En grupos de 3 o 4 personas, se deberá entregar un informe donde se presenten y discutan los resultados numéricos obtenidos.

1. Preliminares

- Se sugiere implementar primero el algoritmo de Monte Carlo y luego de confirmar que está funcionando, agregar el cómputo de las cantidades a medir.
- En líneas generales es buena práctica diagramar en papel un esquema de la estructura del programa que se desea implementar (por ejemplo, cómo podría hacer para calcular fluctuaciones cuadráticas de observables o cómo implementar condiciones de contorno periódicas) antes de sentarse frente a la computadora. Le recomendamos también que comience tratando tamaños de redes pequeñas ($\sim 10 \times 10$) hasta asegurarse que el programa funciona como espera.
- A lo largo de este trabajo estudiaremos básicamente cuatro observables del sistema. La magnetización por sitio, m , la energía por sitio, e , y sus respectivas fluctuaciones $\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$. Su código de simulación debe reportar el valor de dichos observables a lo largo de la cadena de Markov generada.

2. Preequilibrio y tiempos de relajación

- Discuta cómo implementar la condición inicial del sistema en su algoritmo.
- La configuración inicial que haya elegido para comenzar el algoritmo, pone al sistema en un punto del espacio de fases que generalmente tiene poco que ver con configuraciones típicas exploradas por el sistema en equilibrio para valores dados de T . Analice, a partir de la evolución de los observables del ítem 1 el número de pasos de Markov necesarios para considerar al sistema “termalizado”. Realice esta estimación para diferentes temperaturas, en particular para temperaturas mayores, menores y cercanas a la T_c . Este análisis le debe servir para estimar el número de configuraciones iniciales que debe ser descartado para el cálculo de valores medios en equilibrio.

3. Magnetización y energía media

- Estime, como función de la temperatura $\langle m(T, B = 0) \rangle$ y $\langle e(T, B = 0) \rangle$. Para ello utilice una red de spins cuadrada de lado $L = 32$, y realice un barrido entre $T = 0$ y $T = 2T_c$. Para la región de $T \sim T_c$ aumente la resolución del sampleo. Compare lo obtenido con el resultado que se obtiene bajo la aproximación de campo medio. Discuta sobre el origen de las posibles diferencias.
- De manera similar, analice el comportamiento de las fluctuaciones de e y m en función de la temperatura. ¿Con qué cantidades físicas conocidas se relacionan dichas fluctuaciones?
- A partir de lo obtenido en 3(a) y 3(b) obtenga una estimación para la temperatura crítica T_c

4. (Opcional) Efectos de tamaño finito

Discuta los efectos del tamaño finito del sistema en la estimación de observables definidos en el límite termodinámico. Encuentre estimaciones de T_c para redes de diferente tamaño (por ejemplo $L = 8, 16, 64, 128, 256$). ¿Qué tendencia observa? ¿Es posible extrapolar lo encontrado para $L \rightarrow \infty$?

5. (Opcional) Exponentes críticos

Con el valor de T_c , encuentre el exponente crítico β tal que $m \sim (T - T_c)^\beta$. Compare con el resultado de la aproximación de campo medio.