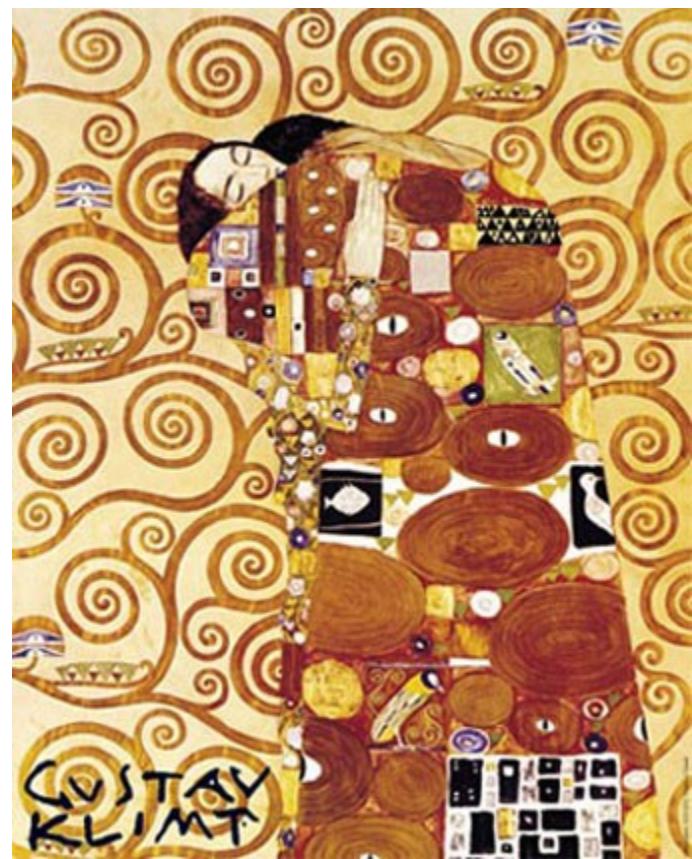


Ising_2

侍



Competencia entre

- a) termino de orden → interaccion
- b) termino de desorden → termino externo estocastico

Definido por

- a) estados del spin
- b) red sobre la que se define el modelo
- c) interacciones entre spnes

Ising

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

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

Sea γ 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

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

Para dos dimensiones se demuestra que se puede tener magnetización espontánea

Para demostrar esto se recuraría al análisis de dominios

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

Equivalencia de dominios

Dos dominios serán iguales si tienen todos sus atributos iguales:

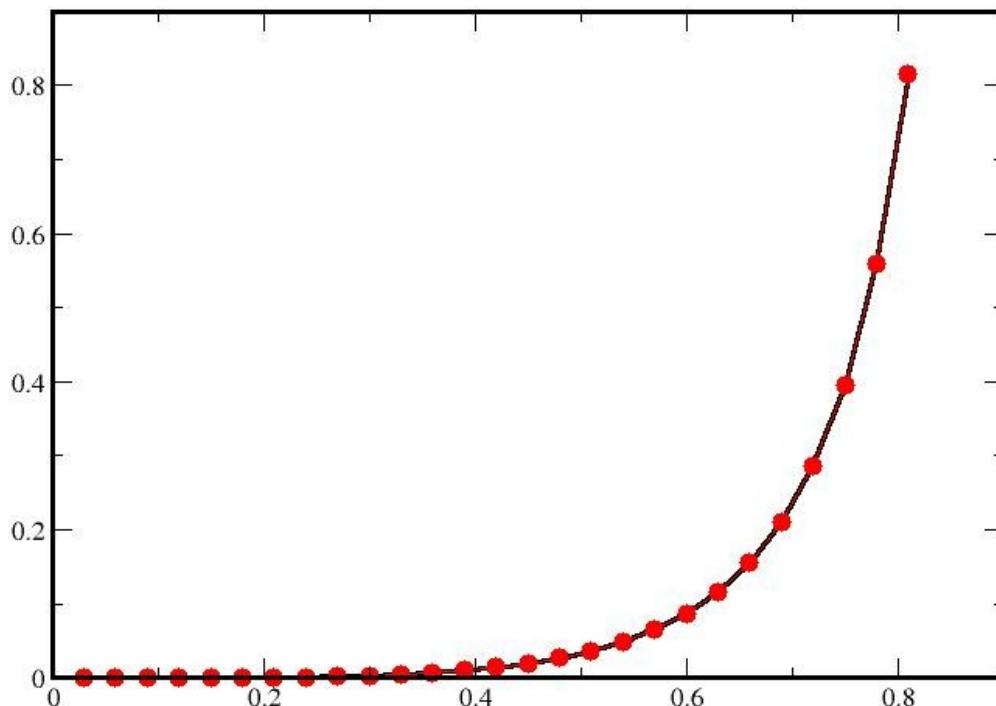
- igual “perímetro”**
- igual “forma”**
- igual orientación**
- igual “posición”**

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

Se calculaba N_-

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

Solucion numerica ecuacion Griffith



Escribimos esto en terminos de variables convenientes

Sean las siguientes definiciones obvias

N_+ numero total de spin \uparrow

N_- numero total de spin $\downarrow = N - N_+$

N_{++} numero de pares $(\uparrow\uparrow)$

N_{--} numero de pares $(\downarrow\downarrow)$

N_{+-} numero de pares $(\uparrow\downarrow)$

Si se toma todo nodo + ["up" o \uparrow] y se traza una linea a los vecinos \rightarrow se trazarán 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

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

Expresando todo en términos 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

Aproximacion de Bragg-Williams

Dadas las configuraciones de Ising, el sistema es descripto en terminos de N_+ y N_{++}

$\frac{N_+}{N}$ esta asociado a la densidad de un cuerpo

$\frac{N_{++}}{N\gamma/2}$ estara asociado a correlaciones de 2 cuerpos.

Podemos pensar $\frac{N_+}{N}$ como asociado a propiedades del sistema en un escala "larga", vision global de la red.

Por otro lado $\frac{N_{++}}{N\gamma/2}$ esta asociado a correlaciones de rango corto.
O sea a propiedades "locales" del sistema.

En terminos de la analogia con ρ y $\rho^{(2)}$

Haciendo la siguiente transformacion:

$$\frac{N_+}{N} \equiv \frac{1}{2}(L + 1) \rightarrow -1 \leq L \leq 1$$

$$\frac{N_{++}}{N\gamma/2} \equiv \frac{1}{2}(\sigma + 1) \rightarrow -1 \leq \sigma \leq 1$$

de donde

$$N_+ = \frac{N}{2}(L + 1)$$

$$N_{++} = \frac{N\gamma}{4}(\sigma + 1)$$

Magnetización $\rightarrow L \neq 0 \Rightarrow N_+ \neq N/2$

como la energía es

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

Recordando que

$$\sum_{\{ij\}} s_i s_j = 4N_{++} - 2\gamma N_+ + \gamma N/2$$

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

$$N_+ = \frac{N}{2}(L + 1)$$
$$N_{++} = \frac{N\gamma}{4}(\sigma + 1)$$

De esta forma podemos escribir

$$\sum_{\{ij\}} s_i s_j = 4 \frac{N\gamma}{4} (\sigma + 1) - 2\gamma \frac{N}{2} (L + 1) + \gamma N/2$$

$$= N\gamma\sigma + \cancel{N\gamma} - \cancel{\gamma NL} - \cancel{\gamma N} + \gamma N/2$$

$$= N\gamma\sigma - \gamma NL + \gamma N/2 = \frac{1}{2}N\gamma(2\sigma - 2L + 1)$$

$$\sum_i s_i = 2N_+ - N = N(L + 1) - N = NL$$

Entonces la energia por spin es

$$\frac{1}{N}E_I(L, \sigma) = -\frac{1}{2}\varepsilon\gamma(2\sigma - 2L + 1) - HL$$

Hasta aqui todo es exacto.

La aproximacion de Bragg-Williams consiste en

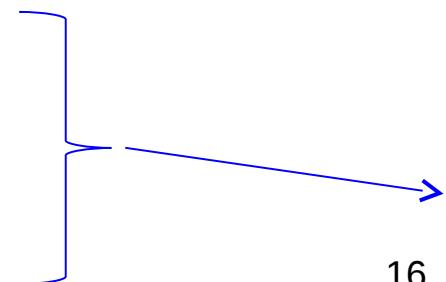
$$\frac{N_{++}}{N\gamma/2} \approx \left(\frac{N_+}{N}\right)^2$$

Que inmediatamente les recuerda ...

