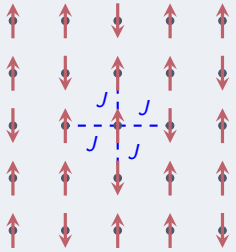
Modelo de Ising

Lectura: R. K. Pathria & P. D. Beale, Cap. 11., K. Huang Cap. 14.

» El Hamiltoniano de Ising

Considero N sitios en una red $d-$dimensional, en cada sitio hay un spin que puede tener 2 proyecciones $(+1, -1)$, y que interactúa con sus primeros vecinos ($\langle i,j \rangle$) con acoplamiento J.



$$H_{\text{Ising}} = -\mu_0 B \sum_i s_i - J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j$$

Trabajaremos en el ensamble canónico, o sea

$$Z_c = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta E[\{s_i\}]} = \sum_{s_1} \sum_{s_2} \cdots \sum_{s_N} e^{-\beta E[s_i]}$$

$$F(B,T) = -k_B T \ln Z_c(B,T), \qquad U = -\frac{\partial \ln Z_c}{\partial \beta}\Big|_B, \qquad M(B,T) = \frac{\partial \ln Z_c}{\partial \beta B}\Big|_\beta = \mu_0 \langle \sum_i^N s_i \rangle$$

» La energía

La energía de un (auto)estado de H, $\{s_i\}$ se puede escribir,

$$E[\{s_i\}] = E[N_+, N_-, N_{++}, N_{--}, N_{+-}] = -\mu_0 B(N_+ - N_-) - J(N_{++} + N_{--} - N_{+-})$$

en donde N_+ y N_- son la cantidad de sitios con spin $+$ o $-$, respectivamente. Mientras que N_{++} y N_{++} son los números de pares de sitios (links/enlances) vecinos con igual (+ o -) spin, y N_{+-} son los primeros vecinos que tienen spin distintos. Sin embargo, no todos los parametros son independientes, ya que $N = N_+ + N_-$. Además, teniendo en cuenta que cada sitio tiene γ primeros vecinos ($\gamma = 4$ en una red cuadrada en 2D), el número de links/pares se puede relacionar de la siguiente manera

$$\gamma N_+ = 2N_{++} + N_{+-} \qquad \text{y} \qquad \gamma N_- = 2N_{--} + N_{+-}$$

Esta relación, se entiende facil si, por ejemplo, dada una red (con condiciones periódicas) tomamos cada spin $+$ y dibujamos una linea uniendo a sus vecinos. Al hacer

» La energía (cont.)

esto dibujaremos γN_+ lineas en total, pero observaremos que en los pares $++$ habrá dos lineas que los conecten, mientras que solo 1 en los pares $+-$.
Las condiciones de arriba hacen que pueda describir mis autoenergías finalmente, en término de dos parámetros, digamos N_+ y N_{++}, pero es más conveniente escribirlos en términos de otros parámetros, que también tienen un significado físico claro.

Largo alcance

$$L = \frac{N_+ - N_-}{N_+ + N_-}, \qquad \frac{N_\pm}{N} = \frac{1 \pm L}{2}$$

Este representa el desbalance total de los spines, o sea es proporcional a magnetización de cada configuración.

Corto alcance

$$\frac{N_{++}}{\frac{1}{2}\gamma N} = \frac{1+\sigma}{2}$$

Este representa cuanto difiere el número de pares primeros vecinos $++$ del máximo que podrían ser, $\gamma N/2$

» Aproximación de Bragg-Williams (BW)

En términos de estos parámetros podemos escribir de manera exacta,

$$E[L,\sigma] = N\left[-\mu_0 BL + \gamma J\left(L - \sigma - \frac{1}{2}\right)\right]$$

Para poder calcular de manera sencilla la función de partición, vamos a hacer una primera aproximación. Si el sistema no está correlacionado, la probabilidad de que dos primeros vecinos estén con spin + es directamente el producto de la probabilidad individual de uno + ,$P_2(+,+) = [P(+)]^2 \to N_{++}/(\gamma N/2) = (N_+/N)^2$. Así eliminando $\sigma = \frac{L^2}{2} + L - \frac{1}{2}$,

