

Ising_1

侍



Modelo de Ising

Sea una red en d-dimensiones

En cada nodo colocamos un "spin"

En la formulacion "original" el spin puede tomar dos valores:

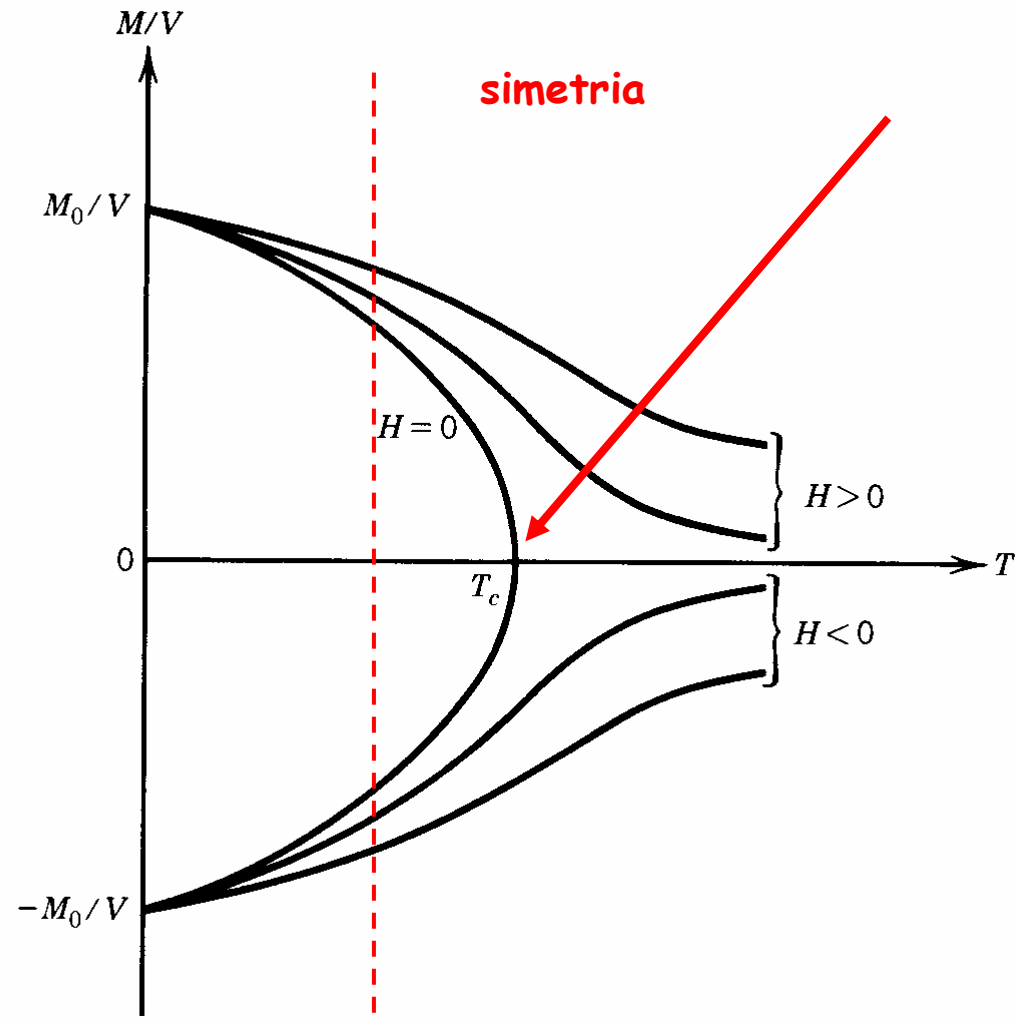
$$\pm 1$$

Objetivo de este modelo : explicar el comportamiento ferromagnetico o paramagnetico

Algunos metales Fe , Ni son tales que para $T < T_c$ toman un campo magnetico macroscopico distinto de 0

Material	Curie temperature (K)
Fe	1043
Co	1388
Ni	627
Gd	293
Dy	85
CrBr ₃	37
Au ₂ MnAl	200
Cu ₂ MnAl	630
Cu ₂ MnIn	500
EuO	77
EuS	16.5
MnAs	318
MnBi	670
GdCl ₃	2.2
Fe ₂ B	1015
MnB	578

Data from F. Keffer, Handbuch der Physik, 18, pt. 2, New York: Springer-Verlag, 1966 and P. Heller, Rep. Progr. Phys., 30, (pt II), 731 (1967)



Magnetización media por unidad de volumen para un ferromagnético típico, para distintos valores del campo magnético externo

+	+	+	+	+	+	+	+
+	-	-	+	-	-	-	+
+	+	+	-	-	+	-	+
+	+	+	+	+	-	-	+
+	+	-	-	+	-	+	+
+	+	-	-	+	-	+	+
+	+	+	+	-	-	+	+
+	+	+	+	+	+	+	+

En este sistema en su version "original" el Hamiltoniano del sistema adopta la forma

$$E_I\{s_i\} = - \sum_{\{ij\}} \varepsilon_{ij} s_i s_j - H \sum_i s_i$$

Donde $\{ij\}$ denota pares de spines que son vecinos inmediatos.

