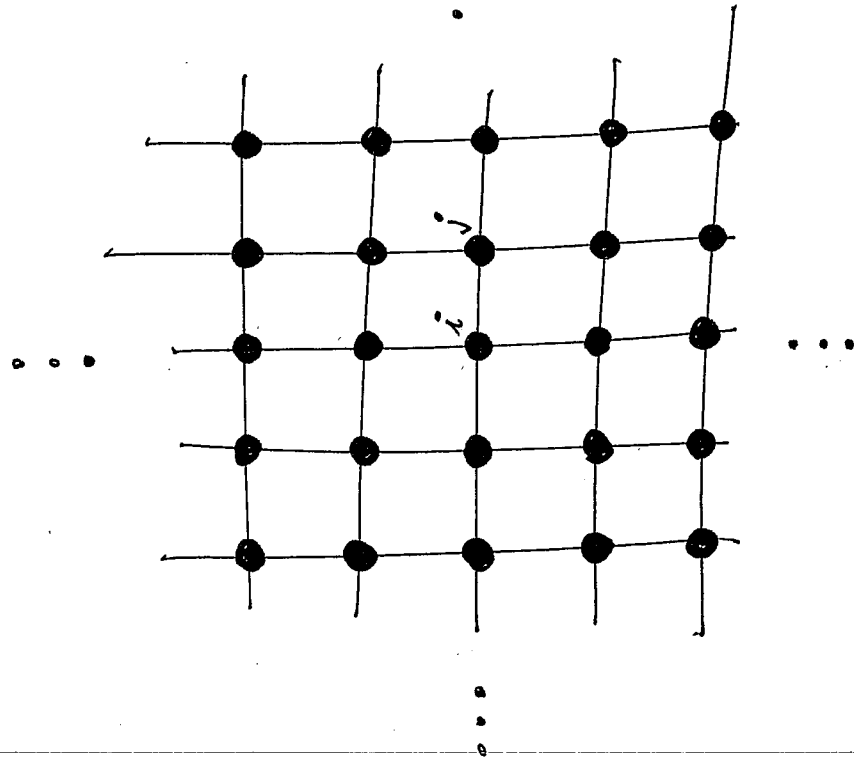


Modelo de Ising

(el ejemplo más simple en el que estudiar Transiciones de fase)



• Red: n dimensiones

• Un grado de libertad por sitio

$$\vec{\mu} = \mu \mathbf{S}_i ; S_i = \pm 1 \Rightarrow \mu = \pm \mu_0$$

• Campo aplicado : H

$$E_v = - \sum_{i \in v}^N H \mu S_i + E_{interacción}$$

↑ configuración v

"Ising model"

$$E_{\text{interacción}} = -J \sum_{ij} s_i s_j$$

\sum' \equiv suma a primeros vecinos
(se puede extender; NNI, ANNI ...)

$J > 0 \Rightarrow$ los espines prefieren ponerse $\uparrow\uparrow$

A baja T , es de esperar \exists imantación espontánea



$\uparrow\uparrow \dots \uparrow \dots \uparrow\uparrow$
correlaciones de largo alcance.

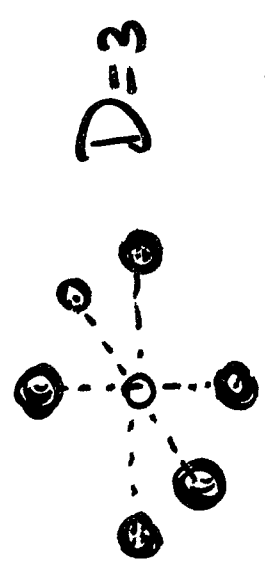
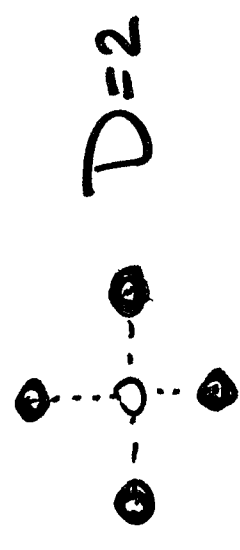
Sea $J > 0$ y $H = 0$
red "cúbica" simple de dimensión D y N espines :

