

La-CoNGA-Physics

Mecánica Estadística Avanzada

2

Modelo de Ising

Profesora
GLORIA BUENDÍA
Departamento de Física
Universidad Simón Bolívar
Caracas-Venezuela
buendia@usb.ve

Contenido General

1	Modelo de Ising	1
1.1	Modelo de Ising-versión original	1
1.2	Lattice Gas	3
1.3	Aleación binaria (Binary Alloy)	4
2	Modelo de Ising en 1-d (Solucion exacta)	5



1. Modelo de Ising

Ernst Ising 1900-1998-Alemania

Fue propuesto por *Wilhem Lenz* como trabajo de tesis para mostrar un modelo que presentara una transición de fase. *Lenz* pensaba que este era un buen modelo para representar un ferromagneto. *Ising* resolvió el modelo en su tesis doctoral y publicó su resultado en 1925. El modelo en 1 - d resuelto por *Ising* no presentaba transición de fase, lo cual llevó a *Ising* a concluir que el modelo no era bueno. Gran error, en dimensiones mayores a 1 sí presenta transiciones de fase.

1.1. Modelo de Ising-versión original

Tenemos una red cristalina y en cada punto de la red (que están fijos) colocamos un spin, $S_i = \pm 1$, y añadimos un campo magnético externo, uniforme H

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - H \sum S_i$$

J_{ij} da la magnitud de la interacción entre dos espines i y j .

En el modelo original, el más sencillo, las interacciones son isotrópicas

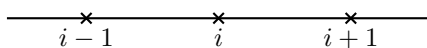
$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum S_i \quad \begin{array}{l} J > 0 \text{ Ferromag} \\ J < 0 \text{ Antiferro} \end{array}$$

$$Z(T, H, N) = \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \dots \sum_{S_N=\pm 1} e^{-\beta[-J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum S_i]}$$

La suma sobre los $\langle ij \rangle$ es sobre vecinos cercanos en la red,

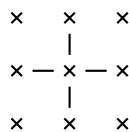
Ejemplo:

Figura 1: Red lineal



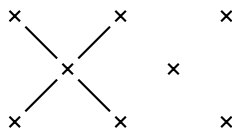
Cada i tiene 2 vecinos cercanos $z = 2$

Figura 2: Red cuadrada en 2 - d



Cada i tiene 4 vecinos cercanos $z = 4$

Figura 3: Red Hexagonal



Cada i tiene 6 vecinos cercanos $z = 6$



Figura 4: Red BCC (body centered cubic)

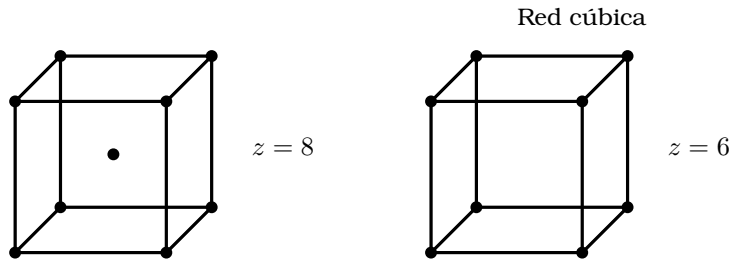
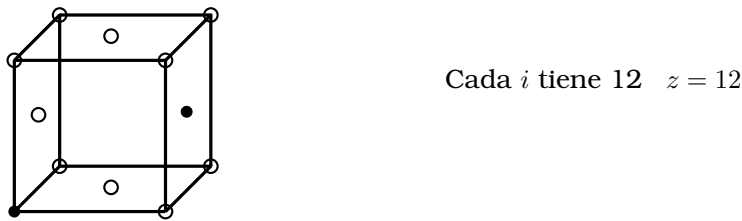


Figura 5: Red FCC (face centered cubic)



z es el llamado # de coordinación de la red

La suma sobre $\langle ij \rangle$ tiene $\frac{zN}{2}$ términos, hay N sitios

Para un sistema de N espines que pueden tomar dos valores, ± 1 , hay 2^N configuraciones distintas.

