Física Teórica 3 — primer cuatrimestre de 2024

Guía 7: *modelo de Ising*

1. (Huang §14.6, Pathria y Beale §13.2). En una dimensión, el modelo de Ising puede ser resuelto mediante el método de la *matriz de transferencia*. Considere una cadena cerrada de N espines. Si se definen $b = \beta\mu B$, $K = \beta J$ y $s_{N+1} = s_1$, la función de partición es

$$Z_N(b, K) = \sum_{s_1,\ldots,s_N=\pm 1} \exp\left[\sum_{i=1}^{N} (b s_i + K s_i s_{i+1})\right]. \tag{1}$$

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

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

   b) Muestre que la función de partición puede escribirse como $Z_N = \lambda_+^N + \lambda_-^N$, donde

$$\lambda_\pm = e^K \left(\cosh b \pm \sqrt{\sinh^2 b + e^{-4K}}\right) \tag{3}$$

   son los autovalores de la matriz $\mathbf{q}$.

   c) Muestre que $\lim\limits_{N\to\infty} \frac{1}{N} \log Z_N = \log \lambda_+$.

   d) Derivando adecuadamente la función de partición, encuentre la magnetización media por espín y estudie el límite $N \to \infty$.

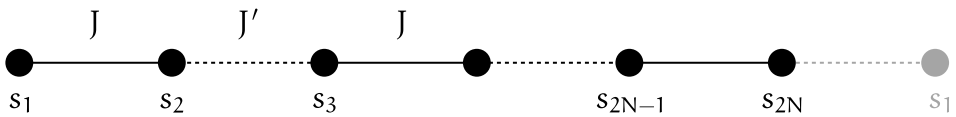
   e) Muestre que no hay magnetización espontánea cuando $B \to 0^+$ en el límite $N \to \infty$, a menos que $T = 0$.

2. La figura muestra una cadena de Ising cerrada de 2N espines. La constante de acoplamiento entre espines alterna su valor entre J y J'. Hay un campo externo B. Se definen $x = e^{\beta J}$, $x' = e^{\beta J'}$ e $y = e^{\beta\mu B} = e^b$.

   a) Calcule la energía libre por espín en el límite $N \to \infty$.

   b) En el mismo límite, calcule el valor medio de la magnetización por espín.

   c) Calcule los valores medios de los espines pares e impares.



3. Para la cadena abierta sin campo: escriba la función de partición, sume explícitamente sobre el último espín y encuentre una relación de recurrencia para Z_N en términos de Z_{N-1}. Resuelva la relación de recurrencia. Verifique el resultado usando algún otro método. (Por ejemplo, considerando como variables los productos $s_i s_{i+1}$, o adaptando el método de la matriz de transferencia). En general, las cadenas cerradas y abiertas, con y sin campo, pueden resolverse a partir de relaciones de recurrencia.

4. **Correlaciones 1**. Para analizar la correlación entre espines de una cadena lineal, el caso más sencillo es con extremos abiertos y sin campo externo. Para tener acceso a los valores medios de productos de pares de espines, se definen constantes de acoplamiento J_i,

$$E = -\sum_{i=1}^{N-1} J_i s_i s_{i+1}. \tag{4}$$

La función de partición se calcula siguiendo el método recursivo del problema 3. Para calcular el valor de expectación del producto $s_i s_{i+1}$, habrá que derivar el logaritmo de la función de partición respecto de J_i. La función de correlación

$$G(i, i+j) = \langle s_i s_{i+j} \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_{i+j} \rangle, \tag{5}$$

puede calcularse de manera análoga (notar que $B = 0 \Rightarrow \langle s_n \rangle = 0$). Puesto que $s_i^2 = 1$,

$$s_i s_{i+j} = (s_i s_{i+1})(s_{i+1} s_{i+2}) \ldots (s_{i+j-2} s_{i+j-1})(s_{i+j-1} s_{i+j}). \tag{6}$$

Esto permite calcular fácilmente el valor medio de $s_i s_{i+j}$. Al final del cálculo todas las constantes J_i toman el mismo valor J. Calcule $G(i, i+j)$. Defina la longitud de correlación ξ escribiendo $G(i, i+j) = e^{j/\xi}$. Notar que, aunque la cadena con extremos abiertos no tiene invariancia de traslación, $G(i, i+j)$ es independiente de i.

