

Tema 12: Fenómenos magnéticos II

- Transiciones orden-desorden: aleaciones binarias
- Modelo Lenz-Ising y variantes: Modelo de Heisenberg, cristal magnético, gas reticular, red de neuronas
- Soluciones -matricial y combinatorial- en dimensión uno
- Teorema de Peierls: existencia de cambio de fase en dimensión dos.
- Solución en dimensión dos.
- Soluciones en aproximación campo medio ($d = \infty$).
- Teoría Curie-Weiss del ferromagnetismo.

Introducción

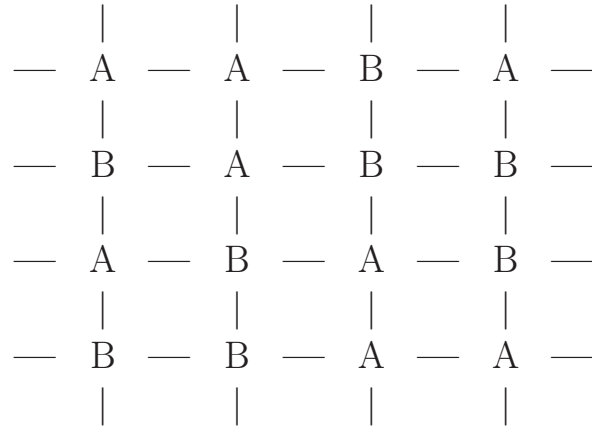
En temas anteriores, al estudiar el paramagnetismo, vimos que esta fase no es estable a bajas temperaturas y aparece un cambio de fase hacia estados ferromagnéticos, antiferromagnéticos o vidrios de espín. Esto ocurre porque a bajas temperaturas las interacciones van a ser muy importantes luego el tratamiento de un sistema de espines como sistema ideal no es posible. En este tema vamos a estudiar esta transición y nos va a servir para introducir ciertas técnicas matemáticas utilizadas en el modelado de sistemas complejos (soluciones exactas, aproximaciones campo medio, etc.) que han jugado papel esencial en teoría de cambios de fase.

La fase paramagnética es una fase desordenada con los espines orientados en todas las direcciones mientras que la fase ferro o antiferro son fases ordenadas con los espines orientados en ciertas direcciones. Comenzamos primero estudiando de forma genérica la transición de fase orden-desorden.

Transiciones orden-desorden. Modelo de aleación binaria.

Muchos sistemas (ej, aleaciones binarias Al-Zn y Au-Cu) presentan transiciones entre un estado ordenado —a bajas T 's— y otro desordenado —a altas T 's. El ejemplo ideal más sencillo:

- Sea red regular cuyos nudos (intersecciones) están ocupados por objetos de dos especies distintas, ej, ión tipo A o ión tipo B. En dimensión dos, una configuración posible es:



- Supongamos que dos objetos interactúan sólo cuando son vecinos próximos (líneas); sean φ_{AB} , φ_{AA} , φ_{BB} las contribuciones de parejas AB, AA y BB, respectivamente, a la energía total consecuencia de esta interacción.
- Si no hay otro efecto (es decir, el sistema está a $T = 0K$) :
 1. si $\varphi_{AB} > \frac{1}{2}(\varphi_{AA} + \varphi_{BB})$, se obtiene menor energía favoreciendo los enlaces AA y BB sobre los AB, luego las configuraciones contendrán regiones que sólo contengan partículas A y otras regiones que sólo contengan B's. Por ej, si la red es finita y las A's son minoritarias, mínima energía requiere todas las A's agrupadas en esfera rodeada de un medio con sólo B's
 2. si $\varphi_{AB} < \frac{1}{2}(\varphi_{AA} + \varphi_{BB})$, la configuración energéticamente más favorable tiene las partículas A y B alternadas en la red, formando una especie de *super-redes* entrelazadas, una de A's y otra de B's, con espaciado doble que la original, si lo permite la simetría de la red y la proporción de A's y B's.

Estas situaciones ocurren de hecho en aleaciones.

1. Al-Zn, Cu-Ti, Ni-Si, Au-Pt,... tendencia agrupamiento, como modelo 1 (pero complicada pues la red cúbica-simple —en la que pensamos— es casi una excepción, hay nudos vacíos, y deformaciones y defectos donde quizás la tendencia es a otro tipo de orden, o los segundos vecinos pueden interactuar, etc.)
2. Au-Cu, Au-Cd, Mg-Cd, Cu-Zn,... presentan tendencia a formar super-redes (también complicada por otros factores)

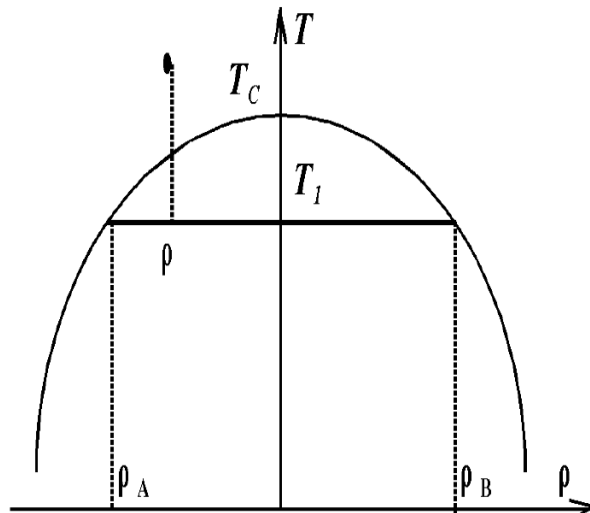
Si, partiendo estados orden perfecto, elevamos T , la energía térmica $k_B T$ induce aleatoriedad que tiende a destruir el orden perfecto; ej, en caso 1, esfera segregará en partes no esféricas que, siendo ricas en A's, contienen B's en interior: A mayor T : menos compacta la forma de *grupos* de A's, y contendrán más B's.

Las siguientes ideas parecen importantes aquí:

- Se tiene

$$\rho = x\rho_A + (1 - x)\rho_B;$$

ρ_A, ρ_B = densidades de las dos fases (rica en A's y B's, respectivamente), y ρ = la densidad media sistema. Si $\rho = \text{const.}$ (puede ser apropiado para aleaciones), x puede ser dado y ρ_A, ρ_B variar con la T : en $T = 0\text{K}$, ρ_A, ρ_B son máximas y disminuyen al aumentar T :



- N° trozos en que se divide fase rica en A's y la irregularidad típica de éstos puede caracterizarse mediante *longitud de correlación*, ξ , que será $f(T)$: es pequeña, igual —o proporcional— al radio de la esfera para $T = 0K$, y crece para $T \rightarrow T_C$ (de hecho, ‘diverge’ en T_C).¹
- Para $T > T_C$, sólo hay una fase homogénea, mezcla de A's y B's, pero *orden de corto alcance*, es decir, agrupamientos microscópicos (ej, ξ del orden de unos pocos espaciados de la red)
- Para $T \rightarrow \infty$, tiende a dominar agitación térmica que conduce a estado completamente homogéneo, *desordenado*, incluso a nivel microscópico.

La función de partición canónica para este modelo es, obviamente:

$$Z_N(T) = \sum_{\text{todas las configuraciones de la red}} \exp \left(-\beta \sum_{\text{todas las parejas de vp}} \varphi_{ij} \right)$$

Veamos cómo escribir esta expresión de forma útil:

- Sea una red en dimensión d , con N nudos.
- Definimos *variables concentración* tales que:

$$\left. \begin{array}{l} c_i^A = 1 \\ c_i^B = 0 \end{array} \right\} \implies \text{A en } i \quad \left. \begin{array}{l} c_i^A = 0 \\ c_i^B = 1 \end{array} \right\} \implies \text{B en } i$$

- En consecuencia, proponemos el hamiltoniano:

$$H = \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j; \text{ vp}}} [c_i^A c_j^A \varphi_{AA}(r_{ij}) + c_i^B c_j^B \varphi_{BB}(r_{ij}) + 2c_i^A c_j^B \varphi_{AB}(r_{ij})] \\ - \sum_i [c_i^A \mu_A(\vec{r}_i) + c_i^B \mu_B(\vec{r}_i)]$$

¹En este contexto es suficiente esta definición fenomenológica. Una definición precisa requiere el concepto de función de correlación; ej, $G(r) \equiv \langle s(0)s(r) \rangle$, donde $s(r)$ es la variable de ocupación en la posición $r \equiv |\vec{r}|$ y $\langle \dots \rangle$ es el promedio canónico. En muchas ocasiones de interés se tiene que la correlación decae con la distancia en la forma: $G(r) \sim \exp(-r/\xi)$, que define $\xi(T)$.

donde $\mu_A(\vec{r}_i)$ = potencial químico local asociado con la especie A. La primera suma se extiende sobre $qN/2$ parejas de vecinos próximos donde q es el número de coordinación de la red.

- Introducimos *variables ocupación* tales que:

$$s_i = \begin{cases} +1 & \text{(A)} \\ -1 & \text{(B)} \end{cases} \implies \begin{cases} c_i^A = \frac{1}{2}(1 + s_i) \\ c_i^B = \frac{1}{2}(1 - s_i) \end{cases}$$

- que permiten escribir el hamiltoniano:²

$$H = H_0 - \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j: \text{vp}}} J_{ij} s_i s_j - \sum_i \mathcal{H}_i s_i$$

donde

$$2J_{ij} \equiv \varphi_{AB}(r_{ij}) - \frac{1}{2}[\varphi_{AA}(r_{ij}) + \varphi_{BB}(r_{ij})]$$

y

$$\mathcal{H}_i \equiv \sum_{j(\neq i)} \frac{1}{4}[\varphi_{BB}(r_{ij}) - \varphi_{AA}(r_{ij})] + \mu_A(\vec{r}_i) - \mu_B(\vec{r}_i)$$

- Este hamiltoniano puede todavía simplificarse³:

$$H = -J \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j: \text{vp}}} s_i s_j - \mathcal{H} \sum_i s_i,$$

donde hemos supuesto

²con $H_0 = \frac{qN}{8}(\varphi_{AA} + \varphi_{BB} + 2\varphi_{AB}) - \frac{1}{2} \sum_i (\mu_A(\vec{r}_i) + \mu_B(\vec{r}_i))$.

³Como veremos, éste es el llamado hamiltoniano de Ising con interacciones entre a vecinos próximos.

- $H_0 = 0$ (reescalamiento de la energía)
- isotropía, de modo que $J_{ij} = J \forall i, j$, con
 - $J > 0$: se favorecen los productos $s_i s_j = +1$, es decir, parejas AA y BB, luego hay tendencia a la formación de grupos,
 - $J < 0$: se favorecen los productos $s_i s_j = -1$, es decir, parejas AB, luego hay tendencia a la formación de super-redes, y
- homogeneidad, de modo que $\mathcal{H}_i = \mathcal{H} > 0 \forall i$.
- Así la función de partición es (G =energía libre de Gibbs, $\langle ij \rangle$ =parejas i, j que sean vecinos próximos)⁴:

$$\begin{aligned}
 Z_N(T, \mathcal{H}) &= \exp[-\beta G(T, \mathcal{H}, N)] \\
 &= \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \exp \left[-\beta \left(-J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - \mathcal{H} \sum_i s_i \right) \right]
 \end{aligned}$$

- Para medir el grado de orden,⁵ definimos el exceso de una especie sobre la otra:

$$\langle M \rangle = (\rho_A - \rho_B) N,$$

donde

$$M = \sum_{i=1}^N s_i$$

⁴Esto es así porque la $P = 0$ y en el hamiltoniano hay un término restando proporcional a lo que hemos llamado \mathcal{H} . Si esto lo interpretamos como el campo magnético y lo consideramos variable independiente se tiene algo como $A - \mathcal{H}M$ que no es más que la energía de Gibbs de un sistema magnético. En el caso de que hablemos de mezcla binaria \mathcal{H} no es una variable independiente y por lo tanto tenemos A .

⁵Al escribir $Z_N(T, \mathcal{H})$ estamos implicando, además del H , una energía térmica $k_B T$ que puede interpretarse consecuencia de las vibraciones de la red (o sistema de fonones) coexistiendo con los grados de libertad de ocupación, representable como baño térmico, de modo que \exists tendencia al orden, medida por J y \mathcal{H} , y tendencia a la aleatoriedad, medida por T .

es n° relativo de nudos ocupados por A's y B's en una configuración. Es decir, $\langle M \rangle$ es el promedio de M sobre todas las configuraciones, cada una con su *peso*:

$$\langle M \rangle = \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} M \exp[-\beta H(\{s_i\})] = k_B T \frac{\partial}{\partial \mathcal{H}} \ln Z_N(T, \mathcal{H})$$

- De acuerdo con la *curva de coexistencia* presentada antes, el modelo tiene transición cuando, para $\mathcal{H} = 0$ ('campo nulo'), se tiene orden por debajo de cierta T , es decir, cuando

$$\langle M \rangle \neq 0 \quad (\rho_A - \rho_B \neq 0) \quad \text{para} \quad \mathcal{H} \rightarrow 0, \quad T < T_C.$$

Es decir, planteamos el problema de demostrar esto, ej, calculando $Z_N(T, \mathcal{H})$, derivando respecto de \mathcal{H} , y haciendo el límite $\mathcal{H} \rightarrow 0$.

- Antes de discutir este problema, escribimos $Z_N(T, \mathcal{H})$ en forma explícita.

- Es conveniente puesto que las configuraciones son muy degeneradas: muchas están caracterizadas por el mismo valor de H .
- De hecho, la energía de una configuración en el modelo no depende de los valores que toman todas las variables s_i , sino de unos pocos parámetros, por ej:

$$N_A = n^\circ \text{ total de partículas A (o de nudos con A), y}$$

$$N_{AA} = n^\circ \text{ total de parejas AA que sean vecinos próximos}$$

- Para comprobar este hecho, definimos también:

$$N_B = n^\circ \text{ total de partículas B; } \quad N_B = N - N_A$$

$$N_{BB} = n^\circ \text{ total de parejas BB vecinos próximos}$$

$N_{AB} = N_{BA} = n^o$ total de parejas AB vecinos proximos

Tenemos inmediatamente que⁶

$$qN_A = 2N_{AA} + N_{AB}$$

$$qN_B = 2N_{BB} + N_{AB}$$

- Se sigue que:

$$N_B = N - N_A \quad (\text{de } N = N_A + N_B)$$

$$N_{AB} = qN_A - 2N_{AA} \quad (\text{de la 1}^a \text{ igualdad})$$

$$N_{BB} = \frac{1}{2}qN_B - \frac{1}{2}N_{AB} \quad (\text{de la 2}^a \text{ igualdad})$$

$$= \frac{1}{2}q(N - N_A) - \frac{1}{2}(qN_A - 2N_{AA}) \quad (\text{de las anteriores})$$

$$= \frac{1}{2}qN - \frac{1}{2}qN_A - \frac{1}{2}qN_A + N_{AA}$$

$$= \frac{1}{2}qN - qN_A + N_{AA}$$

- de donde:

$$\sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j = N_{AA} + N_{BB} - N_{AB} = 4N_{AA} - 2qN_A + \frac{1}{2}qN$$

$$\sum_i s_i = N_A - N_B = 2N_A - N$$

- luego

$$\begin{aligned} H(N_A, N_{AA}) &= -J \left(4N_{AA} - 2qN_A + \frac{1}{2}qN \right) - \mathcal{H}(2N_A - N) \\ &= -4JN_{AA} + 2(qJ - \mathcal{H})N_A - \left(\frac{1}{2}qJ - \mathcal{H} \right) N \end{aligned}$$

⁶En efecto, tomemos un nudo A cualquiera y lanzamos uniones a sus vecinos próximos: habremos dibujado q líneas. Repetimos con todos los A's: habremos dibujado qN_A líneas. Pero éstas pueden también contarse notando que:

entre cada AA habrá dos líneas $\rightarrow 2N_{AA}$

entre cada AB habrá una línea $\rightarrow N_{AB}$

no habrá línea entre las parejas BB

Esto justifica la 1^a igualdad; un argumento similar lleva a la 2^a

- y, finalmente, la función de partición es⁷:

$$\begin{aligned}
 Z_N(T, \mathcal{H}) &= e^{-\beta G} = \sum_{N_A, N_{AA}} g(N_A, N_{AA}) \exp[-\beta H(N_A, N_{AA})] \\
 &= e^{\beta(\frac{1}{2}qJ - \mathcal{H})N} \sum_{N_A=0}^N e^{-2\beta(qJ - \mathcal{H})N_A} \\
 &\quad \times \sum_{N_{AA}} g(N_A, N_{AA}) e^{\beta 4J N_{AA}}
 \end{aligned}$$

- La dificultad aquí reside en el cálculo de $g(N_A, N_{AA})$,

$g(N_A, N_{AA}) =$ n° de configuraciones (con N_A y N_{AA}) o

$g(N_A, N_{AA}) =$ n° de formas distintas de colocar N objetos A y B en la red de modo que se tengan números dados para N_A y N_{AA}

¡CALCULAR $Z_N(T, \mathcal{H})$ EQUIVALE A DETERMINAR $g(N_A, N_{AA})!$

¡UN PROBLEMA COMBINATORIAL!

