**Física Teórica 3 – 1er. cuatrimestre de 2012**

**Guía 9:** *Modelo de Ising*

1. Considere el modelo de Ising unidimensional sin campo externo. Las energías de los microestados $\{s_i\}$ están dadas por

$$E_{\{s_i\}} = -J \sum_{\langle ij \rangle}^{N} s_i s_j,$$

donde $\langle ij \rangle$ denota la suma sobre pares de primeros vecinos y la energía de interacción $J$ es positiva. Las variables $s_i$ pueden tomar valores 1 y $-1$ y hay condiciones periódicas, es decir $s_{N+1} \equiv s_1$.

   (a) Encuentre los estados de la cadena que tienen la mínima energía y dé el valor de $E_{\min}$.

   (b) Calcule el cambio de energía de Helmholtz al invertir un espín. Muestre a partir de este resultado que, para un sistema suficientemente grande, el estado fundamental es inestable si $T > 0$.

   (c) Calcule el cambio de energía interna resultante al invertir un segundo espín vecino al primero. Repita para un tercer y cuarto espín. ¿Cuál es la energía mínima necesaria para generar un estado de magnetización cero a partir del estado fundamental? ¿Qué implican estos resultados?

   (d) Estime el tamaño característico de los dominios de espines paralelos. ¿Qué comportamiento espera para la susceptibilidad en función de la temperatura? Compare con el resultado exacto

$$\chi = \frac{N\mu^2 e^{2J/kT}}{kT}.$$

   (Ayuda: considere a los dominios como espines equivalentes e independientes.)

   Considere ahora el modelo de Ising en dos dimensiones. ¿Cuál es la energía mínima necesaria para generar un estado de magnetización cero a partir del estado fundamental? Para temperaturas muy bajas ($kT \ll J$) estime el cambio de entropía y estudie su dependencia con el tamaño del sistema. Compare con el caso 1D.

2. (Huang §14.6, Pathria §12.1): En una dimensión el modelo de Ising puede ser resuelto en forma exacta.

   (a) Considere los $N$ espines con condiciones periódicas de contorno, es decir $s_{N+1} \equiv s_1$. Muestre que la función de partición canónica $Q_N$ es

$$Q_N(b, K) = \sum_{\substack{s_1,\ldots,s_N \\ =\pm 1}} \exp\left[\sum_{i=1}^{N} (b s_i + K s_i s_{i+1})\right],$$

   donde $b = \beta\mu B$ y $K = \beta J$.

   (b) Muestre que $Q_N = \mathrm{Tr}\,(q^N)$, donde $q$ es la matriz $2 \times 2$ de elementos

$$\exp\left[\frac{b}{2}(s + s') + K\, s\, s'\right] \qquad (s, s' = \pm 1).$$

   Ayuda: El sumando del argumento de la exponencial en $Q_N$ puede ser reescrito en la forma $b(s_i + s_{i+1})/2 + K s_i s_{i+1}$.

(c) Muestre que la función de partición puede escribirse en la forma $Q_N = \lambda_+^N + \lambda_-^N$, donde $\lambda_\pm = e^K\left(\cosh b \pm \sqrt{\sinh^2 b + e^{-4K}}\right)$ son los autovalores de la matriz $q$.

(d) Muestre que en el límite termodinámico $\lim_{N\to\infty} \dfrac{\ln Q_N}{N} = \ln \lambda_+$.

(e) Calcule la magnetización media $M = M(T, B)$ y muestre que no hay magnetización espontánea cuando $B \to 0^+$. Ayuda: la magnetización media por espín es

$$\mu\bar{s} = \mu\, \frac{1}{N}\frac{\partial \ln Q_N}{\partial b}\bigg|_K .$$

3. (Dalvit, prob. 5.14): Considere el modelo de Ising unidimensional a campo nulo y con extremos abiertos. Mediante el cambio de variables $b_i = s_i s_{i+1}$ muestre que la función de partición es $Q_N = 2^N[\cosh(\beta J)]^{N-1}$. Compare este resultado con el de la cadena cerrada cuando $N \gg 1$. ¿Tiene importancia en el límite termodinámico si la cadena es abierta o cerrada?

