1.3.3 Modelo de Ising en una dimensión: solución exacta

El modelo de Ising [1] es uno de los pocos modelos de particulas interactuantes para el cual se conoce su solución exacta e indudablemente el mas simple de todos ellos. Este modelo tiene enorme interéres 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 continuas, 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 también de diversas áreas de la biología. Comenzaremos entonces con la solución en una dimensión.

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

$$H = -J \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \sigma_{i+1} - B \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \tag{107}$$

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. Asi, podemos escribir el Hamiltoniano (107) de manera mas simétrica:

$$H = -J \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{B}{2} \sum_{i=1}^{N} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \tag{108}$$

La función de partición canónica viene dada por

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp\left[K \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2} \sum_{i=1}^{N} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \tag{109}$$

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

$$Z_N = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{i=1}^{N} T(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \tag{110}$$

donde

$$T(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \exp\left[K \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \tag{111}$$

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

$$\mathrm{T} = \begin{pmatrix} T(+1,+1) & T(+1,-1) \\ T(-1,+1) & T(-1,-1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{K+h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-h} \end{pmatrix} \tag{112}$$

Asi, podemos escribir la función de partición como

[1] E. Ising, Z. Phys. **31**, 253 (1925).

$$\begin{aligned}
Z_N &= \sum_{\sigma_1=\pm1}\sum_{\sigma_3=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}\left(\sum_{\sigma_2=\pm1} T(\sigma_1,\sigma_2)T(\sigma_2,\sigma_3)\right)T(\sigma_3,\sigma_4)\dots T(\sigma_N,\sigma_1) && (113)\\
&= \sum_{\sigma_1=\pm1}\sum_{\sigma_4=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}\left(\sum_{\sigma_3=\pm1} T^2(\sigma_1,\sigma_3)T(\sigma_3,\sigma_4)\right)T(\sigma_4,\sigma_5)\dots T(\sigma_N,\sigma_1) && (114)\\
&\vdots && (115)\\
&= \sum_{\sigma_1=\pm1} T^N(\sigma_1,\sigma_1) && (116)\\
&= \mathrm{Tr}\left(\mathrm{T}^N\right) && (117)
\end{aligned}$$

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

$$Z_N = \lambda_+^N + \lambda_-^N \tag{118}$$

Los autovalores resultan

$$\lambda_\pm = e^K\left[\cosh(h) \pm \sqrt{\cosh^2(h) - 2\,e^{-2K}\mathrm{senh}(2K)}\right] \tag{119}$$

A campo nulo $h = 0$ tenemos

$$\lambda_+ = 2\cosh(K) \geq \lambda_- = 2\,\mathrm{senh}(K) > 0$$

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

$$Z_N = \lambda_+^N\left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\right] \tag{120}$$

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

$$\begin{aligned}
f(T,B) &= \lim_{N\to\infty}\left[-\frac{k_BT}{N}\ln Z_N\right] = -k_BT\ln\lambda_+ && (121)\\
&= -J - \frac{1}{\beta}\ln\left\{\cosh(\beta B) + \sqrt{\cosh^2(\beta B) - 2\,e^{-2\beta J}\mathrm{senh}(2\beta J)}\right\} && (122)
\end{aligned}$$

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 $N \to \infty$ en lugar de $V \to \infty$. En general al tratar con 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

$$m(T,B) = -\left(\frac{\partial f}{\partial B}\right)_T = \frac{\mathrm{senh}(\beta B)}{\sqrt{\cosh^2(\beta B) - 2\,e^{-2\beta J}\mathrm{senh}(2\beta J)}} \tag{123}$$

Vemos que $m \to 0$ cuando $B \to 0$, 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

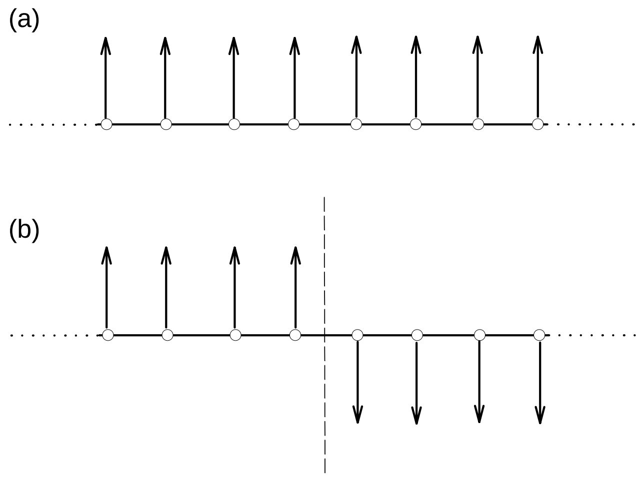

Figura 2: (a) Estado fundamental del modelo de Ising unidimensional. (b) Pared de dominio.

$$C_{B=0} = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_{B=0} = -T \left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \right)_{B=0} = \frac{J^2}{k_B T^2} \frac{1}{\cosh^2 \left(\frac{J}{k_B T} \right)} \tag{124}$$

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.2a. Este es el mínimo absoluto de la energía. Veamos ahora la configuración de spines de la Fig.2b. Esta corresponde a dos *dominios magnéticos* con magnetizaciones opuestas separados por una *pared de dominio*. La diferencia de energía entre esta configuración y el estado fundamental es $\Delta U = 2J$. 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 la pared puede ser colocada en N posiciones distintas de la cadena. A temperatura finita, el cambio en la energía libre producido por la creación de una pared de dominio sería

$$\Delta F = 2J - k_B T \ln N \tag{125}$$

En el límite termodinámico $N \to \infty$ 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 con una pared de dominio, 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.