(de sencillo planteamiento pero, generalmente, difícil solución: tanto más cuanto más complicada sea la red)

Veremos cómo resolver este problema en algunos casos; obtendremos soluciones exactas y aproximadas

⁷La suma es sobre todos los valores posibles de N_A , primero, y luego sobre todos los N_{AA} compatibles con el N_A en cuestión.

Modelo Lenz-Ising y variantes

Al tiempo que Uhlenbeck+Goudsmit convencían de que electrón tenía espín $\frac{1}{2}$, y su dirección estaba cuantizada en presencia de campo magnético, Lenz (1920) propuso a su alumno doctoral Ising explicar ferromagnetismo a partir del concepto espín.

Lenz intuyó que considerando interacción entre los espines en una red cristalina, de modo que primase el que los espines próximos fuesen paralelos y desfavoreciese cuando fuesen antiparalelos, podía esperarse estabilidad de un estado ordenado a T 's suficientemente bajas, cuando interacción predominase sobre agitación térmica.

Si esto ocurría por debajo de una T bien definida, se tendría el primer modelo microscópico del ferromagnetismo.

Concretamente, Lenz propuso el hamiltoniano

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - \mathcal{H} \sum_i s_i,$$

con la interpretación

$$s_i = \begin{cases} +1 & \text{espín 'up'} \\ -1 & \text{espín 'down'} \end{cases},$$

es decir, los dos posibles estados de un espín- $\frac{1}{2}$

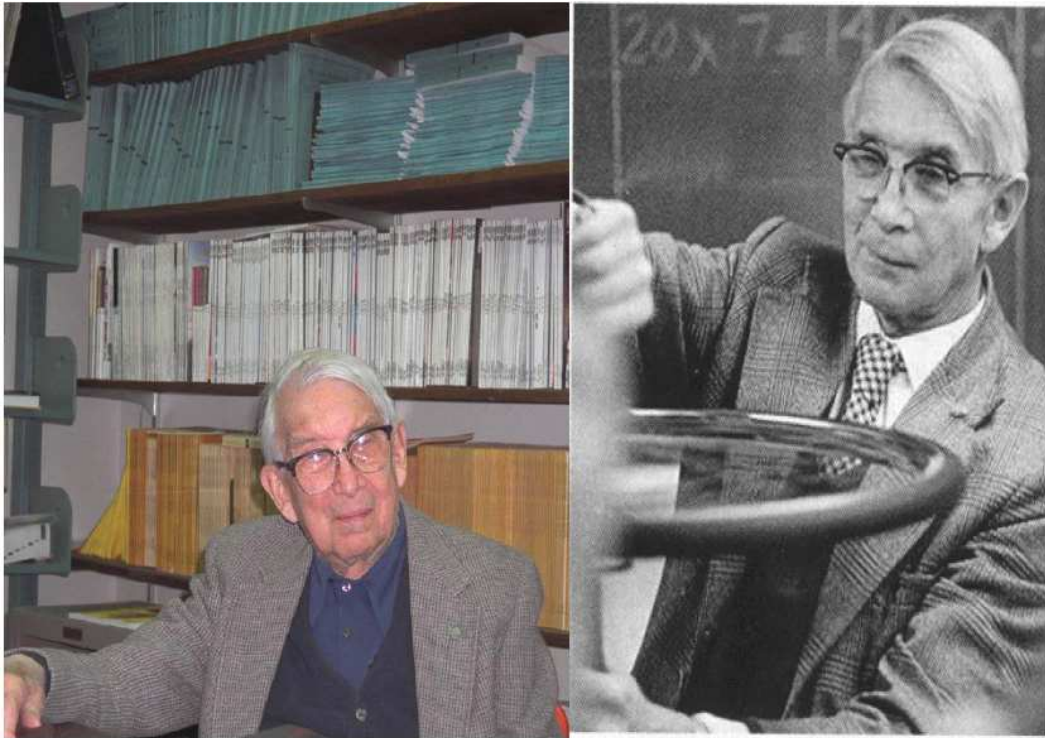
Notad que requiere una notable intuición en la época el que un tratamiento tan simplificado de las interacciones entre los espines de los electrones tendría que explicar la \exists de magnetización espontánea por debajo de cierta T en algunos materiales.

Se espera, pues, que $Z_N(T, \mathcal{H} = 0)$ describa transiciones entre configuraciones paramagnéticas (espines desordenados, luego 'magnetización' $M = 0$) a T 's altas y configuraciones ferromagnéticas (con

$M \neq 0$) o antiferromagnéticas a bajas T 's.

Este modelo puede resolverse exactamente para $d = 1$ y 2 .

Ising (1925) lo resolvió para $d = 1$, con el resultado de que no hay transición a T finita, es decir, $T_C = 0$.



Ernst Ising (1900-1998) demostró⁸ que el modelo unidimensional no presentaba la transición esperada, y no reparó en el papel fundamental de la dimensión en este problema. Este fallo (aparente) llevó a Heisenberg a proponer una interacción más complicada entre espines, que consideró vectoriales. Pero Peierls demostró la \exists de estados ordenados en el modelo de Ising en $d = 2$ a bajas T 's y Onsager presentó el primer cálculo exacto de la función de partición del modelo de Ising con una red cuadrada en ausencia de campo. El caso $d = 3$ sigue sin solución exacta.

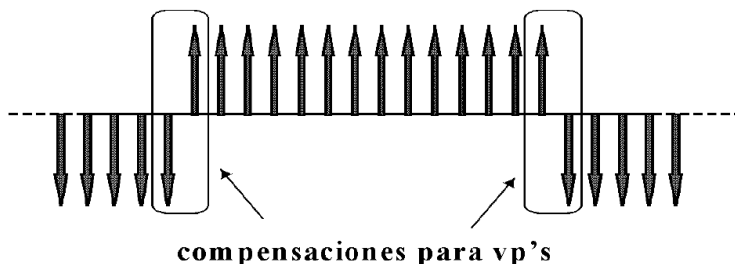
⁸Wilhelm Lenz (1888-1957) introdujo el modelo en
W. Lenz, *Phys. Zeitschrift* **21**, 613 (1920).

La solución para $d = 1$, y su extensión —errónea— a $d = 3$, aparecieron en
E. Ising, Thesis (in German), Hamburg, 1924, y
E. Ising, *Zeitschrift f. Physik* **31**, 253 (1925)

Los otros trabajos pioneros que se mencionan son
W. Heisenberg, *Zeitschrift f. Physik* **49**, 619 (1928)
R. Peierls, *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **32**, 477 (1936)
L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944)

Interesantes notas pueden encontrarse en
S.G. Brush, *Rev. Mod. Phys.* **39**, 883 (1967)

Nota: La ausencia de transición en $d = 1$ puede entenderse: Sea estado ordenado, con todos los espines ‘down’. Es posible que una fluctuación térmica del equilibrio invierta una serie de espines consecutivos en la cadena. Esta inversión no puede ser contrarrestada por efecto de los espines no invertidos en los extremos, pues hay tendencias misma intensidad y distinto signo:



En consecuencia, las fluctuaciones pueden destruir, y destruirán, el estado ordenado, es decir, no es estable en $d = 1$ para $T > 0$.

Notad que el mismo argumento es válido si la interacción sobrepasa los vecinos próximos, con tal de que sea de alcance limitado y menor que la anchura de la fluctuación.

La probabilidad de una fluctuación —por grande que ésta sea— es **no nula**, luego el modelo $d = 1$ sólo puede tener $T_C > 0$ para interacciones de alcance ilimitado o infinito.

El argumento falla para $d > 1$, pues las interacciones pueden *propagarse* por otros caminos.

Ising, que calculó exactamente $d = 1$, presentó también un argumento y unos cálculos aproximados (incorrectos) para $d = 2$ y 3 que sugerían ausencia de transición también para esos valores de d .

Heisenberg (1928) se basó en esta supuesta falta de realidad del modelo Lenz-Ising para justificar otro modelo basado en interacciones más complicadas.

Onsager (1944)⁹ presentó la primera solución para $d = 2$ —red

⁹*Phys. Rev.* **65**, 117 (1944); B. Kaufman *Phys. Rev.* **76**, 1232 (1949); B. Kaufman & L. Onsager *Phys. Rev.* **76**, 1244 (1949)

cuadrada—, con vecinos próximos, $\mathcal{H} = 0$. Hoy se considera una de las contribuciones más importantes en física teórica de las últimas décadas: por primera vez —y casi única— se llegaba a reproducir un cambio de fase y fenómenos críticos en el límite $N \rightarrow \infty$ para una interacción razonable; además se sabe ahora que es *extraordinariamente* realista para multitud de fenómenos.

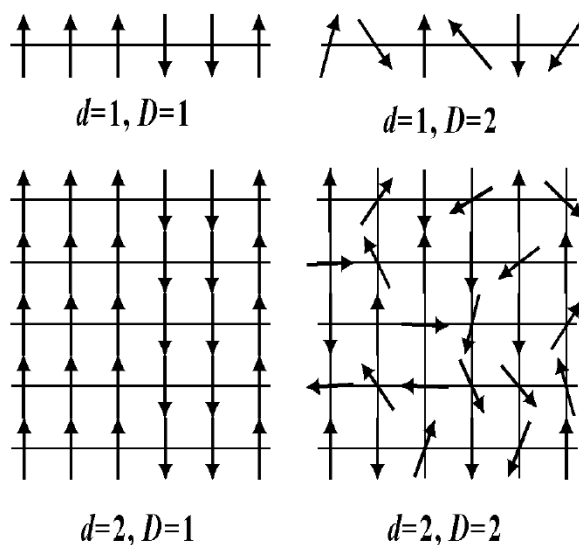
Nunca se ha resuelto en $d = 3$, pero sus propiedades ya se conocen muy bien por métodos aproximados (Monte Carlo + Grupo Renormalización).

Modelo de Heisenberg y variantes.

El hamiltoniano Lenz-Ising (Ising en adelante) tiene su generalización natural en:

$$H = \sum_{i,j; i < j} J_{ij} \vec{s}_i^{(D)} \cdot \vec{s}_j^{(D)} - \vec{\mathcal{H}} \cdot \sum_i \vec{s}_i^{(D)}$$

- las (tres) sumas se extienden a todos los nudos de una red d -dimensional
- la ‘variable de espín’ $\vec{s}_i^{(D)}$ son vectores de módulo unidad D -dimensionales (D puede ser distinto a d)
- Por ejemplo, puede tenerse:



- Las variables $\vec{s}_i^{(D)}$ pueden interpretarse como espines cuantizados,¹⁰ capaces de presentarse en $2s + 1$ estados, con $s = n^\circ$ cuántico de espín; el modelo requiere entonces tratamiento cuántico, con límite clásico para $s \rightarrow \infty$.
- Este hamiltoniano sólo puede tratarse con cierta sencillez matemática en unos pocos casos particulares, no siempre los de mayor interés físico. Afortunadamente, el caso más sencillo ($D = 1, \forall d : \mathbf{Ising}$) es el físicamente más relevante: de hecho, muchas propiedades, incluyendo las *críticas*, sólo dependen débilmente de s .
- ‘**Modelo de Heisenberg**’: $d = D = 3$.

La versión clásica ($s \rightarrow \infty$), fue estudiada por Heller & Kramers (1934) a bajas T 's.

La versión cuántica (s finito; generalmente, se normaliza la magnitud de cada espín dividiendo por $\sqrt{s(s+1)}$), y representa aceptablemente algunos materiales,¹¹ como compuestos ferromagnéticos del europio (EuO, EuS) y los materiales antiferromagnéticos RbMnF₃ y KMnF₃ (incluso MnO, CoO y otros óxidos) tomando $J_{ij} < 0 \forall i, j$, que favorece la alineación antiparalela de espines (formación de super-redes entremezcladas tal que dado un espín en una red, todos sus vecinos próximos están en la otra red) como en estados antiferromagnéticos.

- Para $D > 3$, sigue estando bien definido, y es interesante pues tiene solución exacta cuando:
 - $D \rightarrow \infty$ con $d = 1, 2, 3$, incluso para $\mathcal{H} \neq 0$ e interacciones varias (ej, a vecinos próximos e interacciones de largo alcance de la forma $J(r) \sim r^a, a > d$. Este modelo coincide,¹² en el sentido de que ambos tienen la misma función de partición, con el celebrado **modelo esférico de Kac** (1947), cuyos espines tienen longitud arbitraria (no necesariamente unidad) sólo

¹⁰En realidad, representan el momento angular intrínseco de espín.

¹¹Involucra, sin embargo, algunas propiedades poco realistas: completa isotropía, ausencia de defectos, espines, perfectamente localizados, etc. Ver L. J. de Jongh & A. R. Miedema, *Advances in Physics* **23**, 1 (1974).

¹²Este hecho fue probado por Stanley 1969.

restringida por la condición $\sum s_i^2 = N$

· $d = 1$ para cualquier D

- El caso $D = 2$ (cualquier d) se conoce como el **modelo planar de Heisenberg** o modelo X-Y, estudiado (Vaks & Larkin 1966) en relación con la superfluidez en sistema de bosones

Cristal Magnético

Nos podemos preguntar el por qué el hamiltoniano de Ising o Heisenberg es una buena hipótesis para describir un cristal magnético, en qué pudo basar Lenz su intuición para proponerselo a Ising.

Un cristal magnético ideal puede suponerse constituido por una red cuyos nudos están ocupados por átomos con momento dipolar magnético¹³

$$\vec{\mu} = g \mu_B \vec{s} \quad \text{donde} \quad \begin{cases} g, \mu_B & \text{son constantes} \\ \vec{s} & = \text{m. angular total del átomo, capaz} \\ & \text{de } 2s + 1 \text{ orientaciones} \end{cases}$$

Así, el sistema tiene $(2s + 1)^N$ configuraciones posibles, cada una con cierta energía (sin duda, degenerada) consecuencia de la interacción mutua entre los $\vec{\mu}$ y de éstos con un campo magnético externo.

Limitémonos a sustancias ferromagnéticas. Es un hecho que el ferromagnetismo es principalmente consecuencia del espín (y no del movimiento orbital) electrónico, es decir, $s = \frac{1}{2}$; hay evidencia teórica en este sentido (ej, suponiendo s parámetro ajustable en teoría de Weiss —ver Pathria 393) y los experimentos giromagnéticos —Barnett 1944, Scott 1952— conducen a $g \simeq 2$, como corresponde al electrón.

Así, suponemos $\vec{\mu} = 2\mu_B \vec{s}$ y $s = \frac{1}{2}$, luego hay dos posibles orientaciones del m. magnético, $\mu_z = \pm\mu_B$ (y $s_z = \frac{1}{2}$) y 2^N configuraciones posibles.