De lo cual con

$$N_+ = \frac{N}{2}(L + 1)$$

$$N_{++} = \frac{N\gamma}{4}(\sigma + 1)$$



$$\left. \begin{array}{l} N_+ = \frac{N}{2}(L+1) \\ N_{++} = \frac{N\gamma}{4}(\sigma + 1) \\ \frac{N_{++}}{N\gamma/2} \approx \left(\frac{N_+}{N}\right)^2 \end{array} \right\} \quad \left[\frac{1}{2}(L+1) \right]^2 = \frac{1}{2}(\sigma + 1) \Rightarrow \frac{1}{2}(L+1)^2 - 1 = \boxed{\sigma = \frac{1}{2}L^2 + L - \frac{1}{2}}$$

Reemplazando en la expresión para la energía

reemplazamos

Teníamos que :

$$\frac{1}{N} E_I(L, \sigma) = -\frac{1}{2} \varepsilon \gamma (2\sigma - 2L + 1) - HL$$

obtenemos

$$\frac{1}{N} E_I(L, \sigma) = -\frac{1}{2} \varepsilon \gamma (L^2 + 2L - 1 - 2L + 1) - HL$$

resulta

$$\boxed{\frac{1}{N} E_I(L, \sigma) = -\frac{1}{2} \varepsilon \gamma L^2 - HL}$$

depende solo de L

Entonces en esta aproximación resulta para la energía:

$$\frac{1}{N}E_I(L, \sigma) = -\frac{1}{2}\varepsilon\gamma L^2 - HL$$

y por lo tanto

$$Q_I^{BG}(H, T) = \sum_{\{s_i\}} \exp\left[\beta N\left(\frac{1}{2}\varepsilon\gamma L^2 + HL\right)\right]$$

La suma es sobre los $\{s_i\}$ y el sumando solo depende de L y por

lo tanto hay que ver el conjunto de $\{s_i\}$ que da un dado L .

- Un dado L determina un valor de N_+ \Rightarrow el numero que buscamos es la cantidad de formas de seleccionar N_+ de N o sea $\{N!/[N_+!(N-N_+)!]\}$, \Rightarrow

$$Q_I^{BG}(H, T) = \sum_{L=-1}^{L=1} \{N!/[N_+!(N-N_+)!]\} \exp\left[\beta N\left(\frac{1}{2}\epsilon\gamma L^2 + HL\right)\right]$$

Tomando en el limite de $N \rightarrow \infty$ al termino mas grande de la suma (\overline{L}), trabajando con el log y aplicando la aprox. Stirling \Rightarrow

$$\log Q_I^{BG}(H, T) = \log\{N!/[N_+!(N-N_+)!]\} + \left[\beta N\left(\frac{1}{2}\epsilon\gamma \overline{L}^2 + H\overline{L}\right)\right]$$

como $N_+ = \frac{N}{2}(L + 1)$

$$\begin{aligned}\log Q_I^{BG}(H, T) = & \log \left\{ N! / \left[\left(\frac{N}{2}(\bar{L} + 1) \right)! \left(\frac{N}{2}(1 - \bar{L}) \right)! \right] \right\} + \\ & + \left[\beta N \left(\frac{1}{2} \varepsilon \gamma \bar{L}^2 + H \bar{L} \right) \right]\end{aligned}$$

De donde

Para el primer termino
de la derecha obtenemos

$$\log \left\{ N! / \left[\left(\frac{N}{2} (\overline{L} + 1) \right)! \left(\frac{N}{2} (1 - \overline{L}) \right)! \right] \right\}$$

$$= N \log N - \left| \begin{array}{c} | \\ N \\ | \end{array} \right| \frac{L+1}{2} \left| \begin{array}{c} | \\ \log N \\ | \end{array} \right| + \log \left| \begin{array}{c} | \\ L+1 \\ | \end{array} \right| \frac{L+1}{2} \left| \begin{array}{c} | \\ \log \\ | \end{array} \right| -$$

$$- \left| \begin{array}{c} | \\ N \\ | \end{array} \right| \frac{-L+1}{2} \left| \begin{array}{c} | \\ \log N \\ | \end{array} \right| + \log \left| \begin{array}{c} | \\ -L+1 \\ | \end{array} \right| \frac{-L+1}{2} \left| \begin{array}{c} | \\ \log \\ | \end{array} \right|$$

$$= N \log N - N \left| \begin{array}{c} | \\ L+1 \\ | \end{array} \right| \frac{L+1}{2} \left| \begin{array}{c} | \\ \log N \\ | \end{array} \right| - N \left| \begin{array}{c} | \\ L+1 \\ | \end{array} \right| \log \left| \begin{array}{c} | \\ L+1 \\ | \end{array} \right| \frac{L+1}{2} \left| \begin{array}{c} | \\ \log \\ | \end{array} \right| -$$

$$- N \left| \begin{array}{c} | \\ -L+1 \\ | \end{array} \right| \log N - N \left| \begin{array}{c} | \\ -L+1 \\ | \end{array} \right| \log \left| \begin{array}{c} | \\ -L+1 \\ | \end{array} \right| \frac{-L+1}{2} \left| \begin{array}{c} | \\ \log \\ | \end{array} \right|$$

$$= N \log N - N \left| \begin{array}{c} | \\ L+1 \\ | \end{array} \right| \log N - N \left| \begin{array}{c} | \\ -L+1 \\ | \end{array} \right| \log N -$$

$$- N \left| \begin{array}{c} | \\ L+1 \\ | \end{array} \right| \log \left| \begin{array}{c} | \\ L+1 \\ | \end{array} \right| - N \left| \begin{array}{c} | \\ -L+1 \\ | \end{array} \right| \log \left| \begin{array}{c} | \\ -L+1 \\ | \end{array} \right| \frac{-L+1}{2} \left| \begin{array}{c} | \\ \log \\ | \end{array} \right|$$

Reuniendo términos

$$\begin{aligned}\frac{1}{N} \log Q_I^{BG}(H, T) = & -\left(\frac{\bar{L}+1}{2}\right) \log \left(\frac{\bar{L}+1}{2}\right) - \\ & \left(\frac{-\bar{L}+1}{2}\right) \log \left(\frac{-\bar{L}+1}{2}\right) + \\ & + \left[\beta \left(\frac{1}{2} \varepsilon \gamma \bar{L}^2 + H \bar{L} \right) \right]\end{aligned}$$

Entonces la solución está dada por el máximo, lo calculamos :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \bar{L}} \left[\frac{1}{N} \log Q_I^{BG}(H, T) \right] = & \beta (\varepsilon \gamma \bar{L} + H) - \frac{1}{2} \log \left(\frac{\bar{L}+1}{2} \right) - \frac{1}{2} \\ & + \frac{1}{2} \log \left(\frac{-\bar{L}+1}{2} \right) + \frac{1}{2} = \\ = & (\varepsilon \gamma \bar{L} + H) - \log \left[\frac{\bar{L}+1}{-\bar{L}+1} \right] = 0\end{aligned}$$

Hay que resolver

$$\frac{\bar{L} + 1}{-\bar{L} + 1} = \exp 2\beta(\varepsilon\gamma\bar{L} + H)$$

de donde recordando que

$$\tanh(x) = \frac{\exp(x) - \exp(-x)}{\exp(x) + \exp(-x)} = \frac{\exp(2x) - 1}{\exp(2x) + 1}$$