H denota un posible campo magnetico externo.

ε_{ij} es el parametro de acoplamiento.

De ahora en mas supondremos que $\varepsilon_{ij} \rightarrow \varepsilon \Rightarrow$ homogeneo

$$E_I\{s_i\} = -\varepsilon \sum_{\{ij\}} s_i s_j - H \sum_i s_i$$

Si $\varepsilon > 0$ sera ferromagnetico (trabajaremos en este caso)

Si $\varepsilon < 0$ sera paramagnetico.

La funcion de particion sera :



$$Q_I(H, T) = \sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_N} \exp(-\beta E_I\{s_i\})$$

Donde los s_i toman los valores ± 1 o sea que hay 2^N terminos.

De aqui

$$A_I(H, T) = -kT \log Q_I(H, T)$$

$$U_I(H, T) = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{A_I}{kT} \right)$$

$$C_I(H, T) = \left(\frac{\partial U_I}{\partial T} \right)$$

$$M_I(H, T) = -\frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{A_I}{kT} \right) = \left\langle \sum s_i \right\rangle$$

Posibles extensiones del model son:

- a) los posibles valores de s son $\pm 1, \pm 2, \dots$ modelo de Potts
- b) interacciones de rango mayor

Magnetización espontánea en 1 dimensión

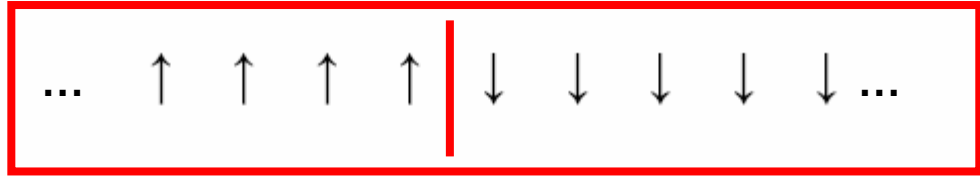
Supongamos que tenemos un cadena lineal de spines perfectamente alineados

↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑

Supongamos ahora que elegimos un dado spin

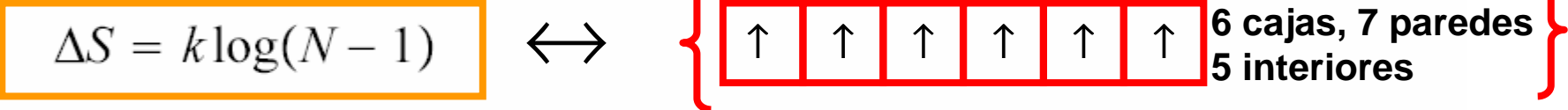
↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑

e invertimos todos los spines "a la derecha" del spin seleccionado



El cambio de energía es $\Delta E = 2\varepsilon$ *

El cambio de entropía está asociado a todas las formas de "poner la pared de dominio"



$$\Delta A = 2\varepsilon - kT \log(N-1) \quad **$$

al agregar la pared para $T > 0$ y $N \rightarrow \infty \Rightarrow$ A decrece
 Entonces se favorece la aparición de paredes \Rightarrow
 randomiza y no hay magnetización espontánea

Para $T = 0$ si hay magnetización espontánea

* $\Delta E = E_f - E_i = -\varepsilon[(1)(-1) - (1)(1)] = 2\varepsilon$

** $\Delta A = 0 \Rightarrow \bar{T} = \frac{2\varepsilon}{k \log(N-1)}$

Magnetización espontánea en 2 dimensiones

Sea N_+ el número de spines "up" (para arriba)

Sea N_- el número de spines "down" (para abajo)

La Magnetización media por spin es

$$M = (N_+ - N_-)/2N$$

Por simetría el valor medio de M debe ser 0

Definimos entonces

$$M_0 = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle |M| \rangle$$

Donde $\langle \ \rangle$ denota un promedio térmico

Lo hacemos sobre el
módulo por la degeneración

Dada una estructura como esta tendremos que ver como hacemos para calcular el numero de spines "up" o el de los "down". Calculando alguno de ellos por comparacion con $1/2 N$ sabremos si hay magnetizacion espontanea

+	+	+	+	+	+	+	+
+	-	-	+	-	-	-	+
+	+	+	-	-	+	-	+
+	+	+	+	+	-	-	+
+	+	-	-	+	-	+	+
+	+	-	-	+	-	+	+
+	+	+	+	-	-	+	+
+	+	+	+	+	+	+	+