¹³Ver lecciones 29,30 y 31

¿Cómo es la interacción entre \vec{s}_i y \vec{s}_j vp's? La mecánica cuántica nos dice que es:

$$K_{ij} \pm J_{ij}, \text{ donde } \begin{cases} K_{ij} = \text{energía directa o culombiana entre los espines} \\ J_{ij} = \text{energía de intercambio, de naturaleza cuántica} \\ + : \begin{cases} \text{para espines 'antiparalelos', es decir, para estado} \\ \text{singlete } \uparrow\downarrow, \text{ antisimétrico, de espín total } S = 0 \end{cases} \\ - : \begin{cases} \text{para espines 'paralelos', es decir, para el estado} \\ \text{triplete } \uparrow\uparrow, \text{ simétrico, de espín tot. } S = 1 \end{cases} \end{cases}$$

Luego, la diferencia de energía entre los estados singlete y triplete es

$$\varepsilon_{\uparrow\uparrow} - \varepsilon_{\uparrow\downarrow} = K_{ij} - J_{ij} - (K_{ij} + J_{ij}) = -2J_{ij}, \quad (1)$$

donde vemos que

$$\begin{aligned} J_{ij} > 0 &\implies \varepsilon_{\uparrow\uparrow} < \varepsilon_{\uparrow\downarrow} \implies \text{se favorece el triplete } \uparrow\uparrow, \rightarrow \text{ pueden} \\ & \text{presentarse estados ferromagnéticos} \\ J_{ij} < 0 &\implies \varepsilon_{\uparrow\uparrow} > \varepsilon_{\uparrow\downarrow} \implies \text{se favorece el singlete } \uparrow\downarrow, \rightarrow \text{ pueden} \\ & \text{presentarse estados antiferromagnéticos.} \end{aligned}$$

Pues bien, el resultado (1) se puede derivar rigurosamente del hamiltoniano de Heisenberg, es decir, es un caso particular de la expresión en éste para la energía de una pareja de vecinos próximos, por ejemplo (el 2 puede incluirse arbitrariamente):

$$\varepsilon_{ij} = -2J_{ij} (\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j),$$

donde ε_{ij} representa indistintamente $\varepsilon_{\uparrow\uparrow}$ o $\varepsilon_{\uparrow\downarrow}$.

En efecto,

$$\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j = \frac{1}{2} \left[(\vec{s}_i + \vec{s}_j)^2 - \vec{s}_i^2 - \vec{s}_j^2 \right]$$

que tiene valores propios¹⁴

$$\frac{1}{2} [S(S+1) - s(s+1) - s(s+1)] = \frac{1}{2} S(S+1) - s(s+1) \equiv \alpha$$

de modo que se tiene para cada una de las posibilidades:

¹⁴De hecho es diagonal en la base $|s_i, s_j, S, m\rangle$ con $\vec{S} = \vec{s}_i + \vec{s}_j$.

$$\begin{aligned} \text{triplete } (s = \frac{1}{2}, S = 1) : \quad & \alpha = \frac{1}{4}, \quad \varepsilon_{\uparrow\uparrow} = -2J_{ij} \left(\frac{1}{4}\right) \\ \text{singlete } (s = \frac{1}{2}, S = 0) : \quad & \alpha = -\frac{3}{4}, \quad \varepsilon_{\uparrow\downarrow} = -2J_{ij} \left(-\frac{3}{4}\right) \end{aligned}$$

luego

$$\varepsilon_{\uparrow\uparrow} - \varepsilon_{\uparrow\downarrow} = -2J_{ij} \left(\frac{1}{4}\right) + 2J_{ij} \left(-\frac{3}{4}\right) = -2J_{ij}$$

QED¹⁵

En este contexto, Ising equivale a reemplazar el producto

$$\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j = s_{ix}s_{jx} + s_{iy}s_{jy} + s_{iz}s_{jz}$$

por uno de sus términos $s_{iz}s_{jz}$.

◦ Desde un punto de vista matemático esta aproximación se justifica por su sencillez: el modelo no requiere tratamiento cuántico puesto que los operadores resultantes conmutan.

◦ Desde un punto de vista físico, esta aproximación introduce anisotropía: la cuantización sólo ocurre a lo largo del eje z , luego sólo el término $s_{iz}s_{jz}$ es diagonal (y nulos los valores esperados de los otros términos).¹⁶

El término con campo magnético exterior ya ha sido justificado en la lección sobre paramagnetismo: representa la acción de $\vec{\mathcal{H}}$ (en la dirección del eje z) sobre cada espín, lo que produce e. potencial adicional $\mp \mu \mathcal{H}_z$, o bien $-\mu \mathcal{H}_z s_i$ con $s_i = \pm 1$, respectivamente.

Por último, resulta que J_{ij} , aunque es del mismo orden de magnitud que K_{ij} , decrece mucho más rápidamente con la distancia y, de hecho, es relativamente pequeña para vecinos segundos.

¹⁵De hecho, esto es una prueba de consistencia, pero puede demostrarse, salvo una cte. aditiva (K. Stevens, Phys.Rep. 24C, 1 (1976) y apéndice 1 de tesina de Parra), partiendo del hamiltoniano para dos átomos en el q figuren los tnos. de enrgía correspondientes a los electrones de las capas atómicas incompletas. **En definitiva, se entiende el hamiltoniano de Heisenberg.**

¹⁶Se sabe (Matsubara & Matsuda 1956, Betts *et al.* 1968-70) que también es interesante el modelo con dos términos en el hamiltoniano, $s_{ix}s_{jx} + s_{iy}s_{jy}$, pues simula ciertas propiedades del helio y de sustancias ferromagnéticas aislantes.

Otras variantes: Gas reticular.

Sencillas modificaciones, a veces sólo conceptuales, del modelo de Ising permiten aplicarlo a otras situaciones físicas caracterizadas por cooperatividad consecuencia de interacciones.

Caso familiar: interpretar $s_i = \pm 1$ como existencia o no de una partícula en nudo i , de modo que se simula la \exists de un potencial entre partículas:

$$\varphi(r) = \begin{cases} \infty & \text{si } r = 0 \\ -\varepsilon_0 & \text{si } r = a = \text{cte red} \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

que, como muchos potenciales realistas, contiene una parte *esfera dura* y una atracción.

Propuesto por Yang & Lee (1952) para estudiar fluidos y sus transiciones:

- de hecho, interesante cuando $a \rightarrow 0$ y, a los valores así obtenidos para propiedades emergentes, se les añade los términos correspondientes a un gas ideal, que representan energía cinética
- para $\varepsilon_0 > 0$ (atracción), reproduce transición gas-líquido en el punto crítico
- para $\varepsilon_0 < 0$ (repulsión), se favorece distribución alternante de nudos y partículas a bajas T 's, mimetizando la solidificación.

El problema que plantea este modelo puede interpretarse como el de distribuir N_A partículas entre los N nudos de la red con n° de coordinación q , teniéndose una energía total para cada configuración:

$$E = -\varepsilon_0 N_{AA},$$

luego

$$Z_{N_A}(T, N) = \sum_{N_{AA}} g(N_A, N_{AA}) e^{\beta \varepsilon_0 N_{AA}},$$

y el cálculo se reduce, como en Ising, al de la degeneración $g(N_A, N_{AA})$.¹⁷

Para comparar propiamente con el modelo de mezcla binaria, escribimos la función de partición macrocanónica:

$$\begin{aligned}\Xi(T, N, \mu) &= e^{\beta NP} \quad (P = \text{presión}) \\ &= \sum_{N_A=0}^N z^{N_A} Z_{N_A}(T, N) \\ &= \sum_{N_A=0}^N e^{\beta \mu N_A} \sum_{N_{AA}} g(N_A, N_{AA}) e^{\beta \varepsilon_0 N_{AA}}.\end{aligned}$$

Es decir, los dos modelos son matemáticamente equivalentes con las correspondencias:

$$\begin{aligned}z = e^{\beta \mu} &\longleftrightarrow e^{-2\beta(qJ - \mathcal{H})} \\ P &\longleftrightarrow -\left(\frac{G}{N} + \frac{1}{2}qJ - \mathcal{H}\right) \\ \varepsilon_0 &\longleftrightarrow 4J\end{aligned}$$

Es decir, hay perfecto isomorfismo matemático y físico si Ising se plantea en la canónica y gas reticular en la macrocanónica.

Para acabar de explotar esta relación, notemos que, para una mezcla binaria (como vimos):

$$\begin{aligned}E &= \varphi_{AA}N_{AA} + \varphi_{AB}N_{AB} + \varphi_{BB}N_{BB} \\ &= \varphi_{AA}N_{AA} + \varphi_{AB}(qN_A - 2N_{AA}) + \varphi_{BB}\left(\frac{1}{2}qN - qN_A + N_{AA}\right) \\ &= \frac{1}{2}q\varphi_{BB}N + q(\varphi_{AB} - \varphi_{BB})N_A + N_{AA}(\varphi_{AA} - 2\varphi_{AB} + \varphi_{BB})\end{aligned}$$

¹⁷ N hace el papel de volumen total accesible al gas (en unidades de volumen de una celda de la red);

N_{AA} = n° total de parejas de nudos vecinos próximos ocupados;

$g(N_A, N_{AA})$ = n° de formas distintas de distribuir N_A partículas indistinguibles en N nudos, de modo que se obtengan N_{AA} parejas de partículas vp;

la suma extendida a todos los posibles valores de N_{AA} compatibles con los valores dados de N_A y N

En definitiva:

mezcla binaria	gas reticular	Ising ferromagn.
N_A	N_A	N_+
N_B	$N - N_A$	N_-
$\varphi_{AA} - 2\varphi_{AB} + \varphi_{BB}$	$-\varepsilon_0$	$-4J$
$A - \frac{1}{2}q\varphi_{BB}N - q(\varphi_{AB} - \varphi_{BB})N_A$	P	$-\left(\frac{G}{N} + \frac{1}{2}qJ - \mathcal{H}\right)$
	A	

Relevancia física del modelo de Ising:

modelo magnético	{ ferromagnetismo antiferromagnet.
aleación binaria	{ agrupamientos, Al-Zn super-redes, Au-Cu
gas reticular	{ condensación solidificación
sistemas desordenados	{ sists.magn. diluidos interacciones q compiten vidrio de espines campos aleatorios
biología	{ encimas: <i>Thompson</i> , p.177 hemoglobina: ” DNA: ” redes de neuronas: ver
otros	{ invasión, propagación, fuegos,...: M&D votantes: M&D autómatas celulares en hidrodinámica etc

⇒

Contiene la *física* esencial en fenómenos cooperativos, que son muy numerosos; clases de universalidad, Ising muy amplia; simetrías!!

Solución Ising $d=1$: método matricial.

El caso $d = 1$ es muy interesante, a pesar de no presentar cambio de fase (como veremos), puesto que tiene solución exacta y permite estudiar la naturaleza de métodos para tratar problemas más complejos.

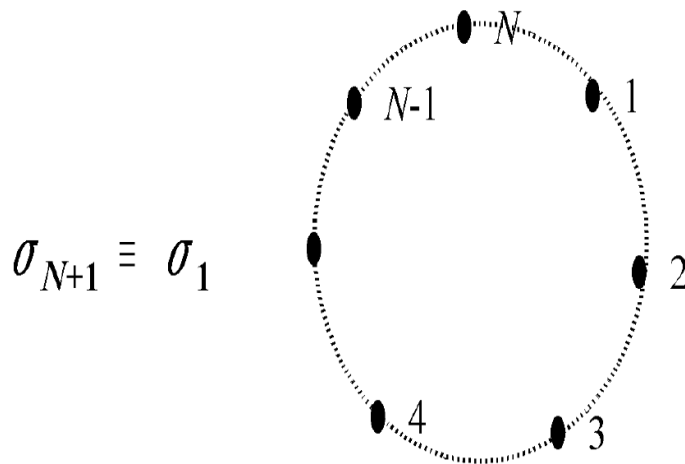
Veamos el método matricial, introducido por Kramers & Wannier (1941) y usado por Onsager (1944) para resolver el caso $d = 2$.

Sea cadena linear con N espines, con interacciones entre vecinos próximos, sometida a un campo magnético externo \mathcal{H} .

La energía de cada configuración es

$$H(\vec{\sigma}) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - \mathcal{H} \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad \vec{\sigma} = \{\sigma_i = \pm 1; i = 1, \dots, N\}$$

Hay condiciones periódicas en los límites de la cadena, luego:



de modo que:

$$\begin{aligned}
H(\vec{\sigma}) &= -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{1}{2} \mathcal{H} \sum_{i=1}^N (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \\
&= - \sum_{i=1}^N \left[J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} \mathcal{H} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right]
\end{aligned}$$

y se tiene:

$$\begin{aligned}
Z(\mathcal{H}, T) &= \sum_{\{\vec{\sigma}\}} e^{-\beta H(\vec{\sigma})} \\
&= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp \left\{ \beta \sum_{i=1}^N \left[J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} \mathcal{H} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \right\}.
\end{aligned}$$

Si definimos la matriz \mathbf{P} de elementos :¹⁸

$$\langle \sigma_i | \mathbf{P} | \sigma_{i+1} \rangle = \exp \left\{ \beta \left[J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} \mathcal{H} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \right\},$$

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+\mathcal{H})} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-\mathcal{H})} \end{pmatrix},$$

se sigue: ¹⁹

$$Z(\mathcal{H}, T) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \langle \sigma_1 | \mathbf{P}^N | \sigma_1 \rangle = \text{traza}(\mathbf{P}^N) = \lambda_+^N + \lambda_-^N,$$

¹⁸Es decir, los posibles elementos de matriz son

$$\langle +1 | \mathbf{P} | +1 \rangle = e^{\beta(J+\mathcal{H})}; \quad \langle -1 | \mathbf{P} | -1 \rangle = e^{\beta(J-\mathcal{H})}$$

$$\langle +1 | \mathbf{P} | -1 \rangle = \langle -1 | \mathbf{P} | +1 \rangle = e^{-\beta J}$$

¹⁹En efecto, teniendo en cuenta la definición de producto de matrices:

$$\begin{aligned}
Z(\mathcal{H}, T) &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \underbrace{\langle \sigma_1 | \mathbf{P} | \sigma_2 \rangle}_{=1} \underbrace{\langle \sigma_2 | \mathbf{P} | \sigma_3 \rangle}_{=1} \langle \sigma_3 | \cdots \\
&\quad \times \cdots \underbrace{\langle \sigma_{N-1} | \mathbf{P} | \sigma_N \rangle}_{=1} \underbrace{\langle \sigma_N | \mathbf{P} | \sigma_1 \rangle}_{=1}
\end{aligned}$$

donde λ_{\pm} son los valores propios de la matriz \mathbf{P} , esto es las soluciones de la ec secular:

$$\begin{vmatrix} e^{\beta(J+\mathcal{H})} - \lambda & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-\mathcal{H})} - \lambda \end{vmatrix} = 0,$$

de donde:

$$\lambda^2 - 2\lambda e^{\beta J} \cosh(\beta\mathcal{H}) + 2 \sinh(\beta J) = 0,$$

cuyas soluciones son

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J} \cosh(\beta\mathcal{H}) \pm \sqrt{e^{2\beta J} \cosh^2(\beta\mathcal{H}) - 2 \sinh(2\beta J)}$$

o, equivalentemente:

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J} \left[\cosh(\beta\mathcal{H}) \pm \sqrt{e^{-4\beta J} + \sinh^2(\beta\mathcal{H})} \right].$$

En esta última expresión vemos que, al ser el radicando positivo para todo \mathcal{H} , se tiene $\lambda_+ > \lambda_-$. Además al ser el radicando menor que $e^{2\beta J} \cosh^2(\beta\mathcal{H})$, se tiene que las dos soluciones son definidas positivas.

