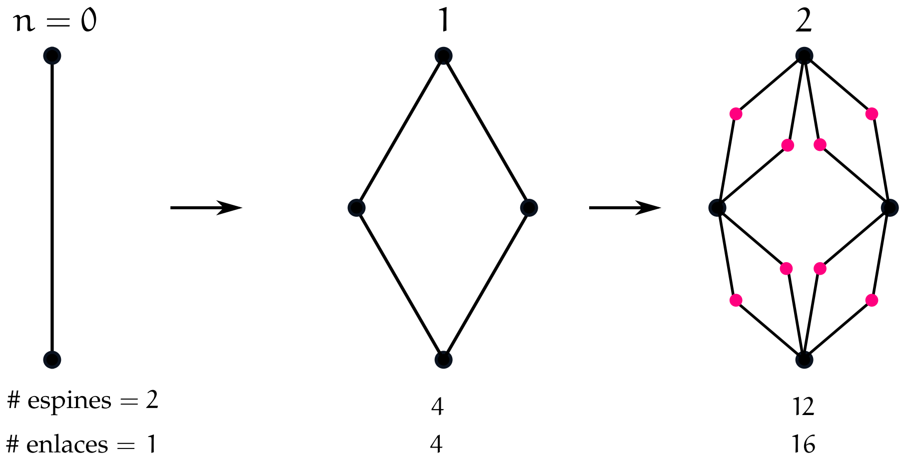
Física Teórica 3 — primer cuatrimestre de 2024

Modelo de Ising en una red jerárquica

Estas notas corresponden a la clase práctica del lunes primero de julio. Se trata de un modelo de Ising con espines en los vértices de una red que se construye iterativamente. El nivel cero de la iteración, $n = 0$, corresponde a dos espines, como muestra la primera figura. El nivel uno de la iteración, $n = 1$, se obtiene reemplazando el enlace original por cuatro enlaces, introduciendo dos nuevos espines, como muestra la figura central. El nivel dos de la iteración, $n = 2$, se obtiene reemplazando cada uno de los cuatro enlaces del nivel anterior por cuatro nuevos enlaces, introduciendo dos espines adicionales por cada enlace original, como muestra la figura de la derecha.

