

Tarea N. 1

Teoría estadística de campos

1. El modelo XXZ

Consideremos espines clásicos \vec{S}_i , en las posiciones i de una red cualquiera. Definimos el Hamiltoniano :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\vec{S}_i^x \vec{S}_j^x + \vec{S}_i^y \vec{S}_j^y + \Delta \vec{S}_i^z \vec{S}_j^z \right] \quad (1)$$

1. Si $\Delta \neq 1$, cual es (son) el (los) grupo(s) de simetría del Hamiltoniano ?
2. Misma pregunta si $\Delta = 1$?
3. Obtener una configuración de mas baja energía para $J > 0$ y $\Delta > 1$ así como para $\Delta < 1$. Qué simetría se rompe en cada caso ?

2. Frustración y degeneración del estado de más baja energía

Consideremos un modelo de Heisenberg con interacción positiva (AF) entre primeros vecinos para tres espines en un triángulo (ver la figura 1):

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad ; \quad J > 0 \quad (2)$$

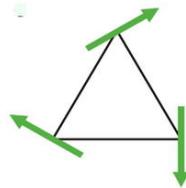


Figura 1: Tres espines en un triángulo

1. Obtenga una configuración de más baja energía
2. Argumente que todas las configuraciones de más baja energía se relacionan entre sí por una rotación global (la misma rotación para los tres espines). En ese sentido se dirá que todas las configuraciones de más baja energía son equivalentes.

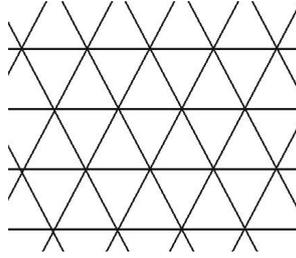


Figura 2: Red triangular

3. Se considera ahora una red triangular como en la figura 2. Sin tomar en cuenta efectos de borde (suponiendo por ejemplo una red infinita), obtenga las configuraciones de más baja energía y argumente que son todas equivalentes.
4. Se considera luego la red de kagomé, como en la figura 3. Muestre que

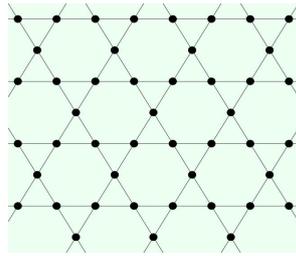


Figura 3: Red de kagomé

existe un gran número de configuraciones de más baja energía que no son equivalentes. Argumente que este número aumenta con el tamaño de la red. Se hablará en este caso de una degeneración extensiva.

3. Modelo de Heisenberg en la aproximación de campo medio

Consideremos, en una red de número de coordinación z (número de vecinos de cada sitio), un modelo de Heisenberg dado por el Hamiltoniano :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \vec{h} \cdot \sum_i \vec{S}_i \quad (3)$$

Donde los \vec{S}_i son vectores unitarios en tres dimensiones. Se quiere estimar la función de partición

$$Z = \int \prod_i d\vec{S}_i \exp(-\beta H) \quad (4)$$

donde las integrales para cada espín se efectúan en la esfera de radio unidad (usando por ejemplo los ángulos azimutales y orbitales θ_i y ϕ_i , $d\vec{S}_i = \sin(\theta_i)d\theta_id\phi_i$).

1. Recuerde la simetría del hamiltoniano (3) en el caso $\vec{h} = \vec{0}$ y $\vec{h} \neq \vec{0}$
2. Obtenga el valor promedio de cada componente de la magnetización

$$\vec{m} = \frac{1}{N} \langle \sum_i \vec{S}_i \rangle \quad (5)$$

donde el promedio de cualquier cantidad O viene dado por :

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_i d\vec{S}_i O \exp(-\beta H) \quad (6)$$

en términos de la derivada con respecto a una componente de \vec{h} de la función de partición.

3. A partir de ahora se escogerá siempre la dirección del eje z según el campo \vec{h} i. e. $\vec{h} = h\vec{e}_z$. En el caso de espines desacoplados, $J = 0$, calcule explícitamente en función de h y β la función de partición y la magnetización promedio.
4. Para el caso de espines acoplados $J \neq 0$, se va a usar la aproximación de campo medio, escribiendo para el promedio de los espines :

$$\langle \vec{S}_i \rangle = m\vec{e}_z \quad \forall i \quad (7)$$

obtenga en ese caso, en función de m , h y β , la función de partición y la magnetización promedio.

5. Muestre que, para el caso $h = 0$, la aproximación de campo medio predice una posible transición de fase para una temperatura crítica que se determinará. Será útil para ello usar la expresión para pequeños argumentos de la función de Langevin :

$$L(x) = \coth(x) - \frac{1}{x} \simeq \frac{1}{3}x - \frac{1}{45}x^3 + \dots \quad (8)$$

4. Modelo de Ising con interacciones de largo alcance

Consideremos un modelo de Ising formado por N sitios, y cuyo Hamiltoniano es:

$$H = \frac{-1}{2N} \sum_{i,j} S_i S_j - h \sum_i S_i$$

donde la suma se hace para todos los pares de sitios $i, j = 1, \dots, N$.

1. Muestre que las configuraciones de más baja energía tienen una energía extensiva (como se debe), i. e. $E \sim N$, lo que justifica el factor $\frac{1}{N}$ en el acople de los espines.
2. Muestre que $\exp(-\beta H)$ puede escribirse como:

$$\left(\frac{N\beta}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \exp(-N\beta\lambda^2/2 + \sum_i (\beta\lambda + \beta h)S_i)$$

Ayuda : se usara la famosa expresión

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{\alpha x^2}{2} - xy} = e^{\frac{y^2}{2\alpha}} \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}} \quad (9)$$

3. Muestre entonces que la función de partición viene dada

$$Z[h] = \left(\frac{N\beta}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \exp(-N\beta A(\lambda))$$

donde se determinara $A(\lambda)$.

4. En el límite de N muy grande, la integral anterior se puede evaluar usando el método del "punto silla". Se escribe

$$A(\lambda) = A(\lambda_0) + \frac{(\lambda - \lambda_0)^2}{2} A''(\lambda_0) + O((\lambda - \lambda_0)^3) \quad (10)$$

donde λ_0 es el valor de λ para el cual $A(\lambda)$ es minimal. Se muestra luego que

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \exp(-N\beta A(\lambda)) = \exp(-N\beta A(\lambda_0)) \sqrt{\frac{2\pi}{N\beta A''(\lambda_0)}} \left(1 + O\left(\frac{1}{N}\right)\right) \quad (11)$$

Muestre entonces que la energía libre por espin viene dada por:

$$f(h) = \frac{-1}{N\beta} \ln(Z(h)) = A(\lambda_0) + O(1/N)$$

5. Muestre también que la magnetización promedio por espín, definida como $m = -\frac{df(h)}{dh}$, viene dada por

$$m = \lambda_0 + O(1/N)$$

6. Concluir entonces a partir de la ecuación que define a λ_0 , que para m se obtiene:

$$\text{th}(\beta(m+h)) = m$$

que es la ecuación de campo medio para ese modelo.

7. Obtener β_c , correspondiente al punto crítico.
8. Concluir sobre la validez del campo medio para ese modelo en el límite $N \rightarrow \infty$