Introducción a la Teoría de Fenómenos Críticos

https://www.famaf.unc.edu.ar/~serra/ifc_2023.html

Guía N° 2 - Sistemas Unidimensionales

Marzo de 2023

Problema 1:

1. Muestre que si $\sigma = \pm 1$ es una variable "tipo" Ising, entonces cualquier función de σ es lineal:

$$f(\alpha\sigma) \, = \, f_p(\alpha) \, + \, f_i(\alpha) \, \sigma$$

donde α es un escalar y f_p y f_i son la proyección par e impar de f respectivamente.

2. Muestre que el Hamiltoniano de Ising mas general posible con interacción de pares y campo externo (no necesariamente uniforme) es de la forma

$$\mathcal{H} \, = \sum_{(i,j)}^{N} J_{ij} \, \sigma_i \sigma_j \, - \, \mu_0 \sum_{i=1}^{N} H_i \, \sigma_i$$

3. Encuentre una expresión análoga a la del punto 1 para el caso de *"spin 1"*, $s = 0, \pm 1$. Escriba el Hamiltoniano mas general posible con interacciónes de pares y de sitios para este caso (Hamiltoniano de Blume-Emery-Griffiths).

Problema 2: *El modelo de Ising a campo nulo en* $d = 1$*: solución iterativa.* Considere el modelo de Ising con interacción primeros vecinos en ausencia de campo ($H = 0$) en $d = 1$ con condiciones de contorno libres,

1. Muestre que la función partición cumple la relación de recurrencia

$$Z_N \, = 2 \cosh{(\beta J)} \, Z_{N-1} \, .$$

2. Calcule explicitamente $Z_{N=2}$ y use este resultado como "condición inicial" para obtener explicitamente

$$Z_N \, = 2^N \cosh^{N-1}{(\beta J)} \, .$$

3. Calcule la energía libre $f(T)$. Compruebe que esta coincide con $f(T, H = 0)$ calculada por matriz de transferencia con condiciones períodicas de contorno.

4. Definimos la función de correlación de spines separados a una distancia l como

$$\Gamma_l \, = \, \langle (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle) \, (\sigma_{i+l} - \langle \sigma_{i+l} \rangle) \rangle \, ,$$

que en $d = 1$, $H = 0$ se reduce a (justifique)

$$\Gamma_l \, = \, \langle \sigma_i \, \sigma_{i+l} \rangle \, .$$

Cálcule Γ_l y muestre que en este caso, en el límite termodinámico obtenemos un decaimiento exponencial de la función correlación

$$\lim_{N\to\infty} \Gamma_l \;=\; e^{-l/\xi(T)}\,,$$

donde $\xi(T)$ se denomina longitud de correlación. Encuentre la expresión explícita de $\xi(T)$.

Ayuda: asuma que la interacción depende del sitio, $\mathcal{H} = -\sum_i J_i\sigma_i\sigma_{i+1}$, recalcule ahora $Z_N(\{J_i\})$, use que

$$\frac{\partial Z_N(\{J_i\})}{\partial J_k} \;=\; \beta \sum_{\sigma} \sigma_k\sigma_{k+1} e^{-\beta\mathcal{H}}\,,$$

y tome $J_i = J\ \forall i$ al final del calculo.

Problema 3: *El modelo de Ising a campo nulo en $d = 1$: independencia de las condiciones de contorno.* Considere el modelo de Ising con interacción primeros vecinos en ausencia de campo ($H = 0$) en $d = 1$ con condiciones de contorno fijas, esto es los valores de los spines extremos de la cadena, σ_1 y σ_N, toman un valor fijo. Podemos asi definir 4 funciones de particion distintas: $Z_N(+,+)$, $Z_N(+,-)$, $Z_N(-,+)$, $Z_N(-,-)$:

$$Z_N(\sigma_1,\sigma_N) \;=\; \sum_{\sigma_2,\ldots,\sigma_{N-1}} e^{-\beta\mathcal{H}(\{\sigma_i\})}\,.$$

Definiendo los vectores

$$u(+) \;=\; \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad u(-) \;=\; \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

1. Muestre que $Z_N(\sigma_1,\sigma_N)$ se puede escribir como:

$$Z_N(\sigma_1,\sigma_N) \;=\; (u(\sigma_1))^\dagger\, T^{N-1} u(\sigma_N)\,,$$

donde T es la matriz de transferencia definida en el teórico para PBC con $h = 0$.

2. Calcule los autovalores y autovectores de T y use la expresión anterior para mostrar que:

$$Z_N(+,+) \;=\; Z_N(-,-) \;=\; 2^{N-2}\left(\cosh^{N-1}(K) + \sinh^{N-1}(K)\right)$$

$$Z_N(+,-) \;=\; Z_N(-,+) \;=\; 2^{N-2}\left(\cosh^{N-1}(K) - \sinh^{N-1}(K)\right)\,.$$

3. Calcule las correspondientes energías libres y muestre que ambas dan el mismo resultado que las obtenidas en el teórico para PBC y en el problema 3. Completamos asi la prueba de que la termodinámica del modelo de Ising en $d = 1$ **no** depende de las condiciones de contorno (la extensión a $H \neq 0$ es engorrosa, pero directa).