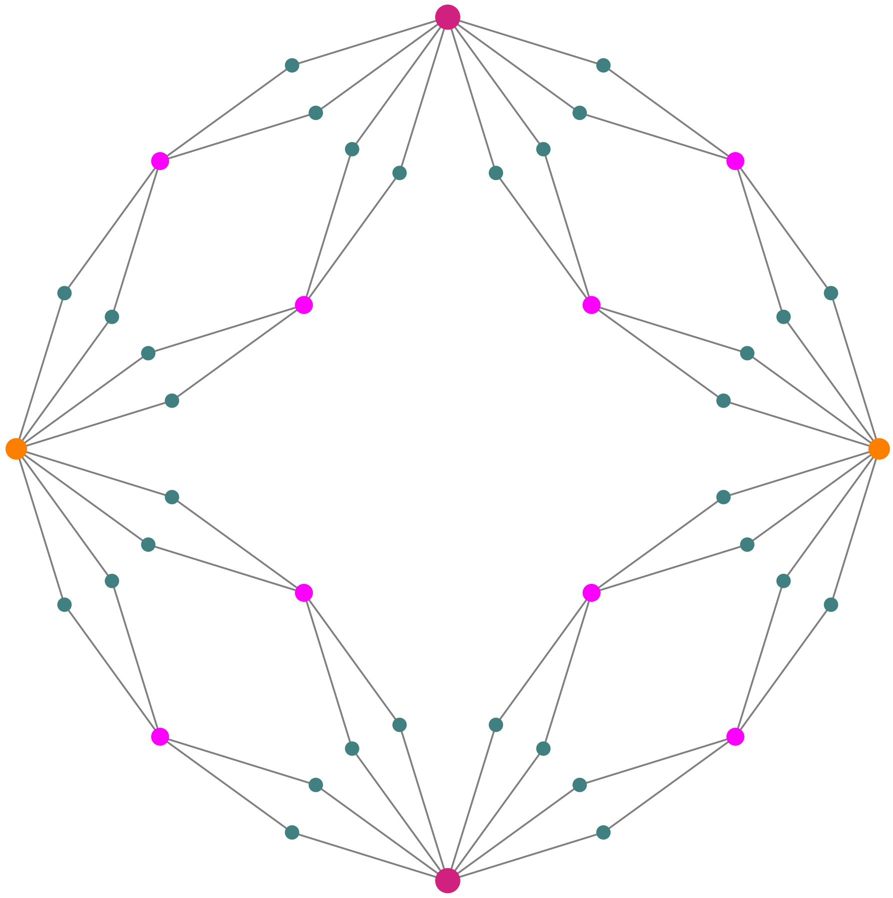


En general, la red de nivel n se construye a partir de la red de nivel $n-1$ sustituyendo cada uno de sus enlaces por cuatro nuevos enlaces e introduciendo un par de espines extra por cada enlace original. Al pasar del nivel n al nivel $n+1$, se agregan dos espines por cada enlace de la red de nivel n y se multiplican los enlaces por cuatro. El número de rombos elementales en la red de nivel n es igual al número de enlaces de la red de nivel $n-1$. La red de nivel cero tiene un enlace; la de nivel uno, 4; la de nivel 2, 16; la de nivel n, tiene 4^n enlaces. La red de nivel cero tiene dos espines; la de nivel uno tiene dos espines más dos por 4^0; a la de nivel dos se le agregan dos por 4^1 espines; etc. Así, el número de espines de la red de nivel n es

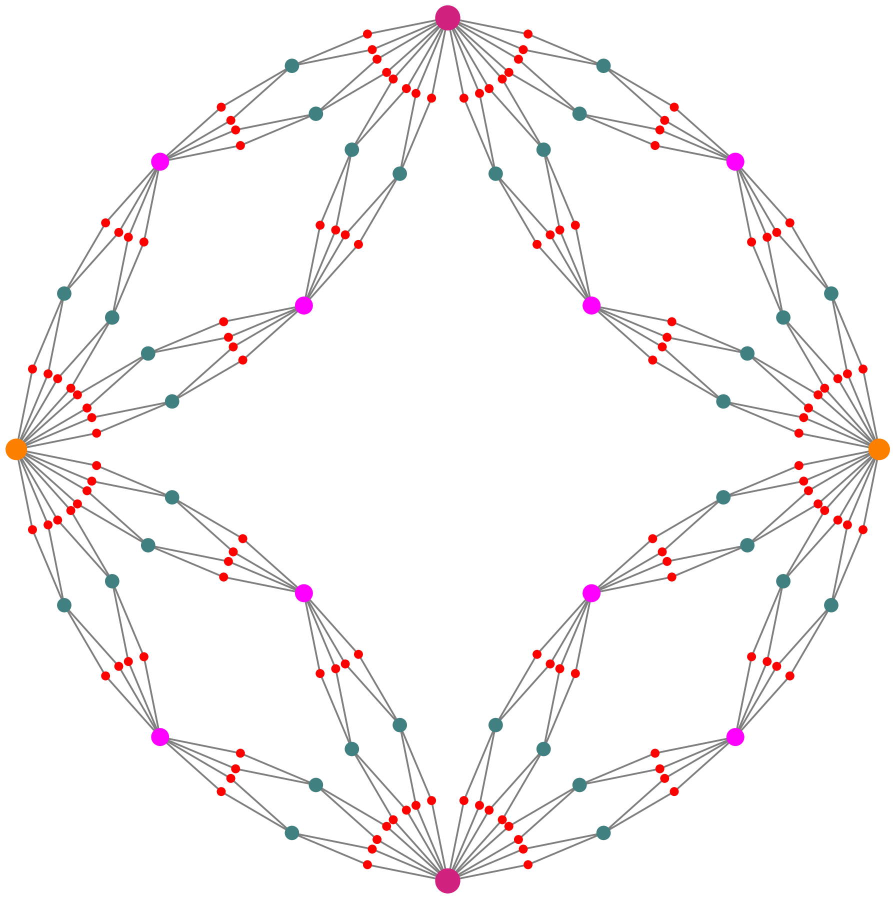
$$2 + 2 \times 4^0 + 2 \times 4 + 2 \times 4^2 + \ldots + 2 \times 4^{n-1} = 2 + 2\frac{4^n - 1}{3} = \frac{2}{3}\left(4^n + 2\right). \tag{1}$$