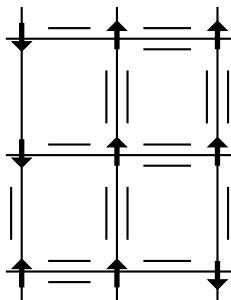
Si $H = 0$ el sistema es invariante bajo la inversión global de los espines

Parámetro de orden: magnetización $M = \sum_{i=1}^N S_i$,

$$M = \frac{1}{\beta} \left. \frac{\partial \ln Z}{\partial H} \right|_T$$

Estimación de Z

$$N_+ + N_- = N, \quad \begin{aligned} N_{++} &\rightarrow \# \text{ Total de vecinos } \uparrow\uparrow \\ N_{--} &\rightarrow \# \text{ Total de vecinos } \downarrow\downarrow \\ N_{+-} &\rightarrow \# \text{ Total de vecinos } \uparrow\downarrow \end{aligned}$$



Me coloco en un espin + (por ejemplo). Dibujo una línea por cada conexión a otro +, otra línea por cada conexión a un -. Repito para todos los espines + (Hay N_+)



$$zN_+ = 2N_{++} + N_{+-}$$

↳ Número total de conexiones que salen de los espines positivos, cada conexión de tipo ++ aparece dos veces, las de tipo +- solo una vez

Si hubiera seleccionado espines negativos tendria

$$zN_- = 2N_{--} + N_{+-}$$

Tengo 3 ecuaciones y 5 incognitas

$$\begin{cases} zN_+ = 2N_{++} + N_{+-} \\ zN_- = 2N_{--} + N_{+-} \\ N_+ + N_- = N \end{cases}$$

Escribo todo en términos de N_+ y N_{++}

$$N_{--} = \frac{z}{2}N + N_{++} - zN_+ \quad , \quad N_- = N - N_+$$

$$N_{+-} = zN_+ - 2N_{++}$$

$$\sum S_i = N_+ - N_- \quad , \quad \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j = N_{++} + N_{--} - N_{+-}$$

$$\implies \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j = 4N_{++} + \frac{z}{2}N - 2zN_+$$

$$\mathcal{H} = -4JN_{++} - \frac{z}{2}JN + 2zJN_+ + H(N - 2N_+)$$

$$= -4JN_{++} - N \left(\frac{Jz}{2} - H \right) - 2N_+ (H - Jz)$$

$$Z(T, H, N) = e^{-\beta N(H - \frac{Jz}{2})} \sum_{N_{++}=0}^N e^{-2\beta N_+(Jz - H)} \sum_{N_+} g(N, N_{++}, N_+) e^{4J\beta N_{++}}$$

$g(N, N_{++}, N_+)$ es el número de configuraciones distintas para determinado N_{++} y N_+ con N fijo. **Un número muy difícil de calcular.**

(Ising resolvió el modelo en 1 - d calculando $g(N, N_{++}, N_+)$)

Escribimos Z de esta forma para identificar la equivalencia del modelo de Ising con otros modelos.

1.2. Lattice Gas

Es una colección de átomos cuyas posiciones solo pueden tomar valores “discretos”, están ubicados en los sitios de una red.



Cada sitio de la red puede estar ocupado por un átomo ●, o vacío ○.

Se desprecia la energía cinética de los átomos, y se toman en cuenta solo interacciones entre primeros vecinos. El potencial es de la forma: $r = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$

$$v(r) = \begin{cases} \infty & r = 0 & \text{Hardcore, no puede haber 2 átomos en el mismo sitio} \\ -e_0 & r = a & \text{Interacciones entre primeros vecinos} \\ 0 & & \text{Para cualquier otro punto} \end{cases}$$



La red tiene N sitios y N_a átomos ($N - N_a$ sitios vacíos). Si N_{aa} es el número total de pares de vecinos cercanos, sitios ocupados en una configuración particular del sistema

$$E = -e_0 N_{aa} \quad ; \quad \underbrace{Q(T, N, N_a) = \sum_{N_{aa}} g(N, N_a, N_{aa}) e^{\beta e_0 N_{aa}}}_{\text{Función de partición}}$$

$g(N, N_a, N_{aa})$ es la degeneración, el número de configuraciones de una red de N sitios, con N_a ocupados y N_{aa} conexiones. La suma es sobre todos los valores de N_{aa} consistentes con N_a y N . Para un volumen fijo, $V = NL$

$$Z(\mathfrak{z}, N, T) = \sum_{N_a=0}^N \mathfrak{z}^{N_a} Q(T, N) \quad \text{Gran función de partición}$$

$$e^{\beta PV} = \sum_{N_a=0}^N \mathfrak{z}^{N_a} \sum_{N_{aa}} g(N, N_a, N_{aa}) e^{\beta e_0 N_{aa}}$$

