Mecánica estadística

Tarea 3: Modelo de Ising - Transiciones de fase

Daniel Alejandro López Martínez.

I. Dualidad

Modelo de Ising bidimensional sobre una red cuadrada. El hamiltoniano:

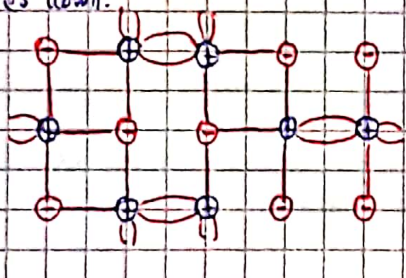
$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

con $J > 0$ interacción entre más próximos únicamente. $\sigma_i = \pm 1$ $\beta = (k_B T)^{-1}$ $L = \beta J$. La red tiene N espines. Condiciones de frontera periódica.

I.1. Desarrollo de baja temperatura.

1. Relación entre s y N.

Para una red cuadrada bidimensional cada partícula tiene 4 vecinos más cercanos. Esto vale si la red es periódica. Pintamos las relaciones que tiene los spines up. Pintando doble línea si el espín vecino es up y 1 si es down.



El número de líneas pintadas es

$$4N_+ = 2N_{++} + N_{-+} \quad (1)$$

N_{++}: # de parejas $++$

N_{-+}: # de parejas $-+$

$$4N_- = 2N_{--} + N_{-+} \quad (2)$$

Lo mismo vale si las líneas son trazadas desde los $--$

$$N_{++} + N_{--} = s - r$$

$$N_{+-} = r$$

Además $N_+ + N_- = N$

Sumando (1) y (2)

$$4(N_+ + N_-) = 2(N_{++} + N_{--}) + 2N_{-+}$$

$$4N = 2(s-r) + 2r = 2s - 2r + 2r = 2s$$

$$\boxed{s = 2N}$$

2.

$$\sum_{\langle i,j\rangle} \sigma_i \sigma_j = N_{++} + N_{--} - N_{+-} = s - r - r = s - 2r$$

$$\boxed{\sum_{\langle i,j\rangle} \sigma_i \sigma_j = s - 2r}$$

3. La función de partición de este sistema es:

$$Z = \sum_{\{\sigma_1\}} \sum_{\{\sigma_2\}} \cdots \sum_{\{\sigma_N\}} e^{\beta J \sum_{\langle i,j\rangle} \sigma_i \sigma_j}$$

donde $\{\sigma_K\} = \{-1, 1\}$. El sistema y sus posibles configuraciones se pueden representar por signos + y − en una matriz:

$$\begin{matrix} + & - & - \\ - & + & - \\ - & + & - \end{matrix} \equiv \begin{matrix} - & + & + \\ + & - & + \\ + & - & + \end{matrix}$$

Estas 2 configuraciones son equivalentes en cuanto al número de pares con espines antiparalelos

r número de pares de espín antiparalelos r

Ahora si se suma sobre todas las configuraciones, varias de las configuraciones con $r = 1$ tienen exponenciales que se suman:

$$Z = 2e^{\beta J \underbrace{(+1+1+\dots+1)}_{s}} + 2e^{\overbrace{-1+1+1+\dots+1}^{s-2r}} + 2e^{+1-1+1+1+1+1\dots+1} + \dots + 2e^{-1-1+1+\dots+1} + \dots$$

↳ pues viene de la equivalencia bajo la inversión de signo

pues el mismo resultado se obtiene con todos los $\sigma_i = +$ o todos $\sigma_i = -$

$$Z = 2e^{\beta J s} + 2e^{\beta J \underbrace{(\overbrace{-1-1-\dots}^{2r}+1+1+\dots)}_{s}} + 2e^{\beta J \underbrace{(\overbrace{-1-1-\dots}^{2r}+1+1+\dots)}_{s}} + \dots$$