$$N^{\circ} \text{ de vecinos} = 2D$$

la energía mínima la tiene el estado "ferro",

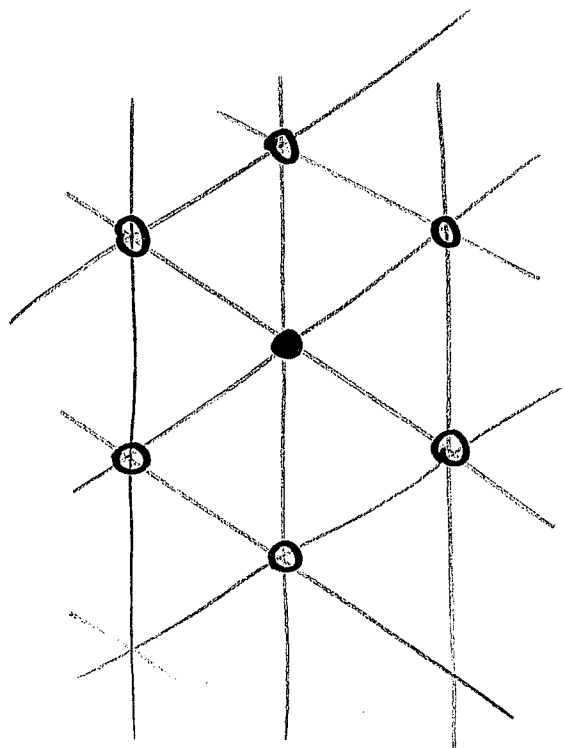
$$E = -JN \left(\frac{1}{2} \cdot 2D \right) = -JND$$

para no contar 2 veces
cada interacción.



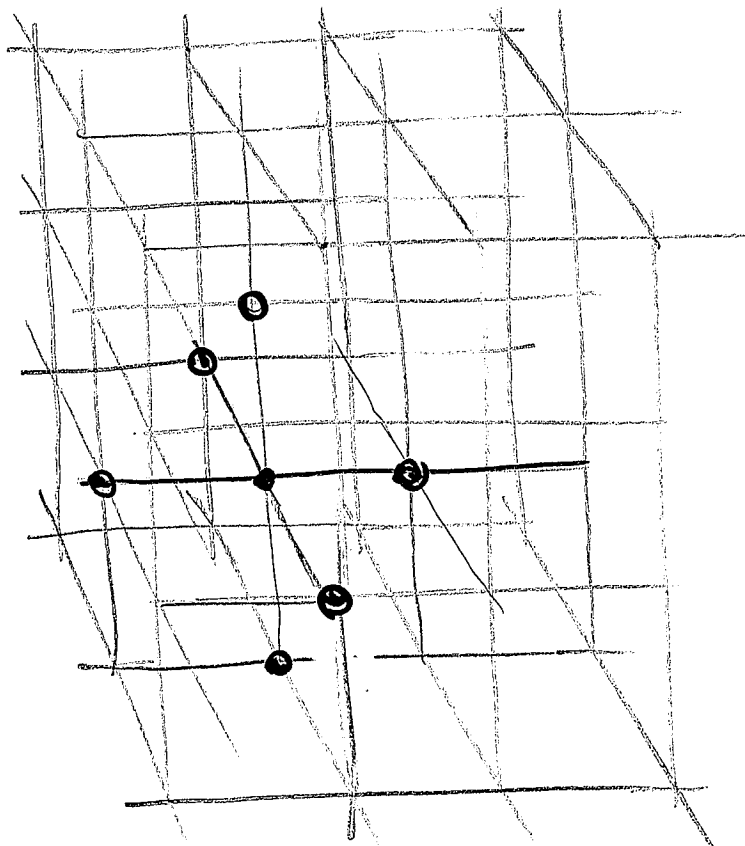
2D-Red triangular: 6 vecinos

$$E_0 = -3NJ$$



3D-cúbica simple: 6 vecinos

$$E_0 = -3NJ$$



Conexión MICRO \leftrightarrow MACRO vía función de PARTICIÓN

$$Z(T, N, H) = \sum_{\nu} e^{-\beta E_{\nu}}$$

$$\beta = 1/k_B T$$

$$= \sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_N} \exp \left[\beta \mu H \sum_{i=1}^N s_i + \beta J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \right]$$