El volumen promedio por partícula, densidad

$$\frac{1}{v} = \frac{N_a}{V} = \frac{N_a}{NL} = \frac{\mathfrak{z}}{KT} \left(\frac{\partial P}{\partial \mathfrak{z}} \right) \quad \text{tomando } L = 1$$

Para el modelo de *Ising*

$$Z(T, N, H) = e^{-\beta N(H - \frac{Jz}{2})} \sum_{N_+ = 0}^N e^{-\beta 2N_+(Jz - H)} \sum_{N_{++}} g(N, N_+, N_{++}) e^{4\beta J N_{++}} = e^{-\beta A}$$

Comparando, podemos establecer las siguientes equivalencias

<i>Ising</i>	<i>Lattice gas</i>
N_+, N_{++}	N_a, N_{aa}
$4J$	e_0
$e^{\beta 2(Jz - H)}$	\mathfrak{z}
$-\frac{A}{N} - H + \frac{Jz}{2}$	P

El *lattice gas* corresponde a algún sistema físico? Si la constante de la red (L) se hace tender a cero, tendríamos un sistema continuo que podría representar un gas real con átomos que interactúan con un potencial de rango muy corto. Podría ser interesante estudiar transiciones de fase de este sistema

Si $e_0 > 0$, los átomos vecinos se atraen, este podría ser un modelo simple para la transición líquido-gas.

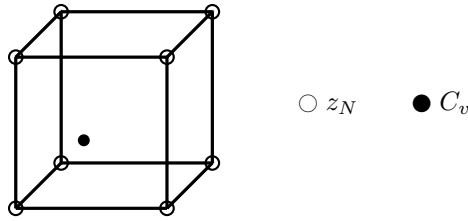
Si $e_0 < 0$, los átomos vecinos se repelen, se favorecen configuraciones donde se alternan sitios llenos y vacíos, podría ser un modelo para la transición líquido-sólido.

1.3. Aleación binaria (Binary Alloy)

Una aleación binaria es una red en que en cada sitio puede haber un átomo de tipo B o uno de tipo A . A $T = 0^\circ K$ este sistema está ordenado tal que los átomos se intercalan.



Ejemplo: de aleación binaria. Bronce, una red *bcc* de átomos de zinc y cobre



En este modelo ahora las interacciones son del tipo *AA*, *BB*, *AB* (la distancia entre los primeros vecinos *AA*, *BB*, y *AB* en general son distintos)

$$E = N_{AA}e_{AA} + N_{BB}e_{BB} + N_{AB}e_{AB}$$

<i>Ising</i>	Aleación Binaria
$N_a, N - N_b$	N_A, N_B
$-e_0$	e_{AA}, e_{BB}, e_{AB}

Tabla 1: Equivalencias (tarea Ver *Huang*).

2. Modelo de Ising en 1-d (Solucion exacta)

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - H \sum_{i=1}^N S_i$$

Condiciones de borde periodicas, $S_{i+N} = S_i$ topología de la cadena es un círculo

$$\begin{aligned} Z(T, H) &= \sum_{S_1} \dots \sum_{S_N} e^{\beta [J \sum_i S_i S_{i+1} + H \sum_i S_i]} \\ &= \sum_{S_1} \dots \sum_{S_N} e^{\beta \sum_i (J S_i S_{i+1} + \frac{H}{2} (S_i + S_{i+1}))} \end{aligned}$$

Notación matricial $\langle S_i | P | S_{i+1} \rangle = e^{\beta [J S_i S_{i+1} + \frac{H}{2} (S_i + S_{i+1})]}$

$$\Rightarrow Z(T, H) = \sum_{S_1} \dots \sum_{S_N} \langle S_1 | P | S_2 \rangle \langle S_2 | P | S_3 \rangle \dots \langle S_N | P | S_{N+1} \rangle$$

Como los S_i pueden ser ± 1 entonces

$\langle S_i | P | S_{i+1} \rangle$ puede tomar 3 valores distintos

$$\langle + | P | + \rangle, \langle - | P | - \rangle, \langle + | P | - \rangle = \langle - | P | + \rangle$$

$$\langle + | P | + \rangle = e^{\beta(J+H)}, \quad \langle - | P | - \rangle = e^{\beta(J-H)}$$

$$\langle + | P | - \rangle = e^{-\beta J}$$

$$\Rightarrow P \text{ es una matriz } 2 \times 2 \quad P = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+H)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-H)} \end{pmatrix}$$

$$\text{Donde } |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$



Entonces $\sum_{S_i=\pm 1} |S_i\rangle\langle S_i| = |+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -| = \mathbb{1}$