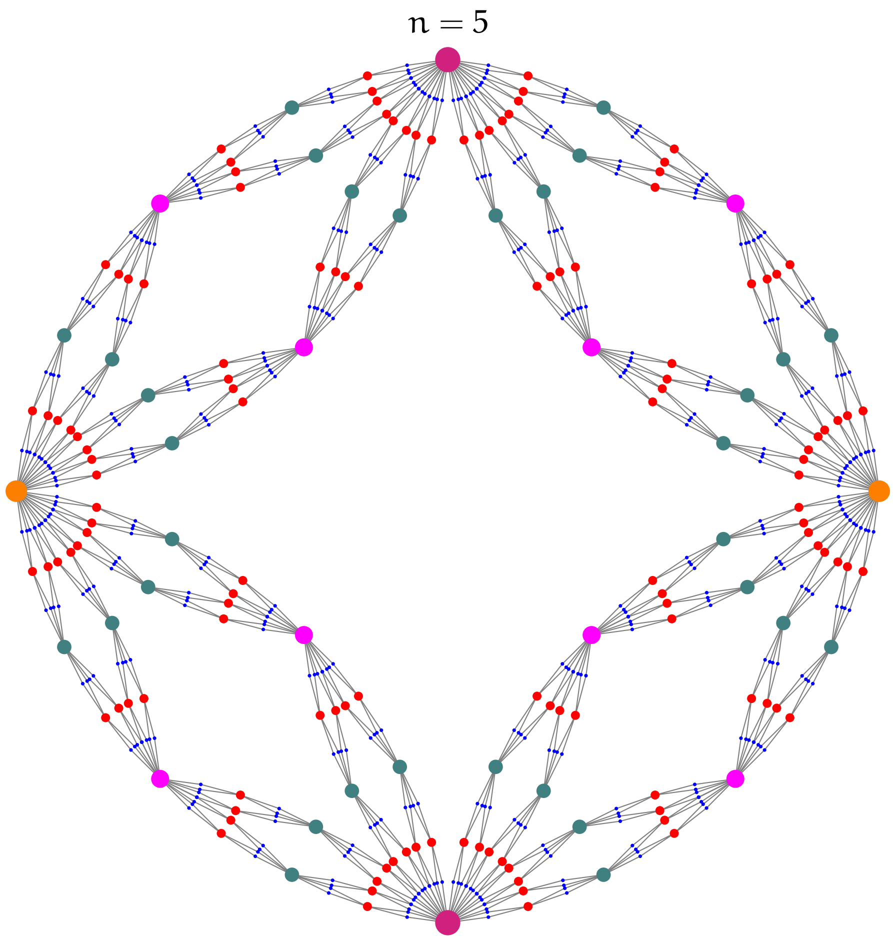
La secuencia del número de espines es $2, 4, 12, 44, 172, 684, 2732, 10924, \ldots$ Las siguientes figuras muestran las redes para $n = 3, 4$ y 5. A partir de $n = 2$, las redes son inhomogéneas, no todos los espines son equivalentes, sino que hay varias clases de espines. Incluso espines de la misma generación no son necesariamente equivalentes.

$n = 3$

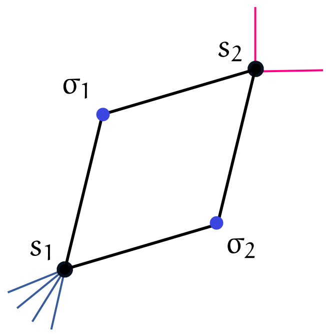


$n = 4$





La red de nivel n es un agregado de piezas elementales con forma de rombo:



Los espines σ_i son los de la última generación. Son los únicos espines a los que se unen sólo dos enlaces.

Una vez que se ha construido la red, se definen las interacciones. Cada par de espines vecinos interactúa a través de un término de la forma

$$\epsilon(s_1, s_2) = -J s_1 s_2 - \tfrac{1}{2}\mu B(s_1 + s_2). \tag{2}$$

El hamiltoniano es la suma de todos estos términos, pero no puede decirse mucho más. A su vez, el factor de Boltzmann será un producto de términos de la forma

$$e^{K s_1 s_2} e^{\frac{b}{2}(s_1+s_2)}, \tag{3}$$

donde $K = \beta J$, y $b = \beta\mu B$. No hay que pensar a la interacción lineal como una interacción con un campo externo, sino como una interacción entre vecinos. Como no todos los espines tienen el mismo número de vecinos, si reuniéramos todos los términos lineales en un dado espín s_i, quedaría algo de la forma