Examinando la figura vemos que tenemos "agrupamientos" de spines + y de spines -

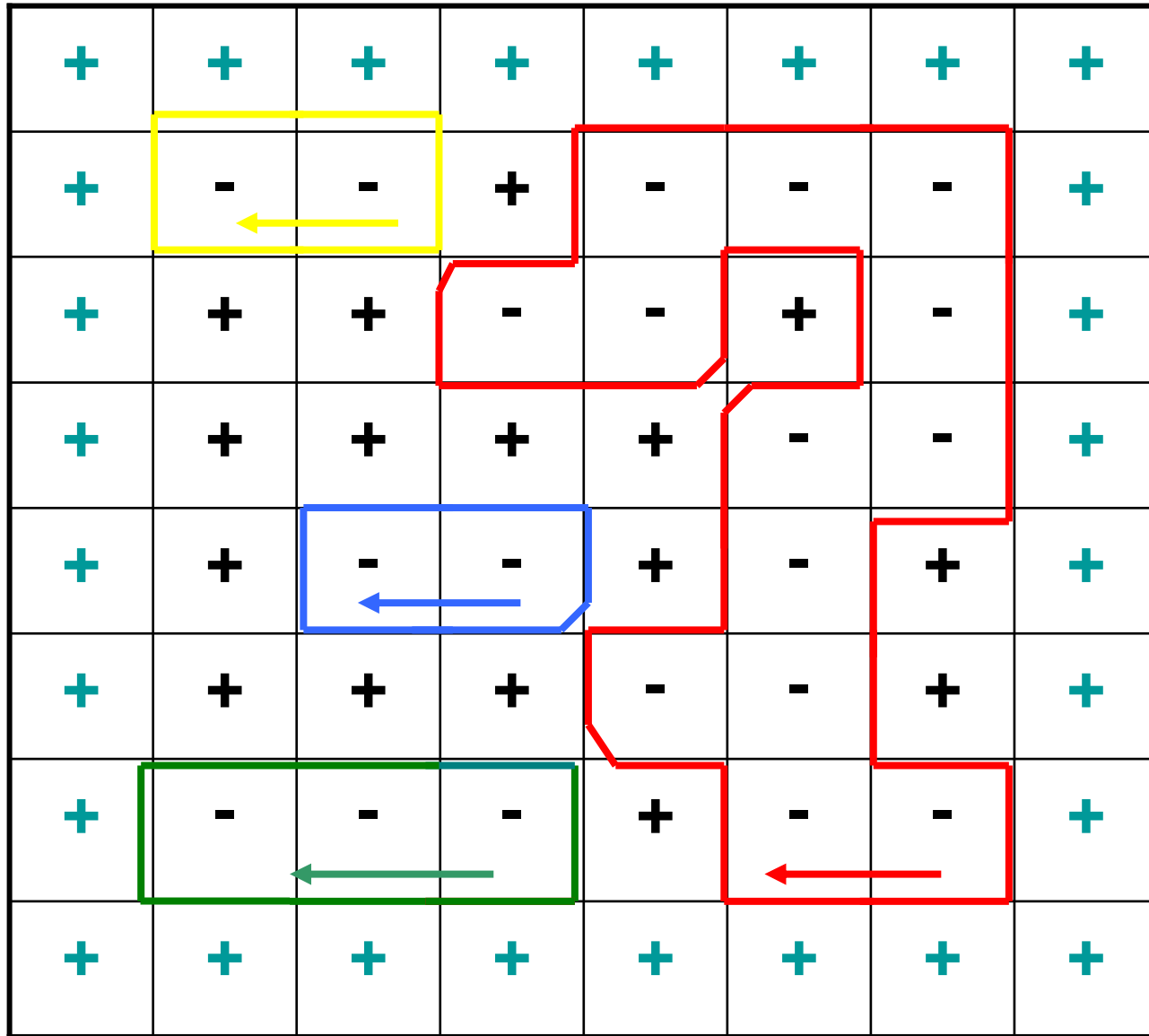
Podemos sistematizar esto mediante la introduccion de "paredes de dominios" \Rightarrow trazamos lineas "rodeando" los spines , digamos, "-" . Fijamos la condicion que los "-" queden a la derecha de la pared. Las paredes tienen una orientacion . (Así distinguimos dos paredes iguales pero que rodean distintos tipos de spines)

Observar que hemos colocado spines + a lo largo de las columnas y filas exteriores.

Esto tiene como objetivo que en el limite $N \rightarrow \infty$, estos espines "+", actuarán como una perturbacion pequeña que rompe la simetria.

Ademas si las paredes rodean a los "-" las capas exteriores hacen a las paredes cerradas.

+	+	+	+	+	+	+	+
+	-	-	+	-	-	-	+
+	+	+	-	-	+	-	+
+	+	+	+	+	-	-	+
+	+	-	-	+	-	+	+
+	+	-	-	+	-	+	+
+	+	+	+	-	-	+	+
+	+	+	+	+	+	+	+



La longitud de las paredes se mide en unidades del espaciamento.

Tomamos una red cuadrada de tamaño $\sqrt{N} \times \sqrt{N}$

Dada la red cuadrada, el dominio minimo tendra una pared de longitud 4 y de area 1





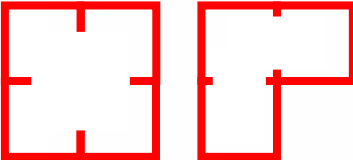

Dada una pared cerrada queda definida un area. El area da directamente la magnetizacion del dominio.

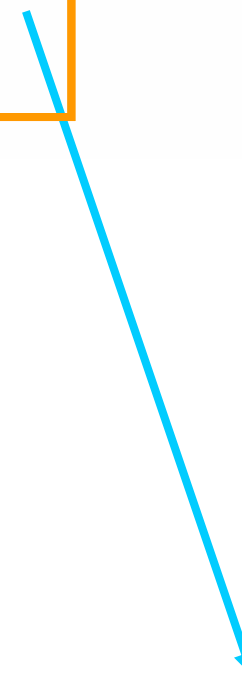
Los dominios estaran caracterizados por la longitud de la pared que los define $\rightarrow b$, por su "forma" y por su orientacion.