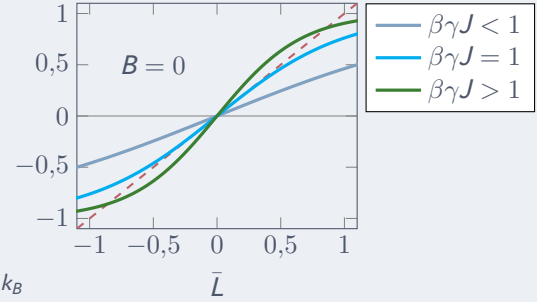
$$E^{\mathrm{BW}}(L) = N\left[-\mu_0 BL - \frac{\gamma J}{2}L^2\right] \quad \to \quad Z_c = \sum_{N_+=0}^{N}\binom{N}{N_+} e^{-\beta N\left[-\mu_0 BL - \gamma\frac{J}{2}L^2\right]}$$

donde incorporamos la multiplicidad de elegir las posiciones de los N_+ spines en la red de N.

En el límite termodinámico podemos aproximar la suma sobre N_+ por el término que más contribuye, situado en $\bar{N}_+$ (o en términos de $\bar{L} = 2\bar{N}_+/N - 1$). La determinación de este extremo da lugar a la ecuación,

$$\bar{L} = \tanh\left[\beta\mu_0 B + \beta\gamma J\bar{L}\right]$$

que determina $\bar{L}$ de manera autoconsistente.
Si tiene una solución con $\bar{L} \neq 0$ entonces habrá magnetización ya que $M = \mu_0 N\bar{L}$.
Teniendo en cuenta la forma de la $\tanh(x)$ (monótona, creciente, y con asíntotas en ± 1.), en ausencia de campo magnético esas soluciones existirán si la pendiente en origen es mayor a 1.



$$\frac{d\tanh(\beta\gamma J\bar{L})}{d\bar{L}}\Big|_{\bar{L}=0} > 1 \quad \Rightarrow \quad \beta\gamma J > 1 \quad \Rightarrow \quad T < T_c = \gamma J/k_B$$

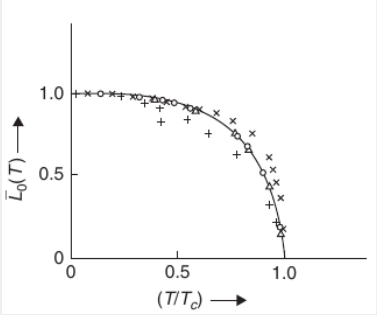
La predicción de BW para T_c en una red cuadrada en 2D es $T_c = 4J/k_B$ en comparación con la exacta de $2{,}27J/k_B$. Aun peor, la misma expresión general para $\gamma = 2$ corresponde al problema en 1D que resolvimos exactamente y no tiene magnetización espontánea...

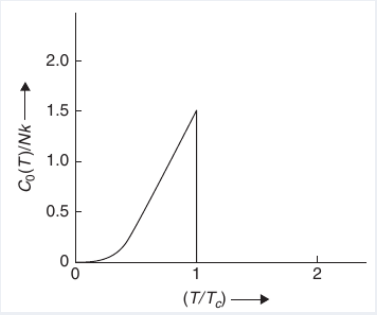
» Magnetización y energía interna ($B = 0$)

En esta misma aproximación podemos calcular la energía, y su calor específico,

$$\frac{U}{N} = -\frac{\gamma J}{2}\bar{L}^2 \quad \Rightarrow \quad C = -\gamma J \bar{L}\frac{\partial \bar{L}}{\partial T} = \gamma J \bar{L} k_B \beta^2 \frac{\partial \bar{L}}{\partial \beta}$$

Como vemos, ademas del problema de valor de T_c que predice BW, el C es nulo por encima de T_c no hay efecto neto de la interacción, ni indicios al bajar T que habrá una transición de fase.