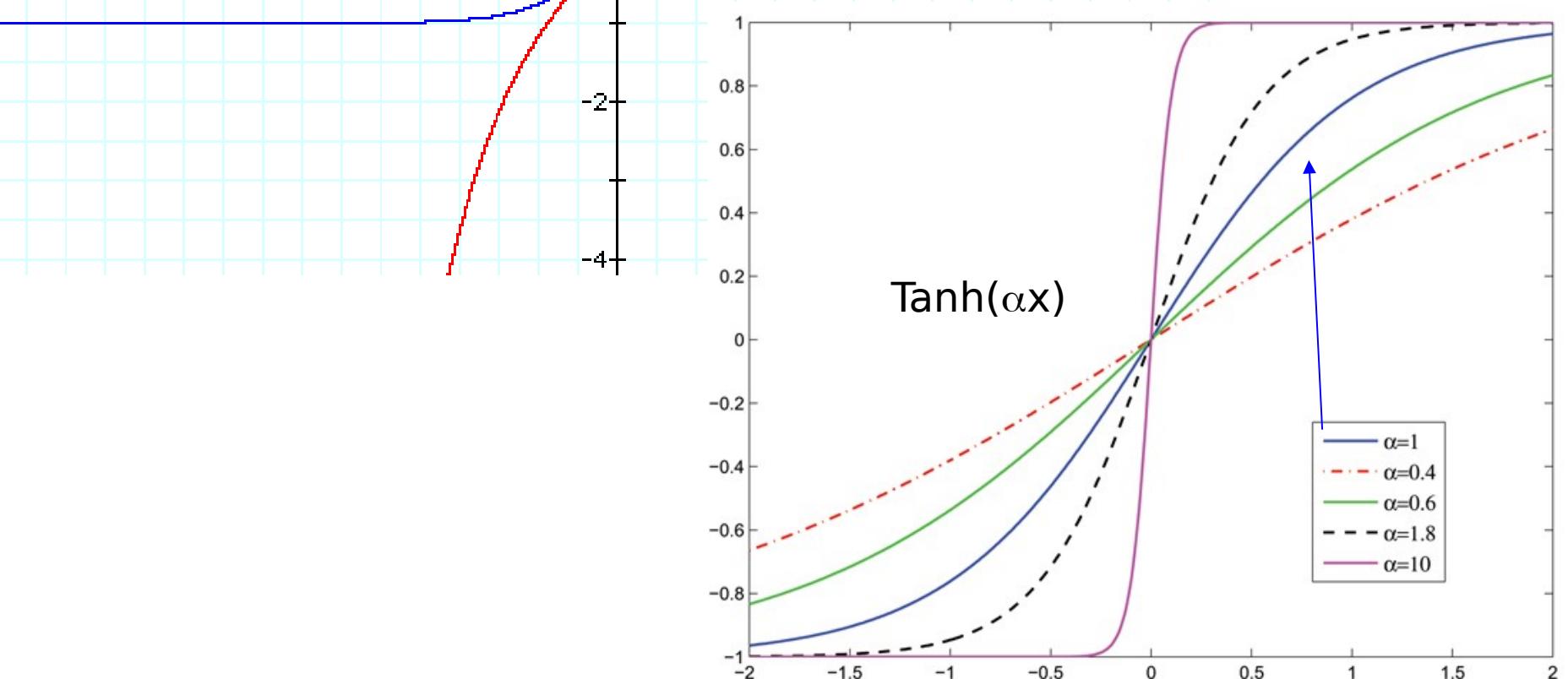
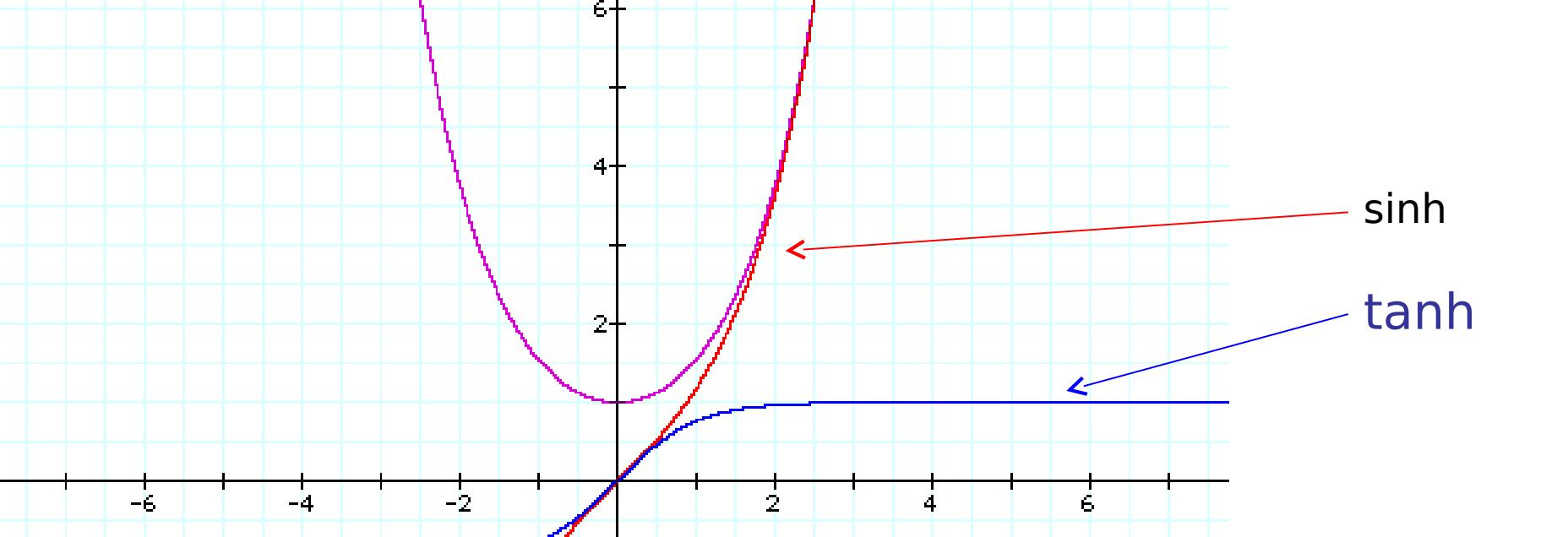
$$\bar{L} + 1 = \exp(2x)(-\bar{L} + 1) = \exp(2x) - \bar{L} \exp(2x) \Rightarrow$$

$$\exp(2x) - \bar{L} \exp(2x) - \bar{L} = 1 \Rightarrow \exp(2x) - \bar{L}(\exp(2x) + 1) = 1 \Rightarrow$$

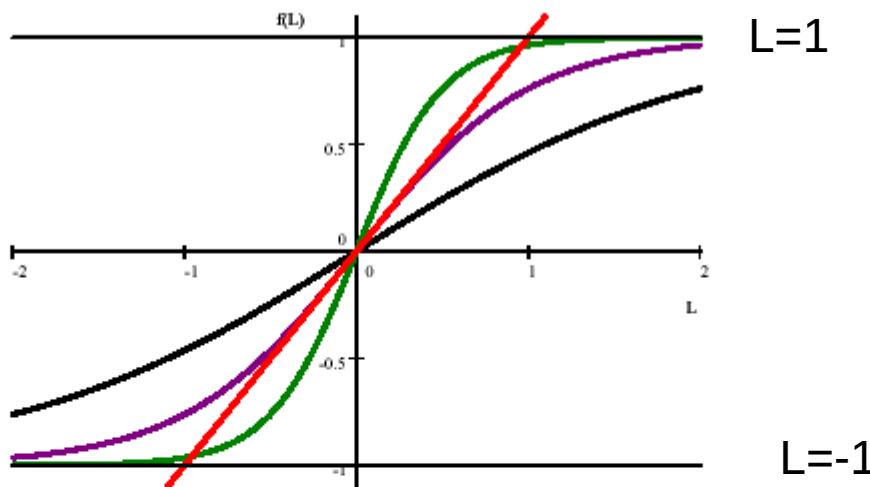
$$\bar{L} = \frac{1 - \exp(2x)}{-(\exp(2x) + 1)} = \frac{\exp(2x) - 1}{\exp(2x) + 1} \Rightarrow \bar{L} = \tanh(\beta(\varepsilon\gamma\bar{L} + H))$$

Si $H = 0 \Rightarrow$

$$\bar{L} = \tanh(\beta\varepsilon\gamma\bar{L})$$



$$N_+ = \frac{N}{2}(L + 1)$$



Así que hay una secuencia de soluciones dependiendo del valor de $\varepsilon\gamma/kT$ (en el gráfico tomamos los valores 0.5 (negro), 1 (violeta), 2 (verde))

Entonces tenemos que las soluciones son

$$N_+ = \frac{N}{2}(L+1)$$

$$\begin{aligned}\varepsilon\gamma/kT < 1 &\rightarrow \overline{L} = 0 \\ \varepsilon\gamma/kT > 1 &\rightarrow \overline{L} = L_0, 0, -L_0\end{aligned}$$

soluciones

Definimos entonces

$$\varepsilon\gamma = kT_c$$

de donde

$$\begin{aligned}T > T_c &\rightarrow \overline{L} = 0 \\ T < T_c &\rightarrow \overline{L} = L_0, 0, -L_0\end{aligned}$$