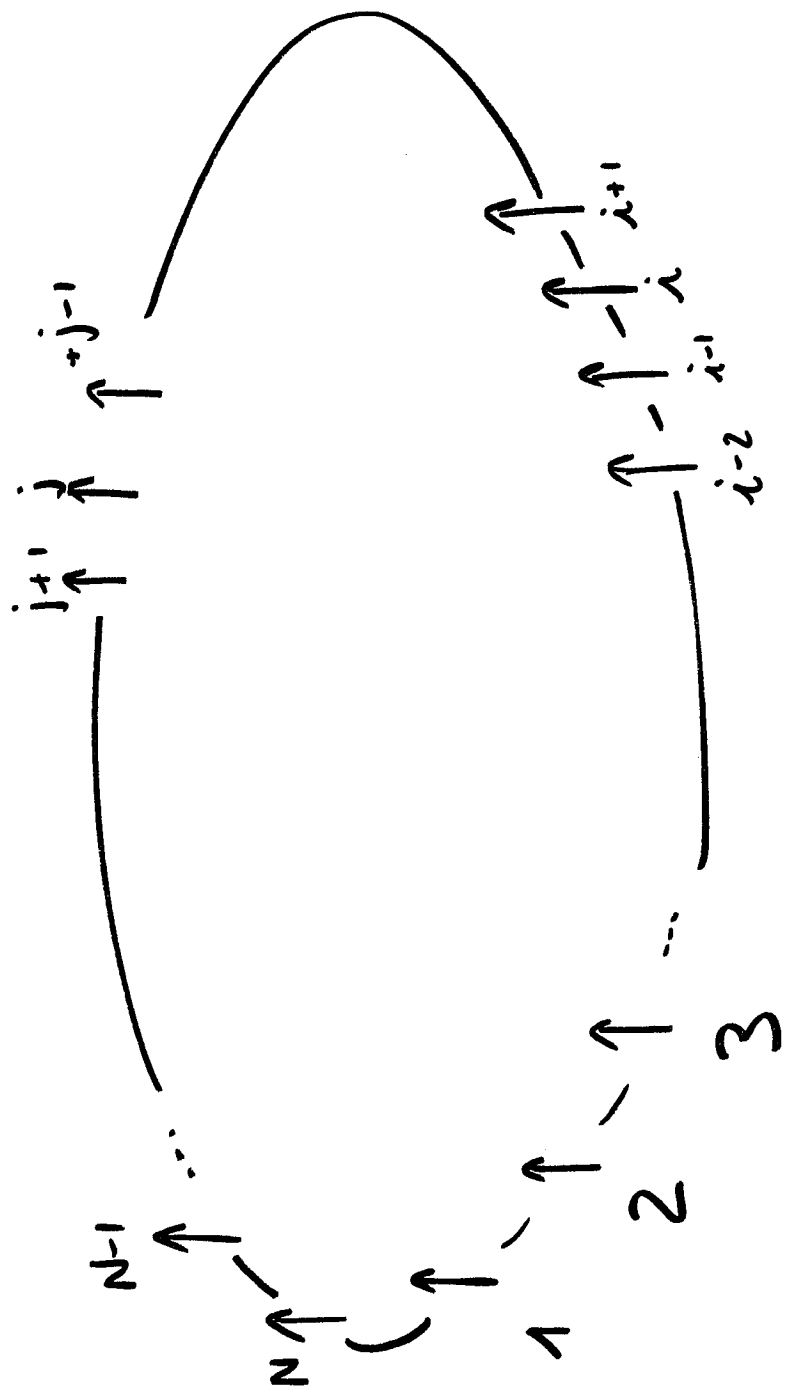
En 1 dimensión :



