

Modelo reticulares: formulación

Conviene en este momento revisar sistemáticamente la formulación de algunos modelos reticulares (Ising, votante, Thom,...) que son aquí relevantes, con objeto de precisar y extender matemáticamente aspectos ya apuntados y ver algunas lecciones importantes que se siguen de ellos. También ampliaremos el rango de aplicaciones de estos modelos.

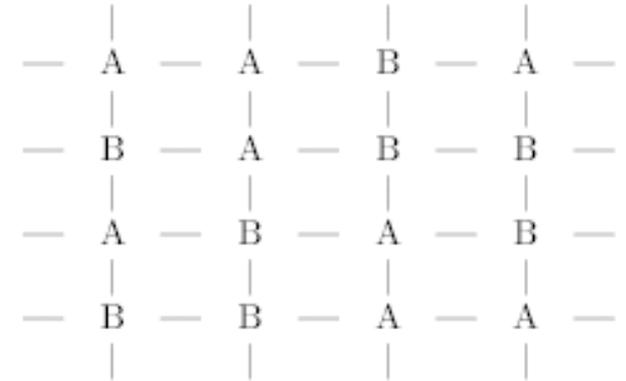
Transiciones orden–desorden. Modelo de aleación binaria.

Muchos sistemas (ej, aleaciones binarias Al-Zn y Au-Cu) presentan transiciones entre un estado ordenado a bajas temperaturas y un estado desordenado a T_s altas. Ejemplo ideal más sencillo:

Sea red regular con nodos, intersecciones ocupados por objetos de dos especies distintas, ej, ión A o B.

En dimensión dos, una configuración posible es:

Sup. dos objetos interaccionan sólo cuando son vp (líneas) y, en ese caso, posibles parejas contribuyen a la energía total con ϕ_{AB} , ϕ_{AA} , ϕ_{BB} , respectivam.



Si no hay otro efecto (ee, sistema a $T = 0K$):

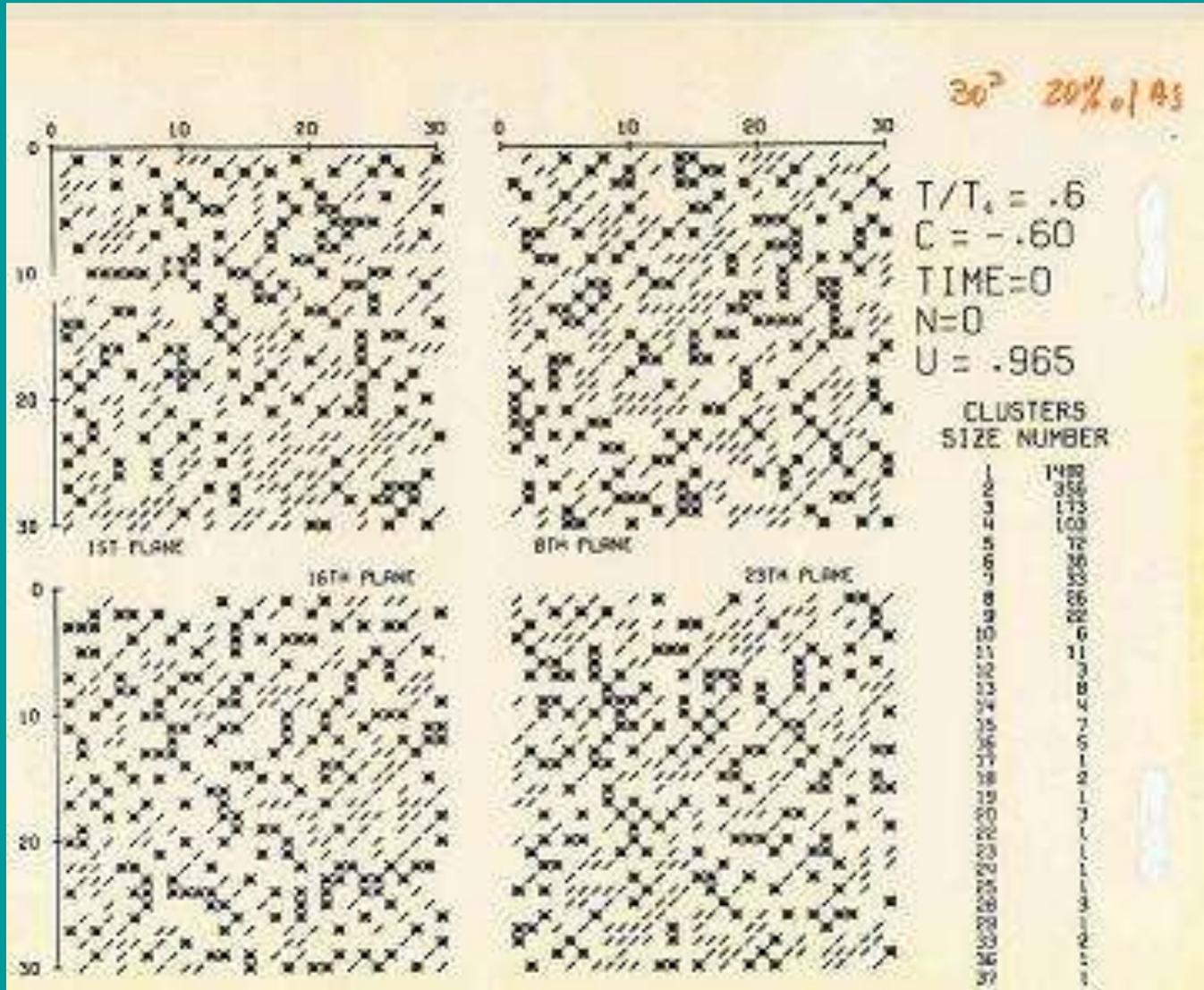
1. si $\phi_{AB} > \frac{1}{2} (\phi_{AA} + \phi_{BB})$, se favorecen enlaces AA y BB sobre AB: regiones ricas en A y otras ricas en B; ej, si red finita y A minoritaria, mínima energía requiere todas las A agrupadas en esfera rodeada de B.
2. si $\phi_{AB} < \frac{1}{2} (\phi_{AA} + \phi_{BB})$, es energéticamente favorable tener las A y B alternadas formando especie de super-redes entrelazadas, si lo permite la simetría de la red y la proporción de As y Bs.