T_c se denomina Temperatura de Curie, para $T < T_c$ el sistema

es ferromagnético

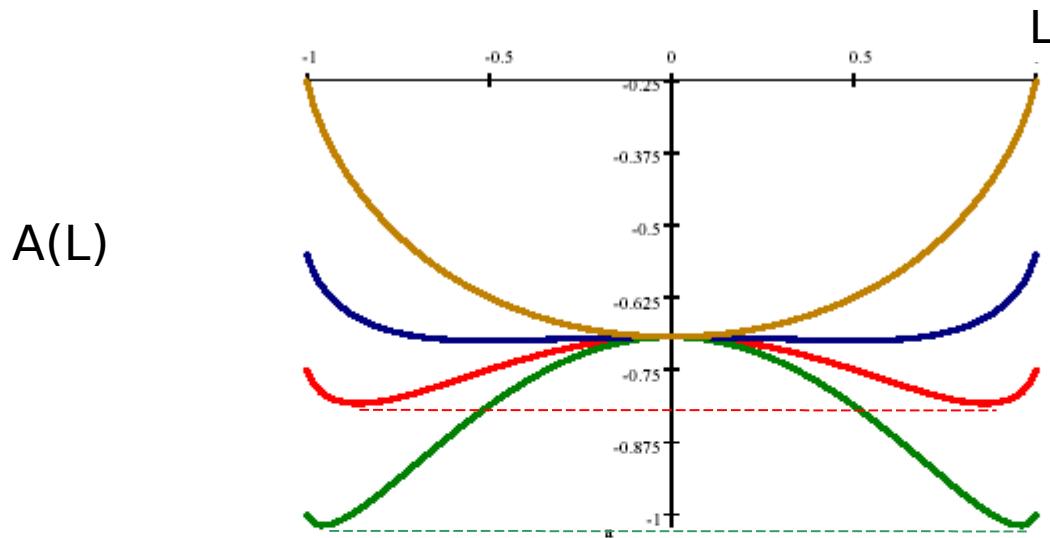
Atencion

$$\frac{1}{N}A_I = \left[-\frac{1}{N} \log Q_I^{BG}(H, T) \right]$$

con

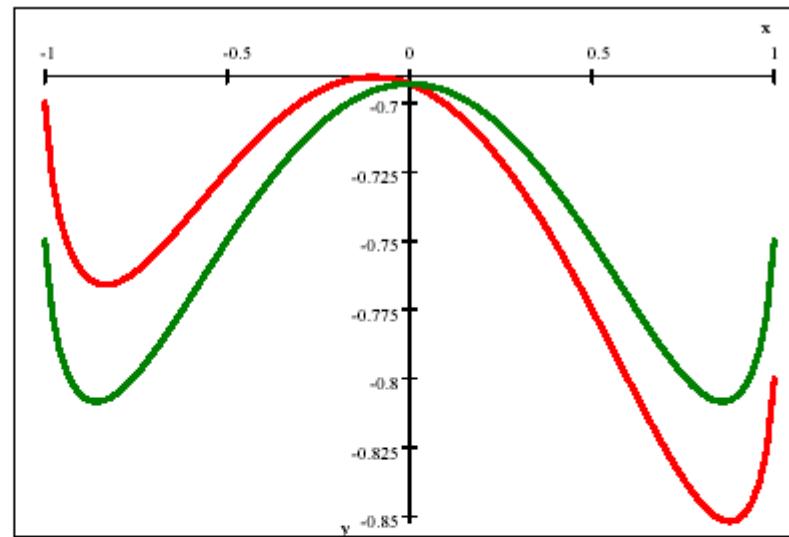
$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \log Q_I^{BG}(H, T) &= -\left(\frac{\bar{L}+1}{2}\right) \log\left(\frac{\bar{L}+1}{2}\right) - \\ &\quad \left(\frac{-\bar{L}+1}{2}\right) \log\left(\frac{-\bar{L}+1}{2}\right) + \\ &\quad + \left[\beta \left(\frac{1}{2} \varepsilon \gamma \bar{L}^2 + H \bar{L} \right) \right] \end{aligned}$$

Sea $T < T_c = \varepsilon\gamma/k$; sea $T_c/T = 1.5$ (rojo), $T_c/T = 2$ (verde),
 $T_c/T = 1.1$ (azul), $T_c/T = 0.9$ (marrón)



Entonces : Que soluciones tomamos?

Si $H \neq 0$



En rojo con $H \neq 0$ y en verde con $H = 0$

De donde se ve

(rotura de la degeneracion!)

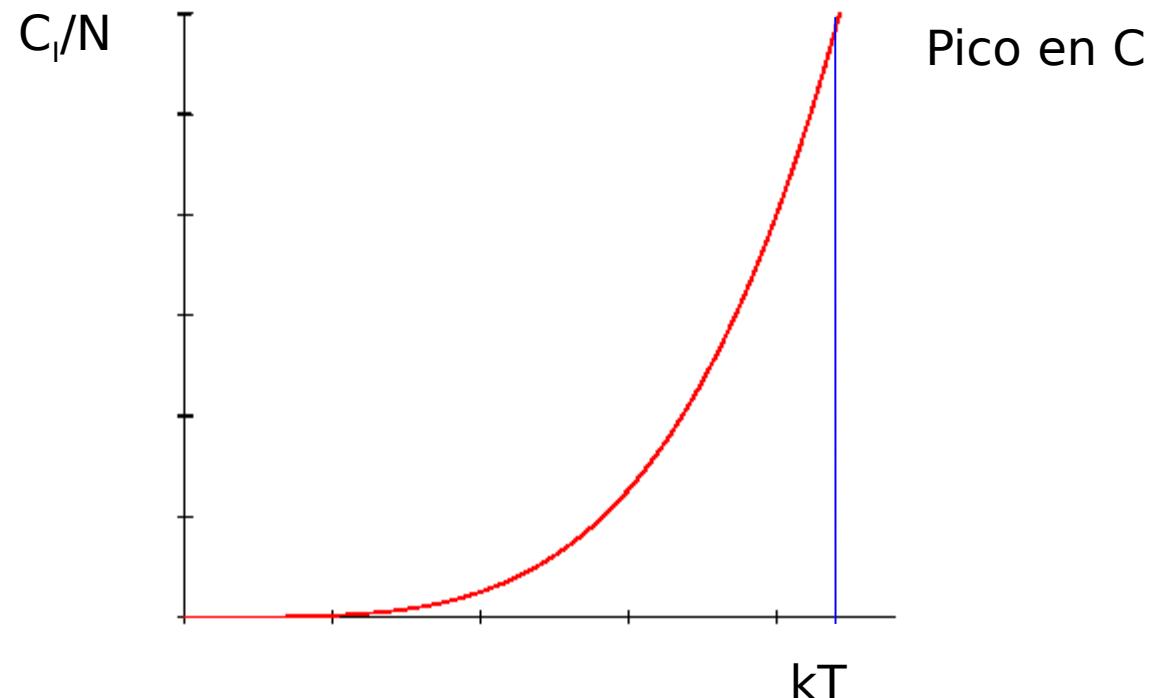
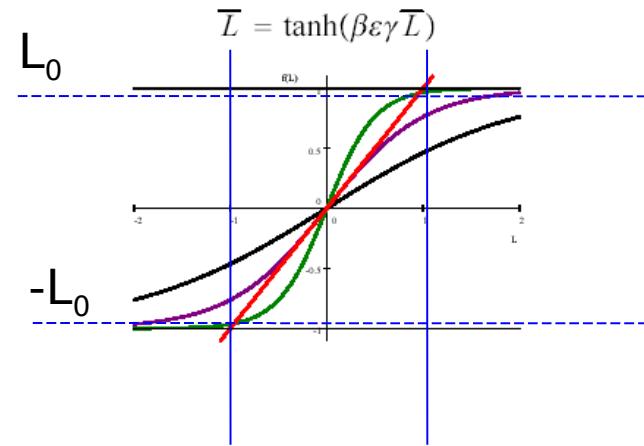
Las correspondientes funciones termodinamicas son :

a) A segun la ecuacion anterior con $L_0 = 0$ para $T > T_c$

$$\text{b) } \frac{1}{N}M_I(0, T) = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ L_0 & T < T_c \end{cases}$$

$$\text{c) } \frac{1}{N}U_I(0, T) = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ -\frac{1}{2}\varepsilon\gamma L_0^2 & T < T_c \end{cases}$$

$$d) \frac{1}{N} C_I(0, T) = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ -\frac{1}{2} \varepsilon \gamma \frac{d}{dT} L_0^2 & T < T_c \end{cases}$$



