

## Capítulo 12

# El modelo de Ising

El modelo de Ising <sup>1</sup> es uno de los pocos modelos de partículas interactuantes para el cual se conoce su solución exacta e indudablemente el mas simple de todos ellos. Este modelo tiene enorme interés por diversas razones. Por un lado resulta interesante su papel en el desarrollo histórico de la comprensión del ferromagnetismo y de las transiciones de fase, en cuyo proceso representó un papel fundamental. En segundo lugar, el método de solución en una dimensión presentado por Ising y luego extendido a dos dimensiones por Onsager, constituye la base de diversos métodos modernos de cálculo en la física estadística de los fenómenos críticos. Finalmente, hoy se sabe que el modelo de Ising y generalizaciones del mismo sirven para explicar una variedad de fenómenos, no solo físicos (como veremos mas adelante), como tambien de diversas áreas de la biología.

### 12.1. Modelo de Ising en una dimensión: solución exacta

En una dimensión ( $d = 1$ ) el Hamiltoniano de Ising puede ser escrito de la forma

$$H = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - B \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (12.1)$$

donde  $\sigma_i = \pm 1$  y vamos a utilizar condiciones de contorno periódicas, esto es

$$\sigma_{i+N} = \sigma_i$$

En una dimensión, las condiciones de contorno periódicas son equivalentes a resolver el problema en un anillo. Así, podemos escribir el Hamiltoniano (12.1) de manera mas simétrica:

$$H = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{B}{2} \sum_{i=1}^N (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \quad (12.2)$$

La función de partición canónica viene dada por

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[ K \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2} \sum_{i=1}^N (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \quad (12.3)$$

donde  $K \equiv \beta J$  y  $h \equiv \beta B$ . Notemos que la función de partición puede ser escrita de la forma

$$Z_N = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N T(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \quad (12.4)$$

---

<sup>1</sup>E. Ising, Z. Phys. **31**, 253 (1925).

donde

$$T(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \exp \left[ K \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \quad (12.5)$$

Esta última expresión puede ser interpretada como un elemento de una matriz  $2 \times 2$  simétrica, indexada por los valores de las variables de spin  $\sigma_i = \pm 1$ . Definimos entonces la **matriz de transferencia**:

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} T(+1, +1) & T(+1, -1) \\ T(-1, +1) & T(-1, -1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{K+h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-h} \end{pmatrix} \quad (12.6)$$

Así, podemos escribir la función de partición como

$$Z_N = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_3=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \left( \sum_{\sigma_2=\pm 1} T(\sigma_1, \sigma_2) T(\sigma_2, \sigma_3) \right) T(\sigma_3, \sigma_4) \cdots T(\sigma_N, \sigma_1) \quad (12.7)$$

$$= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_4=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \left( \sum_{\sigma_3=\pm 1} T^2(\sigma_1, \sigma_3) T(\sigma_3, \sigma_4) \right) T(\sigma_4, \sigma_5) \cdots T(\sigma_N, \sigma_1) \quad (12.8)$$

$$\vdots \quad (12.9)$$

$$= \sum_{\sigma_1=\pm 1} T^N(\sigma_1, \sigma_1) \quad (12.10)$$

$$= \text{Tr}(\mathbf{T}^N) \quad (12.11)$$

La matriz  $\mathbf{T}$  es simétrica por construcción y por lo tanto sus autovalores son reales. Si  $\lambda_{\pm}$  son los autovalores de  $\mathbf{T}$  entonces

$$Z_N = \lambda_+^N + \lambda_-^N \quad (12.12)$$

Los autovalores resultan

$$\lambda_{\pm} = e^K \left[ \cosh(h) \pm \sqrt{\cosh^2(h) - 2e^{-2K} \sinh(2K)} \right] \quad (12.13)$$

A campo nulo  $h = 0$  tenemos

$$\lambda_+ = 2 \cosh(K) \geq \lambda_- = 2 \sinh(K) > 0$$

y en general  $\lambda_+ \geq \lambda_- \geq 0$ . Si escribimos

$$Z_N = \lambda_+^N \left[ 1 + \left( \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right] \quad (12.14)$$

tenemos entonces el límite termodinámico  $N \rightarrow \infty$  para la energía libre por partícula

$$f(T, B) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ -\frac{k_B T}{N} \ln Z_N \right] = -k_B T \ln \lambda_+ \quad (12.15)$$

$$= -J - \frac{1}{\beta} \ln \left\{ \cosh(\beta B) + \sqrt{\cosh^2(\beta B) - 2e^{-2\beta J} \sinh(2\beta J)} \right\} \quad (12.16)$$

que es una función analítica de  $T$  y  $B$ . Notemos que, a diferencia de los gases, en este caso el límite termodinámico se toma como  $N \rightarrow \infty$  en lugar de  $V \rightarrow \infty$ . En general al tratar con