$$-\tfrac{1}{2}\mu B m_i s_i, \tag{4}$$

donde m_i es el número de vecinos del espín s_i. Diferentes espines, aun dentro de una misma generación, tienen distintos valores de m. Si todos los espines estuvieran acoplados a un campo externo del mismo modo que en las redes usuales, de forma que por cada espín hubiera en el hamiltoniano un término $-\mu B s_i$, el problema es mucho más complicado. Al decimar, es necesario introducir campos externos de diferente magnitud para las distintas clases de espines. Ya no alcanza con dos acoplamientos.

La función de partición de la red de nivel cuatro involucra la suma sobre $2^{44} \approx 2 \times 10^{13}$ estados. Es claro que, más allá del nivel 2, sumar lisa y llanamente sobre estados no es el camino más eficiente para calcular la función de partición. Organizar la suma de la función de partición es complicado, porque hay muchas clases de espines. La idea es encontrar una relación de recurrencia,

$$Z^{(n)}\big[K^{(n)}, b^{(n)}\big] = c^{(n)}\big[K^{(n)}, b^{(n)}\big]\, Z^{(n-1)}\big[K^{(n-1)}, b^{(n-1)}\big], \tag{5}$$

donde los acoplamientos del nivel más alto son, por definición,

$$K^{(n)} = K, \qquad b^{(n)} = b, \tag{6}$$

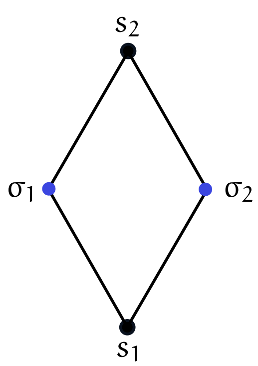
y donde los acoplamientos de los niveles más bajos son funciones de los del nivel anterior,

$$K^{(j-1)} = f\big[K^{(j)}, b^{(j)}\big], \qquad b^{(j-1)} = g\big[K^{(j)}, b^{(j)}\big]. \tag{7}$$

En principio, las funciones f y g podrían depender de n, pero veremos que eso no ocurre. En el último paso de la relación de recurrencia debe usarse que

$$Z^{(0)}(K, b) = e^{K+b} + 2e^{-K} + e^{K-b}. \tag{8}$$

La forma más rápida de entender cómo se obtiene la relación de recurrencia consiste en analizar los primeros casos. Consideremos la red de nivel uno. Esta red consiste en un sólo rombo elemental.



Debemos pensar que esta red se origina a partir de la red de nivel $n = 0$, con espines s_1 y s_2. La función de partición es

$$Z^{(1)}(K, b) = \sum_{s_1,s_2} \sum_{\sigma_1,\sigma_2} e^{[K(s_1+s_2)+b](\sigma_1+\sigma_2)} e^{b(s_1+s_2)}. \tag{9}$$

Si sumamos explícitamente sobre los espines σ_1 y σ_2, resulta

$$Z^{(1)}(K, b) = 4 \sum_{s_1,s_2} e^{b(s_1+s_2)} \cosh^2[K(s_1 + s_2) + b] . \tag{10}$$

Lo que quisiéramos, para poder identificar esta suma con la función de partición $Z^{(0)}$, sería escribir el término general de la suma como

$$e^{b(s_1+s_2)} \cosh^2[K(s_1 + s_2) + b] = c e^{\bar{K} s_1 s_2} e^{\frac{1}{2}\bar{b}(s_1+s_2)}. \tag{11}$$

Si pudiéramos hacer esta identificación, entonces

$$Z^{(1)}(K, b) = 4c\, Z^{(0)}(\bar{K}, \bar{b}) = 4c \left(e^{\bar{K}+\bar{b}} + 2e^{-\bar{K}} + e^{\bar{K}-\bar{b}} \right). \tag{12}$$

La Ec. (11) es, en realidad, un conjunto de cuatro ecuaciones, porque hay cuatro pares de valores para los espines s_1 y s_2. Podemos reescribirla matricialmente,

$$\begin{pmatrix} e^{2b} \cosh^2(2K + b) & \cosh^2 b \\ \cosh^2 b & e^{-2b} \cosh^2(2K - b) \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} e^{\bar{K}+\bar{b}} & e^{-\bar{K}} \\ e^{-\bar{K}} & e^{\bar{K}-\bar{b}} \end{pmatrix}. \tag{13}$$