En suma, hicimos

$$\frac{N_+}{N} \equiv \frac{1}{2}(L + 1) \rightarrow -1 \leq L \leq 1$$

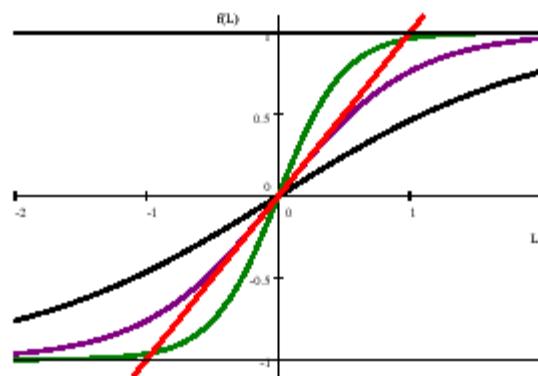
$$\frac{N_{++}}{N\gamma/2} \equiv \frac{1}{2}(\sigma + 1) \rightarrow -1 \leq \sigma \leq 1$$

aproximamos

$$\frac{N_{++}}{N\gamma/2} \approx \left(\frac{N_+}{N} \right)^2$$

obtenemos

$$\overline{L} = \tanh(\beta\varepsilon\gamma\overline{L})$$

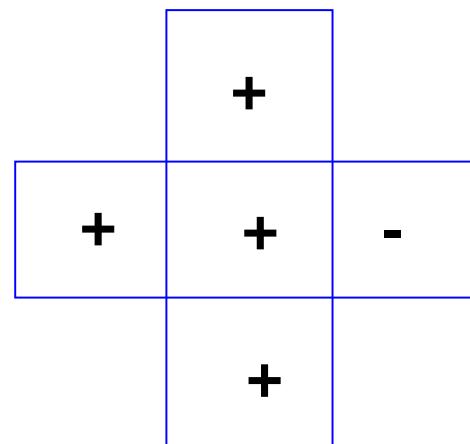


Bethe-Peierls

aproximadamente

- a) mejora a Bragg-Williams (como veremos...)
- b) Se trata de representar apropiadamente el efecto del conjunto de la lattice sobre un "elemento fundamental" del mismo

esto ultimo es algo asi como:



Sea $H = 0$

Sea una celda fundamental

Sea s el spin central

Sea $P(s, n)$ la probabilidad de ...

s	spin central	+	Numero de
$P(+1, n) \Rightarrow$	n	vecinos	+
	$(\gamma - n)$	vecinos	-

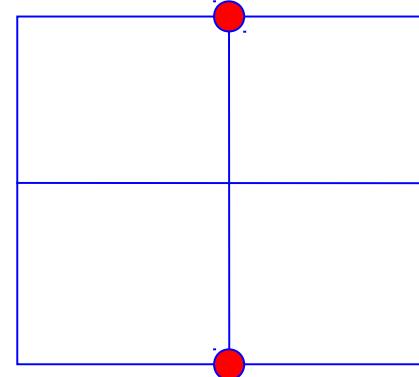
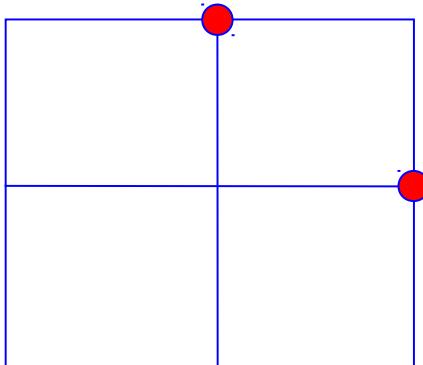
s	spin central	-	
$P(-1, n) \Rightarrow$	n	vecinos	+
	$(\gamma - n)$	vecinos	-

Para una dada topología y un dado número n habrá $\binom{\gamma}{n}$ posibles ordenamientos luego

$$\begin{aligned} P(+1, n) &= \frac{1}{q} \binom{\gamma}{n} \exp[\beta \varepsilon(n + (-\gamma + n))] z^n \\ &= \frac{1}{q} \binom{\gamma}{n} \exp[\beta \varepsilon(2n - \gamma)] z^n \end{aligned}$$

$\varepsilon(n - (\gamma - n))$

proponemos



X 4

X 2

→ total=6

$$\frac{4!}{2! \cdot 2!} = 6$$

donde

q es una normalización

z^n es una "fugacidad" que representa al resto de los spins en su efecto sobre la cantidad de spins "+" ...

Del mismo modo

$$\begin{aligned} P(-1, n) &= \frac{1}{q} \binom{\gamma}{n} \exp[\beta \varepsilon(-n + (\gamma - n))] z^n \\ &= \frac{1}{q} \binom{\gamma}{n} \exp[\beta \varepsilon(2n - \gamma)] z^n \end{aligned}$$

Como toda normalización se determina por

$$\sum_{n=0}^{\gamma} [P(+1, n) + P(-1, n)] = 1$$

De donde

$$q = \sum_{n=0}^{\gamma} \binom{\gamma}{n} [(ze^{2\beta\varepsilon})^n e^{-\beta\varepsilon\gamma} + (ze^{-2\beta\varepsilon})^n e^{\beta\varepsilon\gamma}]$$

Arreglando las cosas para obtener el binomio $y^n x^\gamma = y^n x^\gamma x^{-n} x^n = (yx)^n x^{\gamma-n}$

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\gamma} \binom{\gamma}{n} (ze^{2\beta\varepsilon})^n e^{-\beta\varepsilon\gamma} &= \sum_{n=0}^{\gamma} \binom{\gamma}{n} y^n x^\gamma = (x + xy)^\gamma \rightarrow \\ [e^{-\beta\varepsilon} + ze^{2\beta\varepsilon} e^{-\beta\varepsilon}]^\gamma &= [e^{-\beta\varepsilon} + ze^{\beta\varepsilon}]^\gamma \quad \left. \begin{array}{l} y = (ze^{2\beta\varepsilon}) \\ x = (e^{-\beta\varepsilon}) \end{array} \right\} \end{aligned}$$

Entonces resulta

$$q = [e^{-\beta\varepsilon} + ze^{\beta\varepsilon}]^\gamma + [e^{\beta\varepsilon} + ze^{-\beta\varepsilon}]^\gamma$$

$$(x + y)^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x^{n-k} y^k = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x^k y^{n-k}$$

con

Tomando en cuenta las definiciones de L y σ

$$\frac{N_+}{N} \equiv \frac{1}{2}(L + 1) \text{ y } \frac{N_{++}}{N\gamma/2} \equiv \frac{1}{2}(\sigma + 1)$$

$$\frac{N_+}{N} = \sum_{n=0}^{\gamma} P(+1, n) = \frac{1}{q} [e^{-\beta\varepsilon} + ze^{\beta\varepsilon}]^{\gamma} = \frac{1}{2}(L + 1)$$

pues es la proba de tener un + en un dado "nodo"

$$\frac{N_{++}}{N\gamma/2} = \frac{1}{\gamma} \sum_{n=0}^{\gamma} n P(+1, n)$$

pues es el numero medio de pares "++"

para resolver esto ultimo

$$\begin{aligned} \frac{N_{++}}{N\gamma/2} &= \sum_{n=0}^{\gamma} \binom{\gamma}{n} ny^n x^y = y \frac{\partial}{\partial y} \sum_{n=0}^{\gamma} \binom{\gamma}{n} y^n x^y = y \frac{\partial}{\partial y} (x + xy)^{\gamma} = \\ &= xy\gamma(x(1+y))^{\gamma-1} \end{aligned}$$

Con $\left\{ \begin{array}{l} x = \exp(-\beta\varepsilon), \\ y = z \exp(2\beta\varepsilon) \end{array} \right.$

Entonces 

$$xy(x+xy)^{\gamma-1} = e^{(-\beta\varepsilon)}ze^{(2\beta\varepsilon)}(e^{(-\beta\varepsilon)} + ze^{(\beta\varepsilon)})^{\gamma-1} = \frac{N_{++}}{Ny/2} =$$

luego

$$= ze^{\beta\varepsilon}(e^{-\beta\varepsilon} + ze^{\beta\varepsilon})^{\gamma-1} = \frac{1}{2}(\sigma + 1)$$