Por lo tanto $\lambda_+ > \lambda_- > 0$, y sólo el mayor es relevante en el límite termodinámico, es decir,

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \ln Z(\mathcal{H}, T) &= \frac{1}{N} \ln(\lambda_+^N + \lambda_-^N) = \frac{1}{N} \ln \left(\lambda_+^N \frac{\lambda_+^N + \lambda_-^N}{\lambda_+^N} \right) \\ &= \ln \lambda_+ + \frac{1}{N} \ln \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right] \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \ln \lambda_+ \end{aligned}$$

En definitiva:

$$\frac{1}{N} \ln Z(\mathcal{H}, T) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{J}{kT} + \ln \left[\cosh(\beta\mathcal{H}) + \sqrt{e^{-4\beta J} + \sinh^2(\beta\mathcal{H})} \right],$$

de donde se siguen las propiedades del sistema:

- energía libre de Helmholtz por espín:

$$\begin{aligned} a(\mathcal{H}, T) &= -kT \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z(\mathcal{H}, T) \\ &= -J - kT \ln \left[\cosh(\beta\mathcal{H}) + \sqrt{e^{-4\beta J} + \sinh^2(\beta\mathcal{H})} \right] \end{aligned}$$

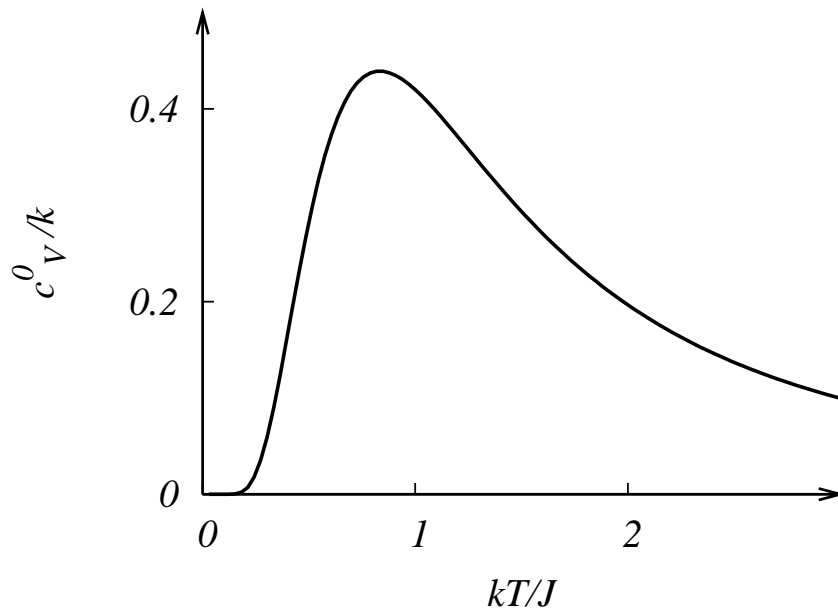
- energía libre en ausencia de campo:

$$\begin{aligned} a(0, T) &= -J - kT \ln(1 + e^{-2\beta J}) \\ &= -kT \ln[2 \cosh(\beta J)] \end{aligned}$$

- calor específico:

$$c_V^0 = -T \left(\frac{\partial^2 a}{\partial T^2} \right)_{N,V} = k(\beta J)^2 \operatorname{sech}^2(\beta J),$$

que se comporta:

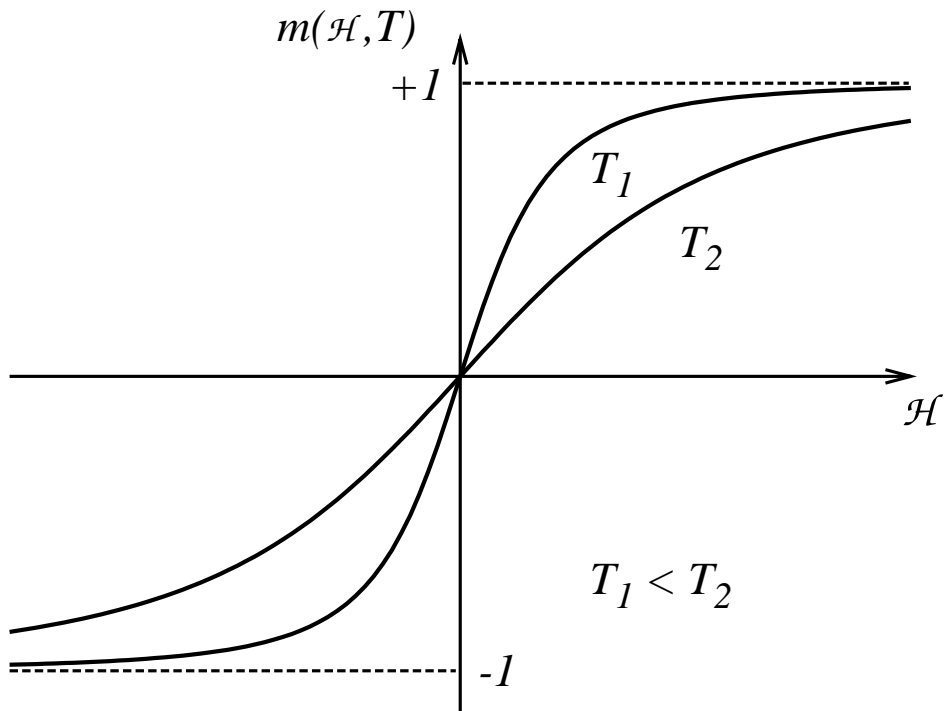


es decir, nunca singularmente (como se esperaría en cambio de fase), sino que tiene pico ancho para $kT/J \sim 1$, lo que indica transición gradual desde orden completo cuando $T = 0$ hacia desorden completo a altas T 's.:

- magnetización por espín.:

$$\begin{aligned}
 m(\mathcal{H}, T) &= - \left(\frac{\partial a}{\partial \mathcal{H}} \right)_T = \frac{1}{\lambda_+} \sinh(\beta \mathcal{H}) \\
 &= \frac{\sinh(\beta \mathcal{H})}{\sqrt{e^{-4\beta J} + \sinh^2(\beta \mathcal{H})}}
 \end{aligned}$$

que se comporta:



lo que contrasta con el caso en el que hay transición a un estado ferromagnético, para el que

$$m(\mathcal{H} = 0, T) \neq 0,$$

es decir, hay magnetización espontánea.

Otras soluciones exactas.

Vamos a citar una serie de modelos con motivación física y matemática que tienen solución exacta:

- El método matricial pudo ser generalizado por **Onsager** — con gran ingenio— para $d = 2$, $\mathcal{H} = 0$, vecinos próximos. Es conveniente/necesario estudiar esta solución (la veremos más adelante). Parte de la bibliografía relevante es:
 - C.J. Thompson, *Mathematical Statistical Mechanics*, Princeton Univ. Press, 1970.

- C. Itzykson & J.M. Drouffe, *Statistical Field Theory*, vol. 1, Cambridge Monographs on Mathematical Physics, 1990.
 - C.J. Thompson, ‘Algebraic Derivation of the Partition Function of a Two-dimensional Ising Model’, *Journal of Mathematical Physics* **6**, 1392-1395 (1965)
 - T.D. Schultz, D.C. Mattis & E.H. Lieb, ‘Two-dimensional Ising Model as a Soluble Problem of Many Fermions’, *Review of Modern Physics* **36**, 856-871 (1964)
 - T.T. Wu, ‘Theory of Toeplitz Determinants and the Spin Correlations of the Two-dimensional Ising Model, I’, *Physical Review* **149**, 380-401 (1966)
 - McKoy & Wu, *The Two-dimensional Ising Model*, Harvard Univ. Press 1973.
 - L.P. Kadanoff, ‘Spin-spin Correlations in the Two-dimensional Ising Model’, *Il Nuovo Cimento* **XLIVB**, 276-304 (1966)
 - R.P. Feynman, *Statistical Mechanics*, Benjamin (1981), p.127.
- La solución de Onsager oculta que se trata simplemente de un **problema combinatorial**, aunque no trivial, como hemos puesto en evidencia anteriormente. Ising resolvió combinatorialmente el caso $d = 1$, $\mathcal{H} = 0$, a vecinos próximos (**Ejercicio**).
 - **Modelo unidimensional de Heisenberg para espín infinito**
 - M.E. Fisher, ‘Magnetism in One-dimensional Systems - the Heisenberg Models for Infinite Spin’, *American Journal of Physics* 343 (1963)

Hamiltoniano:

$$H = -2J \sum_{i=1}^N \vec{s}_i \cdot \vec{s}_{i-1} - g \sum_{i=1}^N \vec{\mathcal{H}} \cdot \vec{s}_i, \quad |\vec{s}| \rightarrow \infty$$

Solución exacta sencilla.

■ **Cadena unidimensional con espines de dimensión arbitraria**

- H.E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford 1971, p. 124.

$$\text{Hamiltoniano: } H^{(D)} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{s}_i^{(D)} \cdot \vec{s}_j^{(D)}$$

Interesante; necesita algo de investigación y es sencillo.

■ **Interacción coulombiana en $d = 1$**

- A. Lenard, ‘Exact Statistical Mechanics of a On-dimensional System with Coulomb Forces’, *J. Math. Phys.* **2**, 682 (1961)²⁰.

Sistema unidimensional de planos infinitos cargados moviéndose perpendicularmente a su dirección. Muy bien explicado.

También interesante por introducir nueva colectividad (presión cte), y usar grafos para calcular la Función de partición y fracciones continuas.

- K.D. Scholte & T.T. Truong, ‘Phase Transition of a One-dimensional Coulomb System’, *Phys. Rev. A* **22**, 2183 (1980)

Planos infinitos cargados en un circuito alternando cargas. Usa colectividad macrocanónica, introduce un interesante truco. Muestra \exists de cambio de fase de 2º orden (excepción —largo alcance— del teorema de van Hove).

- R.J. Baxter, ‘Statistical Mechanics of a One-dimensional Coulomb System with a Uniform Charge Background’, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **69**, 779 (1963)

Similar al caso de Lenard. Al incluir sustrato de carga opuesta, es modelo de plasma. Claridad y belleza de la exposición.

■ **Vidrios de espines unidimensionales:**

²⁰Reimpresiones de éste y de otros de los trabajos citados en esta sección en *Mathematical Physics in One Dimension*, E.H. Lieb & D.C. Mattis, Academic Press, New York 1966.

- J. Joffrin, ‘Disordered Systems – Experimental Viewpoint’, *Ill-condensed Matter*, Les Houches 1978, p. 63, North-Holland.

S. Kirkpatrick *et al*, ‘Infinite-ranged Models of Spin-glasses’, *Phys. Rev. B***13**, 4384 (1978)

El sist tiene hamiltoniano $H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} s_i s_j$ con las J_{ij} distribuidas independientemente sobre la red con probabilidad

$$p(J_{ij}) = \frac{1}{J\sqrt{2\pi}} \exp \left[- \frac{(J_{ij} - J_0)^2}{2J^2} \right]$$

lo que genera competencia ferro-antiferro. Motivado por situación en aleaciones magnéticas diluidas como ya vimos. Es muy interesante el uso de la teoría de réplicas.

- D.C. Mattis, ‘Solvable Spin Systems with Random Interactions’, *Physics Letters A***56**, 421 (1976)
- P.W. Anderson, ‘Lectures on Amorphous Systems’, *Ill-condensed Matter*, Les Houches 1978, p. 159, North-Holland.

■ Redes de neuronas

- D.J. Amit, H. Gutfreund & H. Sompolinsky, ‘Spin Glass Models of Neural Networks’, *Phys. Rev. A***32**, 1007 (1985)

J.L. van Hemmen, ‘Spin Glass Models of a Neural Network’, *Phys. Rev. A***34**, 3435 (1986)

Es exactamente igual al modelo de vidrio de espín introducido antes pero ahora

$$J_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^P \xi_i^\mu \xi_j^\mu$$

donde las $\xi_i^\mu = \pm 1$ son configuraciones aleatorias fijas de la red o *memorias*

Además todas neuronas j actúan sobre una dada i con intensidad J_{ij} . Puede resolverse por completo con técnica de réplicas.

■ Modelo de Ising con **energía de intercambio aleatoria**

- C. Fau & B. McCoy, ‘One-dimensional Ising Model with Random Exchange Energy’, *Phys. Rev.* **182**, 614 (1969)
- McKoy & Wu, *The Two-dimensional Ising Model*, Harvard Univ. Press 1973, p. 345.

Notar: no es un vidrio de espines; no hay competencia ferro-antiferro. En $d = 1$:

$$H = - \sum_{n=1}^N J_n s_n s_{n+1} - \mathcal{H} \sum_{n=1}^N s_n$$

Resuelto para N finito. Ecuaciones integrales.

En $d = 2$:

$$H = -J_1 \sum_{jk} s_{j,k} s_{j,k+1} - \sum_{jk} J_j s_{j,k} s_{j+1,k}$$

■ Modelo de Ising diluido

- Stinchcombe, ‘Phase Transitions and Critical Phenomena’, vol. 7, Academic Press (1983)
- Dotsenko & Dotsenko, *Advances in Physics* **32**, 129 (1983)
- Labarta, Marro & Tejada, *J. Phys.* **C19** (1986) (y otros *papers* míos relacionados)

Hamiltoniano:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} s_i s_j$$

con $s_i = 0$ en una fracción p de nudos elegidos al azar (*site dilution*), o $J_{ij} = 0$ en una fracción p de parejas vecinos

próximos (*bond dilution*). Modela impurezas en sistemas reales y es también muy interesante por la dependencia de su comportamiento crítico con d , por ser una especie de percolación a T finita, etc.

■ Gas de Takahashi

- Lieb & Mattis eds., *Mathematical Physics in One Dimension*, Academic Press, New York 1966, p.6
- Thompson, *Mathematical Statistical Mechanics*, Princeton Univ. Press, 1970, p.81

Modelo (gas reticular):

$$\varphi(r) = \begin{cases} \infty & |r| < a \\ \psi(r-a) & 2a > |r| > a \\ 0 & |r| \geq 2a \end{cases}$$

Ilustra, en particular, el teorema de van Hove (potenciales de corto alcance no inducen cambio de fase).

■ Modelo esférico de gas

- Lieb & Mattis eds., *Mathematical Physics in One Dimension*, Academic Press, New York 1966, p.81

Se divide el sistema en celdas, de modo q cada una tenga 1 ó 0 partículas; entre celdas hay un potencial de interacción. Su solución ilustra física interesante.

■ Modelo X-Y

- D.D. Betts, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Domb & Green eds., vol. 6, p. 569

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} (s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y)$$

Interés: $s^x s^y$ no conmutan. Si parámetro de orden es $m = \sum_i s_i^x$, no conmuta con $H \implies$ estado fundamental no es con todos los espines alineados.

■ Teorema de Lebowitz & Penrose

- Thompson, *Mathematical Statistical Mechanics*, Princeton Univ. Press, 1970, p.218

Solución exacta en el límite termodinámico para potencial tipo Kac (alcance infinito pero infinitamente débil)

■ Modelo de Ising cinético

- R.J. Glauber, ‘Time Dependent Statistics of the Ising Model’, *Journal of Mathematical Physics* **4**, 294 (1963)
- Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford 1971, p. 284

Cadena unidimensional exacta. Ecuación maestra; probabilidades de transición resueltas en Ising unidimensional. Dinámica para solución campo medio. *Retardamiento crítico*.

- S.P. Heins, ‘Master Equation for Ising Models’, *Phys. Rev.* **A138**, 587 (1965)
- B. Felderhof, ‘Spin Relaxation of the Ising Chain’, *Reports on Mathematical Physics* **1**, 215 (1971)

Teorema de Peierls.

Veamos los argumentos de Peierls²¹ que, aparte de un interés histórico, como se discutió, se han usado con éxito en otros problemas. Demuestra que debe haber cambio de fase en el modelo de Ising en $d = 2$

Sea red cuadrada con hamiltoniano ferromagnético:

$$H(\vec{\sigma}) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - \mathcal{H} \sum_i \sigma_i, \quad J > 0$$

Sea conjunto finito, Ω , de N_Ω nudos de la red, descrito por H_Ω de la forma anterior, con las sumas restringidas a $i, j \in \Omega$. La función de partición canónica es:

$$Z_\Omega = \sum_{\sigma_1} \cdots \sum_{\sigma_{N_\Omega}} e^{-\beta H_\Omega} = e^{-\beta N_\Omega a_\Omega},$$

donde Z_Ω es real positivo y a_Ω es la energía libre por nudo.