$$E_{int} = -J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1}$$

$$Z = [2 \cosh(\beta J)]^N$$

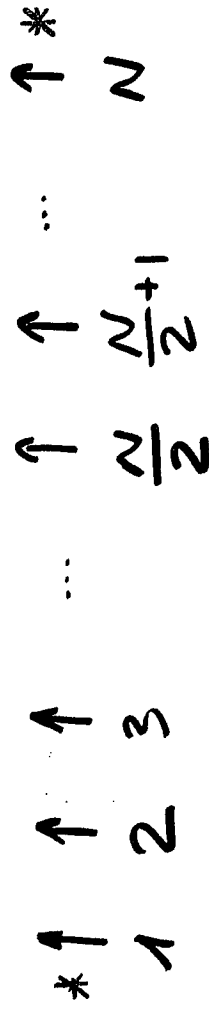
para N grande



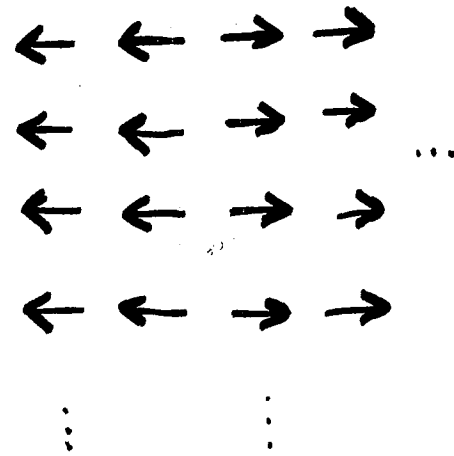
El modelo Ising 1D no predice transición de fase

a T finita:

<u>energía</u>	<u>M/átomo</u>
$\equiv -NJ$	μ



pared de dominio



$\equiv N^{-1/2}$	0
-------------------	-----

en 2D, 3D : Ising presenta una transición de fase.

$$\text{Onsager (1940)} \quad Z(\beta, N, 0) = [2 \cosh(\beta J) e^I]^N$$

$$\text{siendo } I = (2\pi)^{-1} \int_0^\pi d\phi \ln \left\{ \frac{1}{2} [1 + (1 - K^2 \operatorname{sen}^2 \phi)^{1/2}] \right\}$$

$$\text{con } K = 2 \operatorname{senh}(\beta J) / \cosh^2(2\beta J)$$

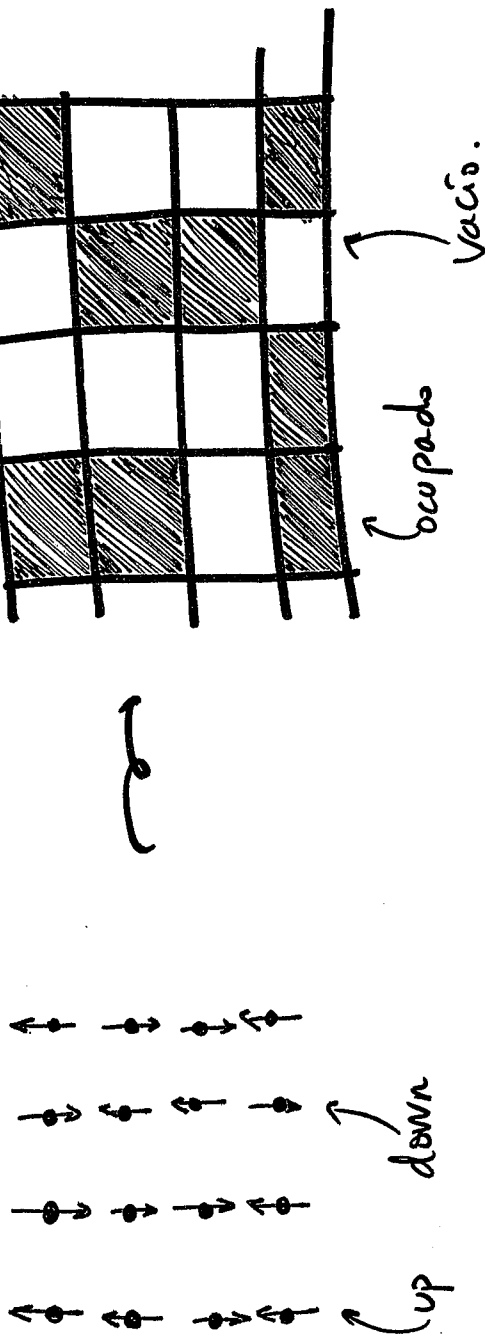
$\Rightarrow Z$ es no-analítica.

se puede demostrar que $T_c = 2.269 J/k_B$

$$C = \left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \right)_{H=0} \text{ es singular en } T_c$$

Generalizaciones:

• Lattice Gas



la energía de cada par de vecinos "ocupados" es $-\epsilon$
 Diferencia fundamental: el espín "down" contribuye a E .
 los sitios vacíos no contribuyen.

$$E = -\epsilon \sum_{i,j} n_i n_j$$

Función Partición
 GRAN-CANÓNICA:

$$\Xi = \sum_{n_1, \dots, n_N = 0,1} \exp \left\{ \beta \mu \sum_{i=1}^N n_i + \beta \epsilon \sum_{i,j} n_i n_j \right\}$$

N celdas, $\mu \equiv$ potencial químico

La "lattice gas" es isomorfa con Ising.