Vemos que sólo hay tres ecuaciones independientes, pero también hay sólo tres incógnitas. La solución de un sistema de ecuaciones de la forma

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B & C \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} e^{\bar{K}+\bar{b}} & e^{-\bar{K}} \\ e^{-\bar{K}} & e^{\bar{K}-\bar{b}} \end{pmatrix} \tag{14}$$

es típica:

$$e^{4\bar{K}} = \frac{AC}{B^2}, \qquad e^{2\bar{b}} = \frac{A}{C}, \qquad c^4 = AB^2C. \tag{15}$$

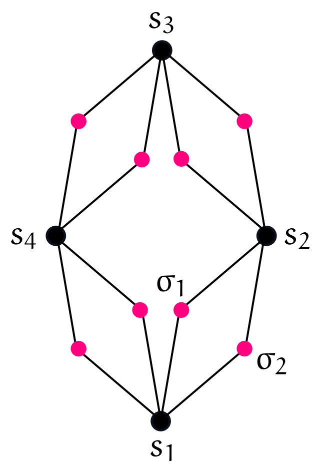
Luego, simplificando algunos exponentes,

$$\begin{aligned} e^{2\bar{K}} &= \frac{\cosh(2K + b)\ \cosh(2K - b)}{\cosh^2 b}, \\ e^{\bar{b}} &= e^{2b} \frac{\cosh(2K + b)}{\cosh(2K - b)}, \\ c^2 &= \cosh(2K + b)\ \cosh(2K - b)\ \cosh^2 b. \end{aligned} \tag{16}$$

Sólo resta reemplazar en la Ec. (12),

$$
\begin{aligned}
Z^{(1)}(K,b) = 4\Big[\cosh(2K+b)\,\cosh(2K-b)\Big]^{1/2}\cosh b \\
\Bigg\{\left[\frac{\cosh(2K+b)\,\cosh(2K-b)}{\cosh^2 b}\right]^{1/2} e^{2b}\,\frac{\cosh(2K+b)}{\cosh(2K-b)} \\
+\,2\left[\frac{\cosh(2K+b)\,\cosh(2K-b)}{\cosh^2 b}\right]^{-1/2} \\
+\left[\frac{\cosh(2K+b)\,\cosh(2K-b)}{\cosh^2 b}\right]^{1/2} e^{-2b}\,\frac{\cosh(2K-b)}{\cosh(2K+b)}\Bigg\} \\
= 4\Bigg\{e^{2b}\cosh^2(2K+b) + 2\cosh^2 b + e^{-2b}\cosh(2K-b)\Bigg\}.
\end{aligned}
\tag{17}
$$

Nadie en su sano juicio calcularía de esta forma la función de partición de un rombo de cuatro espines . Es mucho más sencillo hacer directamente las sumas sobre s_1 y s_2 que figuran en la Ec. (10). Pero imagínense que ahora quisiéramos calcular la función de partición de la red de nivel $n = 2$.



Organizar esta suma es mucho más complicado que sumar sobre cuatro espines. Debemos sumar sobre los estados de doce espines, y algunos espines participan en cuatro enlaces. Pero podemos emplear la estrategia anterior, sumando primero sobre los espines σ. La función de partición puede escribirse como

$$
Z^{(2)} = \sum_{s_1,s_2,s_3,s_4}\left[\sum_{\sigma_1,\sigma_2} e^{(\sigma_1+\sigma_2)[K(s_1+s_2)+b]}e^{b(s_1+s_2)}\right]\ldots \tag{18}
$$

Los puntos suspensivos indican otros términos análogos para los pares de espines $\{s_2,s_3\}$, $\{s_3,s_4\}$ y $\{s_4,s_1\}$. La suma sobre cada par de espines σ_i es la misma que resolvimos antes. Cada suma va a aportar un factor 4 y va a renormalizar los acoplamientos K y b. Luego de sumar sobre los espines σ, obtenemos una suma que es formalmente idéntica a la función de partición del nivel