Recordar que los dominios "contienen" spines (-1)

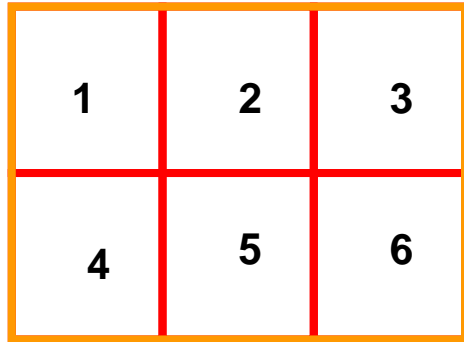
Vemos que: el area es siempre menor que $b^2/16$

$$\text{lados} = b \quad \text{areas} \leq \frac{b^2}{16}$$

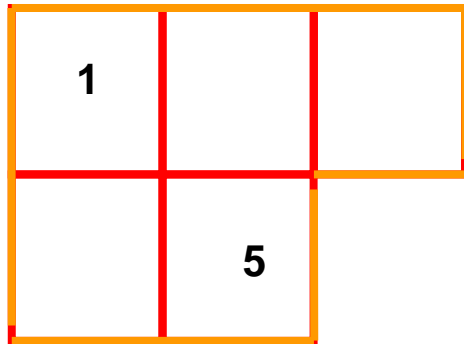
		4	1	1
		6	2	2.25
		8	3,4	4
		10	6,5,4	6.25



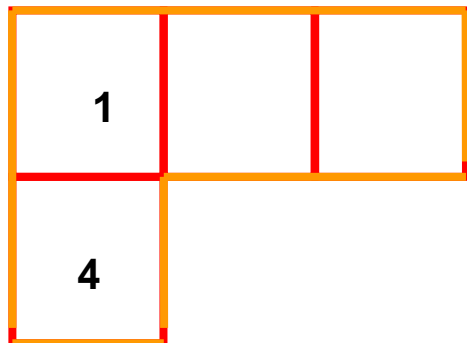
Fijándonos solo en los segmentos exteriores, algunos casos son:



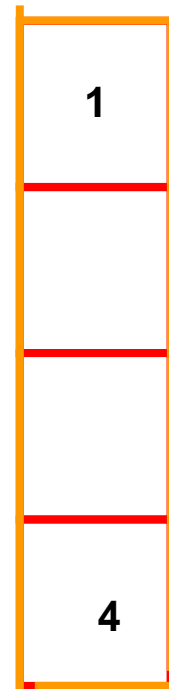
← $B=10, A=6$



← $B=10, a=5$



← $B=10, a=4$ →



Equivalencia de dominios

Dos dominios serán iguales si tienen todos sus atributos iguales:

igual "perimetro"
igual "forma"
igual orientación
igual "posicion" }

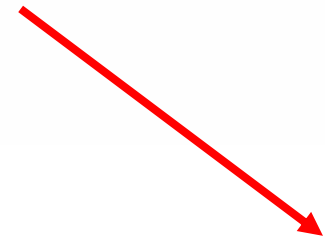
Es decir que al superponer dos redes los dominios iguales se superponen exactamente

Sea un dominio caracterizado por

- a) b denota la longitud
- b) i denota los distintos dominios en la clase caracterizada por b

Sea $\chi(b,i)$ una "funcion" que vale 1 si el dominio (b,i) se da en una dada configuracion de spines entonces, si llamamos

- a) $S_{(b,i)}$ el numero de spines en el dominio (b,i)
- b) $m(b)$ el numero de dominios con b lados



recorremos todos los posibles dominios de b lados ("formas")

$$N_- = \sum_{b=4,6,8,\dots} \sum_{i=1}^{m(b)} \chi(b,i) S_{(b,i)}$$

recorremos todos los posibles valores de b lados

sumamos estos spines si $\chi=1$

ocurre el (b,i)?

$$N_- = \sum_{b=4,6,8,\dots} \sum_{i=1}^{m(b)} \chi(b, i) S_{(b,i)}$$

Entonces, tomando en cuenta que:

a) $S_{(b,i)} \leq \frac{b^2}{16}$

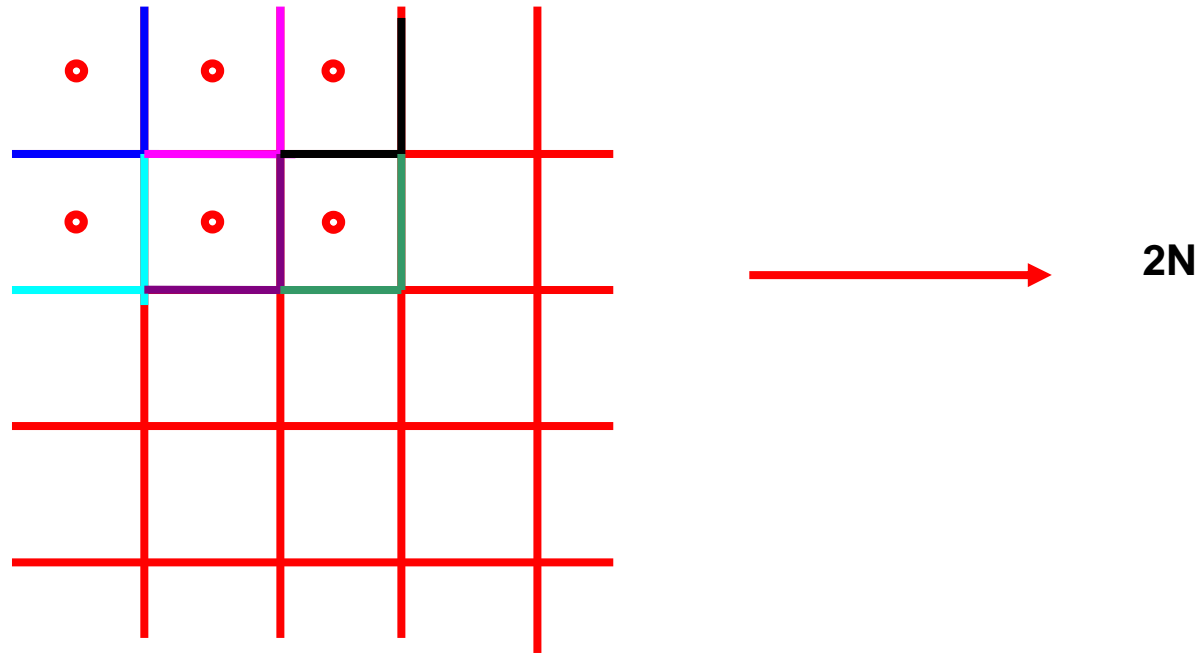
b) $m(b)$ puede ser acotado por :

- para colocar b segmentos empiezo por uno para el cual tengo N' posibilidades, con N' el numero de links en la red adjunta. $N' = 2N$ (N es el numero de spins)

- los $b - 1$ siguientes los coloco uno por uno y en cada caso tengo 3 posibilidades (no puedo volver) $\Rightarrow 3^{(b-1)}$ pero los puedo poner en alguno de los 2 extremos $\Rightarrow \cdot 2$. Ahora tengo que tener en cuenta que estoy contando b de mas

Veamos esto

Respecto del numero de segmentos para construir una pared



$$N_- = \sum_{b=4,6,8,\dots} \sum_{i=1}^{m(b)} \chi(b, i) S_{(b,i)}$$

Entonces, tomando en cuenta que:

a) $S_{(b,i)} \leq \frac{b^2}{16}$

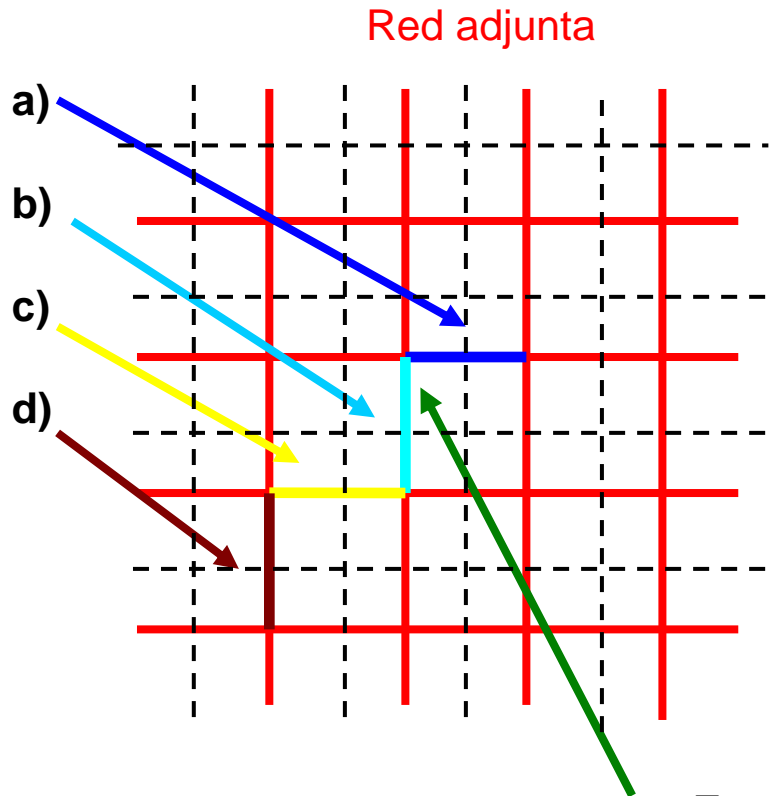
b) $m(b)$ puede ser acotado por :

- para colocar b segmentos empiezo por uno para el cual tengo N' posibilidades, con N' el numero de links en la red adjunta. $N' = 2N$ (N es el numero de spins)

- los $b - 1$ siguientes los coloco uno por uno y en cada caso tengo 3 posibilidades (no puedo volver) $\Rightarrow 3^{(b-1)}$ pero los puedo poner en alguno de los 2 extremos $\Rightarrow \cdot 2$. Ahora tengo que tener en cuenta que estoy contando b de mas

Veamos esto

Dos paredes son iguales si tienen la misma forma, tamaño y posición



Para longitud
 $b=4$

Esta pared se puede generar

EMPEZANDO por a), por b) por c) o por d)

O sea de cuatro maneras, luego tiene

degeneración $4 \rightarrow b$ de mas!