Habrá varias exponenciales con r pares antiparalelos, por lo que debemos sumarlas. Todas estas comparten la misma exponencial y su suma será ω_r que es el número de exponenciales con igual número de pares antiparalelos r

$$Z = 2e^{\beta J s} + 2\sum_r \omega_r e^{\beta J(s-2r)} = 2e^{\beta J s}\left(1 + \sum_r \omega_r e^{-2\beta J r}\right)$$

$$\boxed{Z = 2e^{\beta J S}\left(1 + \sum_{r\neq 0} \omega_r e^{-2\beta J r}\right)}$$

4. Como $e^{-2L} < 1$ para $L > 0$, y $L = \beta J$. En particular si la temperatura del sistema es baja $K_B T \ll J \rightarrow 1 \ll \beta J = L$ tenemos: $e^{-2L} \ll 1$ para $1 \ll L$ así la suma $\sum_{r\neq 0} \omega_r e^{-2\beta J r}$ se puede ver como una expansión de baja temperatura en función del parámetro pequeño e^{-2L}

I.2 Red dual

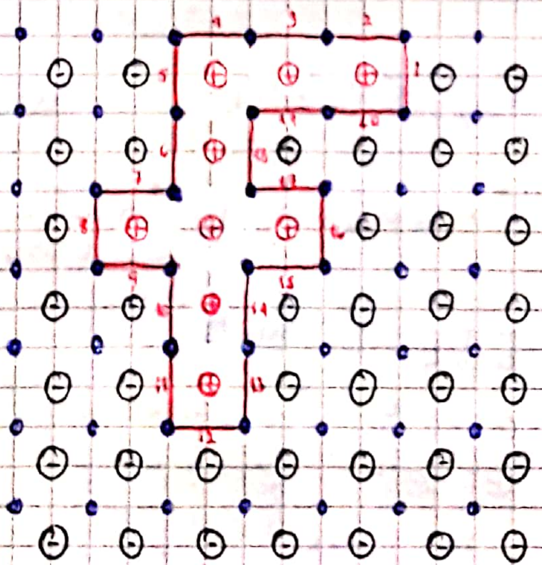
Para la red original el desarrollo a alta temperatura de la función de partición da:

$$Z(T) = 2^N (\cosh L)^S \left[1 + \sum_n \Omega_n (\tanh L)^n\right]$$

Ω_n es el número de gráficos compuestos de n barras, que contribuyen a la función de partición

I.3 Autodualidad y determinación de la temperatura crítica

1 y 2.



$$\underbrace{4N_+}_{\substack{\#\text{ de}\\ \text{partículas}\\ \text{up}}} = \underbrace{2N_{++}}_{\substack{\text{link entre}\\ 2\text{ partículas}\\ ++}} + \underbrace{\overbrace{N_{+-}}^{r}}_{\substack{\text{barra entre}\\ \text{partículas}\\ +-}}$$

Como el número de barras coincide con el número de parejas

$$\boxed{r = n}$$

$$\underbrace{4N_-}_{\substack{\#\text{ de}\\ \text{partículas up}}} = \underbrace{2N_{--}}_{\substack{\text{link entre 2}\\ \text{partículas} --}} + \underbrace{N_{+-}}_{\substack{\text{barra entre}\\ \text{partícula} +-}}$$

$$4N = 2(S - r) + 2r$$

$$2N = S$$

Así la función de partición es similar a la obtenida anteriormente en la expansión a bajas temperaturas con la excepción de que ω_r se sustituye por $\omega_r^* = \Omega_r$ el número de grafos con r barras, ya que la disposición de los pares debe coincidir con grafos poligonales de $r = n$ barras.

$$Z^*(T) = 2e^{\beta J S}\left(1 + \sum_{r\neq 0} \omega_r^* e^{-2\beta J r}\right)$$

4. Si se define ahora una temperatura T^* dada por

$$e^{-2L^*} = \tanh L \qquad \text{con} \quad L^* = \frac{J}{(K_B T^*)} = \beta^* J$$

