

Guía 6, Problema 5

Juan Schmidt

Enunciado

Considere una cadena de Ising abierta y sin campo magnético, con una constante de acoplamiento distinta para cada par de primeros vecinos. El hamiltoniano es pues

$$H = - \sum_{i=1}^{N-1} J_i s_i s_{i+1} \quad (1)$$

donde $J_i > 0$, N es el número de espines y $s_i = \pm 1$. El sistema se encuentra en equilibrio a temperatura T .

(a) Pruebe que la función de partición del sistema es

$$Z_N(K_1, \dots, K_{N-1}) = 2^N \prod_{i=1}^{N-1} \cosh(K_i) \quad (2)$$

donde $K_i = \beta J_i$ (*ayuda*: no use la matriz de transferencia; empiece buscando una relación de recurrencia entre $Z_N(K_1, \dots, K_{N-1})$ y $Z_{N-1}(K_1, \dots, K_{N-2})$).

(b) Calcule la función de correlación $C(r) = \langle s_1 s_{r+1} \rangle$ tomando las derivadas adecuadas de la función de partición (*ayuda*: empiece primero por el caso $r = 1$ y para r genérico tenga en cuenta que $(s_1 s_{r+1}) = (s_1 s_2)(s_2 s_3) \dots (s_r s_{r+1})$, porque $s_i^2 = 1$).

(c) Muestre que, en el caso $J_1 = J_2 = \dots = J_{N-1}$, la función de correlación tiene la forma $C(r) = e^{-r/\xi}$, y calcule la longitud de correlación ξ . ¿Qué valores toma ξ en los límites $T \rightarrow 0$ y $T \rightarrow \infty$?

Resolución

(a) El inciso nos pide demostrar que la función de partición que queda factorizada. Recordemos que para que esto sea posible necesitamos tener grados de libertad independientes. Ya sabemos que, en este caso, la función de partición no se puede factorizar en funciones de partición para cada espín individual, ya que estos no son independientes (cada uno interactúa con sus dos vecinos).

Sin embargo, al igual que en el Problema 3 de esta guía, podemos tratar a cada *enlace* entre espines vecinos como independiente. Específicamente, podemos decir que tenemos un *enlace* con $w = +1$ si los dos espines *enlazados* apuntan en la misma orientación, o con $w = -1$ si apuntan en dirección opuesta. Por lo tanto, en lugar de definir un microestado eligiendo el valor del espín en cada sitio, podemos alternativamente definirlo eligiendo el primer espín, el *tipo de enlace* (u orientación relativa) entre el primer espín y el segundo, entre el segundo y el tercero, y así. Podemos comprobar fácilmente que, valga lo que valga el *enlace* entre el primer y segundo espín, esto no me restringe ni afecta las posibilidades sobre como *enlazar* al segundo y tercero. Si tenemos N espines, entonces habrá $N - 1$ enlaces independientes.

Como muestra la ec. (1), la energía del sistema se puede escribir como la suma de las energías correspondientes a cada uno de estos $N - 1$ enlaces, siendo $\epsilon_i = -J_i$ si los espines s_i y s_{i+1} son paralelos (es decir si el enlace es $w = +1$) o $\epsilon_i = +J_i$ si son antiparalelos (es decir, enlace $w = -1$). Expresado de otro modo

$$E = - \sum_{i=1}^{N-1} J_i w_i. \quad (3)$$

Teniendo en mente que podemos factorizar, empezamos escribiendo la función de partición de un solo enlace

$$Z_i = \sum_{w=\pm} e^{-\beta J_i w_i} = 2 \cosh \beta J_i \quad (4)$$

Por lo tanto, la función de partición del sistema, obtenido como el producto de cada una de estas Z_i , quedaría

$$Z_N = \prod_{i=1}^{N-1} 2 \cosh \beta J_i \quad (5)$$

Pero hay que tener cuidado que al elegir los $N - 1$ enlaces uno en realidad no fija un microestado definido, ya que todavía hay un grado de libertad adicional: hacia dónde oriento el primer espín. Si uno define solo los enlaces, aun habrá dos configuraciones compatibles. Por ejemplo, si uno tiene 4 espines y fija que los enlaces sean paralelo-paralelo-antiparalelo, esto puede corresponder al microestado $\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow$ o al microestado $\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow$. Afortunadamente, ambos microestados tienen la misma energía, con lo cual simplemente hay que agregar una degeneración global 2 a toda la función de partición. Teniendo en cuenta esto, recuperamos la expresión que propone el inciso:

$$Z_N = 2^N \prod_{i=1}^{N-1} \cosh \beta J_i \quad (6)$$

(b) Siguiendo la recomendación del enunciado, empezamos por calcular $C(r = 1) = \langle s_1 s_2 \rangle$. La manera más *formal* de calcular un valor medio sería

$$\langle s_1 s_2 \rangle = \sum_{\text{microestados}} s_1 s_2 p(\text{microestado}) \quad (7)$$

donde la función de probabilidad para cada microestado está dada por

$$p(\text{microestado}) = \frac{e^{-\beta E(\text{microestado})}}{Z_N} \quad (8)$$

con lo cual

$$\langle s_1 s_2 \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{s_1=\pm} \sum_{w_1=\pm} \dots \sum_{w_{N-1}=\pm} s_1 s_2 e^{\beta J_1 s_1 s_2 + \beta J_2 s_2 s_3 + \dots + \beta J_{N-1} s_{N-1} s_N} \quad (9)$$

Acá hacemos algo que ya nos resulta familiar, que es escribir lo que está adentro de la sumatoria como la derivada respecto de βJ_1 de la exponencial sola. Planteando eso, podemos reescribir

$$\langle s_1 s_2 \rangle = \frac{1}{Z_N} \frac{\partial Z_N}{\partial (\beta J_1)} \quad (10)$$

Aplicando esta fórmula a la expresión (6) que escribimos para Z_N , obtenemos

$$\langle s_1 s_2 \rangle = \frac{2^N \sinh(\beta J_1) \prod_{i=2}^{N-1} \cosh(\beta J_i)}{2^N \cosh(\beta J_1) \prod_{i=2}^{N-1} \cosh(\beta J_i)} = \tanh(\beta J_1) \quad (11)$$

Noten que al escribir Z_N en el denominador, escribí el factor con J_1 separado de los demás, para que se vea mejor como se cancelan el resto de los factores con los otros J_i .

De todas formas, el enunciado nos pide una expresión general para $\langle s_1 s_{r+1} \rangle$. Siguiendo la ayuda del enunciado, sabemos que si dentro de este valor medio agregamos algún s_i^2 no se modificará el resultado, ya que sería lo mismo que agregar un 1. Por lo tanto

$$\langle s_1 s_{r+1} \rangle = \langle s_1 s_2^2 \dots s_r^2 s_{r+1} \rangle = \langle (s_1 s_2)(s_2 s_3) \dots (s_r s_{r+1}) \rangle \quad (12)$$

Nuevamente, escribamos este valor medio de manera análoga a la ec (9):

$$\frac{1}{Z_N} \sum_{s_1=\pm} \sum_{w_1=\pm} \dots \sum_{w_{N-1}=\pm} (s_1 s_2)(s_2 s_3) \dots (s_r s_{r+1}) e^{\beta J_1 s_1 s_2 + \dots + \beta J_r s_r s_{r+1} + \dots + \beta J_{N-1} s_{N-1} s_N} \quad (13)$$

Esta vez, hay que realizar múltiples derivadas. Derivando la exponencial respecto de βJ_1 logramos que baje el $(s_1 s_2)$, derivando respecto de βJ_2 baja el $(s_2 s_3)$, y así seguimos derivando hasta llegar a βJ_r para que baje $(s_r s_{r+1})$. En otras palabras

$$\langle s_1 s_{r+1} \rangle = \frac{1}{Z_N} \frac{\partial^r Z_N}{\partial(\beta J_1) \dots \partial(\beta J_r)} \quad (14)$$

Aplicando esto a la expresión (6) para Z_N , tenemos que

$$\langle s_1 s_{r+1} \rangle = \frac{2^N \prod_{i=1}^r \sinh(\beta J_i) \prod_{i=r+1}^{N-1} \cosh(\beta J_i)}{2^N \prod_{i=1}^r \cosh(\beta J_i) \prod_{i=r+1}^{N-1} \cosh(\beta J_i)} = \prod_{i=1}^r \tanh \beta J_i \quad (15)$$

donde podemos ver que para aquellos J_i respecto de los cuales derivamos convertimos a los cosh en sinh en el numerador, mientras que en el denominador todos se mantienen como cosh.