$n = 1$, multiplicada por una constante y con acoplamientos renormalizados:

$$Z^{(2)}(K, b) = \left[4c(K, b)\right]^4 Z^{(1)}(\bar{K}, \bar{b}). \tag{19}$$

Es fácil ver que esto vale en general. En la red de nivel n podemos identificar los espines σ. La suma sobre estos espines baja el nivel de la red en una unidad, renormaliza los acoplamientos y genera un factor multiplicativo. Este factor es igual a cuatro veces $c(K, b)$ elevado al número de rombos elementales que forman la red de nivel n. Hemos visto al comienzo que ese número es 4^{n-1}. Entonces,

$$Z^{(n)}(K, b) = \left[4c(K, b)\right]^{4^{n-1}} Z^{(n-1)}(\bar{K}, \bar{b}). \tag{20}$$

Conviene definir $K^{(n)} = K$, $b^{(n)} = b$ y

$$K^{(j-1)} = \bar{K}^{(j)}, \qquad b^{(j-1)} = \bar{b}^{(j)}. \tag{21}$$

La forma definitiva de la relación de recurrencia es

$$Z^{(n)}\left[K^{(n)}, b^{(n)}\right] = \left\{4c\left[K^{(n)}, b^{(n)}\right]\right\}^{4^{n-1}} Z^{(n-1)}\left[K^{(n-1)}, b^{(n-1)}\right], \tag{22}$$

donde, según la Ec. (16),

$$\begin{aligned}
K^{(j-1)} &= \frac{1}{2} \log\left\{ \cosh\left[2K^{(j)} + b^{(j)}\right] \cosh\left[2K^{(j)} - b^{(j)}\right] \right\} - \log\cosh b^{(j)}, \\
b^{(j-1)} &= 2b^{(j)} + \log\left\{ \frac{\cosh\left[2K^{(j)} + b^{(j)}\right]}{\cosh\left[2K^{(j)} - b^{(j)}\right]} \right\}, \\
c(K, b) &= \left[\cosh(2K + b) \cosh(2K - b) \right]^{1/2} \cosh b.
\end{aligned} \tag{23}$$

La reducción en el nivel de la red en una unidad es una transformación de grupo de renormalización que disminuye la escala de resolución espacial en un factor un medio. No vamos a analizar el problema completo de puntos fijos de la transformación. Nos conformaremos con notar que si $b = 0$, entonces $b^{(j)}$ es igual a cero siempre. Entonces,

$$\begin{aligned}
K^{(j-1)} &= \log\cosh 2K^{(j)}, \\
c(K) &= \cosh 2K.
\end{aligned} \tag{24}$$

Para encontrar los puntos fijos de esta transformación, debemos resolver la ecuación

$$e^K = \cosh 2K \quad \Rightarrow \quad e^{2K} - 2e^K + e^{-2K} = 0. \tag{25}$$

Definiendo $x = e^K$, queda un ecuación cuártica para x,

$$x^4 - 2x^3 + 1 = 0. \tag{26}$$

Factorizando la solución $x = 1$, queda

$$x^4 - 2x^3 + 1 = (x-1)(x^3 - x^2 - x - 1). \tag{27}$$

La cúbica tiene una sola raíz real,

$$x^* = \frac{1}{3}\left[1 + (19 - 3\sqrt{33})^{1/3} + (19 + 3\sqrt{33})^{1/3}\right] \approx 1{,}839\,29. \tag{28}$$

Esto corresponde a $K^* \approx 0{,}609\,378$. De manera que tenemos un punto fijo $(K^*, 0)$. La matriz de derivadas de las ecuaciones de transformación es

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial \bar{K}}{\partial K} & \dfrac{\partial \bar{K}}{\partial b} \\ \dfrac{\partial \bar{b}}{\partial K} & \dfrac{\partial \bar{b}}{\partial b} \end{pmatrix}_{\{K^*,0\}} = \begin{pmatrix} 2\tanh 2K^* & 0 \\ 0 & 2 + 2\tanh 2K^* \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1{,}678\,57 & 0 \\ 0 & 3{,}678\,57 \end{pmatrix}. \tag{29}$$

Los dos autovalores de la transformación linealizada son positivos. Esto significa que el punto fijo corresponde a un punto crítico.