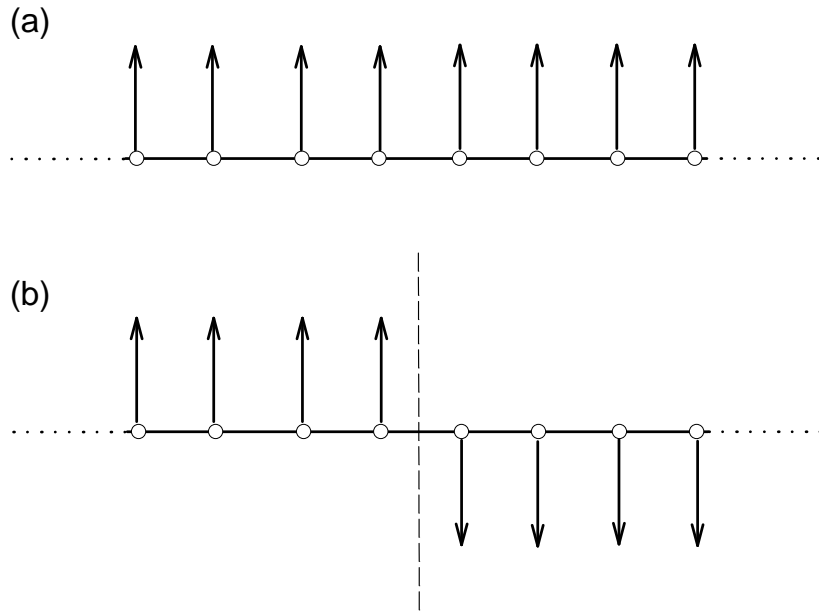


Figura 12.1: (a) Estado fundamental del modelo de Ising unidimensional. (b) Pared de dominio.

modelos en redes  $V$  y  $N$  son variables dependientes, de manera que solo una de ellas es relevante termodinámicamente. Habitualmente se escoge el número de partículas, esto es, el número de sitios en la red.

La magnetización por spin esta dada por

$$m(T, B) = - \left( \frac{\partial f}{\partial B} \right)_T = \frac{\sinh(\beta B)}{\sqrt{\cosh^2(\beta B) - 2e^{-2\beta J} \sinh(2\beta J)}} \quad (12.17)$$

Vemos que  $m \rightarrow 0$  cuando  $B \rightarrow 0$ , para toda  $T \neq 0$ , y por lo tanto este sistema no presenta transición de fase a temperatura finita, esto es, se comporta como un paramagneto a toda temperatura. Podemos calcular tambien la entropía por spin  $s(T, B) = -(\partial f / \partial T)_B$ , y a mediante esta el calor específico a campo constante

$$C_{B=0} = T \left( \frac{\partial s}{\partial T} \right)_{B=0} = -T \left( \frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \right)_{B=0} = \frac{J^2}{k_B T^2} \frac{1}{\cosh^2 \left( \frac{J}{k_B T} \right)} \quad (12.18)$$

que es tambien una función analítica para toda  $T > 0$ .

Existe un argumento atribuido a Landau para mostrar que no es posible tener un estado ordenado a temperatura finita (y, por lo tanto, una transición de fase) en un sistema unidimensional con interacciones de corto alcance. Aplicado al modelo de Ising es como sigue.

El estado fundamental del modelo unidimensional, en ausencia de campo, es una cadena con todos los spines alineados, tal como se muestra en la Fig.12.1a. Este es el mínimo absoluto de la energía. Veamos ahora la configuración de spines de la Fig.12.1b. Esta corresponde a dos *dominios magnéticos*<sup>2</sup> con magnetizaciones opuestas separados por dos *paredes de dominio* (estamos

<sup>2</sup>Un dominio se define como una región conexa con todos los spines alineados. Una pared de dominio es la interface que separa dos dominios.

suponiendo siempre condiciones de contorno periódicas; la extensión del argumento a una cadena abierta es directa). La diferencia de energía entre esta configuración y el estado fundamental es  $\Delta U = 4J$  ( $2J$  es el costo energético de cada pared). Por otra parte, el conjunto de las configuraciones con una pared de dominio tiene una entropía muy grande  $\Delta S = k_B \ln N$ , ya que las paredes pueden ser colocadas en  $N$  posiciones distintas de la cadena (anillo). A temperatura finita, la diferencia de energía libre entre el estado fundamental y el estado con dos dominios de magnetización opuesta es

$$\Delta F = 2J - k_B T \ln N \quad (12.19)$$

En el límite termodinámico  $N \rightarrow \infty$  la expresión anterior se vuelve negativa, favoreciendo por lo tanto la creación de dominios. Dado que la magnetización promedia a cero en el conjunto de configuraciones dos dominios, el estado ordenado resulta inestable frente a un estado de magnetización nula *a cualquier temperatura finita*. El modelo de Ising solo ordena para  $T = 0$ , por lo cual se dice que presenta una transición de fase a temperatura cero.

