

Problema 1: Interacciones de corto alcance

Sistema de tipo Ising con condiciones de borde periódicas e interacciones de corto alcance a varios vecinos

$$\mathcal{H} = - \sum_{i < j \leq N} J(i-j) \sigma_i \sigma_j - B \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (1)$$

$$J(n) = 0, \forall n > n_0.$$

El hamiltoniano puede reescribirse en la forma

$$\mathcal{H} = - \sum_{k=1}^{n_0} J_k \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+k} - B \sum_{i=1}^N \sigma_i. \quad (2)$$

Supongamos que $N = Ln_0$. En ese caso, podemos separar nuestra cadena en bloques de spines consecutivos de tamaño n_0 e introducir la siguiente notación:

$$\begin{aligned} [\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{n_0}] &\rightarrow [s_1^{(1)}, s_2^{(1)}, \dots, s_{n_0}^{(1)}] \\ [\sigma_{n_0+1}, \sigma_{n_0+2}, \dots, \sigma_{2n_0}] &\rightarrow [s_1^{(2)}, s_2^{(2)}, \dots, s_{n_0}^{(2)}] \\ &\dots \\ [\sigma_{(L-1)n_0+1}, \sigma_{(L-1)n_0+2}, \dots, \sigma_{Ln_0}] &\rightarrow [s_1^{(L)}, s_2^{(L)}, \dots, s_{n_0}^{(L)}] \end{aligned}$$

Así, la energía del sistema viene dada por tres tipos de interacciones diferentes:

- Interacciones de spines de un bloque con el campo magnético,
- Interacciones de spines dentro de un bloque,
- Interacciones de spines entre bloques consecutivos.

Las contribuciones de los primeros dos tipos dentro de un bloque vienen dadas por

$$\begin{aligned} X_{c_j} &\equiv X(s_1^{(j)}, s_2^{(j)}, \dots, s_{n_0}^{(j)}) \\ &= -B \sum_{i=1}^{n_0} s_i^{(j)} - \sum_{k=1}^{n_0} J_k \sum_{i=1}^{n_0-k} s_i^{(j)} s_{i+k}^{(j)}. \end{aligned}$$

Por otro lado, las interacciones entre bloques vienen dadas por

$$\begin{aligned}
Y_{c_j, c_{j+1}} &\equiv Y(s_1^{(j)}, s_2^{(j)}, \dots, s_{n_0}^{(j)}, \dots, s_1^{(j+1)}, s_2^{(j+1)}, \dots, s_{n_0}^{(j+1)}) \\
&= - \sum_{k=1}^{n_0} J_k \sum_{i=1}^{n_0-k} s_{n+1-i}^{(j)} s_{k-i+1}^{(j+1)}.
\end{aligned}$$

Luego, el hamiltoniano del sistema puede escribirse como

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^L (X_{c_j} + Y_{c_j, c_{j+1}}) \quad (3)$$

La función de partición del sistema será entonces

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \sum_{\{c\}} \exp \left[-\beta \sum_{j=1}^L (X_{c_j} + Y_{c_j, c_{j+1}}) \right] \\
&= \sum_{\{c\}} \prod_{j=1}^L \exp \left[-\beta \left(\frac{X_{c_j}}{2} + Y_{c_j, c_{j+1}} + \frac{X_{c_{j+1}}}{2} \right) \right]
\end{aligned} \quad (4)$$

Definimos la matriz de transferencia

$$T(c, c') = \exp \left[-\beta \left(\frac{X_c}{2} + Y_{c, c'} + \frac{X_{c'}}{2} \right) \right], \quad (5)$$

entonces

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \sum_{c_1} \sum_{c_2} \cdots \sum_{c_L} T(c_1, c_2) T(c_2, c_3) \dots T(c_{L-1}, c_L) T(c_L, c_1) \\
&= \text{Tr}(T^L).
\end{aligned} \quad (6)$$

En el límite termodinámico, la función de partición puede aproximarse por

$$\mathcal{Z} \sim \lambda_1^L, \quad (7)$$

donde λ_1 es el mayor autovalor de T .