Sabemos que a_Ω es función cóncava de \mathcal{H} , incluso en el lím termodinámico,²² luego la magnetización,

$$m = - \frac{\partial a}{\partial \mathcal{H}},$$

es no-decreciente y bien definida (salvo quizás en conjunto numerable de puntos).²³

Además, implica la definición que

$$H_\Omega(\mathcal{H}, \sigma_i, \sigma_j) = H_\Omega(-\mathcal{H}, -\sigma_i, -\sigma_j) \quad \forall i, j,$$

²¹De hecho, las versiones de Griffiths (1964) y Dobrushin (1965), que eliminan algunos defectos de la prueba original.

²²Vimos el teorema general. Ver Griffiths en Domb & Green, vol. 1, sec. II, B.4, para una demostración explícita en el caso de modelos reticulares.

²³Sabemos (teorema de Yang-Lee) que m es analítica, salvo posiblemente en $\mathcal{H} = 0$, pero conviene evitar usar este resultado pues el argumento de Peierls es aplicable con más generalidad que el T. Yang-Lee.

luego a_Ω es simétrica dada T ,

$$a_\Omega(\mathcal{H}) = a_\Omega(-\mathcal{H}),$$

y se tiene la antisimetría

$$m(-\mathcal{H}) = -m(\mathcal{H}).$$

En definitiva, ha de ser:

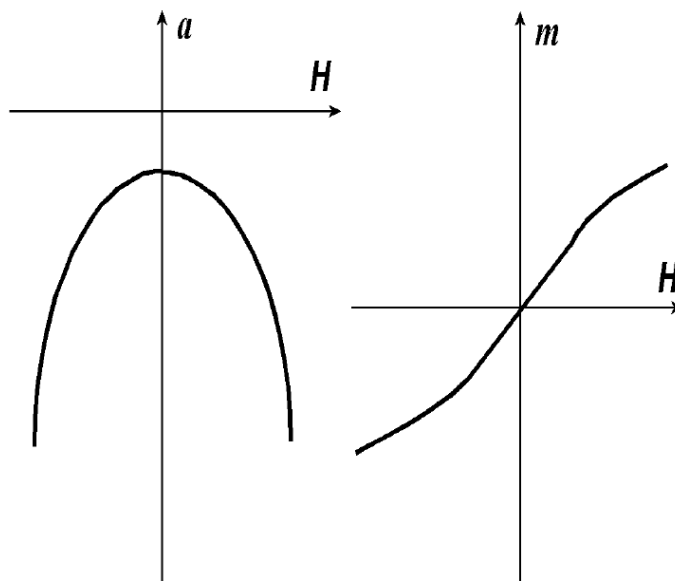


Figura 1

Ahora bien, dadas esas simetrías, se tiene que el límite (para $\mathcal{H} \geq 0$):

$$m_e = \lim_{\mathcal{H} \rightarrow 0^+} m(\mathcal{H})$$

siempre \exists y es no-negativo.²⁴ En Figura 1 es $m_e = 0$, pero lo anterior no excluye la situación representada en la Figura 2, en cuyo caso el sistema presentaría el cambio de fase que se observa en la naturaleza. El teorema de Peierls establece que el modelo de Ising presenta el comportamiento de Figura 2 en ciertas condiciones.

²⁴Según esta definición, m_e sólo depende de a (en el lím-T), luego es independiente de las condiciones en los límites, etc. (ver Griffiths 1966, y tesis de Bortz p.5)

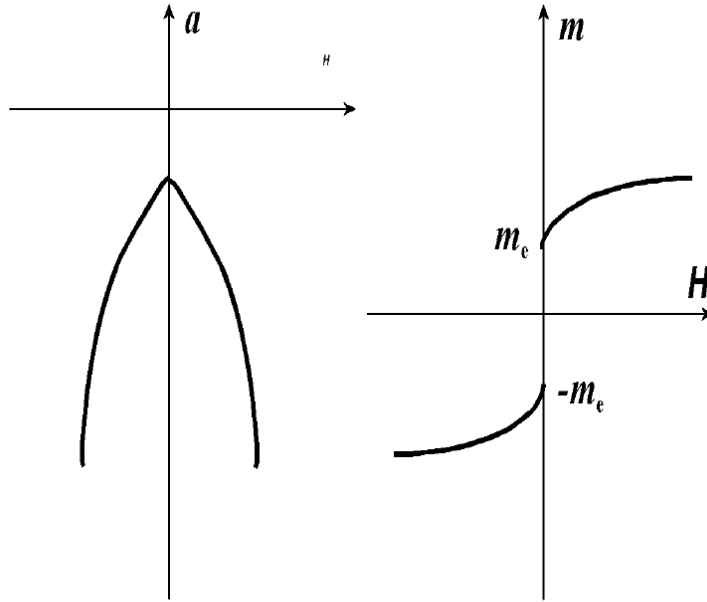


Figura 2

Dividimos la prueba en dos partes:

Parte 1: La magnitud/nudo en sistema **finito** Ω con condición **límite especial** (que indicaremos $\hat{\cdot}$), es decir,

$$\hat{m}_\Omega = - \frac{\partial \hat{a}_\Omega}{\partial \mathcal{H}} = \frac{1}{N_\Omega} \sum_{i \in \Omega} \langle \sigma_i \rangle,$$

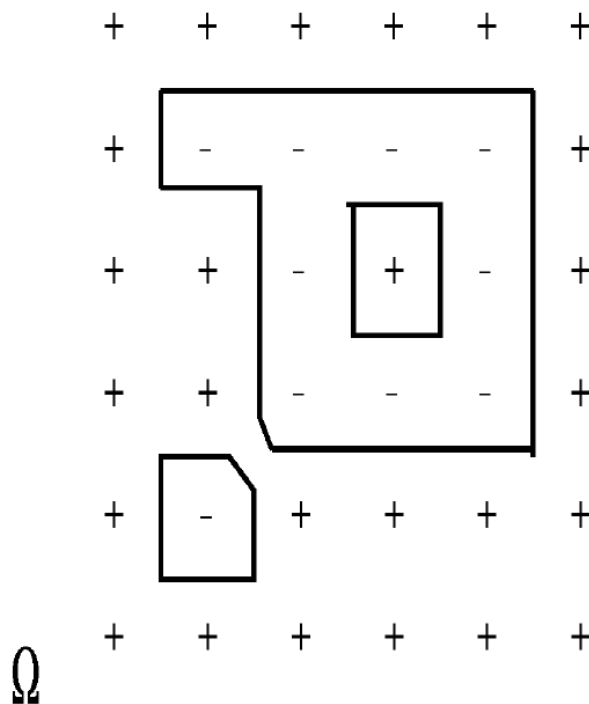
donde la 2^a igualdad es una definición equivalente y $\langle \dots \rangle$ es el promedio canónico²⁵, *en ciertas condiciones, tiene una cota inferior:*

$$\hat{m}_\Omega \geq \alpha \geq 0, \text{ con } \alpha \text{ independiente de } \Omega$$

Parte 2: α es también un límite inferior para m_e (definida antes)

²⁵ $\langle \sigma_i \rangle_\Omega = \text{Tr}(\sigma_i e^{-\beta H_\Omega}) [\text{Tr}(e^{-\beta H_\Omega})]^{-1}$

Parte 1: Sea Ω un cuadrado, y la condición límite especial $\sigma_i = +1$ en todo el contorno del cuadrado,²⁶ como en este ejemplo:



Dada una $\vec{\sigma}$ cualquiera, dibujamos líneas que separen espines con distinta orientación, encerrando los negativos. Con las condiciones límites elegidas, obtendremos polígonos cerrados²⁷ o ‘fronteras’ (físicamente, la *interfase*).

¿Qué propiedades tienen estas fronteras?

- Si $b =$ perímetro (n^o líneas unidad), contiene $\leq (b/4)^2$ espines $-$ (caso de polígono regular sin ‘huecos’).
- Sea ν_b el n^o de fronteras distintas con perímetro b que pueden formarse en Ω (para cualquier $\vec{\sigma}$); las numeramos $j = 1, \dots, \nu_b$. Se tiene con facilidad una cota, por ej:²⁸

$$\nu_b \leq 4N_\Omega 3^{b-1}/b$$

²⁶Los espines del contorno pueden tomarse como parte del sistema o no, pero teniendo siempre en cuenta su interacción con los del interior. Tal tipo de condición sería adecuada para un gas rodeado de vacío o de otras partículas que representarían el contenedor.

²⁷Para evitar ambigüedades será necesario a veces recortar esquinas, como en la figura.

²⁸OJO aclararlo

En efecto, para formar estos polígonos de b lados, podemos partir de un nudo cualquiera de la red, y podemos seguir en cualquiera de las direcciones del espacio, luego hay $4N_\Omega$ formas distintas de empezar en una red cuadrada. Cada uno de los restantes lados puede trazarse, como mucho, en 3 direcciones, pues no puede volverse por el camino recorrido, luego pueden formarse $4N_\Omega 3^{b-1}$ fronteras con longitud b siguiendo este método. Puesto que cualquiera de los b vértices del polígono podría haberse tomado como punto de partida, se sigue $\nu_b \leq 4N_\Omega 3^{b-1}/b$, QED. (Como $b \geq 4$, también puede escribirse $\nu_b \leq N_\Omega 3^{b-1}$, pero no es necesario para el argumento.)

(De hecho, ν_b es menor de lo indicado, pues el polígono ha de ser cerrado, y la frontera no puede cortarse a sí misma, pero no es necesario afinar más en la práctica.)

- Dada una $\vec{\sigma}$, sea

$$X_b^{(j)} = \begin{cases} 1 & \text{si la frontera } (j, b) \text{ está presente en } \vec{\sigma} \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

- El n^o N_- de espines $-$ en cualquier $\vec{\sigma}$ con las condiciones límites elegidas, está acotado:

$$N_- \leq \sum_{b=4,6,\dots} \left(\frac{b}{4}\right)^2 \sum_{j=1}^{\nu_b} X_b^{(j)}$$

y, tomando promedios canónicos:

$$\langle N_- \rangle \leq \sum_{b=4,6,\dots} \left(\frac{b}{4}\right)^2 \sum_{j=1}^{\nu_b} \langle X_b^{(j)} \rangle$$

- Supongamos que podemos determinar la parte derecha aquí y mostrar que es

$$\langle N_- \rangle \leq (1 - \alpha) \frac{N_\Omega}{2}, \quad \alpha \geq 0. \quad (2)$$

En este caso, puesto que

$$\hat{m}_\Omega = \frac{\langle N_+ \rangle - \langle N_- \rangle}{N_\Omega} = 1 - 2 \frac{\langle N_- \rangle}{N_\Omega}, \quad \text{pues } \langle N_+ \rangle + \langle N_- \rangle = N_\Omega$$

se tendría

$$\hat{m}_\Omega = 1 - 2 \frac{\langle N_- \rangle}{N_\Omega} \geq 1 - (1 - \alpha) = \alpha,$$

luego hemos de probar (2).

Para demostrar

$$\langle N_- \rangle \leq (1 - \alpha) \frac{N_\Omega}{2}, \quad \alpha \geq 0 :$$

- Sea $\{\mathbf{C}\}$ el conjunto de todas las $\vec{\sigma}$ en las que aparece una frontera dada, (j, b)
- Sea \mathbf{C}^* la frontera que se obtiene de \mathbf{C} invirtiendo (es decir, $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$) **todos** los espines dentro de esa frontera.²⁹
- Entonces, para $\mathcal{H} = 0$ (el caso en cuestión):

$$H(\mathbf{C}^*) = H(\mathbf{C}) - 2bJ,$$

pues, al hacer $\mathbf{C} \rightarrow \mathbf{C}^*$, el sistema, en los bordes, *pierde* b parejas distintas $(+-)$, cada una con energía $-J\sigma_i\sigma_j = J$, y *gana* b parejas iguales $(++)$, cada una con energía $-J\sigma_i\sigma_j = J$.

- Se sigue que

$$\begin{aligned} \langle X_b^{(j)} \rangle &\equiv \frac{\sum_{\text{toda } \vec{\sigma}} X_b^{(j)} e^{-\beta H}}{\sum_{\text{toda } \vec{\sigma}} e^{-\beta H}} = \frac{\sum_{\{\mathbf{C}\}} e^{-\beta H(\mathbf{C})}}{\sum_{\text{toda } \vec{\sigma}} e^{-\beta H}} \stackrel{\leq}{\text{pues 'toda } \vec{\sigma}' \geq \{\mathbf{C}^*\}} \frac{\sum_{\{\mathbf{C}\}} e^{-\beta H(\mathbf{C})}}{\sum_{\{\mathbf{C}^*\}} e^{-\beta H(\mathbf{C}^*)}} \\ &= \frac{\sum_{\{\mathbf{C}\}} e^{-\beta H(\mathbf{C})}}{e^{+\beta 2bJ} \sum_{\{\mathbf{C}^*\}} e^{-\beta H(\mathbf{C}^*)}} \stackrel{=}{\text{hay correspondencia uno a uno entre } \{\mathbf{C}\} \text{ y } \{\mathbf{C}^*\}} e^{-\beta 2bJ} \end{aligned}$$

²⁹Es decir, en la frontera grande del ejemplo se invierte también el espín central $+ \rightarrow -$.

- En consecuencia:

$$\begin{aligned} \langle N_- \rangle &\leq \sum_{b=4,6,\dots} \left[\left(\frac{b}{4} \right)^2 \right] \left[\sum_{j=1}^{\nu_b} \right] [\langle X_b^{(j)} \rangle] \leq \sum_{b=4,6,\dots} \left[\frac{b^2}{16} \right] \left[\frac{4N_\Omega 3^{b-1}}{b} \right] [e^{-\beta 2bJ}] \\ &= \frac{N_\Omega}{12} \sum_{b=4,6,\dots} b (3 e^{-\beta 2bJ})^b \quad (\text{a comparar con la expresi3n de arriba}) \end{aligned}$$

- Es decir, para completar la prueba (de la **parte 1**) ha de tenerse:

$$\frac{1}{6} \sum_{b=4,6,\dots} b (3 e^{-\beta 2bJ})^b \leq 1 - \alpha$$

que siempre es posible para β suficientemente grande (T peque1a)³⁰, es decir, $\hat{m}_\Omega \geq \alpha \geq 0$, con α independiente de Ω , QED

Parte 2: α es tambi3n un l3mite inferior para $m_e = \lim_{\mathcal{H} \rightarrow 0^+} m(\mathcal{H})$:

- Suponemos el sistema sometido a $\mathcal{H} \geq 0$. Se comprueba inmediatamente que $\hat{m}_\Omega \geq \alpha$ implica $\hat{a}_\Omega(\mathcal{H}) \leq \hat{a}_\Omega(0) - \alpha \mathcal{H}$,³¹ luego

$$\lim_{\Omega \rightarrow \infty} \hat{a}_\Omega(\mathcal{H}) \leq \lim_{\Omega \rightarrow \infty} \hat{a}_\Omega(0) - \alpha \mathcal{H}.$$

³⁰Esto es, la serie converge para $x \equiv 3 \exp(-2\beta J) \ll 1$, es decir, $T \ll 2J(k \ln 3)^{-1}$. En este caso, puede hacerse la suma y se tiene

$$\frac{\langle N_- \rangle}{N_\Omega} \leq \frac{x^4 (2 - x^2)}{6(1 - x^2)^2}.$$

Por ej, si T suficientemente baja tal que $x^2 = \frac{1}{2}$, se tiene $\langle N_- \rangle N_\Omega^{-1} \leq \frac{1}{4} \implies \hat{m}_\Omega \geq \frac{1}{2}$.

