Física Teórica 3 — segundo cuatrimestre de 2023

Guía 8: *problema 6**

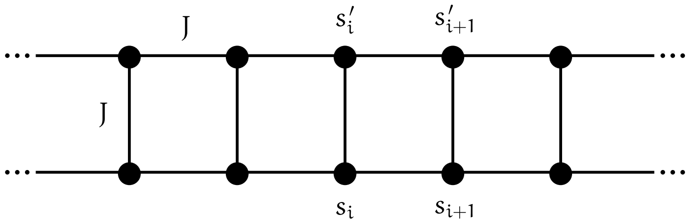
■ **Problema 6**. Use el método de la matriz de transferencia para resolver el problema de una doble cadena Ising cerrada y sin campo externo,

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

Muestre que para $N \gg 1$

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

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.



■ **Solución**. Asumiremos que $K > 0$. El estado de la cadena puede especificarse mediante el estado de los pares de espines (s_i, s_i'). Los pares de espines pueden estar en cuatro estados, a los que asignaremos el siguiente orden:

$$\boldsymbol{e}_1 = (1,1), \quad \boldsymbol{e}_2 = (1,-1), \quad \boldsymbol{e}_3 = (-1,1), \quad \boldsymbol{e}_4 = (-1,-1). \tag{3}$$

El factor de Boltzmann de cualquier configuración puede escribirse como

$$e^{-\beta E} = q_{i_1 i_2} q_{i_2 i_3} \dots q_{i_N i_1}, \tag{4}$$

donde

$$q_{ij} = \exp\left\{K\left[\boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{e}_j + \frac{1}{2}(\boldsymbol{e}_i)_1(\boldsymbol{e}_j)_2 + \frac{1}{2}(\boldsymbol{e}_j)_1(\boldsymbol{e}_j)_2\right]\right\}. \tag{5}$$

La matriz $\mathbf{q}$ es de cuatro por cuatro. La expresión anterior se aplica mejor en un programa de cálculo simbólico que sobre el papel. Sin dar más vueltas, lo que hay que calcular es

$$x^{s_1 s_2 + s_1' s_2' + \frac{1}{2}(s_1 s_1' + s_2 s_2')}, \tag{6}$$

donde

$$x = e^K. \tag{7}$$

*zanellaj@df.uba.ar

Más aún, lo que hay que calcular realmente es

$$m(s_1, s_1', s_2, s_2') = s_1 s_2 + s_1' s_2' + \tfrac{1}{2}(s_1 s_1' + s_2 s_2'). \tag{8}$$

En la siguiente matriz, las filas corresponden al par (s_1, s_1') y las columnas al par (s_2, s_2'),

$$\mathbf{m} = \begin{array}{c} \\ {\scriptstyle (1,1)} \\ {\scriptstyle (1,-1)} \\ {\scriptstyle (-1,1)} \\ {\scriptstyle (-1,-1)} \end{array} \!\!\begin{array}{c} \begin{array}{cccc} {\scriptstyle (1,1)} & {\scriptstyle (1,-1)} & {\scriptstyle (-1,1)} & {\scriptstyle (-1,-1)} \end{array} \\ \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -3 & 0 \\ 0 & -3 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} \end{array}. \tag{9}$$

Finalmente, la matriz $\mathbf{q}$ es

$$\mathbf{q} = \begin{bmatrix} x^3 & 1 & 1 & x^{-1} \\ 1 & x & x^{-3} & 1 \\ 1 & x^{-3} & x & 1 \\ x^{-1} & 1 & 1 & x^3 \end{bmatrix}. \tag{10}$$

En términos de esta matriz, la función de partición para la cadena con condiciones de contorno periódicas es

$$Z = \operatorname{Tr} \mathbf{q}^N. \tag{11}$$

Debido a que la matriz $\mathbf{q}$ es simétrica, podemos diagonalizarla. Si sus autovalores son λ_i, tendremos

$$\operatorname{Tr} \mathbf{q}^N = \sum_{i=1}^{4} \lambda_i^N. \tag{12}$$

En realidad no necesitamos diagonalizarla, sino simplemente encontrar sus autovalores. Aquí puede radicar la mayor dificultad del problema. Sin embargo, aplicando algunas propiedades de los determinantes, el cálculo termina siendo muy sencillo. Cuando encontremos los cuatro autovalores, habrá que ver cuál de ellos es el más grande en valor absoluto, digamos, $\lambda_>$. En el límite en que $N \to \infty$,

$$\frac{1}{2N} \log Z \to \frac{1}{2} \log \lambda_>. \tag{13}$$

Tenemos que calcular el determinante de la siguiente matriz:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} x^3 - \lambda & 1 & 1 & x^{-1} \\ 1 & x - \lambda & x^{-3} & 1 \\ 1 & x^{-3} & x - \lambda & 1 \\ x^{-1} & 1 & 1 & x^3 - \lambda \end{bmatrix}. \tag{14}$$