- spin up — celda ocupada
- spin down — celda vacía
- campo magnético — (cte). μ (\propto potencial químico)
- J — $\epsilon/4$

"otros" modelos de Ising :

dimensionalidad del espín →

3 Heisenberg

2 xy

1 Ising

dimensionalidad de la red

1 cadena

2 plano

3 red tridimensional

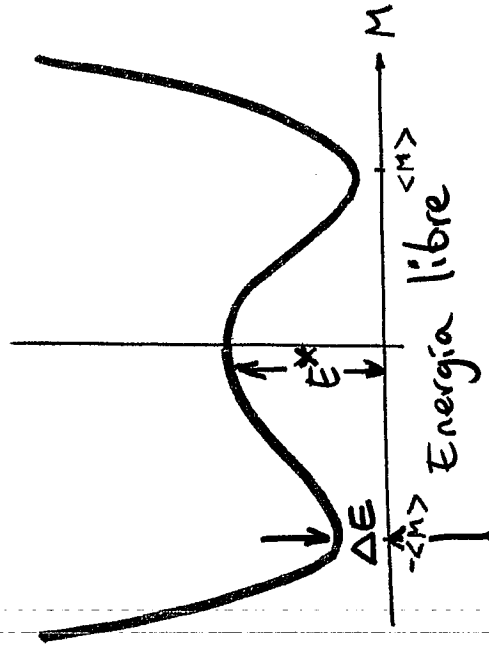
NO ORDER	NO ORDER	NO ORDER
ORDER	K-T	NO ORDER
ORDER	ORDER	ORDER

ROTURA DE SIMETRÍA Y CORRELACIONES

En ausencia de campo: Simetría up - down

$$\langle M \rangle = Z^{-1} \sum_{\nu} \left(\sum_{i=1}^N \mu s_i \right) e^{-\beta E_{\nu}}$$

$$\forall M_{\nu} = \sum_i \mu_i s_i \quad E = -M_{\nu} \quad !!$$



$$-k_B T \ln Z(M)$$

$\Delta E \rightarrow$ campo externo
(aunque sea un mínimo ...)

Cuando $H \rightarrow 0^+$, $\Delta E \rightarrow 0$

Se requiere una fluctuación de energía $\sim E^*$ para pasar de $\langle M \rangle \rightarrow -\langle M \rangle$

$\langle M \rangle$ es el parámetro de orden.

Función de correlación de pares:

C_{ij} se anula cuando el espín en el sitio i no está correlacionado con el espín en j

$$\sum_{j=2}^N C_{ij} \approx N^{\circ} \text{ de espines correlacionados al espín } i$$

Conforme crece el rango de correlaciones, este relacionado con la SUSEPTIBILIDAD:

$$\chi = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial \langle M \rangle}{\partial \beta H} \right)^2$$

$$\chi = \frac{1}{N} \langle (\delta M)^2 \rangle$$

\uparrow
T³ fluct. disp

$$C_{ij} = \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle$$

$$\langle S_i \rangle \equiv \sum_{\nu} P_{\nu} S_i \equiv \langle S_i \rangle_{\text{obs}}$$

$\sum_{j=2}^N C_{ij}$ crece también

$$\delta M = M - \langle M \rangle = \mu \sum_{i=1}^N [S_i - \langle S_i \rangle]$$

$$\Rightarrow \chi = \frac{\mu^2}{N} \sum_{i,j=1}^N [\langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle] = \mu^2 \sum_{j=1}^N C_{ij}$$

↑
 todos los sitios
 son equivalentes $\Rightarrow \frac{N}{2}$

IMPLICACIONES:

a) long-range correlations \Rightarrow divergencia de χ

b) con $N \rightarrow \infty$ $H \rightarrow 0^+$, $T < T_c \Rightarrow \langle M \rangle = N \mu_0 \mu$

momento
espontáneo
por espín

$H \rightarrow 0^-$, $T < T_c \Rightarrow \langle M \rangle = -N \mu_0 \mu$

\Rightarrow @ $H=0 \exists$ salto discontinuo: divergencia de χ

c) Potencial plano \Rightarrow fluctuaciones @ every range !!

\Rightarrow sistema infinitamente susceptible