BBBBBBBBBBBBBB
BBBAAAAAABBB
BBAAAAAABBB
BBBBAAAAAABBB
BBBBBBABBBBB

BABABABABABAB
ABABABABABABA
BABABABABABAB
ABABABABABABA
BABABABABABAB

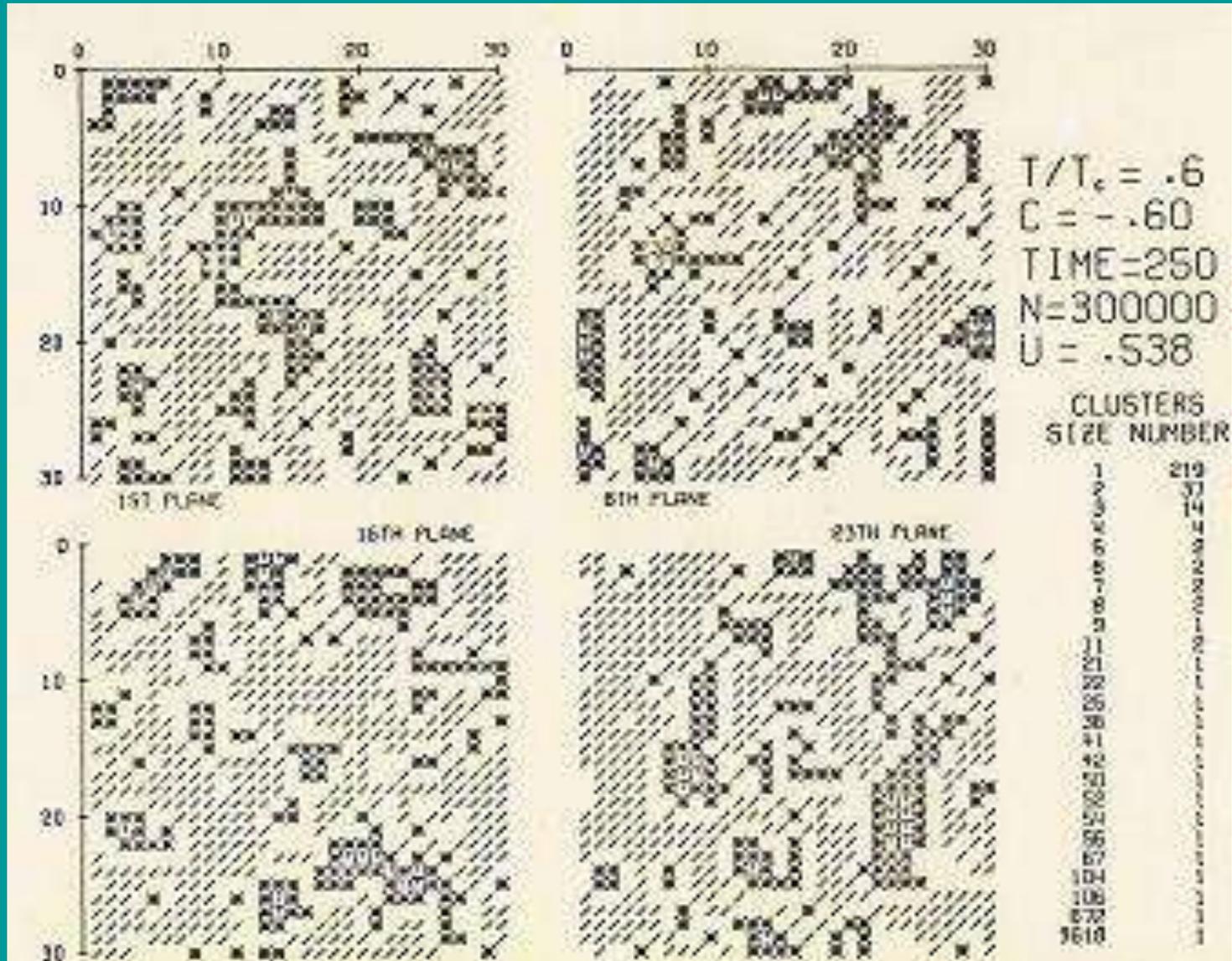
Simulación en el ordenador del comportamiento de una aleación binaria.