³¹Pr ser $\hat{a}_\Omega(\mathcal{H})$ funci3n c3ncava de \mathcal{H} , y \hat{m}_Ω mon3tonamente creciente. De hecho (alternativamente), notad que

$$H_\Omega(\mathcal{H}) = H_\Omega(0) - \mathcal{H} \sum_{i \in \Omega} \langle \sigma_i \rangle = H_\Omega(0) - \mathcal{H} \hat{m}_\Omega N_\Omega \implies H_\Omega(\mathcal{H}) \leq H_\Omega(0) - \alpha N_\Omega \mathcal{H}$$

luego, como $\sum_{\{\bar{\sigma}\}} e^{-\beta H_\Omega} = e^{-\beta N_\Omega a_\Omega}$ se sigue $e^{-\beta N_\Omega a_\Omega(\mathcal{H})} \geq e^{\beta \alpha N_\Omega \mathcal{H}} e^{-\beta N_\Omega a_\Omega(0)}$ QED. La implicaci3n contraria se sigue inmediatamente derivando respecto a \mathcal{H} .

- Pero sabemos que $\lim_{\Omega \rightarrow \infty} \hat{a}_\Omega(\mathcal{H}) = a(\mathcal{H})$, luego

$$a(\mathcal{H}) \leq a(0) - \alpha\mathcal{H}, \quad \mathcal{H} \geq 0,$$

que implica $m_e \geq \alpha$,³² QED

En definitiva, el **T. de Peierls** establece que el modelo de Ising bidimensional con interacciones entre los vecinos próximos ha de presentar magnetización espontánea no-nula (en ausencia de campo aplicado) a T 's suficientemente bajas —en consecuencia, la energía libre (o la presión) tienen una primera derivada discontinua— lo que implica la \exists de un cambio de fase en el sentido usual.

Otras implicaciones, aplicaciones y extensiones del T. de Peierls[1]

- Se puede aplicar de forma sencilla al estudio de la función de correlación $\langle s_i s_j \rangle$ que también marca la \exists del cambio de fase por la divergencia de la longitud de correlación en el punto crítico.
- El teorema de Peierls Se puede extender fácilmente a $d=3$, sin más que sustituir en las fronteras líneas por cuadrados de área a_0^2 , con a_0 la distancia entre nudos, para separar parejas de vecinos próximos con distinta orientación, de modo que las fronteras (*interface*) son ahora poliedros. Prácticamente la única diferencia es que $(b/4)^2$ ha de reemplazarse por $(b/6)^{2/3}$. La extensión a $d > 3$ es trivial.

³²En efecto, se tiene de este resultado, en particular:

$$-\frac{a(\Delta\mathcal{H}) - a(0^+)}{\Delta\mathcal{H}} \geq \alpha$$

luego

$$\lim_{\Delta\mathcal{H} \rightarrow 0} \left[-\frac{a(\Delta\mathcal{H}) - a(0^+)}{\Delta\mathcal{H}} \right] = \lim_{\mathcal{H} \rightarrow 0^+} \left(-\frac{\partial a}{\partial \mathcal{H}} \right) \equiv \lim_{\mathcal{H} \rightarrow 0^+} m(\mathcal{H}) \equiv m_e \geq \alpha.$$

- Más compleja es la extensión al caso de **magnetización constante** (como conviene a las mezclas binarias) con fases separadas. El formalismo adecuado entonces es el canónico (en lugar del macrocanónico que hemos usado hasta ahora). En la práctica, sólo hay que aplicar las relaciones generales entre los dos formalismos. Por ej, la probabilidad de que magnetización = m_Ω es

$$\Pi_{m_\Omega} \propto \sum_{\sigma_1} \cdots \sum_{\sigma_N} P_{m_\Omega} e^{-\beta H_\Omega} = e^{-\beta N_\Omega a_\Omega(m_\Omega)}$$

donde

$$P_{m_\Omega} = \begin{cases} 1 & \text{si } \sum_i \sigma_i = m_\Omega N_\Omega \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

y $a_\Omega(m_\Omega)$ es la energía libre a magnetización fija.

Usando métodos similares a los descritos para la \exists del límite Termodinámico, puede entonces mostrarse que $a_\Omega(m_\Omega) \rightarrow a(m)$ para $\Omega \rightarrow \infty$ si $m_\Omega \rightarrow m$, con $a(m)$ convexa y simétrica en m , y que está relacionada con $a(\mathcal{H})$ por una transformación generalizada de Legendre: $a(m) = \sup_{\mathcal{H}} [a(\mathcal{H}) - m\mathcal{H}]$ dada T .

El TP permite entonces estudiar la propiedades de $a_\Omega(m_\Omega)$ y de su límite $a(m)$, para mostrar la \exists de separación de fases, e incluso describir algunas de las propiedades de las fases separadas (Minlos & Sinai 1967, 1968).

- Extender el TP a **sistemas distintos del Ising** se reduce generalmente a saber encontrar transformación $\mathbf{C} \rightarrow \mathbf{C}^*$ que permita encontrar una cota superior a $\langle X_b^{(j)} \rangle$. Se ha podido estudiar así, por ejemplo, $d = 2$ con:
 - *espín semientero*, $s = n/2$: extensión casi trivial. Se concluye (hacer) que cota superior para T_C tiende a cero cuando $n \rightarrow \infty$. (Luego esta extensión no es muy interesante, salvo por mostrar una de las limitaciones del TP: el modelo tiene transición, pero el TP establece una cota demasiado baja para T_C .)

- *espín entero*, $s = n$: se llega a este mismo resultado, pero la demostración es más complicada (Lebowitz & Gallavotti 1971).

- Se ha extendido al **modelo de Heisenberg**, con interacción isotrópica $E_{ij} = -J \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j / s^2$, si los componentes de \vec{s} no toman valores cuantizados, se sigue una solución equivalente a tomar $s \rightarrow \infty$, y (para $d = 2$ y $J > 0$ —interacción ferromagnética) puede demostrarse que no hay transición (Mermin & Wagner 1966). Podemos plantear aquí un problema interesante: cuánta anisotropía es necesaria para que este modelo presente magnetización espontánea:

- argumentos cualitativos de Bortz (1971), basados en el modelo de gotas de Fisher parecen indicar que cualquier anisotropía es suficiente para que presente transición

- Esto se puede hacer aplicando el TP a un modelo de anisotropía variable que incluye el modelo isotrópico de Heisenberg

$$E_{ij} = -J [s_i^z s_j^z + \alpha (s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y)] / s^2$$

que muestra que \exists cambio de fase para $0 \leq \alpha \leq 0,0298$, y que ha sido también utilizado para estudiar antiferromagnetismo.

Bibliografía

- [1] Otras implicaciones, aplicaciones y extensiones del Teorema de Peierls (TP).

Un cambio de fase —de 2^o orden— puede caracterizarse también por una *sensibilidad especial* de las funciones de correlación a las condiciones límites, aun cuando el sistema sea infinito (es decir, la longitud de correlación diverge en el punto crítico); ver teoremas de Landford y Ruelle (1968). En consecuencia, es interesante comprobar cómo el teorema de Peierls implica esta sensibilidad. En efecto, hemos visto que la condición $\sigma_i = +1$ en los bordes conduce a $\langle \sigma_i \rangle_\Omega \geq A > 0$ para T baja. Pero el mismo argumento puede aplicarse para la condición $\sigma_i = -1$ en los bordes con el resultado de que $\langle \sigma_i \rangle_\Omega \leq -A$ para T baja. De estos hechos, puede llegar a inferirse tal sensibilidad de $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ para $\Omega \rightarrow \infty$.

Por otra parte, notamos que el teorema de Peierls puede extenderse inmediatamente al caso $d = 3$. En este caso, hay que colocar cuadrados de área a_0^2 , con a_0 la distancia entre nudos, para separar parejas de vecinos próximos con distinta orientación, de modo que las fronteras (*interfase*) son ahora poliedros. Prácticamente la única diferencia es que $(b/4)^2$ ha de reemplazarse por $(b/6)^{2/3}$. La extensión a $d > 3$ es trivial.

Más compleja es la extensión al caso de **magnetización constante** (como conviene a las mezclas binarias) con fases separadas. El formalismo adecuado entonces es el canónico (en lugar del macrocanónico que hemos usado hasta ahora).

En la práctica, sólo hay que aplicar las relaciones generales entre los dos formalismos. Por ej, la probabilidad de que magnetiza-

ción = m_Ω es

$$\Pi_{m_\Omega} \propto \sum_{\sigma_1} \cdots \sum_{\sigma_N} P_{m_\Omega} e^{-\beta H_\Omega} = e^{-\beta N_\Omega a_\Omega(m_\Omega)}$$

donde

$$P_{m_\Omega} = \begin{cases} 1 & \text{si } \sum_i \sigma_i = m_\Omega N_\Omega \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

y $a_\Omega(m_\Omega)$ es la energía libre a magnetización fija.

Usando métodos similares a los descritos para la \exists del límite Termodinámico, puede entonces mostrarse que $a_\Omega(m_\Omega) \rightarrow a(m)$ para $\Omega \rightarrow \infty$ si $m_\Omega \rightarrow m$, con $a(m)$ convexa y simétrica en m , y que está relacionada con $a(\mathcal{H})$ por una transformación generalizada de Legendre: $a(m) = \sup_{\mathcal{H}} [a(\mathcal{H}) - m\mathcal{H}]$ dada T .

El TP permite entonces estudiar la propiedades de $a_\Omega(m_\Omega)$ y de su límite $a(m)$, para mostrar la \exists de separación de fases, e incluso describir algunas de las propiedades de las fases separadas (Minlos & Sinai 1967, 1968).

Por ej, se demuestra, con espines + en los bordes, que los espines - tienden a agruparse dentro de una gran frontera que, para T 's suficientemente bajas, tiene aproximadamente la forma de un cuadrado.

El sistema resulta entonces homogéneo dentro de esta frontera³³ que se interpreta como la fase líquida, y lo mismo es cierto con la fase vapor. En definitiva, las fronteras de Peierls juegan un papel fundamental en este problema.³⁴

Extender el TP a **sistemas distintos del Ising** se reduce generalmente a saber encontrar transformación $\mathbf{C} \rightarrow \mathbf{C}^*$ que permita encontrar cota superior a $\langle X_b^{(j)} \rangle$. Se ha podido estudiar así, por ejemplo, $d = 2$ con:

o *espín semientero*, $s = n/2$: extensión casi trivial. Se concluye

³³en el sentido de que la distribución de prob de pequeñas fronteras que rodeen 'burbujas' ($\sigma_i = +1$) es independiente de la posición en el sistema.

³⁴R.A. Minlos & Ya. G. Sinai, *Sov. Phys. Dokl.* **12**, 688 (1967)

(hacer) que cota superior para T_C tiende a cero cuando $n \rightarrow \infty$. (Luego esta extensión no es muy interesante, salvo por mostrar una de las limitaciones del TP: el modelo tiene transición, pero el TP establece una cota demasiado baja para T_C .)

◦ *espín entero*, $s = n$: se llega a este mismo resultado, pero la demostración es más complicada (Lebowitz & Gallavotti 1971). En el caso más sencillo, $s = 1$ (3 posibles orientaciones), la $\mathbf{C} \rightarrow \mathbf{C}^*$ que disminuya siempre la energía configuracional no puede ser una simple inversión, pero no es difícil encontrarla (Bortz 1971 p.1526).

◦ para el **modelo de Heisenberg**, con interacción isotrópica $E_{ij} = -J \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j / s^2$, si los componentes de \vec{s} no toman valores cuantizados, se sigue una solución equivalente a tomar $s \rightarrow \infty$, y (para $d = 2$ y $J > 0$ —interacción ferromagnética) puede demostrarse que no hay transición (Mermin & Wagner 1966).³⁵

Podemos plantear aquí un problema interesante: cuánta anisotropía es necesaria para que este modelo presente magnetización espontánea:

- argumentos cualitativos de Bortz (1971), basados en el modelo de gotas de Fisher parecen indicar que cualquier anisotropía es suficiente para que presente transición;
- alternativamente, uno puede estudiar

$$E_{ij} = -J [s_i^z s_j^z + \alpha (s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y)] / s^2,$$

que describe desde total anisotropía (Ising con $s \rightarrow \infty$) para $\alpha = 0$ hasta la isotropía de heisenberg para $\alpha = 1$. Puedo uno convencerse con facilidad (Bortz & Griffiths 1972) de que \exists transición para $0 \leq \alpha \leq 0,0298$, al menos *Éste* es un buen ejemplo de la versatilidad del TP.

Con la misma técnica se han estudiado, por ej, modelo de Ising

³⁵Uno puede plantearse entonces el interesante problema de determinar cuánta anisotropía es necesaria para que este modelo presente magnetización espontánea. Argumentos cualitativos de Bortz (1971) basados en el modelo de gotas de Fisher parecen indicar que cualquier anisotropía es suficiente para que el modelo presente transición.

antiferromagnético (Griffiths, en Domb & Gree II, p. 5-13), modelos no-reticulares y modelos cuánticos, y ciertas propiedades especiales de modelos familiares:

por ej: a T 's suficientemente bajas, todo estado de equilibrio invariante para Ising con $d \geq 2$ e interacciones ferromagn entre vp's es una combinación lineal y convexa de sólo dos estados extremos.

Solución del modelo de Ising en dimensión 2.

La ventaja del método de las matrices de transferencia es que se puede generalizar fácilmente a dos o más dimensiones. Consideremos el caso de dimensión $d=2$. Tomamos una red bidimensional (con m filas y n columnas) sobre un cilindro (condiciones de contorno periódicas en columnas pero no en filas). La energía configuracional del sistema de espines es:

$$H(\mathbf{S}) = -J \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=1}^n s_{i,j} s_{i+1,j} - J \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n s_{i,j} s_{i,j+1} - \mathcal{H} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n s_{i,j} \quad (3)$$

con $s_{i,n+1} = s_{i,1}$.

Defino σ_j la configuración de la columna j , es decir

$$\sigma_j = (s_{1,j}, s_{2,j}, \dots, s_{m,j}) \quad (4)$$

hay 2^m configuraciones posibles para cada columna. La energía configuracional se puede poner como la suma de dos términos:

$$V_1(\sigma_j) \equiv -J \sum_{i=1}^{m-1} s_{i,j} s_{i+1,j} - \mathcal{H} \sum_{i=1}^m s_{i,j} \quad (5)$$

la energía de interacción cada columna j y

$$V_2(\sigma_j, \sigma_{j+1}) \equiv -J \sum_{i=1}^m s_{i,j} s_{i,j+1} \quad (6)$$

la energía de interacción entre la columna j y $j+1$.