Este argumento puede extenderse a todo tipo de modelos unidimensionales con interacciones de corto alcance.

## 12.2. Modelo de Ising en dos dimensiones

El modelo bidimensional fue resuelto por primera vez usando la técnica de matriz de transferencia por Onsager <sup>3</sup> con campo nulo y por Yang <sup>4</sup> con campo magnético. Posteriormente fue resuelto por diferentes autores usando diferentes técnicas de cálculo <sup>5</sup>. En cualquiera de ellas, la resolución es muchísimo mas complicada que en el caso unidimensional. Nos limitaremos aquí a presentar los resultados principales y discutiremos sus consecuencias.

En el límite termodinámico (en la red cuadrada y a campo nulo) la energía libre por partícula resulta

$$\beta f(T) = -\ln(2 \cosh 2\beta J) - \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\phi \ln \left[ \frac{1}{2} \left( 1 + \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \phi} \right) \right] \quad (12.20)$$

donde

$$\kappa = \frac{2 \sinh(2\beta J)}{\cosh^2(2\beta J)} \quad (12.21)$$

La energía interna por spin viene dada por

$$u(T) = \frac{\partial(\beta f(T))}{\partial \beta} = -2J \tanh(2\beta J) + \frac{\kappa}{2\pi} \frac{d\kappa}{d\beta} \int_0^\pi d\phi \frac{\sin^2 \phi}{\Delta(1 + \Delta)} \quad (12.22)$$

donde  $\Delta(\phi) = \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \phi}$ . Se verifica facilmente que

$$\int_0^\pi d\phi \frac{\sin^2 \phi}{\Delta(1 + \Delta)} = \frac{1}{\kappa^2} \int_0^\pi \frac{d\phi}{\Delta(\phi)} - \frac{\pi}{\kappa^2} \quad (12.23)$$

Reemplazando en la Ec.(12.22) obtenemos, con algo de trabajo, que

$$u(T) = -J \coth(2\beta J) \left[ 1 + \frac{2}{\pi} \kappa' K_1(\kappa) \right] \quad (12.24)$$

<sup>3</sup>L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944); B. Kaufman, Phys. Rev. **76**, 1232 (1949); B. Kaufman y L. Onsager, Phys. Rev. **76**, 1244 (1949).

<sup>4</sup>C. N. Yang, Phys. Rev. **85**, 809 (1952).

<sup>5</sup>T. D. Schultz, D. C. Mattis y E. H. Lieb, Rev. Mod. Phys. **36**, 856 (1964).

donde

$$K_1(\kappa) \equiv \int_0^{\pi/2} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \phi}} \quad (12.25)$$

es una integral elíptica completa de primera especie y

$$\kappa' \equiv 2 \tanh^2(2\beta J) - 1$$

$$\kappa^2 + \kappa'^2 = 1$$

Derivando la Ec.(12.24) podemos obtener, con cierto trabajo, el calor específico

$$c(T) = \frac{du(T)}{dT} = \frac{2k_B}{\pi} (\beta J \coth(2\beta J))^2 \left\{ 2K_1(\kappa) - 2E_1(\kappa) - (1 - \kappa') \left[ \frac{\pi}{2} \kappa' K_1(\kappa) \right] \right\} \quad (12.26)$$

donde

$$E_1(\kappa) \equiv \int_0^{\pi/2} d\phi \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \phi} \quad (12.27)$$

es una integral elíptica completa de segunda especie.

La integral elíptica  $K_1(\kappa)$  tiene una singularidad en  $\kappa = 1$  ( $\kappa' = 0$ ), en cuyo entorno tenemos que

$$K_1(\kappa) \sim \ln \frac{4}{|\kappa'|}$$

$$E_1(\kappa) \sim 1$$

En dicho punto todas las funciones termodinámicas son no-analíticas. La temperatura crítica resulta entonces de la condición

$$\kappa = \frac{2 \sinh(2\beta_c J)}{\cosh^2(2\beta_c J)} = 1 \quad (12.28)$$

o bien de  $\kappa' = 0$

$$2 \tanh^2(2\beta_c J) = 1 \quad (12.29)$$

de donde resulta

$$k_B T_c / J = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})}. \quad (12.30)$$