Pero:

$$Z(T) = 2^N (\cosh L)^S \left[1 + \sum_{r\neq 0} \overset{\Omega_r}{\overset{\downarrow}{\omega_r^*}} (\tanh L)^r\right]$$

$$= 2^{N-1}\, 2 (\cosh L)^S e^{-SL^*} e^{SL^*}\left[1 + \sum_{r\neq 0} \omega_r^* e^{-2rL^*}\right]$$

$$= 2^{N-1} (\cosh L)^S e^{-SL^*} \underbrace{2e^{SL^*}\left[1 + \sum_{r\neq 0} \omega_r^* e^{-2rL^*}\right]}_{Z^*(T^*)}$$

$$Z(T) = 2^{N-1} (\cosh L)^S e^{-SL^*} Z^*(T^*) \qquad \text{(a)}$$

5. Sabemos que $e^{-2L^*} = \tanh L \rightarrow e^{2L^*} = \dfrac{1}{\tanh L}$

$$e^{2L^*} + e^{-2L^*} = \frac{1}{\tanh L} + \tanh L$$

$$= \frac{e^L + e^{-L}}{e^L - e^{-L}} + \frac{e^L - e^{-L}}{e^L + e^{-L}}$$

$$e^{2L^*} + e^{-2L^*} = 2\,\frac{e^{2L} + e^{-2L}}{e^{2L} - e^{-2L}} \Rightarrow \cosh(2L^*) = \frac{\cosh(2L)}{\sinh(2L)}$$

Así: $\sinh(2L) = \dfrac{\cosh(2L)}{\cosh(2L^*)}$

Reescribiendo la ecuación (a): $\left(e^{-2L^*}\right)^{S/2} = e^{-SL^*} = (\tanh L)^{S/2}$

$$Z(T) = 2^{N-1} (\operatorname{Cosh} L)^{S} (\tanh L)^{S/2} Z^*(T^*)$$

$$= 2^{N-1} (\operatorname{Cosh} L \ \operatorname{Sinh} L)^{S/2} Z^*(T^*)$$

$$= \frac{2^{N-1}}{2^{S/2}} \big(\underbrace{2 \operatorname{Cosh} L \ \operatorname{Sinh} L}_{\operatorname{Sinh}(2L)}\big)^{S/2} Z^*(T^*)$$

$$= \frac{2^{N-1}}{2^{S/2}} \left(\frac{\operatorname{Cosh}(2L)}{\operatorname{Cosh}(2L^*)}\right)^{S/2} Z^*(T^*)$$

Como $S = 2N$

$$\frac{Z(T)}{2^{N} \ (\operatorname{Cosh}(2L))^{S/2}} = \frac{Z^*(T^*)}{2^{N+1} \ (\operatorname{Cosh}(2L^*))^{S/2}}$$

Multiplicando por $1/2^{-(N+1)/2}$ $\quad \frac{1}{2^N} \frac{1}{2^{-(N+1)/2}} = \frac{1}{2^{(N-1)/2}}$

Multiplicando: $\quad \frac{1}{2^{N+1}} \frac{1}{2^{-(N+1)/2}} = \frac{1}{2^{(N+1)/2}}$

$$\boxed{\frac{Z(T)}{2^{(N-1)/2} (\operatorname{Cosh}(2L))^{S/2}} = \frac{Z^*(T^*)}{2^{(N+1)/2} (\operatorname{Cosh}(2L^*))^{S/2}}} \quad (b)$$

6. Si $N \to \infty$ $\quad S \to \infty$

El factor $\underbrace{2^{N-1} (\operatorname{Cosh} L)^{S}}_{\text{crece}} \underbrace{e^{-SL^*}}_{\text{decrece}} \simeq 1$

crece → Aporta $\frac{e^{LS}}{2^{2N}}$

Por lo que $Z(T) \approx Z^*(T^*)$

Además si $N \to \infty$ $\quad \frac{1}{2^{(N\pm 1)/2}} \approx \frac{1}{2^{N/2}}$

Así de (6)

$$\frac{Z(T)}{(\cosh 2L)^{N/2}} = \frac{Z^*(T^*)}{(\cosh 2L^*)^{N/2}}$$

7.