El hamiltoniano total queda (teniendo en cuenta que $\sigma_{n+1} = \sigma_1$)

$$H = \sum_{j=1}^n [V_1(\sigma_j) + V_2(\sigma_j, \sigma_{j+1})] \quad (7)$$

La función de partición queda entonces como

$$\begin{aligned}
Z_{n,m} &= \sum_{\{s\}} \exp(-\beta H(\mathbf{s})) \\
&= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} \exp \left[\left(\sum_{j=1}^n \{V_1(\sigma_j) + V_2(\sigma_j, \sigma_{j+1})\} \right) \right] \quad (8) \\
&= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} T(\sigma_1, \sigma_2) T(\sigma_2, \sigma_3) \dots T(\sigma_{n-1}, \sigma_n) T(\sigma_n, \sigma_1) \\
&= \sum_{\sigma_1} T^n(\sigma_1, \sigma_1)
\end{aligned}$$

donde la matriz de transferencia $T(\sigma, \sigma')$ viene dada por

$$\begin{aligned}
T(\sigma, \sigma') &= \exp[-\beta V_1(\sigma)] \exp[-\beta V_2(\sigma, \sigma')] \\
&= \exp \left(\beta J \sum_{i=1}^{m-1} s_i s_{i+1} + \beta \mathcal{H} \sum_{i=1}^m s_i \right) \exp \left(\beta J \sum_{i=1}^m s_i s'_i \right) \quad (9)
\end{aligned}$$

que se puede poner en forma simétrica como (**Ejercicio**)

$$\begin{aligned}
T(\sigma, \sigma') &= \exp[-\frac{\beta}{2} V_1(\sigma)] \exp[-\beta V_2(\sigma, \sigma')] \exp[-\frac{\beta}{2} V_1(\sigma')] \\
&= \exp \left(\frac{\beta J}{2} \sum_{i=1}^{m-1} s_i s_{i+1} + \frac{\beta \mathcal{H}}{2} \sum_{i=1}^m s_i \right) \exp \left(\beta J \sum_{i=1}^m s_i s'_i \right) \\
&\quad \times \exp \left(\frac{\beta J}{2} \sum_{i=1}^{m-1} s'_i s'_{i+1} + \frac{\beta \mathcal{H}}{2} \sum_{i=1}^m s'_i \right) \quad (10)
\end{aligned}$$

que es una matriz $2^m \times 2^m$. Entonces la función de partición queda:

$$Z_{n,m} = \text{Tr} (\mathbf{T})^n = \sum_{j=1}^{2^m} \lambda_j^n \quad (11)$$

donde como antes $\lambda_1 > \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_{2^m}$. Si ahora en el límite termodinámico permitimos que n se aproxime a infinito antes que

m (aunque no es una condición necesaria) entonces

$$\begin{aligned}
a(\mathcal{H}) &= -\frac{1}{\beta} \lim_{m \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{mn} \ln Z_{n,m} \\
&= \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{m} \ln \lambda_1 + \lim_{m \rightarrow \infty} \left[\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{mn} \ln \left(1 + \sum_{j=2}^{2^m} (\lambda_j / \lambda_1)^n \right) \right] \\
&= \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{m} \ln \lambda_1.
\end{aligned} \tag{12}$$

El problema se reduce también a encontrar el autovalor más grande de la matriz \mathbf{T} , pero mientras que para dimensión $d = 1$ se trata de una matriz 2×2 , en dimensión $d = 2$ hay que diagonalizar una matriz $2^m \times 2^m$ con $m \rightarrow \infty$.

El método desarrollado hasta aquí puede ser generalizado a dimensión $d > 2$. Por ejemplo para $d = 3$ definimos σ_j la configuración del plano bidimensional j y contruimos la red mediante estos planos. $V_1(\sigma_j)$ representa ahora la energía de interacción de un plano y $V_2(\sigma_j, \sigma_{j+1})$ la energía de interacción entre los planos j y $j + 1$ y así sucesivamente para dimensiones mayores.

Para campo $\mathcal{H} = 0$ el problema bidimensional fue resuelto por Onsager en 1944 en uno de los artículos más celebrados de las últimas décadas. Ha habido muchas simplificaciones de dicha demostración pero incluso la más simple es bastante complicada. No vamos a demostrar explícitamente la solución de Onsager pero sí vamos a discutir los resultados más relevantes que se derivan de su solución.

Usando algebras de Lie y teoría de grupos, Onsager encontró que el autovalor más grande de la matriz de transferencia con $\mathcal{H} = 0$ es:

$$\lambda_1 = (2 \sinh \nu)^{m/2} \exp\left[\frac{1}{2}(\gamma_1 + \dots + \gamma_{2m-1})\right], \tag{13}$$

donde γ_k se define por la relación

$$\cosh \gamma_k = \cosh 2\nu \coth 2\nu - \cos(k\pi/m) \tag{14}$$

y $\nu = \beta J$.

La energía libre por espín es entonces

$$-\beta a(\mathcal{H} = 0) = \frac{1}{2} \ln(2 \sinh 2\nu) + \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{2m} \sum_{k=0}^{m-1} \gamma_{2k+1}. \quad (15)$$

En el límite $m \rightarrow \infty$ la suma en la expresión anterior se puede sustituir por una integral,

$$-\beta a(0) = \frac{1}{2} \ln(2 \sinh 2\nu) + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \cosh^{-1}(\cosh 2\nu \coth 2\nu - \cos \theta) d\theta \quad (16)$$

y usando la identidad

$$\cosh^{-1} |z| = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \ln[2(z - \cos \phi)] d\phi \quad (17)$$

se tiene

$$-\beta a(0) = \frac{1}{2} \ln(2 \sinh 2\nu) + \frac{1}{2} \ln 2 + \frac{1}{2\pi^2} \iint_0^\pi \ln(\cosh 2\nu \coth 2\nu - \cos \theta - \cos \phi) d\theta d\phi \quad (18)$$

que da la fórmula simétrica de Onsager:

$$-\beta a(0) = \ln 2 + \frac{1}{2\pi^2} \iint_0^\pi \ln[\cosh^2 2\nu - (\sinh 2\nu)(\cos \theta_1 + \cos \theta_2)] d\theta_1 d\theta_2 \quad (19)$$

Podemos calcular la energía interna por espín u

$$u \equiv \frac{U}{N} = \left(\frac{\partial \beta a}{\partial \beta} \right) = J \left(\frac{\partial \beta a}{\partial \nu} \right)$$

$$= -J \coth 2\nu$$

$$\times \left[1 + (\sinh^2 2\nu - 1) \frac{1}{\pi^2} \iint_0^\pi \frac{d\theta_1 d\theta_2}{\cosh^2 2\nu - (\sinh 2\nu)(\cos \theta_1 + \cos \theta_2)} \right] \quad (20)$$

Aquí la integral diverge logarítmicamente en el origen ($\theta_1 = \theta_2 = 0$) cuando $\cosh^2 2\nu = 2 \sinh 2\nu$ (**Ejercicio: demostrarlo**). Hay una singularidad, o cambio de fase, por lo tanto cuando

$$\delta \equiv \cosh^2 2\nu - 2 \sinh 2\nu = 0 \quad (21)$$

es decir cuando $\nu = \nu_c = J/kT_c$ solución a la ecuación

$$\sinh 2\nu_c = 1 \quad (22)$$

Se sigue de esto que la energía interna u es continua en $\nu = \nu_c$ y que en una vecindad de dicho valor viene dada por (**Ejercicio**):

$$u \sim -J \coth 2\nu_c [1 + A(\nu - \nu_c) \ln |\nu - \nu_c|] \quad (23)$$

con A constante. De este resultado se sigue que el calor específico en la vecindad del punto crítico $C = \frac{\partial U}{\partial T}$ presenta una divergencia logarítmica simétrica ($C \sim B \ln |\nu - \nu_c|$) en el punto crítico.

Uno puede determinar la energía interna u de forma exacta calculando de forma exacta la integral obteniendo (**Ejercicio**)

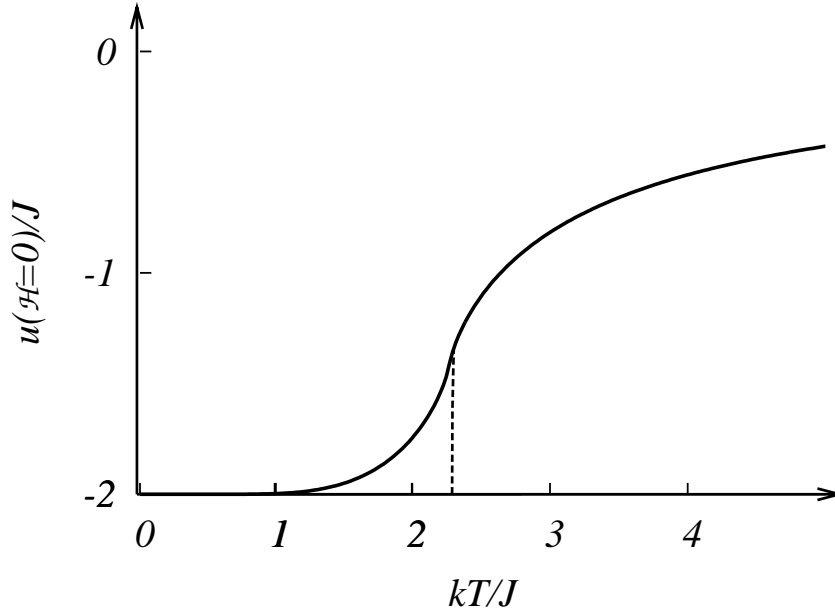
$$u = -J \coth 2\nu \left[1 + (2 \tanh^2 2\nu - 1) \frac{2}{\pi} K(k_1) \right], \quad (24)$$

donde

$$k_1 = \frac{2 \sinh 2\nu}{\cosh^2 2\nu} \quad (25)$$

y $K(k_1)$ es la integral completa elíptica de primera especie definida por

$$K(k_1) = \int_0^{\pi/2} (1 - k_1^2 \sin^2 \theta)^{-1/2} d\theta. \quad (26)$$



El calor específico queda por tanto

$$C = \frac{2k}{\pi} (\nu \coth 2\nu)^2 \left\{ 2K(k_1) - 2E(k_1) - 2(1 - \tanh^2 2\nu) \left[\frac{\pi}{2} + (2 \tanh^2 2\nu - 1)K(k_1) \right] \right\} \quad (27)$$

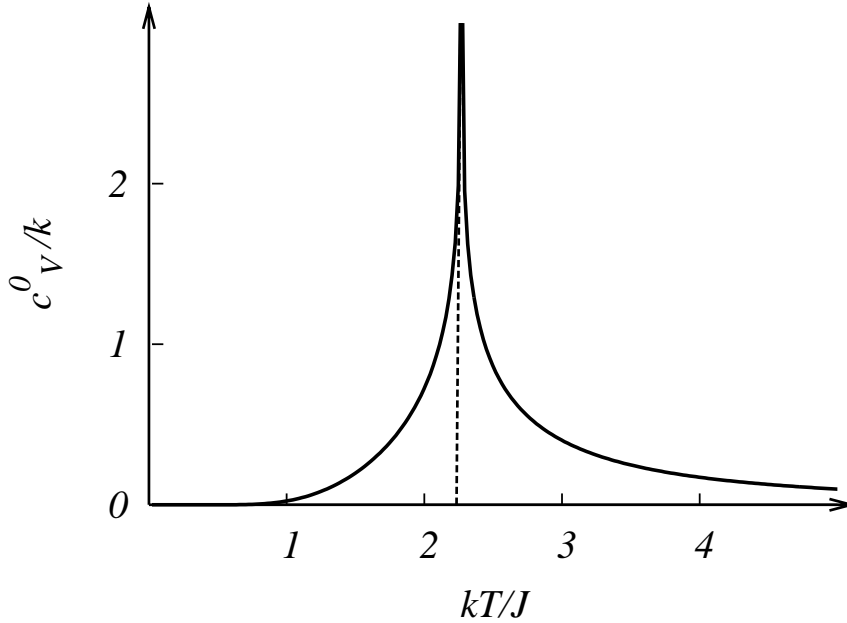
donde $E(k_1)$ es la integral completa elíptica de segunda especie definida como

$$E(k_1) = \int_0^{\pi/2} (1 - k_1^2 \sin^2 \theta)^{1/2} d\theta \quad (28)$$

En la vecindad de $k_1 = 1$ se tiene

$$K(k_1) \sim \ln[4(1 - k_1^2)^{-1/2}] \quad (29)$$

que da la divergencia logarítmica del calor específico.



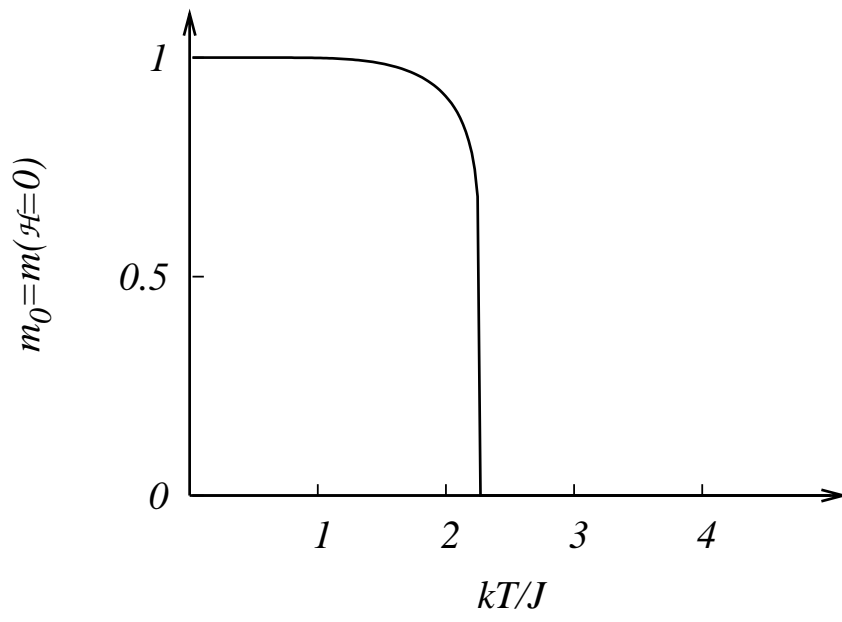
En presencia de un campo magnético el modelo de Ising en dimensión $d = 2$ no ha sido resuelto todavía. Esto es necesario para obtener el comportamiento de la magnetización espontánea cerca del punto crítico que es

$$m_0 = \lim_{\mathcal{H} \rightarrow 0^+} \frac{\partial a(\mathcal{H})}{\partial \mathcal{H}} \quad (30)$$

donde $\lim_{\mathcal{H} \rightarrow 0^+}$ se hace después de hacer el límite termodinámico, lo cual sugiere resolver el modelo de Ising en presencia de campo externo no nulo. Métodos alternativos que no vamos a describir sugieren un comportamiento

$$m_0 = \begin{cases} [1 - (\sinh 2\nu)^{-4}] & T < T_c \\ 0 & T \geq T_c \end{cases} \quad (31)$$

pero nadie ha probado que esta expresión deriva de la definición de m_0 . La expresión (31) fue derivada primero por Onsager en la década de los 40 pero nunca publicó su derivación. No fue hasta el año 1952 cuando C.N. Yang publicó una primera derivación de tal expresión trabajando con campos \mathcal{H} débiles y haciendo después el $\lim_{\mathcal{H} \rightarrow 0^+}$. Tal derivación y otras más recientes son extremadamente complejas, que en vista de la simplicidad del resultado es a la vez sorprendente y frustrante.

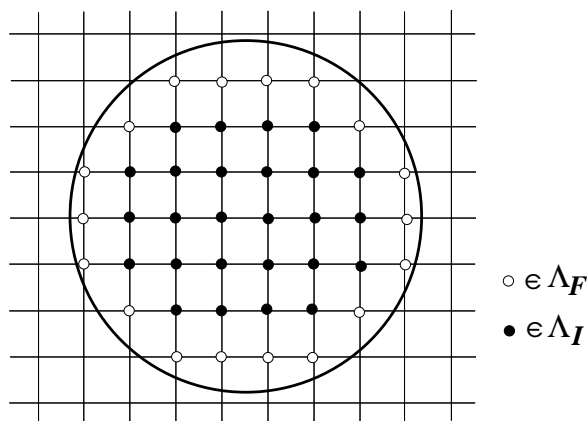


Teorías de Campo medio

Los modelos de magnetismo descritos anteriormente son, en general, difíciles de resolver de forma analítica exacta. El modelo de Ising sólo está resuelto en 1 y 2 dimensiones. Cuando no podemos trabajar de forma analítica podemos hacer simulaciones numéricas del sistema, o bien utilizar aproximaciones. Entre éstas, están las teorías de campo medio y teoría de perturbaciones.

Dada la versatilidad del modelo de Ising (válido para sistemas magnéticos, gas reticular, mezclas binarias, redes neuronales, sistemas biológicos, etc) es interesante hacer un estudio previo de las diferentes aproximaciones que existen en la literatura.