5. **Correlaciones 2**. En el problema 1 calculamos el valor medio de la magnetización tomando una derivada adecuada del logaritmo de la función de partición. En el problema anterior hicimos algo parecido para calcular los valores de expectación $\langle s_i s_{i+j} \rangle$ para una cadena abierta sin campo. El problema ahora es calcular la función de correlación de la Ec. (5) para una cadena cerrada y con campo. Las estrategias que usamos en los otros problemas ahora no funcionan. La idea es calcular valores medios directamente a partir de la distribución de probabilidades.

   a) Para empezar, demuestre que el valor medio de s_1 es

   $$\langle s_1 \rangle = \frac{1}{\lambda_+^N + \lambda_-^N} \sum_{s_1} s_1 \left(\mathbf{q}^N\right)_{s_1, s_1}. \tag{7}$$

   b) Para poder hacer la suma, necesitará los elementos de matriz de $\mathbf{q}^N$. Si los autovectores normalizados correspondientes a λ_+ y λ_- son $\boldsymbol{u}$ y $\boldsymbol{v}$, demuestre que

   $$\mathbf{q}^k = \lambda_+^k \boldsymbol{u}\boldsymbol{u} + \lambda_-^k \boldsymbol{v}\boldsymbol{v}. \tag{8}$$

   El objeto $\mathbf{AB}$, llamado diada, frecuente en mecánica clásica y en electromagnetismo, tiene el siguiente significado operacional:

   $$\mathbf{a} \cdot (\mathbf{AB}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{A})\mathbf{B}, \qquad (\mathbf{AB}) \cdot \mathbf{b} = \mathbf{A}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{b}). \tag{9}$$

   La ventaja de usar diadas, es que no es necesario introducir la matriz que diagonaliza a la matriz de transferencia $\mathbf{q}$.

c) Como se trata de vectores ortonormales en el plano, u y v deben poder escribirse como $u = (\cos\varphi, \sin\varphi)$ y $v = (\sin\varphi, -\cos\varphi)$. Demuestre que $\cot 2\varphi = e^{2K}\sinh b$.

d) Reuniendo todos estos resultados, calcule el valor medio (7) explícitamente y verifique que se obtiene el resultado del problema 1.

e) Del mismo modo, calcule el valor medio $\langle s_1 s_n\rangle$ y $G(i, i+j)$.

f) Muestre que, cuando $N \to \infty$,

$$G(i, i+j) = \sin^2 2\varphi \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^j. \tag{10}$$

g) Encuentre la longitud de correlación como función de K y b.

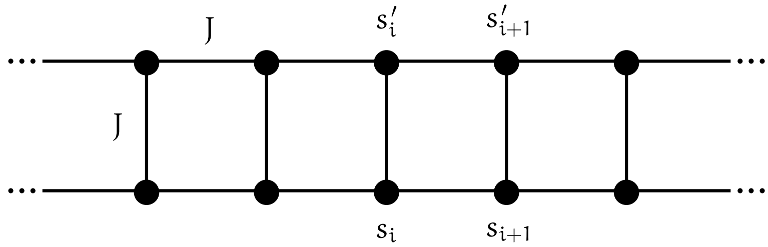
6. (Pathria y Beale, problema 13.7). Use el método de la matriz de transferencia para resolver el problema de una doble cadena Ising cerrada y sin campo externo,

$$H = -J\sum_{i=1}^{N}\left(s_i s_{i+1} + s_i' s_{i+1}'\right) - J\sum_{i=1}^{N} s_i s_i'. \tag{11}$$

Muestre que para $N \gg 1$

$$\frac{1}{2N}\log Z_N \simeq \frac{1}{2}\log\left[2\cosh K\left(\cosh 2K + \sqrt{1 + 4\sinh^4 K}\right)\right], \tag{12}$$

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.



7. Para la cadena lineal en un campo B en el límite $N \to \infty$, calcule la magnetización por espín usando la aproximación de Bethe–Peierls. Muestre que el resultado es exacto.

8. La aproximación de campo medio más simple para el modelo de Ising en una red infinita 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 el valor crítico del parámetro $K = \beta J$ por debajo del cual hay magnetización espontánea. Para el caso $\gamma = 4$, compare esta solución con el valor exacto, $K_c = \frac{1}{2}\log\left(\sqrt{2}+1\right) \approx 0{,}44$.

9. 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:

   $$M(T, B = 0) \sim (T_c - T)^\beta, \quad \text{para } T \to T_c^-. \tag{13}$$

   b) La magnetización media en la temperatura crítica,

   $$M(T_c, B) \sim B^{1/\delta}, \quad \text{para } B \to 0. \tag{14}$$

   c) La susceptibilidad magnética $\chi_T(T, B = 0)$,

   $$\chi_T \sim (T_c - T)^{-\gamma}, \quad \text{para } T \to T_c^-. \tag{15}$$

10. 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 $\bar{s}$. 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.

11. 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.

12. 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.

13. 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 6.