Como en la aproximación anterior estoy considerando paredes abiertas y cerradas vale :

$$m(b) \leq 2N \cdot 2 \cdot \frac{3^b}{3b}$$

extremos

Con todo esto

elección

$$(3^{b-1}/b) \cdot (3/3)$$

$$N_- \leq \sum_{b=4,6,8,\dots} \frac{b^2}{16} \sum_{i=1}^{4N \cdot 3^b / 3b} \chi(b, i)$$

Calculando el valor medio de N_-

$$\langle N_- \rangle \leq \sum_{b=4,6,8,\dots} \frac{b^2}{16} \sum_{i=1}^{4N \cdot 3^b / 3b} \langle \chi(b, i) \rangle$$

Calculamos ahora $\langle \chi(b, i) \rangle$

$$\langle \chi(b, i) \rangle = \frac{\sum'_{\{s_i\}} \exp(-\beta E_{\{s_i\}})}{\sum_{\{s_i\}} \exp(-\beta E_{\{s_i\}})}$$

Donde la $\sum'_{\{s_i\}}$ denota la suma sobre las configuraciones que contienen la (b, i) . (promedio de 1' para esta pared especifica)
Como queremos acotar, si removemos terminos del denominador

Limitemos la suma en el **denominador** a aquellos terminos en el numerador, en los que los spines en (b, i) se dan vuelta.

~

Si llamamos C a la configuración original y \tilde{C} a la resultante, habra un ΔE asociado al cambio de la

interaccion "por" la pared. Para un segmento

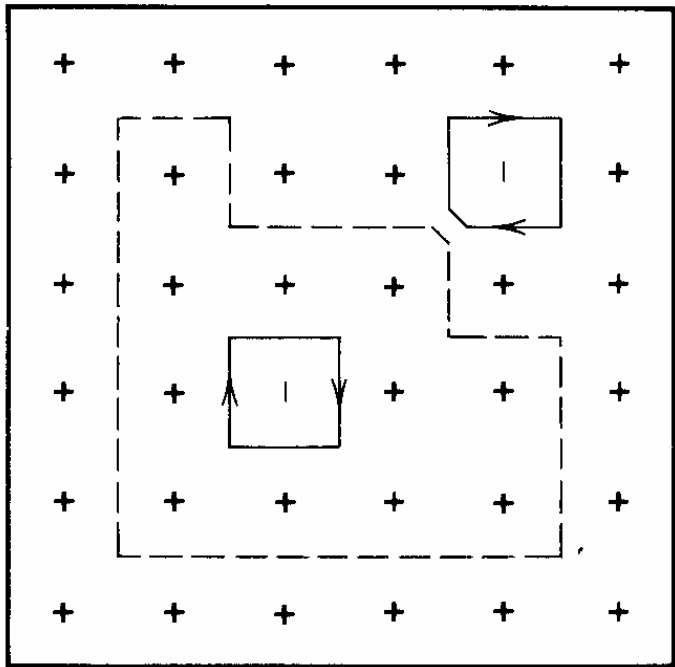
$$-|+ \rightarrow +|+ \Rightarrow \Delta E = -2\varepsilon \Rightarrow$$

$$E_C - 2\varepsilon b = E_{\tilde{C}}$$

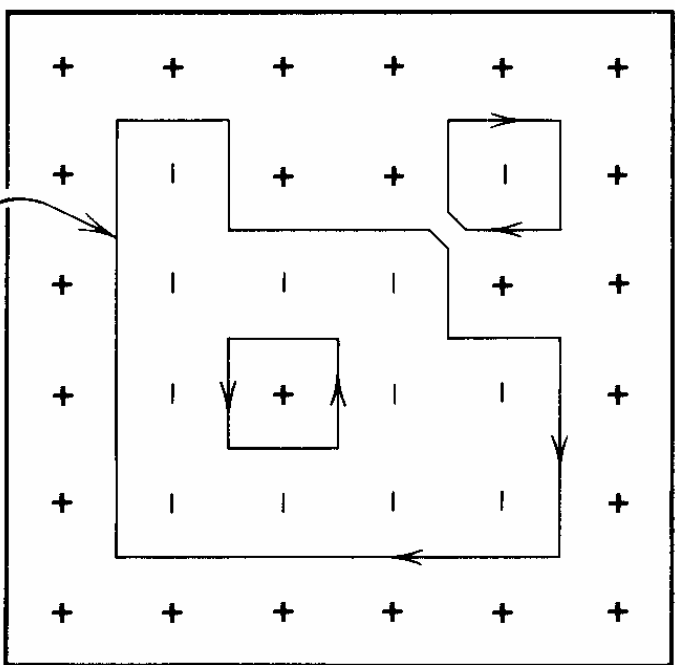
por lo tanto

$$\langle \chi(b, i) \rangle \leq \exp(-2\beta\varepsilon b)$$

$$\frac{\sum e^{-\beta E_C}}{\sum e^{-\beta E_{C'}}} = \frac{\sum e^{-\beta E_C}}{\sum e^{-\beta(E_C - 2\varepsilon b)}} = \frac{\sum e^{-\beta E_C}}{e^{\beta 2\varepsilon b} \sum e^{-\beta E_C}} = e^{-\beta 2\varepsilon b}$$