Otra relación satisfecha por  $T_c$  es

$$\sinh^2(2\beta_c J) = 1. \quad (12.31)$$

En el entorno de  $T_c$  tenemos entonces que

$$c(T) \sim -\frac{2k_B}{\pi} \left( \frac{2J}{k_B T_c} \right)^2 \ln |\kappa'| \quad (12.32)$$

Pero

$$\kappa' = 2 \tanh^2(2\beta J) - 1 = 2 \tanh^2(2\beta J) - 2 \tanh^2(2\beta_c J) \sim D(T - T_c)$$

donde  $D$  es una constante. Asi

$$c(T) \sim -\frac{2k_B}{\pi} \left( \frac{2J}{k_B T_c} \right)^2 \ln \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right| \quad (12.33)$$

esto es,  $c(T)$  presenta una singularidad logarítmica, en contraste con la predicción de campo medio de una discontinuidad.

El parámetro de orden, esto es, la **magnetización** por partícula es

$$m(T) = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ \left\{ 1 - [\sinh(2\beta J)]^{-4} \right\}^{1/8} & T \leq T_c \end{cases} \quad (12.34)$$

En el entorno del punto crítico tenemos que

$$m(T) \sim [\sinh^4(2\beta J) - \sinh^4(2\beta_c J)]^{1/8} \sim A(T_c - T)^{1/8} \quad (12.35)$$

donde  $A$  es una constante. El exponente crítico del parámetro de orden resulta entonces  $\beta = 1/8$ .

En dimensiones  $d \leq 3$  no se conoce hasta hoy la solución exacta del modelo Ising en ningún tipo de red. Sin embargo, existen numerosas soluciones aproximadas, así como resultados de simulaciones numéricas, las cuales permiten obtener la temperatura crítica y los exponentes críticos en 3 dimensiones. En particular, el exponente crítico para la magnetización resulta independiente del tipo de red cristalina y es  $\beta \approx 1/3$ , en concordancia con el exponente crítico para la transición gas-líquido (la independencia de los exponentes críticos de los detalles microscópicos del sistema se conoce como **universalidad**).

### 12.3. Aproximación de campo medio

Una aproximación no controlada de enorme uso es la que se campo medio y se basa en la teoría del ferromagnetismo de Weiss. Si bien esta aproximación no describe quantitativamente bien los resultados experimentales, es de enorme importancia teórica, debido especialmente a su simplicidad. La misma puede desarrollarse como sigue.

Si consideramos un sistema con invariancia traslacional (red infinita ó finita con condiciones de contorno periódicas), tendremos que la magnetización local  $\langle \sigma_i \rangle$  será  $\langle \sigma_i \rangle = m$  independiente del sitio particular  $i$ , donde  $m$  es la magnetización por spin:

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \sigma_i \rangle$$

Podemos entonces escribir el Hamiltoniano como sigue

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [(\sigma_i - m)(\sigma_j - m) + m(\sigma_i + \sigma_j) - m^2] - B \sum_i \sigma_i \quad (12.36)$$

Sea  $q$  el número de primeros vecinos de un sitio (propiedad de la red particular), el cual se conoce como **número de coordinación**. El Hamiltoniano (12.36) puede escribirse como

$$H = \frac{qN}{2} m^2 J - (qJm + B) \sum_i \sigma_i - J \sum_{\langle i,j \rangle} \Delta \sigma_i \Delta \sigma_j \quad (12.37)$$

donde  $\Delta\sigma_i \equiv \sigma_i - m$  es una variable aleatoria que representa las fluctuaciones en la magnetización del sitio  $i$ . La aproximación de campo medio consiste entonces en despreciar el término de fluctuaciones en el Hamiltoniano (12.37), con lo cual obtenemos

$$H_{cm} = \frac{qN}{2} m^2 J - B_{ef} \sum_i \sigma_i \quad (12.38)$$

donde  $B_{ef} \equiv qJm + B$ . En esta aproximación entonces, el sistema es descrito por un conjunto de spines independientes en presencia de un campo efectivo generado por la magnetización promedio de sus vecinos mas el campo externo. Este corresponde al campo medio o campo molecular introducido por Weiss. La función partición resulta entonces

$$Z_{cm} = \exp(-\beta q N m^2 J / 2) \left[ \sum_{\sigma=\pm 1} e^{\beta B_{ef} \sigma} \right]^N = \exp(-\beta q N m^2 J / 2) [2 \cosh(\beta B_{ef})]^N \quad (12.39)$$

y la energía libre por spin

$$f_{cm} = -\frac{k_B T}{N} \ln Z_{cm} = \frac{1}{2} m^2 J q - k_B T \ln [2 \cosh(\beta B_{ef})] \quad (12.40)$$