» Los exponentes críticos

Cerca de la transición de fases, los exponentes criticos caracterizan la transición, y a partir del resultado de BW, podemos calcularlos. Por ejemplo para obtener el correspondiente a $\bar{L}$, aproximamos la ecuacion autoconsistente alrededor, pero por debajo, de T_c o sea $\bar{L}$ chico.

$$\bar{L} = \tanh(\beta\gamma J\bar{L}) \simeq \beta\gamma J\bar{L} - \frac{(\beta\gamma J\bar{L})^3}{3} \Rightarrow 1 - \beta\gamma J \simeq -\frac{(\beta\gamma J)^3}{3}\bar{L}^2 \Rightarrow \frac{3}{(\beta\gamma J)^3}(T_c/T - 1) \simeq \bar{L}^2$$

Como estoy aproximando cerca de T_c, el factor $1/\beta \simeq 1/\beta_c$ y entonces $\bar{L} \propto (T_c - T)^{1/2}$. Los otros exponentes criticos se calculan de manera similar. Obteniendose,

$$\bar{L} \propto (T_c - T)^{1/2} \qquad (T \lesssim T_c, B \simeq 0) \qquad \beta = 1/8 \qquad \text{exacto 2D}$$

$$\chi \propto |T - T_c|^{-1} \qquad \gamma = 7/4 \qquad \text{exacto 2D}$$

$$L(T = T_c, B) \simeq \left(\frac{3\mu_0 B}{k_B T_c}\right)^{1/3} \qquad \delta = 15/7 \qquad \text{exacto 2D}$$

» La aproximación de BW como campo medio

La idea de BW supone pensar que cada spin siente un campo promedio uniforme

$$-J\sum_{\langle i,j\rangle} s_i s_j \quad \Rightarrow \quad -J\gamma\bar{s}\sum_i s_i$$

La idea más en general para construir un campo medio es lograr escribir el Hamiltoniano de manera aproximada como suma de términos independientes/no interactuantes. Para eso analizamos los términos de interacción, y despreciamos la correlación entre spines vecinos

$$s_i\, s_j = (s_i - \bar{s} + \bar{s})(s_j - \bar{s} + \bar{s}) = \bar{s}(s_i + s_j) - \bar{s}^2 + \underbrace{(s_i - \bar{s})(s_j - \bar{s})}_{\approx 0} \qquad \forall i \neq j$$

Si en la suma de H hacemos la aproximación,

$$-J\sum_{\langle i,j\rangle} s_i s_j \simeq -J\sum_{\langle i,j\rangle}\left(\bar{s}(s_i + s_j) - \bar{s}^2\right) = -\gamma J\bar{s}\sum_i s_i + J\frac{\gamma N}{2}\bar{s}^2$$

podemos definir el Hamiltoniano de campo medio H_{MF}

$$H_{\mathrm{MF}} = \sum_{i=1}^{N}\left(-\mu_0 B s_i - J\gamma\bar{s}\, s_i + J\frac{\gamma}{2}\bar{s}^2\right) = -\mu_0(B+B')\sum_{i=1}^{N} s_i + J\frac{\gamma}{2}\bar{s}^2 = \sum_i H_{MF}(i),\ \text{definiendo } B' = J\gamma\bar{s}/\mu_0$$

» La aproximación de Bethe: mejorando BW

incorporando parte de la correlación de manera exacta.

$$H_{\gamma+1} = -\mu_0 B s_0 - \mu_0 (B + B') \sum_{j=1}^{\gamma} s_j - J \sum_{j=1}^{\gamma} s_0\, s_j$$

donde B' es un campo efectivo a determinar de manera autoconsistente.

$$Z = \sum_{s_0, \{s_j\}=\pm 1} e^{\beta\left[\mu_0 B s_0 + \mu_0 (B+B') \sum_{j=1}^{\gamma} s_j + J \sum s_0\, s_j\right]} = \sum_{s_0, s_j} e^{\alpha s_0 + (\alpha+\alpha') \sum_{j=1}^{\gamma} s_j + \delta \sum_{j=1}^{\gamma} s_0\, s_j}$$

$$= Z_+ + Z_- \qquad \text{con } \alpha = \beta\mu_0 B, \alpha' = \beta\mu_0 B', \delta = \beta J$$

$$Z_\pm = \sum e^{\pm\alpha + (\alpha+\alpha' \pm \delta) \sum s_j} = e^{\pm\alpha} 2^\gamma \cosh^\gamma(\alpha + \alpha' \pm \delta)$$