Configuration \tilde{C}



Configuration C

$$\begin{aligned}
\langle N_- \rangle &\leq \sum_{b=4,6,8,\dots} \frac{b^2}{16} \underbrace{\sum_{i=1}^{4N3^b/3b} \exp(-2\beta\epsilon b)}_{\text{(no depende de i)}} \\
&\leq \sum_{b=4,6,8,\dots} \frac{b^2}{16} 4N \cdot \frac{3^b}{3^b} \exp(-2\beta\epsilon b) \\
&\leq \frac{N}{12} \sum_{b=4,6,8,\dots} 3^b b \exp(-2\beta\epsilon b)
\end{aligned}$$

Si llamamos $\kappa = 3 \exp(-2\beta\epsilon)$ e imponemos $\kappa < 1$

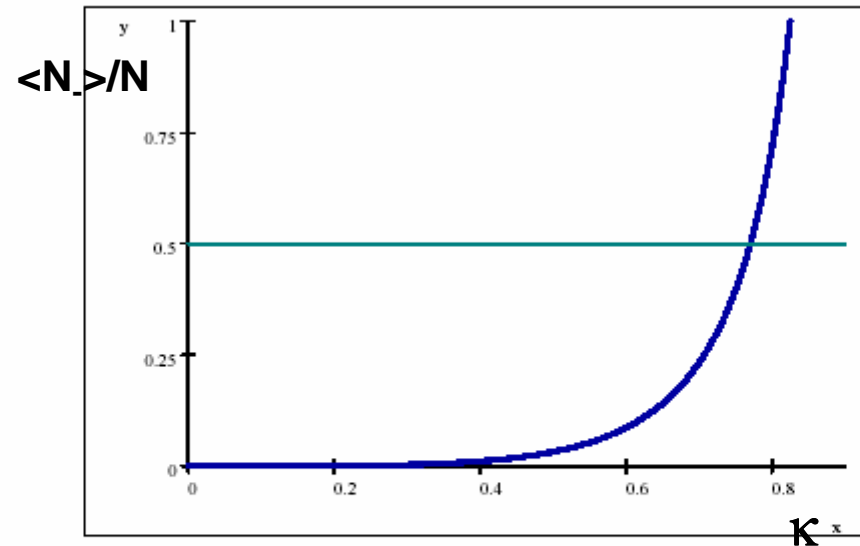
$$\langle N_- \rangle \leq \frac{N}{6} \kappa^4 \frac{2 - \kappa^2}{(1 - \kappa^2)^2}$$

dividiendo por N tendremos el $\langle N_- \rangle$ por nodo y

$$\sum b \cdot x^b = \frac{x}{(1-x)^2}$$

$$\left[= \frac{N}{12} \sum_{b=4,6,\dots} b \kappa^b = \frac{N}{12} \left[\sum_{b'=1} 2b' (\kappa^2)^{b'} - 2\kappa \kappa^2 \right] \right]$$

$$\frac{1}{6} \kappa^4 \frac{2 - \kappa^2}{(1 - \kappa^2)^2}$$



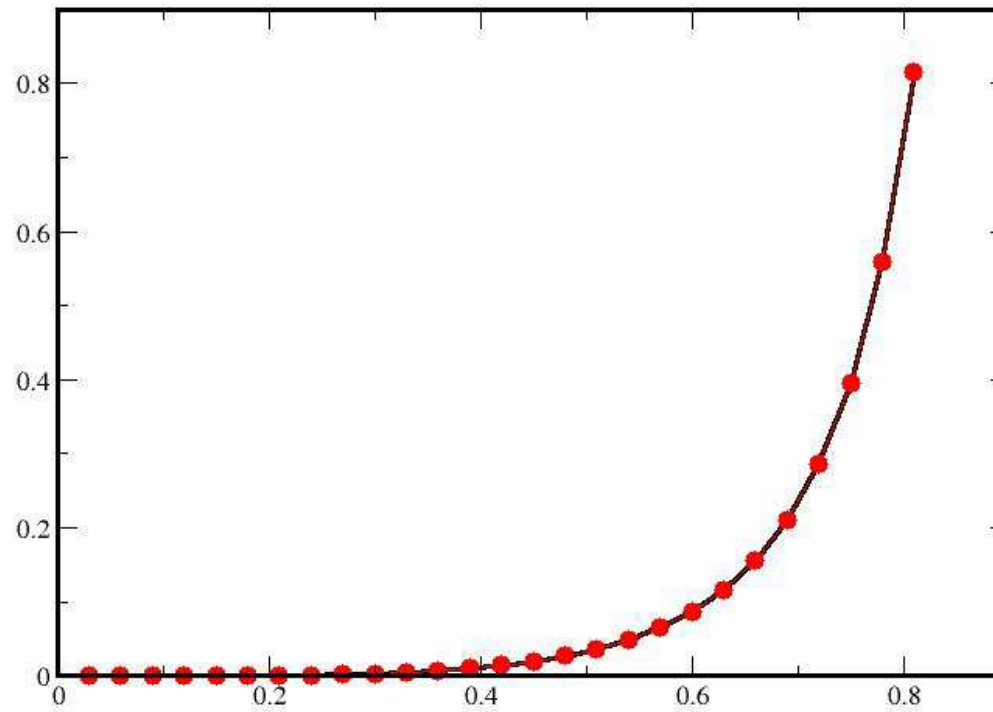
Luego existen valores de κ para los cuales podemos asegurar que $\frac{\langle N_- \rangle}{N}$ es menor que 0.5

