Física Teórica 3 — primer cuatrimestre de 2025

Guía 7: *modelo de Ising*

1. La matriz de transferencia es uno de los métodos más potentes para estudiar redes de Ising. El ejemplo más sencillo es el de una cadena cerrada (i.e., periódica) de N espines. En todos los problemas, $\mu > 0$ es el momento magnético de los espines. Si se definen $K = \beta J$, $x = e^K$, $b = \beta\mu B$, $y = e^b$ y $s_{N+1} = s_1$, la función de partición es

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

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

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

Aquí, s y $s' = \pm 1$. La matriz de transferencia no es única. La forma anterior prioriza la simetría de $\mathbf{q}$, pero esta no es una propiedad indispensable, ni siempre posible.

b) Pruebe que la función de partición puede escribirse como $Z_N = \lambda_+^N + \lambda_-^N$, donde $\lambda_\pm$ son los autovalores de la matriz $\mathbf{q}$,

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

c) Muestre que $\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \log Z_N = \log \lambda_+$. Preste atención al hecho de que K puede tener cualquier signo.

d) Encuentre la magnetización media por espín y estudie el límite $N \to \infty$.

e) Demuestre que no hay magnetización espontánea cuando $B \to 0^+$ en el límite $N \to \infty$.

2. a) Considere una cadena abierta de N espines. Muestre que la función de partición está dada por $Z_N = \mathrm{Tr}\big(\mathbf{q}^{N-1}\mathbf{Q}\big)$, donde $\mathbf{q}$ es la matriz definida en el Problema 1 y $\mathbf{Q}$ es la matriz con elementos $Q_{ss'} = e^{\frac{1}{2}b(s+s')} = y^{\frac{1}{2}(s+s')}$.

b) Para calcular Z_N, es necesario conocer los elementos de $\mathbf{q}^{N-1}$. En notación de Dirac, $\mathbf{q}^k = \lambda_+^k\, (|+\rangle\langle+|) + \lambda_-^k\, (|-\rangle\langle-|)$, donde $\mathbf{q}\,|\pm\rangle = \lambda_\pm\,|\pm\rangle$. Como la matriz $\mathbf{q}$ es simétrica, es suficiente introducir un sólo conjunto de autovectores. Puesto que son vectores ortonormales en el plano, $|+\rangle$ y $|-\rangle$ tienen componentes $(\cos\varphi, \sin\varphi)$ y $(\sin\varphi, -\cos\varphi)$, respectivamente. Demuestre que

$$\cot 2\varphi = e^{2K} \sinh b. \tag{4}$$

c) Usando estos resultados, calcule explícitamente Z_N.

d) Muestre que $\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \log Z_N = \log \lambda_+$, de modo que, en ese límite, se recuperan los mismos resultados que para la cadena cerrada.

3. Las relaciones de recurrencia son otro método efectivo para tratar redes de Ising. El caso más sencillo es el de la cadena abierta sin campo. Escriba la función de partición, sume explícitamente sobre el último espín, encuentre una relación de recurrencia para Z_N y resuélvala. Verifique el resultado comparándolo con el del Problema 2.

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

$$H(\{s\}) = -\sum_{i=1}^{N-1} J_i s_i s_{i+1}. \tag{5}$$

Al final del cálculo, todas las constantes J_k toman el mismo valor J. La función de partición se calcula siguiendo el método recursivo del Problema 3. Para calcular el valor medio del producto $s_i s_{i+1}$, hay que derivar el logaritmo de la función de partición respecto de J_i. Puesto que $s_k^2 = 1$,

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

Esto permite calcular fácilmente $\langle s_i s_{i+j} \rangle$ y, por lo tanto, la función de correlación,

$$G(i, i+j) = \langle s_i s_{i+j} \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_{i+j} \rangle, \tag{7}$$

teniendo en cuenta que, cuando $B = 0$, es $\langle s_k \rangle = 0$. Calcule $G(i, i+j)$. Encuentre la longitud de correlación ξ, definida a partir de $G(i, i+j) = e^{-j/\xi}$. Aunque la cadena con extremos abiertos no tiene invariancia de traslación, note que $G(i, i+j)$ no depende de i.

5. **Correlaciones 2**. En el Problema 1, el valor medio de la magnetización se calculó tomando una derivada adecuada del logaritmo de la función de partición. En el problema anterior, se hizo algo parecido para calcular $\langle s_i s_{i+j} \rangle$ en una cadena abierta sin campo. El problema es calcular la función de correlación de la Ec. (7) para una cadena cerrada y con campo. Las estrategias usadas en los otros problemas ahora no funcionan. La idea es calcular valores medios directamente a partir de la distribución de probabilidad.

   a) Para empezar con un problema sencillo, muestre que

   $$\langle s_i \rangle = \frac{\mathrm{Tr}\left(\mathbf{S}\mathbf{q}^N\right)}{\mathrm{Tr}\, \mathbf{q}^N}, \tag{8}$$

   donde $\mathbf{S}$ es la matriz con componentes $S_{ss'} = s\delta_{ss'}$. Calcule $\langle s_i \rangle$ mediante este método y compare con el resultado del Problema 1.

   b) Del mismo modo, calcule $G(i, i+j)$ y muestre que, cuando $N \to \infty$,

   $$G(i, i+j) = \sin^2 2\varphi \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^j. \tag{9}$$

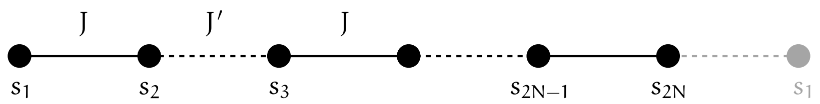
   c) En ese límite, encuentre la longitud de correlación como función de K y b.