El determinante no se ve afectado si a una fila o columna de la matriz le sumamos, respectivamente, otra fila u otra columna. Eso permite generar nuevas matrices con el mismo determinante pero con la posibilidad de anular algunos elementos. Por ejemplo, si a la primera fila le restamos la última, queda

$$\mathbf{A}' = \begin{bmatrix} x^3 - x^{-1} - \lambda & 0 & 0 & x^{-1} - x^3 + \lambda \\ 1 & x - \lambda & x^{-3} & 1 \\ 1 & x^{-3} & x - \lambda & 1 \\ x^{-1} & 1 & 1 & x^3 - \lambda \end{bmatrix}. \tag{15}$$

Si ahora a la última columna le sumamos la primera, resulta

$$\mathbf{A}'' = \begin{bmatrix} x^3 - x^{-1} - \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 1 & x - \lambda & x^{-3} & 2 \\ 1 & x^{-3} & x - \lambda & 2 \\ x^{-1} & 1 & 1 & x^3 + x^{-1} - \lambda \end{bmatrix}. \tag{16}$$

Esto sería suficiente para reducir el cálculo original al determinante de una matriz de tres por tres. Podemos simplificar aún más las cosas si a la segunda fila le restamos la tercera,

$$\tilde{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} x^3 - x^{-1} - \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 1 & x - x^{-3} - \lambda & x^{-3} - x + \lambda & 0 \\ 1 & x^{-3} & x - \lambda & 2 \\ x^{-1} & 1 & 1 & x^3 + x^{-1} - \lambda \end{bmatrix}. \tag{17}$$

Por último, sumando la tercera columna a la segunda,

$$\tilde{\mathbf{A}}' = \begin{bmatrix} x^3 - x^{-1} - \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & x^{-3} - x + \lambda & 0 \\ 1 & x + x^{-3} - \lambda & x - \lambda & 2 \\ x^{-1} & 2 & 1 & x^3 + x^{-1} - \lambda \end{bmatrix}. \tag{18}$$

El determinante de esta matriz es esencialmente el de una matriz de dos por dos:

$$\det \mathbf{A} = \det \tilde{\mathbf{A}}' = \left(x^3 - x^{-1} - \lambda\right)\left(x^{-3} - x + \lambda\right)\left[4 - \left(x^3 + x^{-1} - \lambda\right)\left(x + x^{-3} - \lambda\right)\right]. \tag{19}$$

Dos autovalores ya están a la vista:

$$\lambda_1 = x^3 - x^{-1} = x\left(x^2 - x^{-2}\right), \qquad \lambda_2 = x - x^{-3} = x^{-1}\left(x^2 - x^{-2}\right). \tag{20}$$

Reemplazando x por e^K,

$$\lambda_1 = 2e^K \sinh 2K, \qquad \lambda_2 = 2e^{-K}\sinh 2K. \tag{21}$$

Puesto que $K \geqslant 0$, es evidente que $\lambda_1 \geqslant \lambda_2$. Los otros dos autovalores son raíces de la cuadrática

$$\begin{aligned}&\left(x^3+x^{-1}-\lambda\right)\left(x+x^{-3}-\lambda\right)-4\\&=\lambda^2-\lambda\left(x^3+x^{-1}+x^{-3}+x\right)+\left(x^3+x^{-1}\right)\left(x+x^{-3}\right)-4.\end{aligned}\tag{22}$$

Reagrupando términos, la ecuación que hay que resolver es

$$\lambda^2-\lambda\left(x+x^{-1}\right)\left(x^2+x^{-2}\right)+\left(x^2-x^{-2}\right)^2=0.\tag{23}$$