Problema 4: *Correlaciones y Suceptibilidad del Modelo de Ising*

1. Muestre que para el modelo de Ising la suceptibilidad y las correlaciones estan relacionadas por:

$$\chi_N(\beta,H) = \frac{\beta}{N}\sum_{i,j}\Gamma_{i,j}(\beta,H)$$

note que el resultado es válido en cualquier dimensión.

2. Use el resultado anterior el punto 4 del problema 3 para reobtener la expresión encontrada en el teorico para $\chi_0(T)$.

Problema 5: *El modelo n-vectorial*

Considere el modelo $n-$vectorial a campo nulo definido sobre una cadena lineal con condiciones de contorno libres :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{N-1} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_{i+1}$$

donde $\vec{s}_i$ es un vector de n componentes con $|\vec{s}_i| = 1$.

1. Calcule la función partición.
2. Calcule la energía libre $f(T)$ y la energía interna $u(T)$.
3. Calcule la función correlación de pares $< \vec{s}_i \cdot \vec{s}_{i+l} >$. Compruebe que decae exponencialmente para $l \to \infty$.
4. Muestre que para $n \to 1$ se reobtienen las funciones calculadas para el modelo de Ising.
5. Muestre que los calores específicos cumplen

$$\lim_{T\to 0} c = \begin{cases} 0 & \text{si } n = 1 \quad \text{(Ising)} \\ 1/2 & \text{si } n = 2 \quad (X - Y) \\ 1 & \text{si } n = 3 \quad \text{(Heisenberg)} \end{cases} ,$$

lo que dice que la entropía diverge para $T \to 0$ en los modelos $X - Y$ y Heisenberg. Discuta el resultado.

Problema 6: *El modelo de Blume-Capel*

Considere el modelo de Blume-Capel a campo nulo en $d = 1$ con condiciones períodicas de contorno :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{N} s_i s_{i+1} + D \sum_i s_i^2$$

donde $s_i = 0, \pm 1$ y $D, J > 0$.

1. Calcule los autovalores de la matriz de transferencia.
2. Calcule la energía libre y la entropía por spin.
3. Grafique el diagrama de fases a $T = 0$ en el plano $D - J$. Calcule la forma asintótica de los autovalores de la matriz de transferencia para $T \to 0$ en las tres regiones características.

Problema 7: *El modelo de Potts de q estados en $d = 1$: solución por Matriz de Transferencia.* Considere el modelo de Potts de q estados con interacción primeros vecinos en presencia de un campo H en $d = 1$ con condiciones de contorno periódicas,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{N} \delta_{s_i, s_{i+1}} - H \sum_{i=1}^{N} \delta_{s_i, 1} \quad ; \quad s_{N+1} = s_1 \; ; \; s_i = 1, \ldots, q \; .$$

1. Utilice el método de la matriz de transferencia para escribir $Z_N = tr(T^N)$, donde T es una matriz simétrica de $q \times q$. De la expresión explícita de T.

2. Para el cálculo de los autovalores de T defina los vectores $\vec{u} = (1, 0, \cdots, 0)$ y $\vec{v} = (\exp(h/2), 1, 1, \cdots, 1)$. Muestre que todo vector normal a ambos vectores es autovector de T con autovalor $e^k - 1$, donde $k = \beta J$ y $h = \beta H$. A partir de este resultado calcule el espectro de T e identifique el mayor autovalor.

3. Calcule, para $H = 0$, $F_N(T)$ y $S_N(T)$. Estudie el límite $T \to 0$ y explique los resultados obtenidos.

4. Calcule del punto anterior el límite termodinámico $f(T)$ y $s(T)$, analice los resultados y comparelos con los obtenidos en el punto 3.

Problema 8: *Interacciones segundos vecinos*

Considere el modelo de Ising unidimensional con interacciones primeros y segundos vecinos a campo nulo y con condiciones períodicas de contorno:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \sigma_{i+1} - J_2 \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \sigma_{i+2} \,.$$

1. Estudie el diagrama de fases a temperatura nula en el plano $J_1 - J_2$. Note que el sistema presenta una nueva fase solo en el caso de interacciones competitivas, esto es cuando J_1, J_2 tienen distinto signo.

2. Escriba una matriz de transferencia **simétrica** de 4×4.

3. Use la simetría de $\mathcal{H}$ ante inversión de spines para reducir el problema de cálculo de la energía libre a encontrar el mayor autovalor de una matriz de 2×2 (escriba esta explícitamente).

4. Asuma FBC y aplique la transformación

$$\sigma_1 = t_1;\ \sigma_2 = t_1 t_2\,;\ \sigma_3 = t_1 t_2 t_3\ ;\ \sigma_N = t_1 t_2 t_3 \dots t_N$$

   Que sistema describe? Este es un ejemplo donde se resuelve un problema mediante un mapeo a otro de solución conocida.