Para que la aproximación resulte consistente, al magnetización por spin  $m$  debe resultar

$$m = \langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{Z_{cm}} \text{Tr} \sigma_i e^{-\beta H_{cm}} = \frac{\sum_{\sigma=\pm 1} \sigma e^{\beta B_{ef} \sigma}}{\sum_{\sigma=\pm 1} e^{\beta B_{ef} \sigma}} = \tanh(\beta B_{ef}) \quad (12.41)$$

Así, arribamos a la ecuación autoconsistente para  $m$ :

$$m = \tanh[\beta(qJm + B)] \quad (12.42)$$

la cual se conoce como **ecuación de Curie-Weiss**. La misma puede resolverse gráficamente. Tomemos el caso  $B = 0$ :  $m = \tanh(\beta q J m)$ , cuya solución se ilustra en la Fig.12.2.  $m = 0$  es siempre solución. Cuando la pendiente de la tangente hiperbólica en el origen es mayor que uno, aparecen dos soluciones simétricas  $m = \pm m_0(T)$ . La condición para que ocurra esto último es entonces  $\beta_c J q = 1$  ó  $k_B T_c = q J$ . Es posible ver que la solución  $m = 0$  representa un máximo de la energía libre  $f_{cm}$  para  $T < T_c$ . Así,  $m_0(T)$  corresponde a la magnetización espontánea. Para  $B \neq 0$ , solo existe una solución estable (mínimo absoluto de la energía libre) para cualquier temperatura. Para temperaturas levemente menores que  $T_c$  tendremos que  $m_0 \ll 1$ . Así, podemos desarrollar la Ec.(12.42) con  $B = 0$  como

$$m_0 = \beta q J m_0 + (\beta q J m_0)^3 / 3 + \mathcal{O}(m_0^5)$$

de donde

$$m_0(T) \sim \left[ 3 \left( 1 - \frac{T}{T_c} \right) \right]^{1/2}$$

El exponente crítico para la magnetización en la aproximación de campo medio es por lo tanto  $\beta = 1/2$ . Notemos que este exponente es totalmente independiente de la dimensión de la red (la dimensión en esta aproximación entra solamente a través del número de coordinación  $q$ ), y difiere de los valores exactos para  $d = 2$  (1/8) y  $d = 3$  (1/3). Mas aún, esta aproximación predice una transición de fase incluso para  $d = 1$ . Puede demostrarse que la aproximación de campo medio para el modelo de Ising se vuelve exacta en dimensiones  $d \geq 4$ .

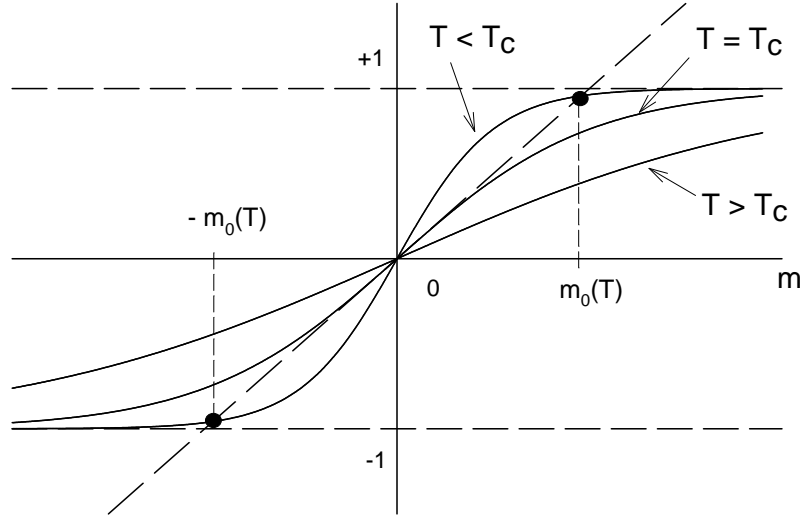


Figura 12.2: Solución gráfica de la ecuación de Curie-Weiss a campo externo nulo  $B = 0$ .