6. Para una cadena cerrada de N espines, calcule la probabilidad de que un determinado par de espines vecinos esté en cada uno de sus cuatro estados. Analice el límite $N \to \infty$.

7. Para una cadena abierta, calcule la función de correlación de los espines de los extremos.

8. Para una cadena abierta de longitud $N \gg 1$, calcule $\langle s_j \rangle$ asumiendo que $N - j \gg 1$. ¿A qué distancia los efectos de borde se vuelven despreciables?

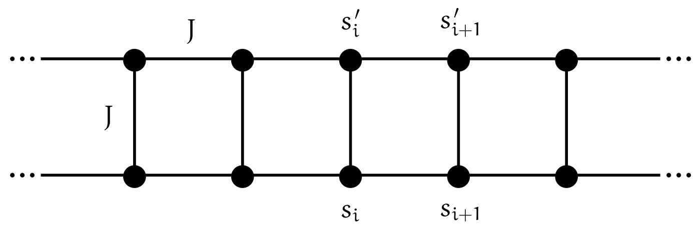
9. La figura muestra una cadena cerrada de 2N espines. La constante de acoplamiento entre espines alterna su valor entre J y J′. Hay un campo externo B.



   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.
   d) Verifique que, cuando $J = J'$, se recuperan los resultados del Problema 1.

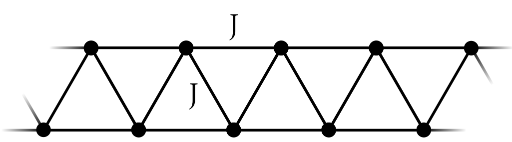
10. Use el método de la matriz de transferencia para calcular la función de partición de la doble cadena cerrada que muestra la figura. El número de eslabones es N y el campo externo es nulo. Muestre que

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{2N} \log Z_N = \frac{1}{2} \log\left[2\cosh K \left(\cosh 2K + \sqrt{1 + 4\sinh^4 K}\right)\right]. \qquad (10)$$

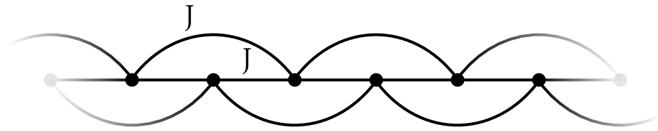


Ayuda: la matriz de transferencia puede elegirse de forma que sea centrosimétrica, lo que garantiza que pueda llevarse a una forma diagonal por bloques.

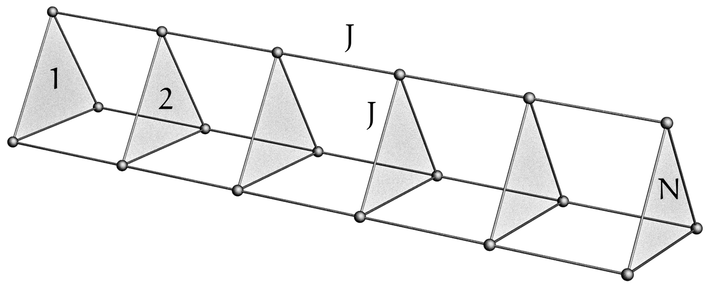
11. La figura representa una doble cadena triangular de 2N espines sin campo externo. Calcule la energía libre por espín en el límite $N \to \infty$.



12. La figura representa una cadena de longitud N con interacciones a primeros y segundos vecinos sin campo externo. Calcule la energía libre por espín en el límite $N \to \infty$.



13. **TOBLERONE de Ising**. Encuentre la energía libre por espín en el límite $N \to \infty$ para la cadena de la figura. El campo externo es nulo. Aunque el problema se puede resolver con una matriz de transferencia de 8×8, es posible evitarlo. Asuma que la cadena es abierta, sume explícitamente sobre el último eslabón y obtenga una relación de recurrencia. De esta forma será suficiente trabajar con una matriz de 2×2. Deberá permitir que el último eslabón tenga una constante de acoplamiento entre sus tres espines diferente respecto del resto de la cadena.



14. 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 $-\mu B s$. Escriba la ecuación de autoconsistencia para el valor medio del espín y encuentre el valor crítico del parámetro $K = \beta J$ por arriba del cual hay magnetización espontánea. Para el caso $\gamma = 4$, compare esta solución con el valor exacto, $K_c = \frac{1}{2}\log\left(\sqrt{2}+1\right) \approx 0{,}44$.

15. 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 medio $\bar{s}$ y con ella una expresión para K_c. Encontrar el valor de K_c para la red cuadrada y comparar con el resultado exacto y con el resultado obtenido en la aproximación del problema anterior.

16. Encontrar K_c 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.

17. 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.

18. 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 10.

19. ¿Cómo se compara la predicción de la "mejor" de las aproximaciones anteriores con la predicción de la peor de las aproximaciones de Bethe-Peierls?