De donde σ y L quedan expresados en terminos de z y T
y esto es entonces la aproximacion de Bethe-Peierls

La interpretacion de $\frac{N_+}{N} = \sum_{n=0}^{\gamma} P(+1, n)$ es la proba de encontrar en spin "+" en el centro

Sea ahora $\frac{1}{\gamma} \sum_{n=0}^{\gamma} n[P(+1, n) + P(-1, n)]$ que es la proba de que un vecino sea "+" independiente del valor del spin en el centro

Pero un "centro" es indistinguible de un "vecino", luego

$$\sum_{n=0}^{\gamma} P(+1, n) = \frac{1}{\gamma} \sum_{n=0}^{\gamma} n[P(+1, n) + P(-1, n)]$$

Recordando que por ejemplo

$$n[P(+1, n)] = z \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{q} \left(\frac{\gamma}{n} \right) \exp[\beta \varepsilon(2n - \gamma)] z^n$$

Entonces quedara, reemplazando las sumas por lo que ya calculamos (slides 38 y 39)

$$\left\{ \begin{array}{l} P(+1, n) = \frac{1}{q} \binom{\gamma}{n} \exp[\beta\varepsilon(n + (-\gamma + n))] z^n \\ = \frac{1}{q} \binom{\gamma}{n} \exp[\beta\varepsilon(2n - \gamma)] z^n \end{array} \right.$$

$$\frac{N_+}{N} = \sum_{n=0}^{\gamma} P(+1, n) = \frac{1}{q} [e^{-\beta\varepsilon} + z e^{\beta\varepsilon}]^{\gamma} = \frac{1}{2}(L + 1)$$

$$\begin{aligned} [e^{-\beta\varepsilon} + z e^{\beta\varepsilon}]^{\gamma} &= \frac{z}{\gamma} \frac{\partial}{\partial z} \{ [e^{-\beta\varepsilon} + z e^{\beta\varepsilon}]^{\gamma} + [e^{\beta\varepsilon} + z e^{-\beta\varepsilon}]^{\gamma} \} \\ &= z \{ [e^{-\beta\varepsilon} + z e^{\beta\varepsilon}]^{\gamma-1} e^{\beta\varepsilon} + [e^{\beta\varepsilon} + z e^{-\beta\varepsilon}]^{\gamma-1} e^{-\beta\varepsilon} \} \end{aligned}$$

de donde trivialmente

$$z = \left[\frac{1 + z \exp(2\beta\varepsilon)}{z + \exp(2\beta\varepsilon)} \right]^{\gamma-1}$$

Para calcular L hacemos

$$z = \left[\frac{1 + z \exp(2\beta\varepsilon)}{z + \exp(2\beta\varepsilon)} \right]^{\gamma-1} \quad \rightarrow$$

$$z(z+e^{2\beta\varepsilon})^{\gamma-1} = (1+z e^{2\beta\varepsilon})^{\gamma-1}$$

$$z^{\frac{\gamma}{\gamma-1}}(z+e^{2\beta\varepsilon})^\gamma = (1+z e^{2\beta\varepsilon})^\gamma$$

$$\frac{N_+}{N} = \sum_{n=0}^{\gamma} P(+1, n) = \frac{1}{q} [e^{-\beta\varepsilon} + z e^{\beta\varepsilon}]^\gamma = \frac{1}{2}(L+1)$$

$$\frac{1}{q} e^{-\beta\varepsilon} [1 + z e^{2\beta\varepsilon}]^\gamma = \frac{1}{q} e^{2\beta\varepsilon} z^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} (z+e^{2\beta\varepsilon})^\gamma$$

Para calcular L hacemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{q} [e^{-\beta\varepsilon} + ze^{\beta\varepsilon}]^\gamma &= \frac{1}{2}(L+1) = \\ &= \frac{e^{-\beta\varepsilon\gamma}}{q} [1 + ze^{2\beta\varepsilon}]^\gamma = \frac{e^{-\beta\varepsilon\gamma}}{q} z^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} [z + \exp(2\beta\varepsilon)]^\gamma = \\ &= \frac{e^{-\beta\varepsilon\gamma}}{[e^{-\beta\varepsilon} + ze^{\beta\varepsilon}]^\gamma + [e^{\beta\varepsilon} + ze^{-\beta\varepsilon}]^\gamma} z^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} [z + \exp(2\beta\varepsilon)]^\gamma = \\ &= \frac{1}{[1 + ze^{2\beta\varepsilon}]^\gamma + [e^{2\beta\varepsilon} + z]^\gamma} z^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} [z + \exp(2\beta\varepsilon)]^\gamma = \\ &= \frac{z^{\frac{\gamma}{\gamma-1}}}{1 + \frac{[1 + ze^{2\beta\varepsilon}]^\gamma}{[e^{2\beta\varepsilon} + z]^\gamma}} = \frac{z^x}{1 + z^x} = \frac{1}{2}(L+1) \Rightarrow \end{aligned}$$

$$L = 2 \frac{z^x}{1 + z^x} - 1 = \frac{z^x - 1}{1 + z^x} = L$$

(Usando resultado para z
slide anterior)

Entonces tenemos

$$L = 2 \frac{z^x}{1 + z^x} - 1 = \frac{z^x - 1}{1 + z^x} = L$$

Observar que $z=1 \Rightarrow L=0$ ademas $z=\infty \Rightarrow L=1$

Del mismo modo

$$\sigma = \frac{2z^2}{(1 + z \exp(-2\beta\varepsilon))(1 + z^x)} - 1$$

De esta forma calculamos la energia en ausencia de campo usando

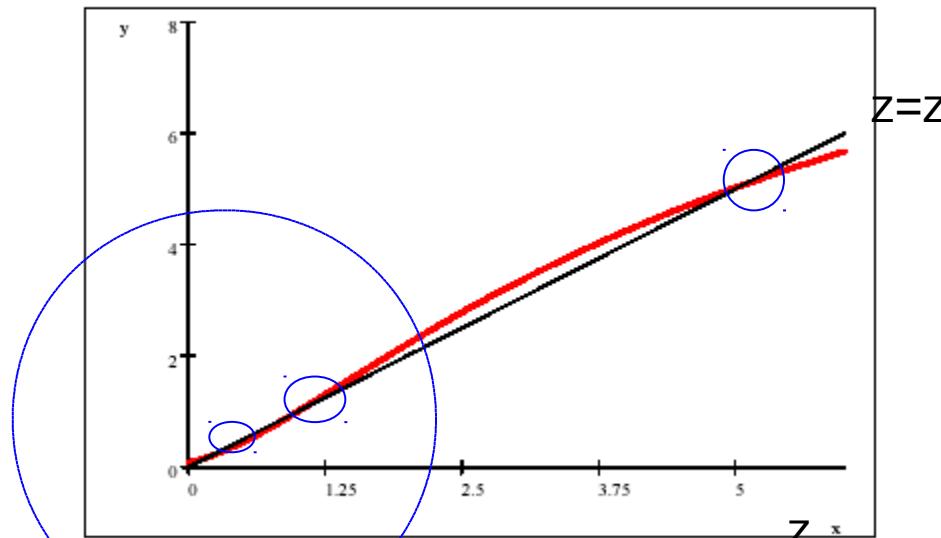
$$\frac{1}{N} E_I(L, \sigma) = -\frac{1}{2} \varepsilon \gamma (2\sigma - 2L + 1)$$

$$z = \left[\frac{1 + z \exp(2\beta\varepsilon)}{z + \exp(2\beta\varepsilon)} \right]^{\gamma-1}$$