## 12.4. El gas de red

Este es un modelo de partículas interactuantes para describir la transición líquido-gas. En este modelo las partículas solo pueden ocupar posiciones discretas en el espacio. De esta manera, podemos asociar a cada posición un sitio o celda en una red de Bravais con  $N$  sitios. En otras palabras, dividimos el espacio en celdas ubicadas regularmente, tal que cada celda puede alojar a lo sumo una partícula. El número de sitios  $N$  es proporcional al volumen del sistema. Como vimos en el capítulo 6, la función partición canónica puede descomponerse en una parte correspondiente a la energía cinética (gas ideal) y una parte configuracional. En el ensamble gran canónico, la primera puede absorberse dentro del potencial químico. Consideramos entonces solamente la parte configuracional y asumimos un potencial de interacción entre dos partículas del tipo “carozo duro” (es decir, repulsión infinita) a muy cortas distancias y atractiva a distancias intermedias. El potencial de carozo duro impone que en un sitio no puede haber mas de una partícula. Si llamamos  $u(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$  al potencial de interacción entre dos partículas ubicadas en las posiciones  $\mathbf{r}_i$  y  $\mathbf{r}_j$ , entonces:

$$u(r) = \begin{cases} \infty & r = 0 \\ -\epsilon_0 & r = 1 \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases} \quad (12.43)$$

(compare con el potencial de Lennard-Jones visto en el capítulo 6). Asociamos a cada sitio  $i$  una variable  $n_i = 0, 1$ , tal que  $n_i = 0$  corresponde a un sitio vacío y  $n_i = 1$  a un sitio ocupado. Entonces, dada una configuración de  $n$  sitios ocupados  $\{n_1, n_2, \dots, n_N\}$ , con  $\sum_{i=1}^N n_i = n$ , la energía del gas será

$$H_g = -\epsilon_0 \sum_{\langle i, j \rangle} n_i n_j \quad (12.44)$$

y la función gran partición

$$\mathcal{Z}_g = \sum_{n=0}^N \sum_{\{n_i\}} e^{-\beta(H_g - \mu n)} \quad (12.45)$$



donde la suma  $\sum_{\{n_i\}}$  es sobre todas las configuraciones de  $\{n_i\}$  tales que  $\sum_{i=1}^N n_i = n$ .

Hacemos ahora el cambio de variables

$$n_i = \frac{1}{2}(1 + \sigma_i)$$

con  $\sigma_i = \pm 1$ . Tenemos que

$$H_g = -\frac{\epsilon_0}{4} \left[ \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i + \sigma_j) + \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \right] \quad (12.46)$$

donde hemos eliminado los términos constantes. Se define el *número de coordinación* de la red como el número de primeros vecinos de un sitio cualquiera. Tenemos entonces que

$$H_g = -\frac{\epsilon_0}{4} \left[ q \sum_{i=1}^N \sigma_i + \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \right] \quad (12.47)$$

Por otra parte

$$n = \sum_{i=1}^N n_i = \frac{N}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (12.48)$$

y así

$$H_g - \mu n = -\frac{\epsilon_0}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \left( \frac{\mu}{2} + \frac{q\epsilon_0}{4} \right) \sum_{i=1}^N \sigma_i - \frac{\mu N}{2} \quad (12.49)$$

Ademas

$$\sum_{n=0}^N \sum_{\{n_i\}} = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1}$$

Tenemos por lo tanto que

$$\mathcal{Z}_g = \mathcal{Z}_I e^{\beta \mu N/2} \quad (12.50)$$

donde  $\mathcal{Z}_I$  es la función de partición de un modelo de Ising con  $J = \epsilon_0/4$  y  $B = \mu/2 + qJ$ . El potencial gran canónico resulta entonces

$$\Omega_g(T, \mu, V) = -k_B T \ln \mathcal{Z}_g = F_I(T, B = \mu/2 + qJ, N) - \frac{\mu N}{2} \quad (12.51)$$

Si consideramos una red hipercúbica en  $d$  dimensiones con parámetro de red unitario tenemos que  $V = N$ . Así, la presión resulta

$$P = -\frac{\Omega_g}{V} = -f_I(T, B = \mu/2 + qJ) + \frac{\mu}{2} \quad (12.52)$$

donde  $f_I$  es la energía libre por spin. De la Ec.(12.48) obtenemos la segunda ecuación de estado:

$$\rho(T, \mu) \equiv \frac{\langle n \rangle}{N} = \frac{1}{2} [1 + m(T, B = \mu/2 + qJ)] \quad (12.53)$$

donde  $m(T, B)$  es la magnetización por spin.

