Física Teórica 3 – 1er cuatrimestre de 2016

Guía 7: *Modelo de Ising*

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

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

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

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

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

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

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

   (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 $\lim_{N\to\infty} \dfrac{\ln Q_N}{N} = \ln\lambda_+$.

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

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

2. (a) Use el método de la matriz de transferencia para resolver el problema de la cadena lineal con extremos abiertos: muestre primero que la función de partición es $Q'_N = \sum_{s,s'} e^{b(s+s')/2}\left[q^{N-1}\right]_{ss'}$ y luego que

   $$Q'_N = \left[\cosh b + \frac{\sinh^2 b + e^{-2K}}{\sqrt{\sinh^2 b + e^{-4K}}}\right]\lambda_+^{N-1} + \left[\cosh b - \frac{\sinh^2 b + e^{-2K}}{\sqrt{\sinh^2 b + e^{-4K}}}\right]\lambda_-^{N-1}.$$

   (b) Muestre que $\lim_{N\to\infty} \dfrac{\ln Q'_N}{N} = \ln\lambda_+$.

3. Para la cadena abierta sin campo, escriba la función de partición como una suma sobre todos los espines, sume explícitamente sobre el último espín y encuentre una relación de recurrencia para Q'_N en términos Q'_{N-1}. Resuelva la relación de recurrencia y verifique que coincide con el resultado del problema anterior.

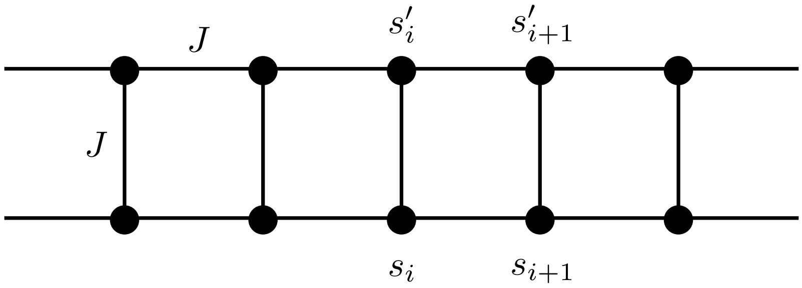
4. Use el método de la matriz de transferencia para resolver el problema de una doble cadena Ising cerrada y sin campo externo,

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

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, $\sum_{i=1}^{N} s_i s_i' = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\left(s_i s_i' + s_{i+1}s_{i+1}'\right)$. La matriz de transferencia será de 4×4.



5. 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, $kT_c = -2J/\log(\sqrt{2}-1)$.

6. En la aproximación de campo medio para un solo espín del problema anterior, halle los exponentes críticos de las siguientes magnitudes termodinámicas:

   (a) La magnetización media a campo nulo, que se comporta como $M(T, B=0) \sim (T_c - T)^{\beta}$ para $T \longrightarrow T_c^-$.

   (b) La magnetización media en la temperatura crítica, que se comporta como $M(T_c, B) \sim B^{1/\delta}$ para $B \to 0$.

   (c) La susceptibilidad magnética $\chi_T(T, B=0)$, la cual diverge como $(T_c - T)^{-\gamma}$ para $T \longrightarrow T_c^-$.

7. Una segunda aproximación de campo medio consiste en escribir un hamiltoniano efectivo para dos espines vecinos, s_1 y s_2, conservando de manera exacta su interacción mutua, pero reemplazando los espines de los otros sitios vecinos por su valor medio $\bar{s}$.

   (a) Hallar la ecuación de autoconsistencia para el valor de expectación $\bar{s}$ y con ella una expresión para T_c. Encontrar (numéricamente si es necesario) el valor de T_c para la red cuadrada y comparar con el resultado exacto y con el obtenido en la aproximación de campo medio para un solo espín.

(b) Hallar U y C_V para $T > T_c$.

8. [*] Encontrar numéricamente la temperatura crítica para una red cuadrada en una aproximación de campo medio en donde la interacción de cuatro espines en una celda fundamental sea descripta de manera exacta. Comparar con el resultado exacto y con las aproximaciones de los problemas anteriores.

9. Ídem al anterior, pero en un modelo de campo medio que incluya exactamente las interacciones de toda una hilera de espines, como en el problema 1.

10. Ídem al anterior, pero en un modelo de campo medio que incluya exactamente las interacciones de dos hileras vecinas de espines, como en el problema 4.

11. (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:

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

   (a) Escriba el hamiltoniano en términos de s_i^A y s_i^B.
   (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.
   (c) Halle las ecuaciones para $\langle s_i^A \rangle$ y $\langle s_i^B \rangle$.
   (d) Muestre que la susceptibilidad magnética a campo nulo obedece la ley de Curie

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

(Computacional): Modelo de Ising y Método Monte Carlo

Se propone escribir el código para una simulacion 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**

   (a) Se sugiere implementar primero el algoritmo de Monte Carlo y luego de confirmar que está funcionando, agregar el cómputo de las cantidades a medir.
   (b) 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) <u>antes</u> 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.

[*] Los problemas 8, 9 y especialmente el 10 están pensados para resolverse en la computadora.

(c) A lo largo de este trabajo estudiaremos básicamente cuatro observables del sistema. La magnetización por sito, 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**

   (a) Discuta cómo implementar la condición inicial del sistema en su algoritmo.

   (b) 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 item 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 calculo de valores medios en equilibrio.

3. **Magnetización y energía media**

   (a) 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 spines 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.

   (b) 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?

   (c) A partir de lo obtenido en 3(a) y 3(b) obtenga una estimación para la temperatura crítica T_c

4. **Función de correlación**

   (a) Calcule la función de correlación $C(l) = \langle s_{ij} s_{ij+l} \rangle$ para varias temperaturas entre 0 y $2T_c$. Grafique esta función para dos valores de T, uno superior y otro inferior a T_c.

   (b) Para cada temperatura, ajuste $C(l)$ a una función de la forma $C(l) = Ae^{-l/\xi}$.

   (c) Grafique la longitud de correlación ξ como función de la temperatura.

5. **(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 $L \to \infty$?

6. **(Opcional) Exponentes críticos**

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