Mecánica Estadística II

Año 2020

Prof. T. S. Grigera
JTP N. Nessi

Práctica 2 — Modelos ferromagnéticos en el retículo

Modelo de Ising. Se trata de uno de los modelos más estudiados en mecánica estadística. Si bien es un modelo de formulación muy simple, exhibe transiciones de fase, y de hecho consituye una especie de paradigma de las transiciones de fase de primero y segundo orden. Fue propuesto por W. Lenz en 1920, como un modelo simple para un ferromagneto (Binney et al., 1992), y resuelto en su version unidimensional por E. Ising en 1925. Se trata de un modelo clásico de variables discretas. En su versión más general el hamiltoniano de Ising es

$$H = \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - \sum_i h_i S_i, \qquad S_i = \pm 1 \tag{2.1}$$

donde la matriz de interacción J y el campo h estan fijos. Según cómo se elija la matriz J se tienen las distintas versiones del modelo. Generalmente, las variables S_i se asocian a sitios de un retículo en d dimensiones,

$$H = \sum_{\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}'} J_{\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}'} S_{\boldsymbol{R}} S_{\boldsymbol{R}'} - \sum_{\boldsymbol{R}} h_{\boldsymbol{R}} S_{\boldsymbol{R}}. \tag{2.2}$$

Se suele referir a las variables S_i como "spines", y llamar "magnetización" a la cantidad $m = \frac{1}{N}\sum_i \langle S_i \rangle = \langle S_i \rangle$.

Consideremos el caso de campo uniforme ($h_{\boldsymbol{R}} = h$) e interacción ferromagnética (es decir, que favorece energéticamente las configuraciones en las cuales pares de spines tienen el mismo valor) a primeros vecinos:

$$J_{\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}'} = \begin{cases} -\frac{J}{2} & \text{si } \boldsymbol{R} \text{ y } \boldsymbol{R}' \text{ son primeros vecinos} \\ 0 & \text{si no} \end{cases} \tag{2.3}$$

El hamiltoniano se suele escribir

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i, \tag{2.4}$$

donde $\langle ij \rangle$ quiere decir sumar sobre todos los pares de primeros vecinos. Para definir completamente el modelo, resta especificar el retículo considerado, p. ej. cuadrado, triangular, ($d = 2$) cúbico simple, cúbico centrado en las caras ($d = 3$), etc. En $d = 1$, el hamiltoniano se puede escribir simplemente

$$H = -J \sum_{i=1}^{N} S_i S_{i+1} + h \sum_i S_i. \tag{2.5}$$

Ejercicio 1. Modelo de Ising en la aproximación de campo medio. Resuelva el modelo de Ising ferromagnético d-dimensional en la aproximación de campo medio y muestre que esta aproximación predice la existencia de una trasición de fase con ruptura espontánea de simetría. Utilice la formulación variacional de la aproximación de campo medio, en la cual se supone que la probabilidad conjunta de las variables microscópicas (en este caso las S_i), está factorizada, es decir que las S_i son independientes,

$$P(\{S_i\}) = \prod_i p_i(S_i), \tag{2.6}$$

donde las $p_i(S_i)$ se eligen de modo que la energía libre, calculada con esta forma particular de $P(\{S_i\})$, sea mínima. Esto equivale a decir que se reemplaza la interacción de las partículas entre sí por la interacción de cada una de ellas con un campo externo, no necesariamente el mismo para todas.

Proceda del siguiente modo:

a) Como los valores permitidos para S_i son ± 1, podemos parametrizar con toda generalidad la p_i como

$$p_i(S) = q_i \delta_{S,1} + (1 - q_i)\delta_{S,-1}, \tag{2.7}$$

o bien, cambiando q_i por $m_i = \langle p_i(S) \rangle = 2q_i - 1$,

$$p_i(S) = \frac{1 + m_i}{2}\delta_{S,1} + \frac{1 - m_i}{2}\delta_{S,-1}. \tag{2.8}$$

Notar que escrita de este modo, $p_i(S)$ está ya normalizada. Calcule la energía libre con esta forma de la probabilidad (recuerde, cuando tenga que evaluar términos de la forma $\langle S_i S_j \rangle$, que debido a la forma particular de la probabiliad los valores medios se factorizan, $\langle S_i S_j \rangle = \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle$). Deberá obtener

$$F[P] = -J \sum_{\langle ij \rangle} m_i m_j - \sum_i h_i m_i - \frac{1}{\beta} \sum_i s(m_i), \tag{2.9}$$

$$s(m) = -\frac{1 + m}{2} \log\left(\frac{1 + m}{2}\right) - \frac{1 - m}{2} \log\left(\frac{1 - m}{2}\right). \tag{2.10}$$

b) Ahora busque el mínimo de la energía libre variando los parámetros m_i. Muestre que se obtienen las ecuaciones