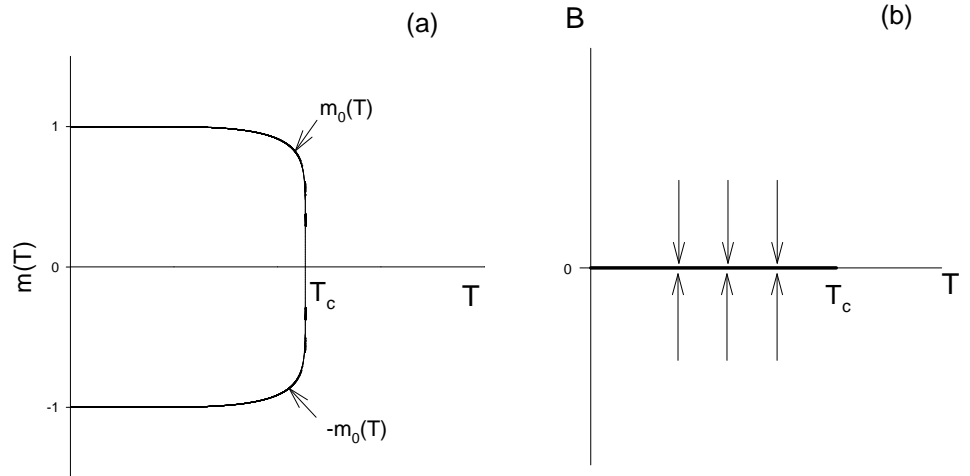


Figura 12.3: (a) Magnetización espontanea del modelo de Ising para  $d \geq 2$ . (b) Línea de transición de primer orden.

El modelo de Ising en dimensiones  $d \geq 2$  presenta una transición de fase de primer orden para  $B = 0$  y  $T < T_c$ , donde el parámetro de orden cambia de manera discontinua de  $m_0(T)$  a  $-m_0(T)$ , siendo  $m_0(T) = \lim_{B \rightarrow 0^+} m(B, T)$  (ver Fig.(12.3)). En la versión gas de red, dicha transición ocurre entre dos estados de diferente densidad

$$\rho(T) = \frac{1}{2} [1 \pm m_0(T)]$$

correspondiendo por lo tanto a las fases líquida y gaseosa.

#### 12.4.1. Ejercicios

1. Incorpore la parte de energía cinética (en la aproximación clásica) a las ecuaciones de estado del gas de red.
2. Resuelva numéricamente la ecuación de Curie-Weiss y grafique las curvas de coexistencia para el gas de red en los espacios  $P$  vs.  $T$  y  $P$  vs.  $v = 1/\rho$ , dentro de la aproximación de campo medio.

### 12.5. Modelo de Ising antiferromagnético

Consideremos el Hamiltoniano de Ising con campo nulo y  $J < 0$ . En este caso la configuración ferromagnética con todos los spins alineados resulta el máximo absoluto de la energía. El mínimo absoluto debería corresponder ahora a una configuración en la cual todo par de spins primeros vecinos se encuentran **anti-alineados**. Es esto posible? Depende de la red. Evidentemente es posible en la red unidimensional, como se muestra en la Fig.(12.4). También es posible en la red cuadrada como se muestra en la Fig.(12.5). ¿Qué tienen en común estas redes? En ambos casos podemos dividir la red en dos subredes A y B, tal que todo sitio de una de las subredes tiene como primeros vecinos solamente sitios de la otra subred. En el caso de la cadena cada subred tiene parámetro de

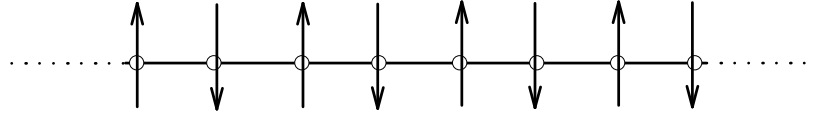


Figura 12.4: Orden antiferromagnético en la cadena lineal.

red 2 (suponiendo el parámetro de la red original 1) y en la red cuadrada cada subred es a su vez una red cuadrada con parámetro de red  $\sqrt{2}$ . Redes que pueden ser subdivididas de esta manera se dicen **bipartitas**. En estas redes el estado fundamental del Hamiltoniano de Ising corresponde a cada una de las subredes en configuraciones ferromagnéticas con magnetización opuesta. Estas configuraciones se conocen como **estados de Néel ó antiferromagnéticos**. A fin de cuantificar el orden antiferromagnético se define como parámetro de orden la **magnetización staggered (alternante)**:

$$m_s \equiv m_A - m_B \quad (12.54)$$

donde

$$m_A = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i \in A} \sigma_i \right\rangle \quad m_B = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i \in B} \sigma_i \right\rangle \quad (12.55)$$

A temperatura cero  $m_s = 1$ . A temperatura finita existe orden antiferro en redes con  $d \geq 2$ , esto es  $m_s(T) \neq 0$  por debajo de cierta temperatura crítica  $T_N$  llamada temperatura de Néel. Para  $T > T_N$  se tiene que  $m_s(T) = 0$ . El estado antiferromagnético tiene magnetización total nula para toda  $T$ .