4. (Pathria §11.4, Huang §14.2): El modelo de gas reticular (*lattice gas*) se utiliza para estudiar transiciones de fase líquido$-$gas. Consiste en $N$ sitios, cada uno de los cuales puede estar ocupado a lo sumo por una partícula. Las partículas interactúan entre sitios vecinos, siendo $\epsilon$ la energía de interacción. Muestre que este modelo es isomorfo a uno de Ising con hamiltoniano

$$H = -\sum_{i=1}^{N} B\mu s_i - J\sum_{\langle ij\rangle}^{N} s_i s_j \qquad (s_i = \pm 1),$$

donde la última suma es sobre los primeros vecinos. Para ello derive las relaciones que ligan los parámetros del modelo de Ising con los del gas reticular, de modo que la función de partición canónica del primero sea idéntica (a menos de una constante de proporcionalidad) a la función de partición gran canónica del segundo.

5. La aproximación de campo medio más simple para el modelo de Ising con condiciones periódicas consiste en escribir un hamiltoniano efectivo para un solo espín, $s$, reemplazando la interacción con sus $\gamma$ 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 $-B\mu s$. Escriba la ecuación de autoconsistencia para el valor medio del espín y encuentre la temperatura crítica, $T_c$, por debajo de la cual hay magnetización espontánea. Para el caso $\gamma = 4$, compare esta solución el valor exacto, $kT_c = -2J/\log(\sqrt{2}-1)$.

6. En la aproximación de campo medio para un solo espín del problema anterior, halle los exponentes críticos para las siguientes magnitudes termodinámicas:

(a) La magnetización media a campo nulo, que se comporta como $M(T, B = 0) \sim (T_c - T)^\beta$ para $T \longrightarrow T_c^-$.

(b) La magnetización media en la temperatura crítica, que se comporta como $M(T_c, B) \sim B^{1/\delta}$ para $B \to 0$.

(c) La susceptibilidad magnética $\chi_T(T, B = 0)$, la cual diverge como $(T_c - T)^{-\gamma}$ para $T \longrightarrow T_c^-$.

7. 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 $\bar{s}$.

   (a) Hallar la ecuación de autoconsistencia para el valor de expectación $\bar{s}$ y con ella una expresión para $T_c$. Encontrar (numéricamente si es necesario) el valor de $T_c$ para la red cuadrada y comparar con el resultado exacto y con el obtenido en la aproximación de campo medio para un solo espín.

   (b) Hallar $U$ y $C_V$ para $T > T_c$.

8. Encontrar numéricamente la temperatura crítica 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.

9. Ídem al anterior, pero en un modelo de campo medio que incluya exactamente las interacciones de toda una hilera de espines.

10. (Dalvit, prob. 5.22) Considere una red cuadrada bidimensional formada por dos tipos de sitios $A$ y $B$ con momentos magnéticos $\mu_A$ y $\mu_B$, respectivamente. El hamiltoniano es del tipo Ising, pero con interacción a primeros y segundos vecinos. Las constantes de acoplamiento son:

$$\begin{array}{ll} J_1 > 0 & \text{entre sitios vecinos de la red } A \\ J_1 > 0 & \text{entre sitios vecinos de la red } B \\ J_2 < 0 & \text{entre sitios vecinos } A \text{ y } B \end{array}$$

   (a) Escriba el hamiltoniano en términos de $s_i^A$ y $s_i^B$.

   (b) En la aproximación de campo medio, calcule el campo magnético efectivo que ven los espines de la red $A$. Ídem para la red $B$.

   (c) Halle las ecuaciones para $\langle s_i^A \rangle$ y $\langle s_i^B \rangle$.

   (d) Muestre que la susceptibilidad magnética a campo nulo obedece la ley de Curie

$$\chi(T, B \to 0) \sim \frac{1}{T - T_c}\,.$$