Como último ejercicio, calculemos la función de partición para la red de nivel $n = 2$ cuando $b = 0$. Aplicando la relación de recurrencia,

$$\begin{aligned} Z^{(2)}(K) &= (4\cosh 2K)^4 Z^{(1)}(\log\cosh 2K) \\ &= 4(4\cosh 2K)^4 \cosh[2\,(\log\cosh 2K)]\, Z^{(0)}\Big(\log\{\cosh[2\,(\log\cosh 2K)]\}\Big) \\ &= 16(4\cosh 2K)^4 \cosh[2\,(\log\cosh 2K)] \cosh\Big\{\log[\cosh 2\,(\log\cosh 2K)]\Big\}. \end{aligned} \tag{30}$$

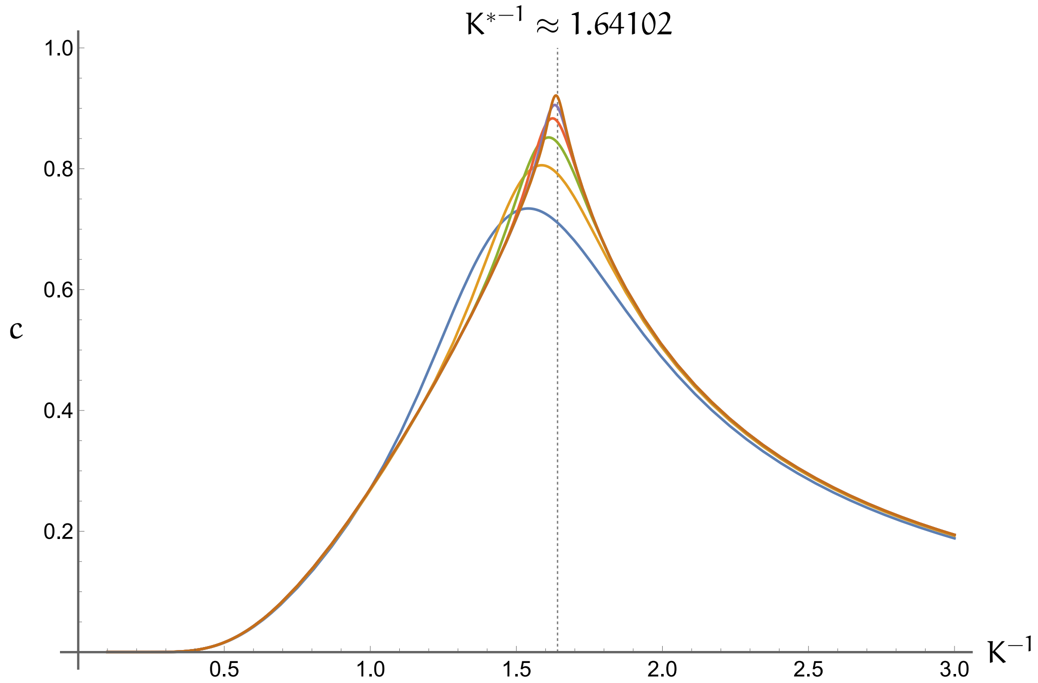
Resulta relativamente simple desarrollar estas expresiones, usando repetidas veces la relación

$$\cosh\log x = \frac{x + x^{-1}}{2}. \tag{31}$$

Primero conviene expandir el último término,

$$\begin{aligned} Z^{(2)}(K) &= 8(4\cosh 2K)^4 \cosh[2\,(\log\cosh 2K)]\Big[\cosh 2\,(\log\cosh 2K) + \cosh 2\,(\log\cosh 2K)\Big] \\ &= 8(4\cosh 2K)^4\left[1 + \cosh^2 2\,(\log\cosh 2K)\right] \\ &= 2^{11}\cosh^4 2K\left[1 + \tfrac{1}{4}\left(\cosh^2 2K + \cosh^{-2} 2K\right)^2\right] \\ &= 512\left(1 + 6\cosh^4 2K + \cosh^8 2K\right). \end{aligned} \tag{32}$$

Resulta interesante graficar el calor específico en función de $1/K^*$ para redes con n creciente, para ver si es plausible la predicción de una transición de fase en $1/K^* \approx 1{,}641\,02$. La figura de la página siguiente muestra el calor específico por espín para las redes con $n = 3, \ldots, 8$.


$K^{*-1} \approx 1.64102$
c
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.5
1.0
1.5
2.0
2.5
3.0
K^{-1}