$$m_i = \operatorname{tgh}\left[\beta J \sum_{j \in nn(i)} m_j + \beta h_i\right]. \tag{2.11}$$

c) En el caso $h_i = h$, todos los sitios de la red son idénticos, de modo que la probabilidad de un spin es independiente del sitio, $P(S_i = \sigma) = P(S_j = \sigma)$, y por lo tanto $m_i = m$. Llamando z al *número de coordinación* (número de primeros vecinos), la ecuación de campo medio para la magnetización es

$$m = \tanh\left[z\beta J m + \beta h\right]. \tag{2.12}$$

d) Considere el caso $h = 0$. Observe que $m = 0$ siempre es una solución. Muestre que cuando $\beta > \beta_c$, con

$$\beta_c = \frac{1}{Jz}, \tag{2.13}$$

existen otras dos soluciones con magnetización no nula ($\pm m_0$). Analice la estabilidad de las soluciones (esto es, vea si son mínimos o máximos de la energía libre) y muestre que para $\beta > \beta_c$ (o bien $T < T_c$) las soluciones con $m = \pm m_0$ son estables.

e) **Ruptura espontánea de simetría.** Escriba las distribuciones de probabilidad correspondientes a cada una de las soluciones estables para $\beta > \beta_c$. Calculando $\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2$, muestre que ambas describen estados puros con $\langle m \rangle = m_0$, y concluya entonces que la aproximación de campo medio predice la existencia de una transición de fase con ruptura espontánea de simetría en el modelo de Ising. Se trata de una trasición de fase *continua,* porque el *parámetro de orden* (en este caso, la magnetización) se anula (tiende al valor de la fase de alta temperatura) al acercarse a la transición desde la fase ordenada: $m \to 0$ cuando $T \to T_c^-$.

f) **Exponentes críticos.** Utilizando la ec. (2.12) muestre que para $T = T_c + \epsilon$

$$m \sim (T_c - T)^{\beta}, \qquad \beta = 1/2 \quad (T < T_c) \tag{2.14}$$

$$\chi \equiv \left.\frac{dm}{dh}\right|_{h=0} \sim (T - T_c)^{-\gamma}, \qquad \gamma = -1 \quad (T > T_c). \tag{2.15}$$

Finalmente, para $T = T_c$ y para campos pequeños, obtenga

$$m \sim h^{1/\delta}, \qquad \delta = 3. \tag{2.16}$$

Los exponentes β, γ y δ así definidos son algunos de los *exponentes críticos,* que caracterizan la transición de fase.

g) ¿Cómo dependen los resultados anteriores, y en particular los exponentes críticos, de la dimensión del espacio en esta aproximación?

Ejercicio 2. Modelo de Ising completamente conectado. Si para la matriz de interacción de la ec. (2.1) se elige $J_{ij} = -J/2N(1-\delta_{ij})$, el hamiltoniano que resulta describe interacciones de alcance infinito, esto es, cada spin interactúa con todos los otros spines:

$$H = -\frac{J}{2N}\sum_{i\neq j} S_i S_j - h\sum_i S_i, \tag{2.17}$$

(el factor $1/N$ se introduce para asegurar que la energía crezca linealmente con N en el límite termodinámico). En este ejercicio resolverá el modelo de Ising completamente conectado para el caso ferromagnético ($J > 0$) y mostrará que la solución de campo medio (2.12) es exacta para este modelo en el límite termodinámico. Proceda del siguiente modo:

a) Note que $\sum_{i\neq j} S_i S_j = \left(\sum_i S_i\right)^2 - \sum_i S_i^2$. Escriba entonces la función de partición

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \int dM \, \exp[\beta J M^2/2N - \beta J + \beta h M]\delta(M - \sum_i S_i). \tag{2.18}$$

Use la representación integral de la delta de Dirac $\delta(x) = (2\pi)^{-1}\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\lambda x)\, d\lambda$ y, cambiando el orden de la suma y las integrales, podrá hacer fácilmente la suma sobre $\{S_i\}$. Finalmente, podrá integrar sobre λ usando el método del punto de ensilladura y obtener

$$Z = N\int dm \, \exp[-N\beta g(m,h)], \tag{2.19}$$

$$g(m,h) = -J\frac{m^2}{2} - \frac{1}{\beta}\phi(m), \tag{2.20}$$

$$\phi(m) = \log[2\cosh(\operatorname{arctanh} m)] - m \operatorname{arctanh} m \tag{2.21}$$

$$= -\frac{1+m}{2}\log\frac{1+m}{2} - \frac{1-m}{2}\log\frac{1-m}{2}. \tag{2.22}$$

b) Utilice el método del punto de ensilladura para integrar sobre m y obtener la energía libre. Muestre que la condición de punto estacionario conduce a

$$m = \tanh(\beta J m + \beta h), \tag{2.23}$$

es decir a la misma ecuación de la aproximación de campo medio pero con $z = 1$. Explique por qué $z = 1$ aún cuando cada spin tiene $N-1$ vecinos.