Aquí ya conviene reemplazar x por e^K,

$$\lambda^2-4\lambda\cosh K\,\cosh 2K+4\sinh^2 2K=0.\tag{24}$$

Las soluciones son

$$\lambda_\pm=2\left(\cosh K\,\cosh 2K\pm\sqrt{\cosh K^2\,\cosh^2 2K-\sinh^2 2K}\right).\tag{25}$$

Con las sustituciones

$$\sinh 2K=2\cosh K\,\sinh K,\qquad \cosh 2K=2\sinh^2 K+1,\tag{26}$$

queda

$$\begin{aligned}\lambda_\pm&=2\left[\cosh K\,\cosh 2K\pm\sqrt{\cosh K^2\left(4\sin^4 K+4\sinh^2 K+1\right)-4\cosh^2 K\,\sinh^2 K}\right]\\&=2\cosh K\left(\cosh 2K\pm\sqrt{1+4\sinh^4 K}\right).\end{aligned}\tag{27}$$

El mayor de estos dos autovalores es λ_+. Tenemos que ver cómo se compara λ_+ con

$$\lambda_1=2e^K\sinh 2K.\tag{28}$$

La diferencia de los dos autovalores es

$$\begin{aligned}\Delta(K)=\lambda_+-\lambda_1&=2\cosh K\left(\cosh 2K+\sqrt{1+4\sinh^4 K}\right)-2e^K\sinh 2K\\&=2\cosh K\left(\cosh 2K+\sqrt{1+4\sinh^4 K}-2e^K\sinh K\right).\end{aligned}\tag{29}$$

Aquí lo único que usamos es que $\sinh 2x=2\cosh x\,\sinh x$. Como $\cosh x>0$, el signo de Δ va a ser igual al signo de

$$A=\cosh 2K+\sqrt{1+4\sinh^4 K}-2e^K\sinh K.\tag{30}$$

Ahora bien

$$A>\cosh 2K+2\sinh^2 K-2e^K\sinh K.\tag{31}$$

Entonces el signo de $\Delta(K)$ va a ser igual al signo de la función

$$\begin{aligned} f(K) &= \cosh 2K + 2\sinh^2 K - 2e^K \sinh K \\ &= 2\cosh 2K - 1 - 2e^K \sinh K \\ &= 2\cosh 2K - 1 - e^{2K} + 1 = 2\cosh 2K - e^{2K}. \end{aligned} \tag{32}$$

Aquí hemos usado la identidad $2\sinh^2 x = \cosh 2x - 1$. Pero

$$2\cosh 2K = e^{2K} + e^{-2K} > e^{2K}. \tag{33}$$

Luego, claramente $f(K) > 0$. Vemos así que el mayor autovalor es λ_+. Luego,

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{2N} \log Z = \frac{1}{2} \log \lambda_+ = \frac{1}{2} \log\left[2\cosh K \left(\cosh 2K + \sqrt{1 + 4\sinh^4 K}\right)\right]. \tag{34}$$

■ Si agregamos un campo externo, para que la matriz de transferencia resulte simétrica, conviene escribir el término de interacción con el campo como

$$\exp\left[\frac{b}{2}(s_i + s_i' + s_{i+1} + s_{i+1}')\right], \qquad b = \beta\mu B. \tag{35}$$

Lo importante es que

$$\sum_{i=1}^{N} e^{b(s_i+s_i')} = \sum_{i=1}^{N} e^{\frac{1}{2}b(s_i+s_i'+s_{i+1}+s_{i+1}')}. \tag{36}$$

La matriz de transferencia es entonces

$$\mathbf{q} = \begin{bmatrix} x^3y^2 & y & y & x^{-1} \\ y & x & x^{-3} & y^{-1} \\ y & x^{-3} & x & y^{-1} \\ x^{-1} & y^{-1} & y^{-1} & x^3y^{-2} \end{bmatrix}, \tag{37}$$

donde $y = e^b$. Para encontrar los autovalores, hay que calcular el determinante la siguiente matriz

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} x^3y^2 - \lambda & y & y & x^{-1} \\ y & x - \lambda & x^{-3} & y^{-1} \\ y & x^{-3} & x - \lambda & y^{-1} \\ x^{-1} & y^{-1} & y^{-1} & x^3y^{-2} - \lambda \end{bmatrix}. \tag{38}$$