En esta lección vamos a ver un formalismo general para diferentes aproximaciones al modelo de Ising: Consideremos un sistema constituido por N espines en una red d -dimensional Λ , en contacto con un baño a temperatura T (producido por las vibraciones de la red). En un instante de tiempo t , tenemos una configuración de espines $\mathbf{s} = \{s_i = \pm 1, i \in \Lambda\}$ y de interacciones $\mathbf{J} = \{J_{i,j} \in \mathfrak{R}, i, j \in \Lambda\}$. Del conjunto de toda la red diferenciamos un *cluster* (ver figura), Λ_C , constituido por un conjunto Λ_I de nudos que constituyen su *interior*, y el conjunto de vecinos próximos de los mismos o *frontera* Λ_F , es decir:



$$\begin{aligned} \Lambda_C &= \Lambda_I \cup \Lambda_F, & \Lambda_I \cap \Lambda_F &= \emptyset \\ \Lambda_I &= \{i \in \Lambda_C / \text{si } |\mathbf{i} - \mathbf{j}| = 1 \Rightarrow \mathbf{j} \in \Lambda_C\}. \end{aligned} \quad (32)$$

La aproximación de campo medio considera de forma exacta, en el hamiltoniano, la interacción entre espines en el *cluster*. El resto de las interacciones se incluye en un campo medio en el hamiltoniano, desconocido a priori, que se calcula de forma autoconsistente.

Existen diferentes grados u órdenes de aproximación, dependiendo del número de espines que constituyan el cluster. Así si $\text{card}(\Lambda_C) = N$ tendremos el problema exacto. No existe una teoría general que nos dé, a cualquier orden n , la correspondiente aproximación de campo medio. Vamos a ver estudiar los dos primeros órdenes.

A. Aproximación de orden 0 (Bragg-Willians).

Cuando el rango del “orden” se refiere a todo el sistema (orden de largo alcance). La hipótesis principal de la aproximación es que la energía de un “átomo” en cualquier configuración del sistema está determinada por el grado promedio de orden en todo el sistema (campo medio) mas que por las configuraciones fluctuantes de sus átomos vecinos. En este caso las propiedades de la aproximación son insensibles a la estructura o dimensionalidad del sistema:

- tanto mejor cuanto mayor sea la dimensionalidad (mayor número de vecinos q)
- y mayor el rango de la interacción entre espines.

En ambos casos disminuye la importancia de las fluctuaciones. Esta aproximación es equivalente a la teoría del campo molecular de *Curie-Weiss*.

Consideremos un sistema magnético de N espines en los nudos de una red Λ d -dimensional en presencia de un campo magnético externo \mathcal{H} . La energía configuracional del sistema viene dada por,

$$H(\mathbf{s}) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j \in \Lambda} J_{i,j} s_i s_j - \mathcal{H} \sum_{i \in \Lambda} s_i. \quad (33)$$

Vamos a distinguir si la interacción $J_{i,j}$ es a vecinos próximos o no.

Interacción a vecinos próximos:

Suponemos que, dado un espín en la posición i , se tiene para la interacción de intercambio $J_{i,j} = J$, $|\mathbf{i} - \mathbf{j}| = 1$. La hipótesis de campo medio consiste en suponer

$$H(\mathbf{s}) = - \sum_{i \in \Lambda} \mathcal{H}_i s_i \quad (34)$$

con

$$\mathcal{H}_i = \mathcal{H} + \sum_{|\mathbf{i}-\mathbf{j}|=1} J_{i,j} s_j \equiv \mathcal{H} + Jqm, \quad (35)$$

q es el número de coordinación de la red y m el campo medio autoconsistente definido

$$m = \left\langle \frac{1}{q} \sum_{|\mathbf{i}-\mathbf{j}|=1} s_j \right\rangle \quad (36)$$

que representa el efecto de los restantes espines. Vemos que $\mathcal{H}_i = \bar{\mathcal{H}} \forall i$ (no depende de i). La función de partición es

$$Z \equiv \sum_{\mathbf{s}} \exp\{-\beta H(\mathbf{s})\} = 2^N \{\cosh(\beta \bar{\mathcal{H}})\}^N. \quad (37)$$

Podemos ahora calcular m definido por (36), imponiendo que sea igual a la magnetización promedio sobre toda la red, esto es,

$$m = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i \in \Lambda} s_i \right\rangle = \frac{1}{\beta N} \frac{\partial}{\partial \bar{\mathcal{H}}} \ln Z = \tanh(\beta \bar{\mathcal{H}}). \quad (38)$$

Si el campo magnético externo es $\mathcal{H} = 0$, la ecuación anterior queda,

$$m_0 = \tanh(\beta Jqm_0), \quad (39)$$

m_0 es el campo medio para campo externo nulo. La ecuación (39) se resuelve numéricamente, obteniendo la solución trivial $m_0 = 0$, y una solución no trivial $m_0 \neq 0$ para $T < T_c = \frac{Jq}{k}$. Además si $m_0 \neq 0$ es solución, también lo es $-m_0$. El sistema es por tanto ferromagnético por debajo de T_c . A $T = 0$, tenemos totalmente ordenado el sistema. Si subimos la temperatura, las vibraciones en la red hacen que los espines empiecen a orientarse al azar, de forma que $m_0 \rightarrow 0$ cuanto $T \rightarrow T_c$. Para $T > T_c$, $m_0 = 0$, es decir, el sistema se comporta como un material paramagnético \implies tenemos un cambio de fase.

Interacción de largo alcance:

Consideramos ahora $J_{i,j}$ de largo alcance: dos espines situados en posiciones lejanas sienten la interacción de intercambio. Sea $J_{i,j} = \frac{J}{N} \forall i, j \in \Lambda$, siendo J intensivo (\Rightarrow que $H(\mathbf{s})/N$ no diverje en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$). Si llamamos $x(\mathbf{s}) = \frac{1}{N} \sum_{i \in \Lambda} s_i$, el

hamiltoniano queda

$$H(\mathbf{s}) = \frac{J}{2} - \frac{JN}{2}x(\mathbf{s})^2 - \mathcal{H}Nx(\mathbf{s}). \quad (40)$$

La función de partición es

$$Z = \sum_{\mathbf{s}} e^{-\beta H(\mathbf{s})} = e^{-\frac{\beta J}{2}} \sum_{\mathbf{s}} \exp \left\{ \frac{\beta JN}{2}x(\mathbf{s})^2 + \beta \mathcal{H}Nx(\mathbf{s}) \right\}. \quad (41)$$

Utilizando la transformación gaussiana

$$e^{a^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-\frac{y^2}{2} + \sqrt{2}ay}, \quad (42)$$

con

$$a = \left(\frac{\beta JN}{2} \right)^{\frac{1}{2}} x(\mathbf{s}), \quad (43)$$

la función de partición queda

$$Z = e^{\frac{\beta J}{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-\frac{y^2}{2}} \sum_{\mathbf{s}} \exp \left\{ (\beta JN)^{\frac{1}{2}} x(\mathbf{s})y + \beta \mathcal{H}Nx(\mathbf{s}) \right\}. \quad (44)$$

Haciendo el cambio $y = (\beta JN)^{\frac{1}{2}}m$, y realizando la suma sobre configuraciones de espines se tiene

$$Z = 2^N e^{-\frac{\beta J}{2}} \left(\frac{\beta JN}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dm e^{-Nf(m)}, \quad (45)$$

con

$$f(m) = \frac{\beta Jm^2}{2} - \ln \{ \cosh(\beta Jm + \beta \mathcal{H}) \}. \quad (46)$$

En el límite termodinámico, el único término que va a contribuir a Z es el término dominante en la integral, que va a ser el punto de silla, determinado por la ecuación

$$\frac{\partial f(m)}{\partial m} = 0, \quad (47)$$

que da como resultado:

$$m = \tanh(\beta J m + \beta \mathcal{H}). \quad (48)$$

Para campo magnético nulo ($\mathcal{H} = 0$), la magnetización espontánea es

$$m_0 = \tanh(\beta J m_0). \quad (49)$$

Esta ecuación tiene solución no trivial para $T < T_c = \frac{J}{k}$, de forma que tenemos, al igual que para el caso de vecinos próximos, un cambio de fase ferromagnético-paramagnético.

B. Aproximación de orden 1

Esta aproximación se conoce también con el nombre de aproximación de *Bethe-Peierls*. Trata con más precisión la interacción de un espín dado con sus vecinos próximos. Más concretamente considera de forma exacta la interacción de un espín s_{i_0} con sus q vecinos próximos, y el resto de las interacciones en la red a través de un campo medio, que de nuevo obtenemos de forma autoconsistente.

Vamos a considerar de nuevo interacciones de intercambio sólo a vecinos próximos. Llamamos Λ_F al conjunto de espines que son vecinos próximos a s_{i_0} y que constituyen su frontera. El hamiltoniano de Ising queda de la forma

$$\begin{aligned} H(\mathbf{s}) &= -\frac{1}{2} \sum_{|i-j|=1} J_{i,j} s_i s_j - \mathcal{H} \sum_{i \in \Lambda} s_i \approx H_{BP}(\mathbf{s}_{\mathbf{c}}) \\ H_{BP}(\mathbf{s}_{\mathbf{c}}) &= -J s_{i_0} \sum_{j \in \Lambda_F} s_j - \mathcal{H} s_{i_0} - (\mathcal{H} + h) \sum_{j \in \Lambda_F} s_j, \end{aligned} \quad (50)$$

donde $\mathbf{s}_{\mathbf{c}} = \{s_{i_0}, s_j, j \in \Lambda_F\}$. La interacción entre espines que no pertenecen al cluster formado por s_{i_0} y Λ_F , está incluida en el campo medio h (autoconsistente).

La función de partición asociada al hamiltoniano $H_{BP}(\mathbf{s}_{\mathbf{c}})$, viene dada por

$$Z_{BP} = \sum_{\mathbf{s}_{\mathbf{c}}} e^{-\beta H_{BP}(\mathbf{s}_{\mathbf{c}})} \quad (51)$$

que, tras un poco de álgebra, queda de la forma

$$\begin{aligned} Z_{BP} &= Z_+ + Z_- \\ Z_{\pm} &= e^{\pm \beta \mathcal{H}} [2 \cosh\{\beta(\mathcal{H} + h \pm J)\}]^q. \end{aligned} \quad (52)$$

Para determinar el campo h , imponemos que el promedio del espín ha de ser igual en el centro y la frontera del cluster, es decir,

$$\langle s_{i_0} \rangle = \left\langle \frac{1}{q} \sum_{j \in \Lambda_F} s_j \right\rangle. \quad (53)$$

Por definición,

$$\langle s_{i_0} \rangle \equiv \frac{1}{Z_{BP}} \sum_{\mathbf{s}_c} s_{i_0} e^{-\beta H_{BP}(\mathbf{s}_c)} = \frac{Z_+ - Z_-}{Z_{BP}} \quad (54)$$

y, por otra parte,

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{q} \sum_{j \in \Lambda_F} s_j \right\rangle &= \frac{1}{\beta q} \frac{\partial}{\partial h} \ln Z_{BP} \\ &= \frac{1}{Z_{BP}} [Z_+ \tanh\{\beta(\mathcal{H} + h + J)\} \\ &\quad + Z_- \tanh\{\beta(\mathcal{H} + h - J)\}], \end{aligned} \quad (55)$$

que queda como

$$e^{2\beta h} = \left[\frac{\cosh\{\beta(\mathcal{H} + h + J)\}}{\cosh\{\beta(\mathcal{H} + h - J)\}} \right]^{q-1}. \quad (56)$$

ecuación que se resuelve numéricamente, obteniendo h en función T . La magnetización m se puede poner en función del campo medio h , quedando

$$\begin{aligned} m &= \langle s_{i_0} \rangle = \left\langle \frac{1}{q} \sum_{j \in \Lambda_F} s_j \right\rangle \\ &= \frac{\sinh\{2\beta(\mathcal{H} + h)\}}{\cosh\{2\beta(\mathcal{H} + h)\} + e^{-2\beta J}} \end{aligned} \quad (57)$$

con h solución a la ecuación (56).

Estamos interesados en ver si, con esta aproximación, el sistema presenta magnetización espontánea m_0 . La ecuación de autoconsistencia para $\mathcal{H} = 0$ queda de la forma

$$\beta h_0 = \frac{q-1}{2} \ln \left\{ \frac{\cosh(\beta h_0 + \beta J)}{\cosh(\beta h_0 - \beta J)} \right\}. \quad (58)$$

Esta ecuación tiene solución no trivial h_0 y por tanto m_0 (dada por Eq. 57) para $T < T_c$, con

$$T_c = \frac{2J}{k_B \ln \left(\frac{q}{q-2} \right)}. \quad (59)$$

Esto es, se presenta el cambio de fase ferromagnético-paramagnético, al igual que en *Bragg-Williams*, pero mejora sensiblemente el valor de la temperatura crítica (se aproxima más al resultado exacto de Onsager, por ejemplo), y describe mejor las correlaciones en el sistema. (Ver figura 1)

Aproximaciones sucesivas al modelo de Ising consistirían en considerar *clusters*, cada vez con más espines, cuya interacción a vecinos próximos sería tratada de forma exacta, y el resto mediante un campos medios autoconsistentes.

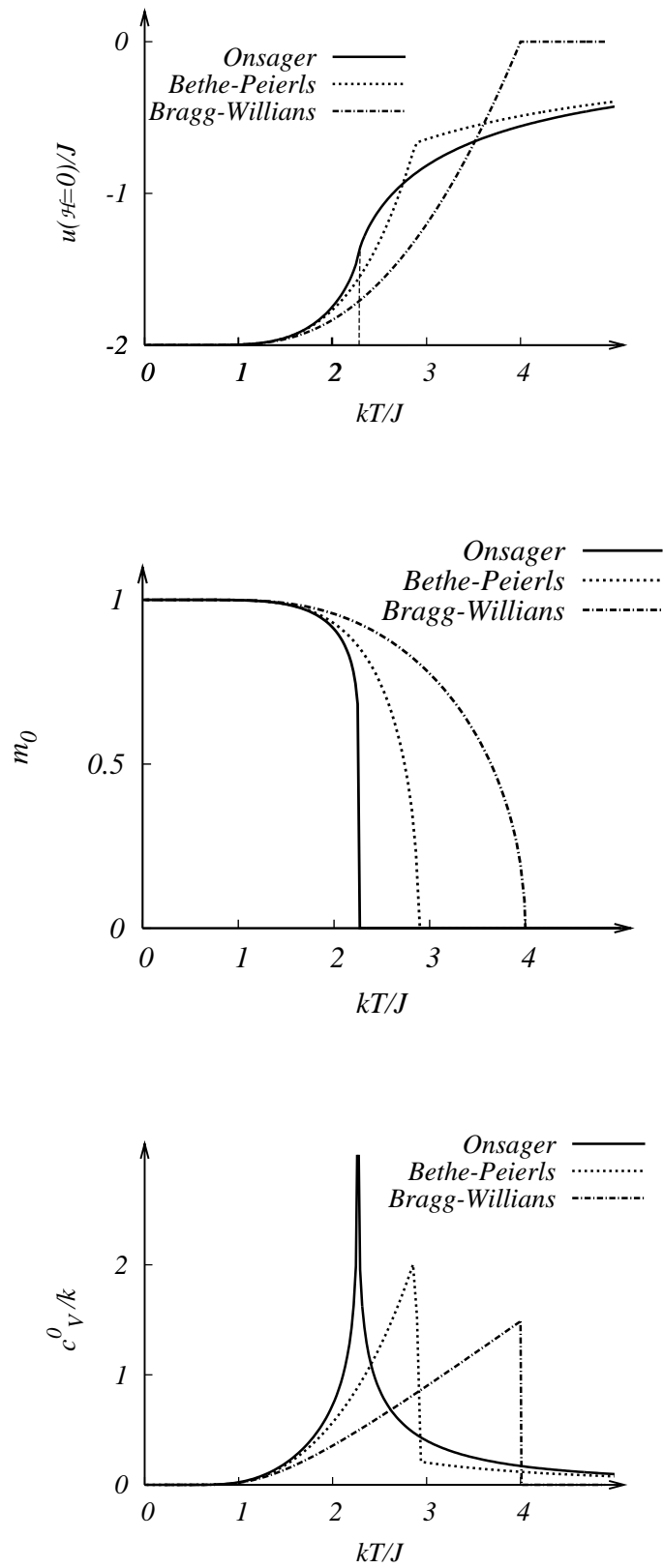


Figura 1: Modelo de Ising en $d = 2$. Soluci3n exacta (—). Aproximaci3n de Bethe-Peierls. (· · ·). Aproximaci3n de Bragg-Willians (- · -)