↙ Matriz unitaria

$$= (1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + (0 \ 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$Z = \sum_{S_1} \langle S_1 | P \sum_{S_2} |S_2\rangle\langle S_2| P \sum_{S_3} |S_3\rangle\langle S_3| \cdots \sum_{S_N} |S_N\rangle\langle S_N| P |S_1\rangle$$

$$= \sum_{S_1} \langle S_1 | P^N |S_1\rangle = \text{Tr } P^N = \sum_{K=1}^2 \lambda_K^N$$

Donde λ_1 y λ_2 son los autovalores de P , que debo calcular

$$P|V\rangle = \lambda|V\rangle \implies \begin{pmatrix} e^{\beta(J+H)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-H)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \end{pmatrix}$$

Tomando $A = e^{\beta J}$, $\beta = e^{\beta H}$

$$\begin{pmatrix} AB & A^{-1} \\ A^{-1} & AB^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \end{pmatrix} \quad ; \quad \gamma = \frac{V_1}{V_2} \quad (V_2 \neq 0)$$

$$\begin{aligned} AB\gamma + A^{-1} &= \lambda\gamma \\ \gamma A^{-1} + AB^{-1} &= \lambda \end{aligned} \implies \lambda^2(A^2B) - \lambda A^3(1+B) + B(A^4 - 1) = 0$$

↙ Ecuación cuadrática

$$\lambda = A \left[\frac{(1+B^2)}{2B} \pm \sqrt{\frac{(1+B^2)^2}{4B^2} - \left(1 - \frac{1}{A^4}\right)} \right]$$

Donde $\frac{1+B^2}{2B} = \cosh \beta H$ $A^4 - 1 = A^2 \left[A^2 - \frac{1}{A^2} \right] = e^{2\beta J} 2 \sinh 2\beta J$

$$\implies \lambda = e^{\beta J} \left[\cosh(\beta H) \pm \sqrt{\cosh^2(\beta H) - 2e^{-2\beta J} \sinh(2\beta J)} \right]$$

Note que $\lambda_+ > \lambda_- \quad \forall H, J$

$$Z = \lambda_+^N + \lambda_-^N = \lambda_+^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right] \approx \lambda_+^N \quad N \text{ grande}$$

$$\ln Z \approx N \ln \lambda_+$$

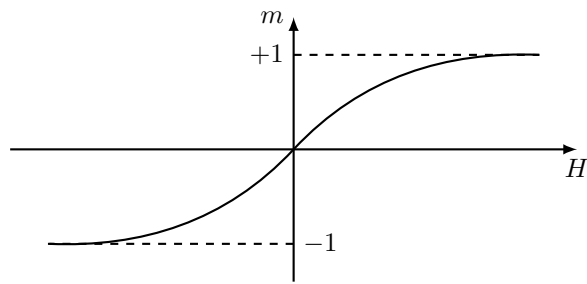
Como $Z = e^{-\beta A} \implies A = -KT \ln Z$

$$\frac{A}{N} = -\frac{KT}{N} \ln \lambda_+ \approx -J - KT \ln \left[\cosh(\beta H) + \sqrt{\cosh^2(\beta H) - 2e^{-2\beta J} \sinh(2\beta J)} \right]$$

Magnetización por espín

$$\begin{aligned} m &= \frac{1}{N} \langle \sum_i S_i \rangle = -\frac{1}{N\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial H} \Big|_H = -\frac{1}{N} \frac{\partial A}{\partial H} \\ &= \frac{\sinh \beta H}{\sqrt{\cosh^2 \beta H - 2e^{-2\beta J} \sinh(2\beta J)}} \end{aligned}$$

Note que $m(H) = -m(-H)$, $m(H=0) = 0$



No hay magnetización espontánea

El modelo de *Ising* en $1 - d$ no exhibe magnetización espontánea. *Ising* pensó que su modelo fallaba en describir las transiciones ferromagnéticas. **Grave error de su parte.** En dimensiones más altas el modelo si presenta magnetización espontánea.

En 1944 *Onsager* logró resolver el modelo en $2 - d$ de forma exacta.

Ya *Peirls* en 1936 demostró, resolviendo el modelo de forma aproximada, que si mostraba propiedades ferromagnéticas (magnetización espontánea).