(c) En el caso particular en que $J_1 = J_2 = \dots = J_{N-1} = J$, todos los factores que aparecen en la ec (15) son iguales, con lo cual

$$C(r) = \langle s_1 s_{r+1} \rangle = (\tanh(\beta J))^r \quad (16)$$

El enunciado nos pide que escribamos este resultado con la forma $C(r) = e^{-r/\xi}$ para poder identificar quién es ξ . Lo importante es notar que tanto la forma que nos quedó como la que propone el enunciado corresponde a algún número elevado a la r . Ese número corresponde a $\tanh(\beta J)$ en nuestra expresión, y a $e^{-1/\xi}$ en la expresión del enunciado. Por suerte, en nuestro caso $J_i > 0$ como dice el enunciado, con lo cual $\tanh(\beta J)$ será necesariamente positivo al igual que $e^{-1/\xi}$. Vamos a pedir, por supuesto que se trate del mismo número en ambos casos, por lo tanto

$$\tanh(\beta J) = e^{-1/\xi} \quad (17)$$

Si despejamos ξ de esta última expresión, obtenemos

$$\xi = -\frac{1}{\ln [\tanh(\beta J)]} \quad (18)$$

Conociendo este valor, podemos escribir la función de correlación de la manera que nos propone el enunciado

$$C(r) = e^{-r/\{-\ln [\tanh(\beta J)]\}^{-1}} \quad (19)$$

Para analizar el límite de baja temperatura, hacemos que $\beta \rightarrow +\infty$ en la expresión (18). Al hacer esto, la tangente hiperbólica tiende a su asíntota horizontal en 1^- ; y el logaritmo de 1^- tiende a 0^- , con lo cual $\xi \rightarrow +\infty$.

Para analizar el límite de alta temperatura, hacemos que $\beta \rightarrow 0^+$, con lo cual la tangente hiperbólica también tiende a 0^+ , y entonces el logaritmo tiende a $-\infty$. Consecuentemente, $\xi \rightarrow 0^+$.

Comentario final

Aprovechando el contexto del problema que plantea la posibilidad de tener distintas constantes de acoplamiento J_i entre los distintos sitios, quería mencionar una fase que pueden adoptar algunos sistemas magnéticos, conocido como *vidrio de espín* o *spin glass*.

Esta fase ocurre en materiales con una constante de acoplamiento J_i aleatoria, que sigue alguna distribución de probabilidad. Un ejemplo en donde ocurre esto es en aleaciones de cobre y manganeso (CuMn), en las cuales el Mn tiene momento magnético pero en Cu no. Dado que los átomos de cada elemento se distribuyen azarosamente, la distancia entre un átomo de Mn (que tienen momento magnético) y sus Mn vecinos será aleatoria. La constante de acoplamiento depende de la distancia que hay entre los momentos magnéticos, y en este tipo de materiales, al variar la distancia entre los sitios magnéticos, J puede incluso pasar de ser positivo a negativo. Todo esto hace que al bajar la temperatura, el sistema no adquiera un orden ferromagnético (todos los espines apuntando para el mismo lado) o antiferromagnético (espines alternados), ya que ocurrirá un fenómeno denominado *frustración*. En pocas palabras, algunos espines no podrán encontrar una orientación que deje satisfecho a todos

los espines que acoplan a este. Por ejemplo, podría ocurrir que un espín esté acoplado ferromagnéticamente a un espín up, y al mismo tiempo acoplado antiferromagnéticamente a otro espín up. Esto hace que haya muchos posibles estados de mínima energía del sistema, con una gran degeneración. En estas situaciones, en donde hay frustración debido a una constante de acoplamiento aleatoria se forma la fase conocida como *vidrio de espín*, en la cual la magnetización promedio será cero en ausencia de campo (al igual que en una fase paramagnética), pero los espines se encontrarán congelados colectivamente (a diferencia de una fase paramagnética).

De más está decir que esta fenomenología no ocurre en el problema que resolvimos acá ya que es unidimensional, y por lo tanto no presenta ninguna transición de fase, pero si podría ocurrir en sistemas de dimensión mayor, en los cuales haya algunas $J_i > 0$ y otras $J_i < 0$.