Calculamos ahora las soluciones de z

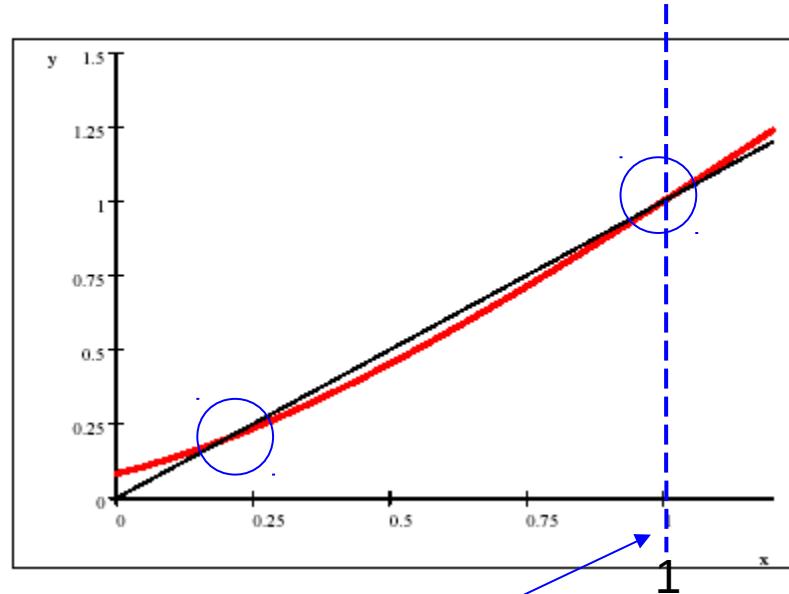
Si fijamos $\gamma = 4$ y jugamos con $2\beta\varepsilon = 2.3$ las soluciones de z son :

(la variable es z y y es fijo)



en la region $0 \leq z \leq 1.25$

$$((1 + 2.3x)/(x + 2.3))^3$$



El termino de la derecha
va a $\exp(2\beta\varepsilon(\gamma-1))$ con z
muy grande de donde si en
1 tiene pendiente >1 tendra que
“bajar”

Observar que para $z = \left[\frac{1+z\exp(2\beta\varepsilon)}{z+\exp(2\beta\varepsilon)} \right]^{\gamma-1}$

a) $z = 1$ es siempre solucion

b) si z_0 es solucion $1/z_0$ tambien lo es

$$z = \left[\frac{1+z \exp(2\beta\varepsilon)}{z+\exp(2\beta\varepsilon)} \right]^{\gamma-1} \rightarrow \left[\frac{1+\exp(2\beta\varepsilon)/z}{1/z+\exp(2\beta\varepsilon)} \right]^{\gamma-1} = \left[\frac{z+\exp(2\beta\varepsilon)}{1+z \exp(2\beta\varepsilon)} \right]^{\gamma-1} = 1/z$$

c) $z = 1 \rightarrow L = 0 ; z = \infty \rightarrow L = 1$

d) z corresponde a L y $1/z$ corresponde a $-L$

$$\begin{cases} L = \frac{z^x - 1}{1 + z^x} \end{cases}$$

Para definir la Temperatura critica nos fijamos cuando la pendiente de z en $z = 1$ vale 1

En $z=1$

la pendiente es $\frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{1+z \exp(2\beta\varepsilon)}{z+\exp(2\beta\varepsilon)} \right]_1^{\gamma-1} = (\gamma - 1) \left[\frac{1+z \exp(2\beta\varepsilon)}{z+\exp(2\beta\varepsilon)} \right]_1^{\gamma-2} \cdot$

- $\frac{\exp(2\beta\varepsilon)(z+\exp(2\beta\varepsilon)) - (1+z \exp(2\beta\varepsilon))}{(z+\exp(2\beta\varepsilon))^2} \Big|_1 = (\gamma - 1) \frac{\exp(2\beta\varepsilon)(1+\exp(2\beta\varepsilon)) - (1+\exp(2\beta\varepsilon))}{(1+\exp(2\beta\varepsilon))^2} =$

$= (\gamma - 1) \frac{(\exp(2\beta\varepsilon) - 1)}{(1+\exp(2\beta\varepsilon))} = c$

$Z=1$

(Hay que calcular la derivada segunda ...)

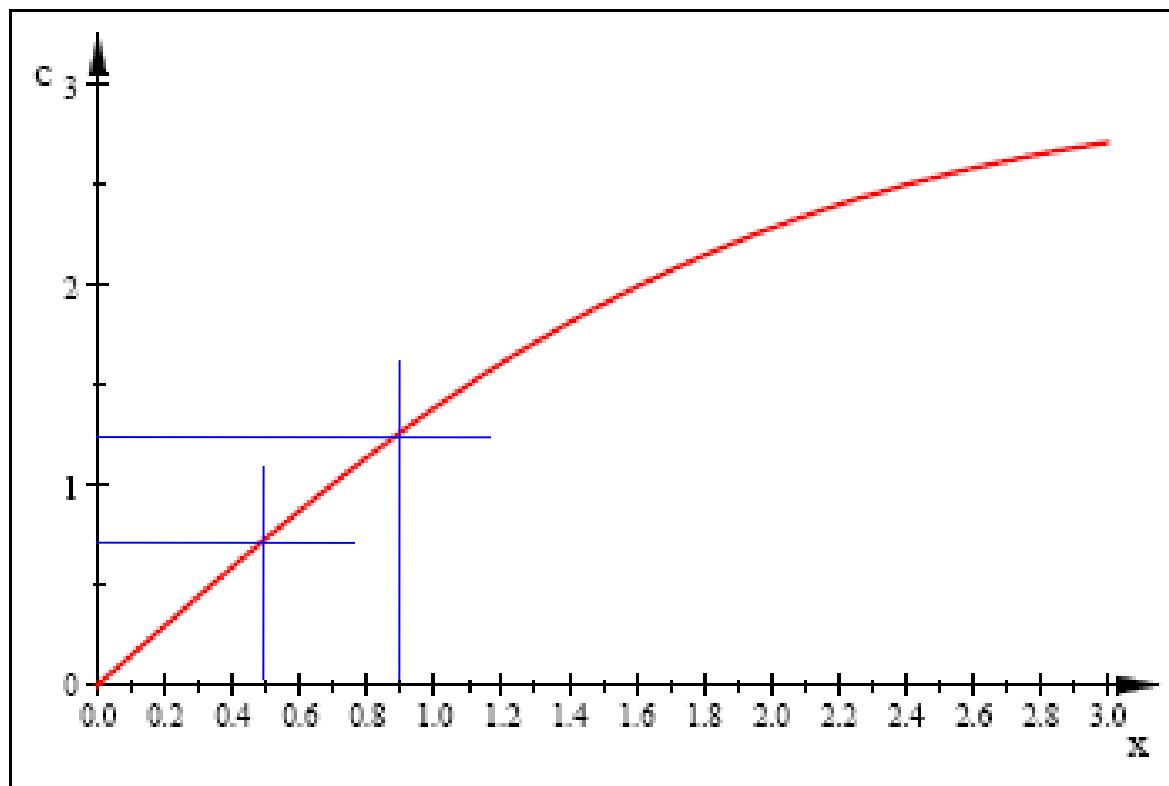
- Si $c < 1$ hay una sola solución $z = 1 \Rightarrow L = 0$
- Si $c > 1$ hay 3 soluciones pero la de $z = 1$ la dejamos de lado por lo mismo que en Bragg-Williams
las soluciones relevantes son z_0 y $1/z_0$ pero para cada solución $1/z_0$ hay la inversa en z_0

$$(\gamma - 1) \frac{(\exp(2\beta\varepsilon) - 1)}{(1 + \exp(2\beta\varepsilon))}$$