$$[\kappa = \kappa(\beta)]$$

(como es solo una cota superior solo podemos asegurar algo en este caso)

Si resolvemos numericamente

Solucion numerica ecuacion Griffith



Ising (general)

$$E_I\{s_i\} = -\varepsilon \sum_{\{ij\}} s_i s_j - H \sum_i s_i$$

La primer suma se realiza sobre los vecinos inmediatos una suma de este tipo depende de las características de la red sobre la que se trabaja.

Sea una red regular

$$\text{Sea } \gamma \text{ el grado de un nodo} \Rightarrow \sum_{\{ij\}} \Rightarrow \gamma N/2$$

dimension	tipo	γ
2	cuadrada	4
3	cubica simple	6
3	cubica body-centered	8

La funcion de particion sera :

$$Q_I(H, T) = \sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_N} \exp(-\beta E_I\{s_i\})$$

Donde los s_i toman los valores ± 1 o sea que hay 2^N terminos.

De aqui

$$A_I(H, T) = -kT \log Q_I(H, T)$$

Escribimos esto en terminos de variables convenientes

Sean las siguientes definiciones obvias

$$\left\{ \begin{array}{ll} N_+ & \text{numero total de spin } \uparrow \\ N_- & \text{numero total de spin } \downarrow = N - N_+ \\ N_{++} & \text{numero de pares } (\uparrow\uparrow) \\ N_{--} & \text{numero de pares } (\downarrow\downarrow) \\ N_{+-} & \text{numero de pares } (\uparrow\downarrow) \end{array} \right.$$

Si se toma todo nodo + ["up" o \uparrow] y se traza una línea a los vecinos \rightarrow se trazaran γN_+ líneas

Para cada par (+ +) corresponden 2 líneas

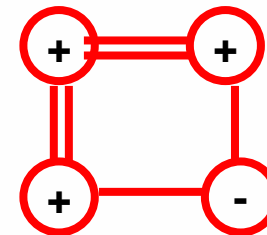
Para cada par (+ -) corresponde 1 línea

Entonces

$$1) \gamma N_+ = 2N_{++} + N_{+-}$$

$$2) \gamma N_- = 2N_{--} + N_{+-}$$

$$3) N_+ + N_- = N$$



sumando (los dos primeros)

$$4) \gamma(N_+ + N_-) = 2[N_{++} + N_{+-} + N_{--}]$$

$$1) \gamma N_+ = 2N_{++} + N_{+-}$$

$$2) \gamma N_- = 2N_{--} + N_{+-}$$

$$3) N_+ + N_- = N$$

Expresando todo en terminos de, por ejemplo, N_{++} , N_+ y N

Expresamos N_{--} , N_- y N_{+-}

de 1) $\gamma N_+ - 2N_{++} = N_{+-}$

de 3) $N_- = -N_+ + N$

de 4) $\gamma N/2 + N_{++} - \gamma N_+ = N_{--}$

Observar que

$$\begin{aligned}\sum_{\{ij\}} s_i s_j &= N_{++} + N_{--} - N_{+-} = \\ &= N_{++} + [\gamma N/2 + N_{++} - \gamma N_+] - [\gamma N_+ - 2N_{++}] \\ &= 4N_{++} - 2\gamma N_+ + \gamma N/2\end{aligned}$$

Ademas

$$\sum_i s_i = N_+ - N_- = N_+ - [-N_+ + N] = 2N_+ - N$$

De donde la energia se escribe

$$\begin{aligned}E_I(N_{++}, N_+) &= -\varepsilon\{4N_{++} - 2\gamma N_+ + \gamma N/2\} - H\{2N_+ - N\} \\ &= -\varepsilon 4N_{++} + 2(\varepsilon\gamma - H)N_+ - (\gamma\varepsilon/2 - H)N\end{aligned}$$

de donde

$$\exp[-\beta A(H, T)] = \exp[N\beta(\gamma\varepsilon/2 - H)] \left\{ \sum_{N_+}^N \exp[-2(\varepsilon\gamma - H)]N_+ \right\} \\ \cdot \left\{ \sum_{N_{++}} g(N_+, N_{++}) \exp[\beta\varepsilon 4N_{++}] \right\}$$

En el ultimo factor la suma se hace sobre los valores de N_{++} compatibles y $g(N_+, N_{++})$ es la degeneracion de las configuraciones.

Esto no se ha resuelto analiticamente sino para 2dimensiones