Ahora los valores medios de los espines los sacamos

$$\langle s_0 \rangle = \frac{Z_+ - Z_-}{Z}, \quad \langle s_j \rangle = \frac{1}{\gamma} \langle \sum_{i=1}^{\gamma} s_i \rangle = \frac{1}{\gamma} \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \alpha'} = \frac{1}{Z} \left[Z_+ \tanh(\alpha + \alpha' + \delta) + Z_- \tanh(\alpha + \alpha' + \delta) \right]$$

$$\boxed{\langle s_j \rangle = \langle s_0 \rangle} \qquad \text{pido autoconsistencia}$$

» La magnetización espontánea

Despejando,

$$e^{2\alpha'} = \left(\frac{\cosh(\alpha+\alpha'+\delta)}{\cosh(\alpha+\alpha'-\delta)}\right)^{\gamma-1}$$

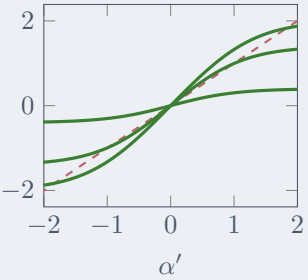
cuya solución determina α'. El parámetro de orden $\bar{L}$ es directamente $\bar{s}_0 (= \bar{s}_j)$, que se escribe

$$\bar{L} = \bar{s}_0 = \frac{\sinh(2\alpha+2\alpha')}{\cosh(2\alpha+2\alpha') + \exp(-2\delta)}$$

Si $B = 0$ ($\alpha = 0$),

$$\alpha' = \frac{\gamma-1}{2} \ln\left[\frac{\cosh(\alpha'+\beta J)}{\cosh(\alpha'-\beta J)}\right]$$

Como para que haya magnetización espontánea, ie. $\bar{L} \neq 0$ con $\alpha = 0$, la solución deber ser $\alpha' \neq 0$ y la derivada en $\alpha' = 0$ es $(\gamma-1)\tanh\beta J$,



$$(\gamma-1)\tanh\beta J > 1 \quad \Rightarrow \quad T < T_c = \frac{2J}{k_B}\frac{1}{\ln(\gamma/(\gamma-2))} \qquad \left[\text{recordar } \tanh^{-1}(x) = \frac{1}{2}\ln\frac{1+x}{1-x}\right]$$

Esta expresión predice la ausencia de magnetización espontánea en 1D ($\gamma = 0, \to T_c = 0$), y da una mejor aproximación al caso 2D ($T_c \simeq 2{,}88J/k_B$).

¿Qué pasa con N_{++} en este caso?.

En nuestro hamiltoniano esto lo podemos leer de las probabilidades de $s_0 = +$ y $s_j = +$ para cualquier j, contenidas en la Z. Si separamos la Z sumando sobre los spines s_j con $j = 2 \cdots \gamma$.

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{s_0,s_1} e^{\alpha s_0 + (\alpha+\alpha')s_1 + \delta s_0 s_1} \sum_{s_2 \cdots s_\gamma} e^{(\alpha+\alpha')s_j} e^{\delta s_0 s_j} \\ &= \sum_{s_0,s_1} e^{\alpha s_0 + (\alpha+\alpha')s_1 + \delta s_0 s_1} \left[2\cosh(\alpha+\alpha'+\delta s_0)\right]^{\gamma-1} \\ &= Z_{++} + Z_{--} + Z_{+-} \end{aligned}$$

con lo cual $N_{++} \propto e^{-2\alpha+\alpha'+\delta}\,[2\cosh(\alpha+\alpha'+\delta)]^{\gamma-1}$.
Teniendo en cuenta la normalización podemos escribir

$$N_{++} = \frac{\gamma N}{2}\,\frac{e^{2\alpha+2\alpha'+\delta}}{2\,[e^{\delta}\cosh(2\alpha+2\alpha')+e^{-\delta}]}$$

que en ausencia de campo ($\alpha = 0$) y arriba de T_c ($\alpha' = 0$), predice un valor que depende de la interacción y va a cero al aumentar la temperatura. A diferencia de lo que sucede en BW que es constante es igual al limite de T alta.

$$\frac{N_{++}}{\frac{\gamma N}{2}} = \frac{1}{4}\,\frac{e^{\delta}}{\cosh\delta} \qquad \text{vs} \qquad \frac{1}{4} \quad \text{para BW}$$