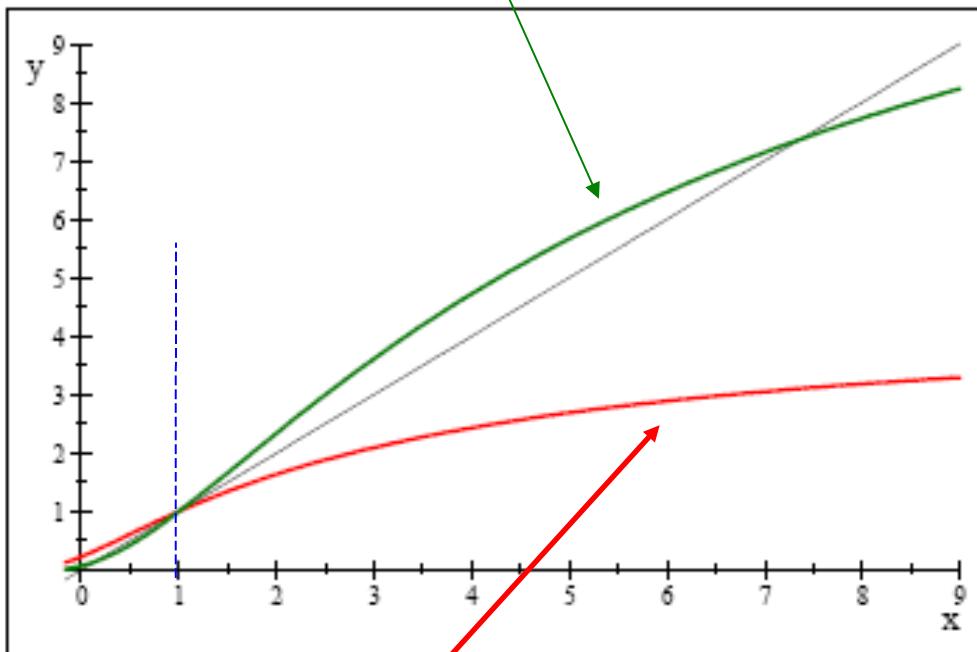
Sea $\gamma = 4$

$$2\beta\varepsilon = x$$

$$3 \cdot \frac{(\exp(x) - 1)}{(1 + \exp(x))}$$



Luego si $x = 0.9 \Rightarrow c > 1 \Rightarrow$



Luego si $x = 0.5 \Rightarrow c < 1 \Rightarrow$

Entonces imponiendo $c = 1$ obtenemos la temperatura critica

$$(\gamma - 1) \frac{(\exp(2\beta\varepsilon) - 1)}{(1 + \exp(2\beta\varepsilon))} = 1 \Rightarrow (\gamma - 1)(\exp(2\beta\varepsilon) - 1) = (1 + \exp(2\beta\varepsilon))$$

$$(\gamma - 1)\exp(2\beta\varepsilon) - \exp(2\beta\varepsilon) = (\gamma - 1) + 1 \Rightarrow \exp(2\beta\varepsilon) = \frac{\gamma}{(\gamma - 2)} \Rightarrow$$

$$kT_c = \frac{2\varepsilon}{\log(\gamma/(\gamma - 2))}$$

De donde

$$T > T_c \quad z = 1 \quad L = 0 \quad \sigma = \frac{1}{2(1+\exp(-2\beta\varepsilon))}$$

$$T < T_c \quad z > 1 \quad L > 0$$

El calor específico es

$$C_I(0, T)/Nk = -\varepsilon\gamma \left(\frac{d\sigma}{dT} - \frac{dL}{dT} \right)$$

Para $T > T_c$

$$C_I(0, T)/Nk = \frac{2\gamma\varepsilon^2}{(kT)^2} \frac{\exp(2\varepsilon/kT)}{(1 + \exp(2\varepsilon/kT))^2}$$

No se va a 0 para $T > T_c$

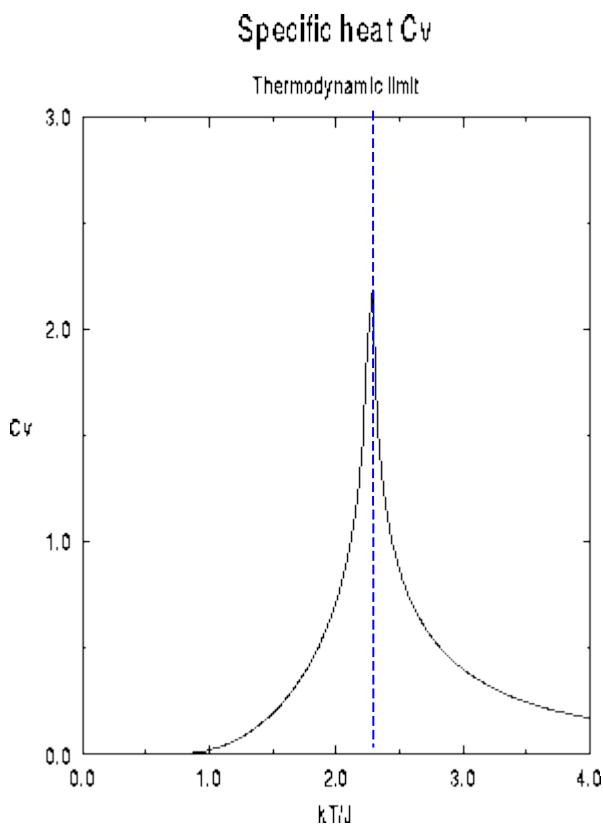
solo como referencia, la solucion de Onsager es (cerca del punto critico)

$$kT_c = \varepsilon \cdot 2.269185$$

$$\frac{1}{k} C_I(0, T) = \frac{2}{\pi} \left(\frac{2\varepsilon}{kT_c} \right) \left[-\log \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right| + \log \left(\frac{kT_c}{2\varepsilon} \right) - 1 - \frac{\pi}{4} \right]$$

En terminos de $\frac{kT}{\varepsilon}$

	<i>Onsager</i>	<i>Bethe – Peierls</i>	<i>Bragg – Williams</i>
kT_c/ϵ	2.27	2.88	4
div. logaritmica		pico	pico

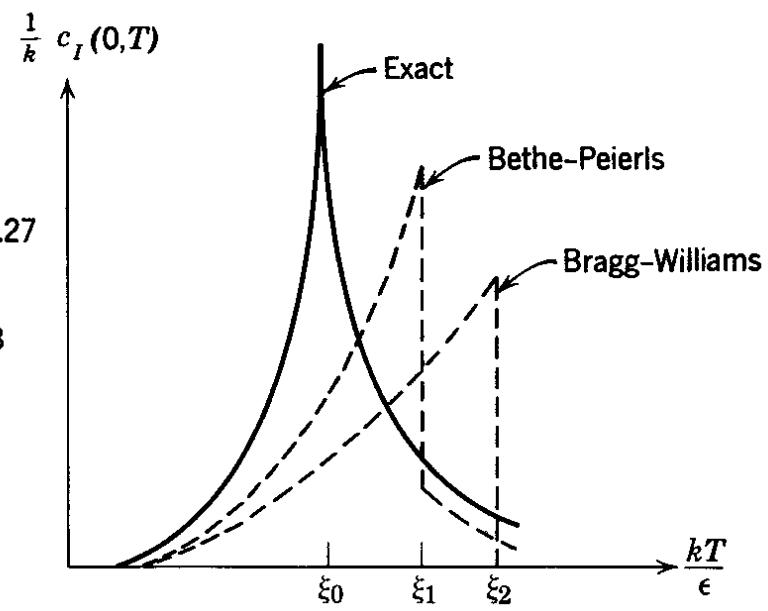


$$\xi_0 = \frac{1}{2 \sinh^{-1} 1} = 2.27$$

$$\xi_1 = \frac{2}{\log 2} = 2.88$$

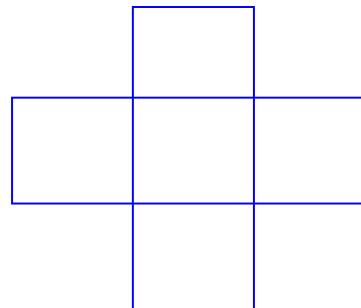
$$\xi_2 = 4$$

kT_c/ϵ



..

En suma, estudiamos

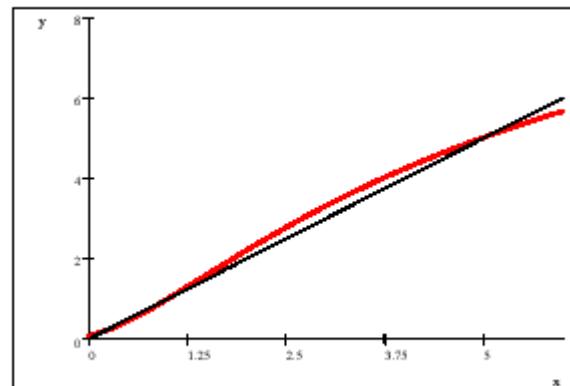
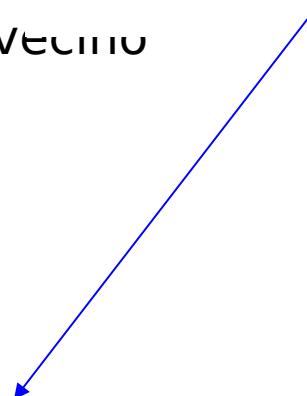


Representamos el resto del sistema por **z**

$$z = \left[\frac{1 + z \exp(2\beta\varepsilon)}{z + \exp(2\beta\varepsilon)} \right]^{\gamma-1}$$

Notamos que un centro es lo mismo que un vector

$$L = 2 \frac{z^x}{1 + z^x} - 1 = \frac{z^x - 1}{1 + z^x}$$



Obtuvimos:

Las soluciones para Ising