Problema 2: Modelo de Ising antiferromagnético unidimensional

$$\mathcal{H} = J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - B \sum_{i=1}^N \sigma_i - B_a \sum_{i=1}^N (-1)^N \sigma_i. \quad (8)$$

Simetrizamos el hamiltoniano y separamos las sumas en términos pares e impares

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{i \text{ par}} \left[J \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{B}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) - \frac{B_a}{2} (\sigma_i - \sigma_{i+1}) \right] + \\ & + \sum_{i \text{ impar}} \left[J \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{B}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) - \frac{B_a}{2} (\sigma_{i+1} - \sigma_i) \right]. \end{aligned} \quad (9)$$

Definimos la matriz A tal que

$$(A)_{\sigma\sigma'} = -\beta \exp \left[J \sigma \sigma' - \frac{B}{2} (\sigma + \sigma') - \frac{B_a}{2} (\sigma - \sigma') \right].$$

La función de partición puede escribirse entonces como

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{\{\sigma\}} (A)_{\sigma_1 \sigma_2} (A^T)_{\sigma_2 \sigma_3} \dots (A)_{\sigma_{N-1} \sigma_N} (A^T)_{\sigma_N \sigma_1} \\ &= \text{Tr} \left(U^{N/2} \right), \end{aligned} \quad (10)$$

donde $U = AA^T$. Como U es simétrica, podemos aplicar el teorema de Perron-Frobenius. El sistema, entonces, está caracterizado por el autovalor más grande de U , λ_1 .

Calculamos explícitamente A para obtener los autovalores de U .

$$A = \begin{bmatrix} e^{-\beta(J+B)} & e^{\beta(J-B_a)} \\ e^{\beta(J+B_a)} & e^{\beta(J+B)} \end{bmatrix} \quad (11)$$

$$U = \begin{bmatrix} e^{-\beta(J+B)} & e^{\beta(J-B_a)} \\ e^{\beta(J+B_a)} & e^{\beta(J+B)} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} e^{-\beta(J+B)} & e^{\beta(J+B_a)} \\ e^{\beta(J-B_a)} & e^{\beta(J+B)} \end{bmatrix} \quad (12)$$

$$= \begin{bmatrix} e^{-2\beta(J+B)} + e^{2\beta(J-B_a)} & e^{\beta(B_a-B)} + e^{\beta(2J+B-B_a)} \\ e^{\beta(B_a-B)} + e^{\beta(2J+B-B_a)} & e^{2\beta(J+B)} + e^{2\beta(J+B_a)} \end{bmatrix} \quad (13)$$

Problema 3: Modelo de Blume-Capel Unidimensional

$$\mathcal{H} = -J \sum_i s_i s_{i+1} + D \sum_i s_i^2. \quad (14)$$

Reescribimos el hamiltoniano de forma simetrizada

$$\mathcal{H} = \sum_i \left[\frac{D}{2} (s_i^2 + s_{i+1}^2) - J s_i s_{i+1} \right]. \quad (15)$$

La función de partición está dada por

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{s\}} \prod_i e^{K s_i s_{i+1} - \frac{K_2}{2} (s_i^2 + s_{i+1}^2)}, \quad (16)$$

donde definimos $K \equiv \beta J$ y $K_2 \equiv \beta D$. Definimos la matriz de transferencia A como

$$A_{ss'} = e^{K s s' - \frac{K_2}{2} (s^2 + s'^2)}, \quad (17)$$

por lo que tenemos

$$\mathcal{Z} = \text{Tr}(A^N). \quad (18)$$

Como A es real, simétrica y de dimensión finita, vale Perron-Frobenius, por lo que, en el límite termodinámico se puede aproximar

$$\mathcal{Z} = \lambda_1^N, \quad (19)$$

siendo λ_1 el mayor autovalor de A .

Escribimos la expresión explícita para A :

$$A = \begin{bmatrix} A_{-1,-1} & A_{-1,0} & A_{-1,1} \\ A_{0,-1} & A_{0,0} & A_{0,1} \\ A_{1,-1} & A_{1,0} & A_{1,1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{K-K_2} & e^{-K_2/2} & e^{-K-K_2} \\ e^{-K_2/2} & 1 & e^{-K_2/2} \\ e^{-K-K_2} & e^{-K_2/2} & e^{K-K_2} \end{bmatrix} \quad (20)$$

Los autovalores de la matriz son

$$\lambda_s = 2e^{-K_2} \sinh(K) \quad (21)$$

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} + e^{-K_2} \cosh(K) \pm \sqrt{\left[\frac{1}{2} - e^{-K_2} \cosh(K) \right]^2 + 2e^{-K_2}} \quad (22)$$

En el límite de altas temperaturas, el autovalor $\lambda_s \rightarrow 0$, por lo que el mayor autovalor es

$$\lambda_1 = \lambda_+ = \frac{1}{2} + e^{-K_2} \cosh(K) + \sqrt{\left[\frac{1}{2} - e^{-K_2} \cosh(K) \right]^2 + 2e^{-K_2}} \quad (23)$$