c) **Ruptura espontánea de simetría.** Ya hemos visto que para $\beta > J^{-1}$ y $h = 0$ la ecuación anterior tiene dos soluciones simétricas no nulas, además de $m = 0$. Muestre que los dos puntos de ensilladura no nulos contribuyen igualmente a la función de partición:

$$Z = 2e^{\beta N g(m_0)}. \tag{2.24}$$

Recordando que la distribución de probabilidad del parámetro de orden es $P(m) = Z^{-1}e^{-\beta N g(m)}$, muestre que en el límite termodinámico

$$P(m) = \frac{1}{2}\delta(m - m_0) + \frac{1}{2}\delta(m + m_0). \tag{2.25}$$

Calcule $\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2$ a partir de esta distribución y concluya que el estado de Boltzmann no es puro, sino que se escribe

$$P(m) = \frac{1}{2}P_+(m) + \frac{1}{2}P_-(m), \tag{2.26}$$

y que por lo tanto para $\beta > \beta_c$ la simetría de inversión de spines está espontáneamente rota.

d) **Efecto de un campo magnético pequeño a $T < T_c$.** Agregando ahora un campo $h \ll 1$, de modo que $g(m) = g_0(m) - hm$, encuentre los puntos de ensilladura perturbados,

$$m_\pm = \pm m_0 + \frac{h}{g_0''(m_0)} \tag{2.27}$$

(observe que ya no son simétricos). Muestre que a primer ordene en el campo la magnetización media es

$$\langle m\rangle = \frac{m_+ e^{\beta N h m_0} + m_- e^{-\beta N h m_0}}{e^{\beta N h m_0} + e^{-\beta N h m_0}}, \tag{2.28}$$

y que por lo tanto

$$\lim_{h\to 0} \langle m\rangle = 0, \qquad (N \text{ finito}), \tag{2.29}$$

pero

$$\lim_{N\to\infty} \langle m\rangle = m_+ = m_0 + \frac{h}{g''}, \qquad (h \text{ finito}). \tag{2.30}$$

Es decir que el orden de los limites $N \to \infty$ y $h \to 0$ no conmuta, lo que constituye una forma alternativa de caracterizar la existencia de una ruptura espontánea de simetría:

$$\lim_{N\to\infty} \lim_{h\to 0} \langle m\rangle = 0, \tag{2.31}$$

$$\lim_{h\to 0} \lim_{N\to\infty} \langle m\rangle = m_0. \tag{2.32}$$

Ejercicio 3. Modelo de Ising en $d = 1$. Calcule la energía libre, la magnetización y la función de correlación espacial de espines para el modelo de Ising en $d = 1$ con campo aplicado. Utilice condiciones periódicas de contorno con N spines ($S_{N+1} = S_N$).

a) Tomando primero $h = 0$ por simplicidad, escriba $H = \sum_i h_0(S_i, S_{i+1})$. La función de partición es

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \prod_{i=1}^{N} \exp[-\beta h_0(S_i, S_{i+1})]. \tag{2.33}$$

Introduzca la *matriz de transferencia* $\boldsymbol{T}$, definiendo sus elementos por

$$\langle S|\boldsymbol{T}|S'\rangle = \exp[-\beta h_0(S, S')], \qquad S, S' = \pm 1 \tag{2.34}$$

y muestre que entonces

$$Z = \mathrm{Tr}\, \boldsymbol{T}^N. \tag{2.35}$$

b) En este caso la matriz $\boldsymbol{T}$ es de 2×2, y es fácil ver que es simétrica. Tiene entonces 2 autovalores reales; llamémoslos $\lambda_{1,2}$ con $\lambda_1 > \lambda_2$. La función de partición se expresa entonces $Z = \lambda_1^N + \lambda_2^N$ y

$$f = -\frac{1}{N\beta} \log Z \xrightarrow[N\to\infty]{} -\frac{\lambda_1}{\beta}. \tag{2.36}$$

Calcule los autovalores y muestre que la energía libre en el límite termodinámico es

$$f = -\frac{1}{\beta} \log[2\cosh(\beta J)]. \tag{2.37}$$

c) Considere ahora el caso con campo magnético. La función de partición se puede escribir de la misma forma, eligiendo ahora

$$\langle S|\boldsymbol{T}|S'\rangle = \exp\{-\beta h_0(S, S') - \beta/2[V(S) + V(S')]\}, \tag{2.38}$$

con $V(S) = -hS$. Muestre que la energía libre es

$$f = -J - \frac{1}{\beta} \log\left[\cosh \beta h + \sqrt{\cosh^2 \beta h - (1 - e^{-4\beta J})}\right]. \tag{2.39}$$

d) Con el resultado anterior, calcule la magnetización $m(h) = -\partial f/\partial h$ y obtenga

$$\lim_{h\to 0} \lim_{N\to\infty} m(h) = 0 \tag{2.40}$$

para todo β. Esto muestra que para toda temperatura finita, la magnetización es nula, y que por lo tanto en $d = 1$ el modelo de Ising no tiene transición de ruptura de simetría para T finita.