Como al final de todo vamos a igualar el determinante a cero, multiplicar a una fila o a una columna por una constante no va a afectar la ecuación para los autovalores. Multiplicando la última fila por y y restándola al resultado de multiplicar a la primera fila por y^{-1}, queda

$$\begin{bmatrix} x^3y - y^{-1}\lambda - x^{-1}y & 0 & 0 & (xy)^{-1} - x^3y^{-1} + y\lambda \\ y & x-\lambda & x^{-3} & y^{-1} \\ y & x^{-3} & x-\lambda & y^{-1} \\ x^{-1}y & 1 & 1 & x^3y^{-1} - y\lambda \end{bmatrix}. \tag{39}$$

Restándole la tercera columna a la segunda,

$$\begin{bmatrix} x^3y - y^{-1}\lambda - x^{-1}y & 0 & 0 & (xy)^{-1} - x^3y^{-1} + y\lambda \\ y & x-\lambda-x^{-3} & x^{-3} & y^{-1} \\ y & x^{-3}-x+\lambda & x-\lambda & y^{-1} \\ x^{-1}y & 0 & 1 & x^3y^{-1} - y\lambda \end{bmatrix}. \tag{40}$$

Multiplicando la primera columna por y^{-1} y restándola a la cuarta columna multiplicada por y,

$$\begin{bmatrix} x^3 - y^{-2}\lambda - x^{-1} & 0 & 0 & 2x^{-1} - 2x^3 + \left(y^2 + y^{-2}\right)\lambda \\ 1 & x-\lambda-x^{-3} & x^{-3} & 0 \\ 1 & x^{-3}-x+\lambda & x-\lambda & 0 \\ x^{-1} & 0 & 1 & x^3 - x^{-1} - y^2\lambda \end{bmatrix}. \tag{41}$$

Por último, si a la segunda fila le restamos la tercera,

$$\mathbf{A}' = \begin{bmatrix} x^3 - y^{-2}\lambda - x^{-1} & 0 & 0 & 2x^{-1} - 2x^3 + \left(y^2 + y^{-2}\right)\lambda \\ 0 & 2x-2\lambda-2x^{-3} & x^{-3}-x+\lambda & 0 \\ 1 & x^{-3}-x+\lambda & x-\lambda & 0 \\ x^{-1} & 0 & 1 & x^3 - x^{-1} - y^2\lambda \end{bmatrix}. \tag{42}$$

Veamos qué tanto se simplificó el determinante. Desarrollándolo por la primera fila, obtenemos

$$\begin{aligned} \det \mathbf{A}' &= \left(x - x^{-3} - \lambda\right)\Big\{ \left(x^3 - y^{-2}\lambda - x^{-1}\right)\left(x^3 - x^{-1} - y^2\lambda\right)\left(x + x^{-3} - \lambda\right) \\ &\quad - \left[2x^{-1} - 2x^3 + \left(y^2 + y^{-2}\right)\lambda\right]\left[2x^{-1}(x-\lambda) + x^{-1}\left(x^{-3} - x + \lambda\right) - 2\right]\Big\} \\ &= \left(x - x^{-3} - \lambda\right)\Big\{ \left(x^3 - x^{-1} - y^2\lambda\right)\left(x^3 - x^{-1} - y^{-2}\lambda\right)\left(x + x^{-3} - \lambda\right) \\ &\quad + 2x^{-1}\left[x^3 - x^{-1} - \tfrac{1}{2}\left(y^2 + y^{-2}\right)\lambda\right]\left(x^{-3} - x - \lambda\right)\Big\}. \end{aligned} \tag{43}$$

Hay un sólo autovalor fácil de calcular y que no depende del campo externo,

$$\lambda_1 = x^{-1}\left(x^2 - x^{-2}\right) = 2e^K \sinh 2K. \tag{44}$$

Los otros autovalores son las raíces de la siguiente cúbica:

$$\lambda^3 - 2\lambda^2 e^K \left(\cosh 2K + e^{4K}\cosh 2b\right) + 8\lambda e^{2K} \sinh 2K\, \cosh(K-b)\, \cosh(K+b) - 8e^K \sinh^3 2K. \quad (45)$$

No hay mucho que se pueda hacer para simplificar el cálculo de los autovalores. Incluso es más sencillo recuperar el caso con $b = 0$ a partir de la Ec. (43) que a partir de la expresión anterior. Sin embargo, esta expresión les va a resultar útil para resolver numéricamente el último problema de la guía.