Consideremos ahora la función partición del modelo de Ising a campo nulo:

$$Z(\beta, J) = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[ \beta J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j \right] \quad (12.56)$$

Introducimos una transformación:  $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i \forall i \in B$ . La función partición permanece invariante, ya que la suma corre sobre todas las configuraciones de spines. Así, tenemos que

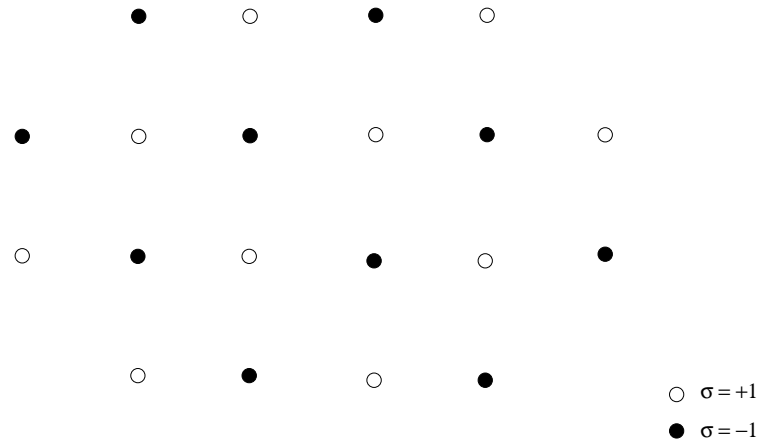


Figura 12.5: Orden antiferromagnético en la red cuadrada.

$$Z(\beta, J) = Z(\beta - J)$$

Por otra parte, la aplicación de esta transformación al cálculo de la magnetización nos da

$$m(\beta, J) = m_s(\beta, -J)$$

Así, las soluciones para el modelo antiferromagnético a campo nulo son completamente simétricas con las del modelo ferromagnético. En particular tendremos que  $T_N = T_c$ , donde  $T_c$  es la temperatura crítica del modelo ferromagnético. Esta simetría se rompe en presencia de campo magnético. En este caso el comportamiento del antiferro es completamente diferente del ferro. En el caso ferromagnético la presencia de campo destruye la transición de fase. En el caso antiferro la transición persiste y el efecto del campo es solamente alterar la temperatura crítica, creando una **línea crítica**, tal como se muestra en la figura 12.6. En este caso el comportamiento de la magnetización  $m$  es la de un paramagneto. De hecho el antiferromagnetismo fue propuesto por primera vez por Néel en 1932 como manera de explicar la susceptibilidad paramagnética de metales como el Cr o el Mn, la cual era mucha mas grande que la predicha por la teoría de Pauli. En años posteriores pudo ser verificada la existencia del antiferromagnetismo mediante difracción de neutrones. Hoy en día se sabe que el antiferromagnetismo es mucho mas frecuente que el ferromagnetismo en la naturaleza.

Finalmente, en redes que no son bipartitas no existe orden antiferromagnético. Tomemos como ejemplo la red triangular y consideremos una celda unitaria. Es imposible hacer que todos los pares esten antialineados. En esta situación el mínimo de energía corresponde a dos spines en una dirección y el tercero en la opuesta. Este estado tiene degeneración 3. En la red completa la situación es parecida, aunque mucho mas compleja. Sistema con estas características se dicen **frustrados**, y estan caracterizados por una degeneración altísima del estado fundamental (infinita, en el límite termodinámico), sin ningun tipo de orden magnético espacial.

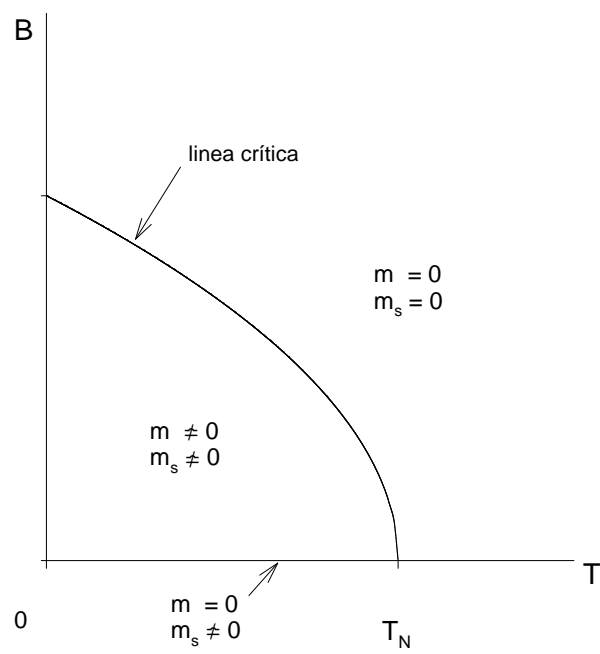


Figura 12.6: Diagrama de fases del modelo de Ising antiferromagnético con campo externo.