

### 1.3.6 Modelo de Ising antiferromagnético

Consideremos el Hamiltoniano de Ising con campo nulo y  $J < 0$ . En este caso la configuración ferromagnética con todos los spines alineados resulta el máximo absoluto de la energía. El mínimo absoluto debería corresponder ahora a una configuración en la cual todo par de spines 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.(7). También es posible en la red cuadrada como se muestra en la Fig.(8). ¿Que 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 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)**:

$$m_s \equiv m_A - m_B \quad (159)$$

donde

$$m_A = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i \in A} \sigma_i \right\rangle \quad m_B = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i \in B} \sigma_i \right\rangle \quad (160)$$

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:

$$Z(\beta, J) = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[ \beta J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \right] \quad (161)$$

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

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

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 9. 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

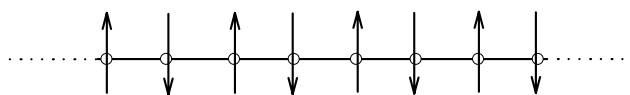


Figura 7: Orden antiferromagnético en la cadena lineal.

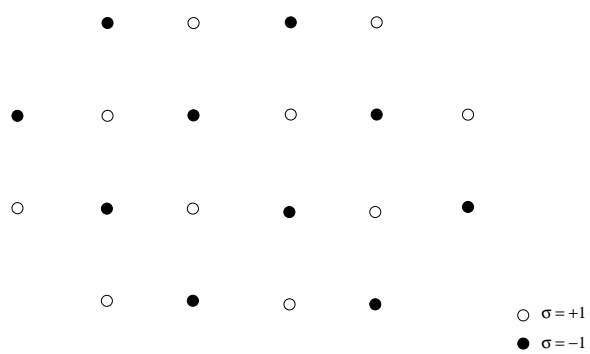


Figura 8: Orden antiferromagnético en la red cuadrada.

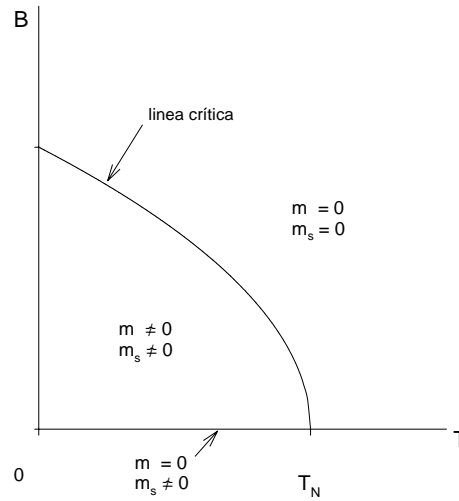


Figura 9: Diagrama de fases del modelo de Ising antiferromagnético con campo externo.

paramagnética de metales como el Cr o el Mn, la cual era mucho 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.

### 1.3.7 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. El número de sitios  $N$  es proporcional al volumen del sistema. La energía cinética se desprecia y el potencial de interacción entre dos partículas se toma 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  $v(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$  al potencial de interacción entre dos partículas ubicadas en las posiciones  $\mathbf{r}_i$  y  $\mathbf{r}_j$ , entonces:

$$v(r) = \begin{cases} \infty & r = 0 \\ -\epsilon_0 & r = 1 \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases} \quad (162)$$

Asociamos a cada sitio  $i$  una variable  $n_i = 0, 1$ , tal que  $n_i = 0$  corresponde a un sitio vacio 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

$$H_g = -\epsilon_0 \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j \quad (163)$$

y la función gran partición

$$\mathcal{Z}_g = \sum_{n=0}^N \sum_{\{n_i\}} e^{-\beta(H_g - \mu n)} \quad (164)$$

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

$$H_g = -\frac{\epsilon_0}{4} \left[ \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i + \sigma_j) + \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \right] - \frac{\epsilon_0 q N}{8} \quad (165)$$

$$= -\frac{\epsilon_0}{4} \left[ q \sum_{i=1}^N \sigma_i + \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \right] - \frac{\epsilon_0 q N}{8} \quad (166)$$

Por otra parte

$$n = \sum_{i=1}^N n_i = \frac{N}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (167)$$

y así

$$H_g - \mu n = -\frac{\epsilon_0}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \left( \frac{\mu}{2} + \frac{q\epsilon_0}{4} \right) \sum_{i=1}^N \sigma_i - \frac{N}{2} \left( \mu + \frac{\epsilon_0 q}{4} \right) \quad (168)$$

Ademas

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

Tenemos por lo tanto que

$$\mathcal{Z}_g = Z_I \exp \left\{ \frac{\beta N}{2} \left( \mu + \frac{\epsilon_0 q}{4} \right) \right\} \quad (169)$$

donde  $Z_I$  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

$$\Omega_g(T, \mu, V) = -k_B T \ln \mathcal{Z}_g = F_I(T, B = \mu/2 + qJ, N) - \frac{N}{2}(\mu + Jq) \quad (170)$$

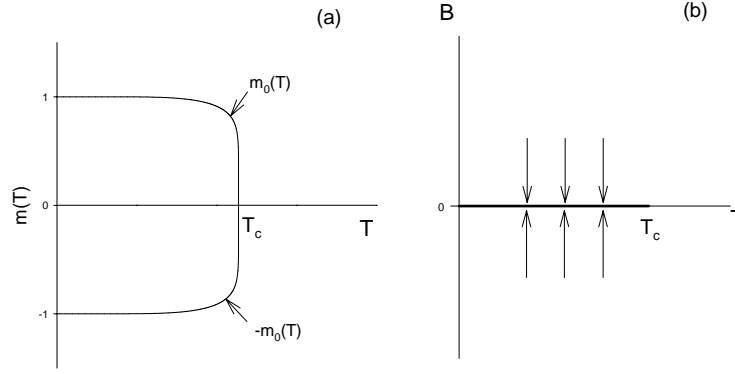


Figura 10: (a) Magnetización espontanea del modelo de Ising para  $d \geq 2$ . (b) Línea de transición de primer orden.

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

$$P = -\frac{\Omega_g}{V} = -f_I(T, B = \mu/2 + qJ) + \frac{1}{2}(\mu + Jq) \quad (171)$$

donde  $f_I$  es la energía libre por spin. De la Ec.(167) obtenemos la segunda ecuación de estado:

$$\rho(T, \mu) \equiv \frac{\langle n \rangle}{N} = \frac{1}{2} [1 + m(T, B = \mu/2 + qJ)] \quad (172)$$

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

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.(10)). 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. El único aspecto del modelo que no concuerda con la transición real líquido-gas, es que en este caso ambas fases poseen la misma entropía y por lo tanto el calor latente es cero.