e) Finalmente calcule la función de correlación espacial spin-spin

$$C(i,j) = \langle S_i S_j \rangle \tag{2.41}$$

utilizando la matriz de transferencia. Comience mostrando que definiendo

$$\langle S|\boldsymbol{F}|S'\rangle = S\delta_{SS'}, \tag{2.42}$$

se tiene

$$\langle S|\boldsymbol{FT}|S'\rangle = S\exp[-\beta h_0(S,S')], \tag{2.43}$$

y que por lo tanto la función de correlación se puede escribir

$$C(i,j) = \frac{1}{Z}\operatorname{Tr}[\boldsymbol{T}^{i-1}\boldsymbol{FT}^{j-i}\boldsymbol{FT}^{N-j+1}]. \tag{2.44}$$

Luego evalúe la expresión anterior en la base diagonal de $\boldsymbol{T}$ para obtener

$$C(i,j) = \frac{1}{\lambda_1^N}\sum_{\mu\nu}\lambda_\mu^{i-1}\langle\mu|\boldsymbol{F}|\nu\rangle\lambda_\nu^{j-i}\langle\nu|\boldsymbol{F}|\mu\rangle\lambda_\mu^{N-j+1} \xrightarrow[N\to\infty]{} \sum_\nu |\langle 1|\boldsymbol{F}|\nu\rangle|^2\left(\frac{\lambda_\nu}{\lambda_1}\right)^{j-i}. \tag{2.45}$$

Utilizando los autovalores ya calculados para el caso $h = 0$, muestre que entonces la correlación espacial decae exponencialmente, $C(i,j) = C(i,i)e^{-|j-i|/\xi}$, con una longitud de correlación

$$\xi = \frac{1}{\log(\lambda_1/\lambda_2)} = \frac{1}{\log[\coth(\beta J)]}. \tag{2.46}$$

Ejercicio 4. Modelo p-spin ferromagnético. Estudie el p-spin ferromagnético en el caso completamente conectado:

$$H = -\frac{J}{p!N^p}\sum_{i_1,i_2,\ldots,i_p} S_{i_1}S_{i_2}\ldots S_{i_p} - h\sum_i S_i. \tag{2.47}$$

a) Utilizando la misma técnica que empleó para el modelo de Ising completamente conectado obtenga la función de partición

$$Z = N\int dm\, \exp[-N\beta g(m,h)], \tag{2.48}$$

$$g(m,h) = -\frac{J}{p!}m^p - \frac{1}{\beta}\phi(m), \tag{2.49}$$

$$\phi(m) = \log[2\cosh(\operatorname{arctanh} m)] - m \operatorname{arctanh} m \tag{2.50}$$

$$= -\frac{1+m}{2}\log\frac{1+m}{2} - \frac{1-m}{2}\log\frac{1-m}{2}. \tag{2.51}$$

b) Muestre que para $p = 3$ la magnetización de equilibrio tiene que cumplir

$$m = \tanh\left(\beta J m^2/2\right). \tag{2.52}$$

Para β suficientemente grande, esta ecuación tiene tres soluciones. Estudiando la forma de la energía libre $g(m)$ muestre que corresponden a un estado estable, uno inestable y uno metaestable, y que el modelo tiene una transición de fase discontinua.

c) Grafique cualitativamente las ecuaciones de estado $m(T)$ a campo 0 y $m(h)$ para temperaturas mayores y menores que la temperatura crítica.

Ejercicio 5. Considere un sistema magnético con una $g(m)$ con un mínimo absoluto y un mínimo local (es decir con un estado de equilibrio y otro metaestable).

a) Muestre el agregado de un campo magnético apropiado puede cambiar la estabilidad de los mínimos y producir una transición de primer orden, y que otro valor del campo puede hacer que el estado metaestable desaparezca (pierda estabilidad).

b) Si por el contrario se parte de una $g(m)$ con un sólo mínimo, ¿puede un campo magnético crear un estado metaestable? ¿Qué condición debe cumplir $g(m)$ para que esto sea posible?

Ejercicio 6. Escriba el Hamiltoniano de una cadena de osciladores armónicos donde cada partícula está a su vez fija a un sitio de una red periódica mediante un acoplamiento armónico de intensidad g. Muestre cómo se mapea este problema al modelo Gaussiano de espines ferromagnéticos y estudie el comportamiento al variar el acoplamiento g.