“Experimento” con el *modelo 1* a muy baja temperatura respecto de la crítica, red 30x30x30 (se dibujan 4 secciones equidistantes), con un 20% de partículas A (círculo es partícula A rodeada de As; asterisco es A rodeada de Bs; raya es B rodeada de Bs). Esta figura se corresponde con $t=0$, donde las partículas se han distribuido al azar.

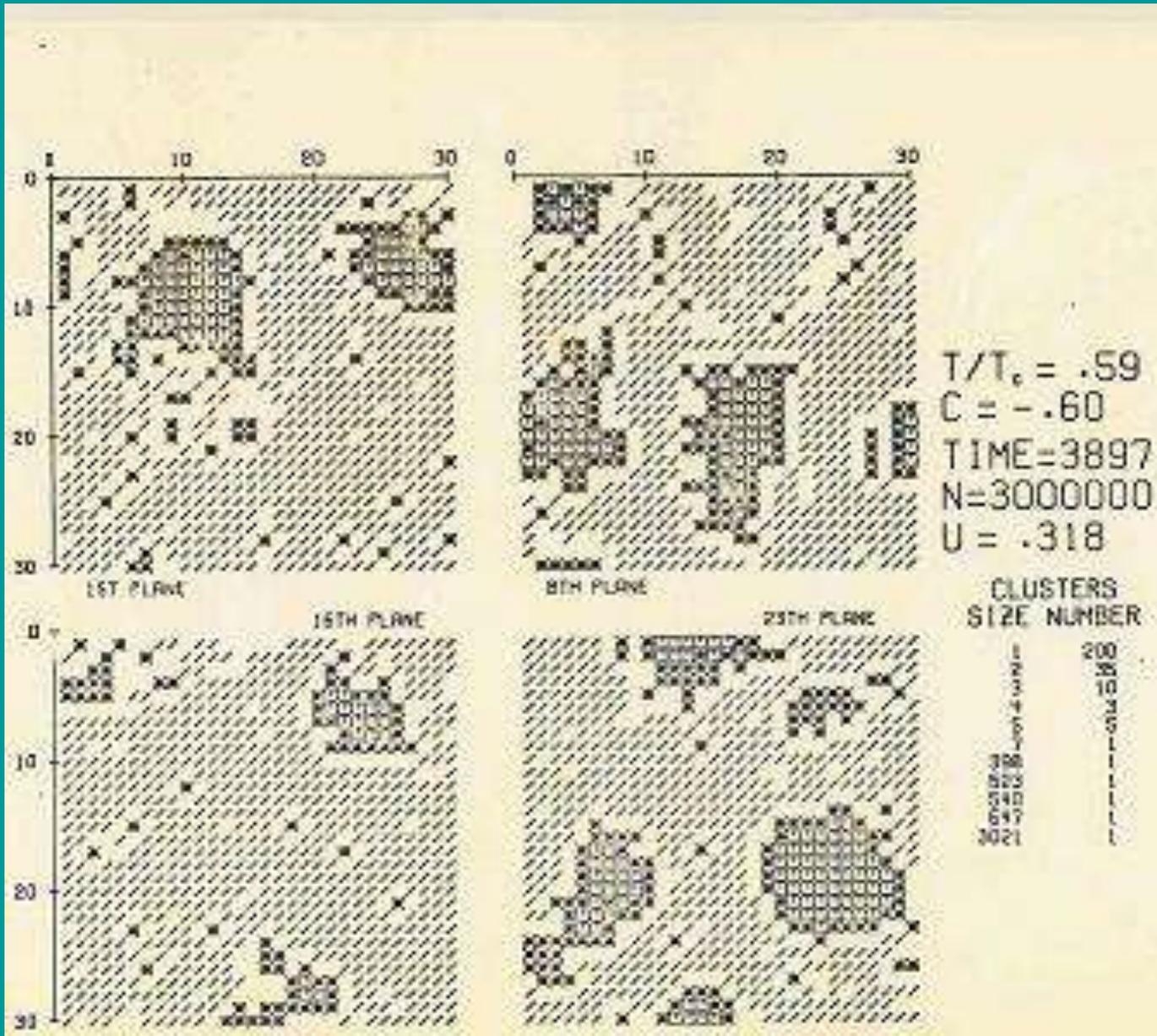


Simulación en el ordenador del comportamiento de una aleación binaria.

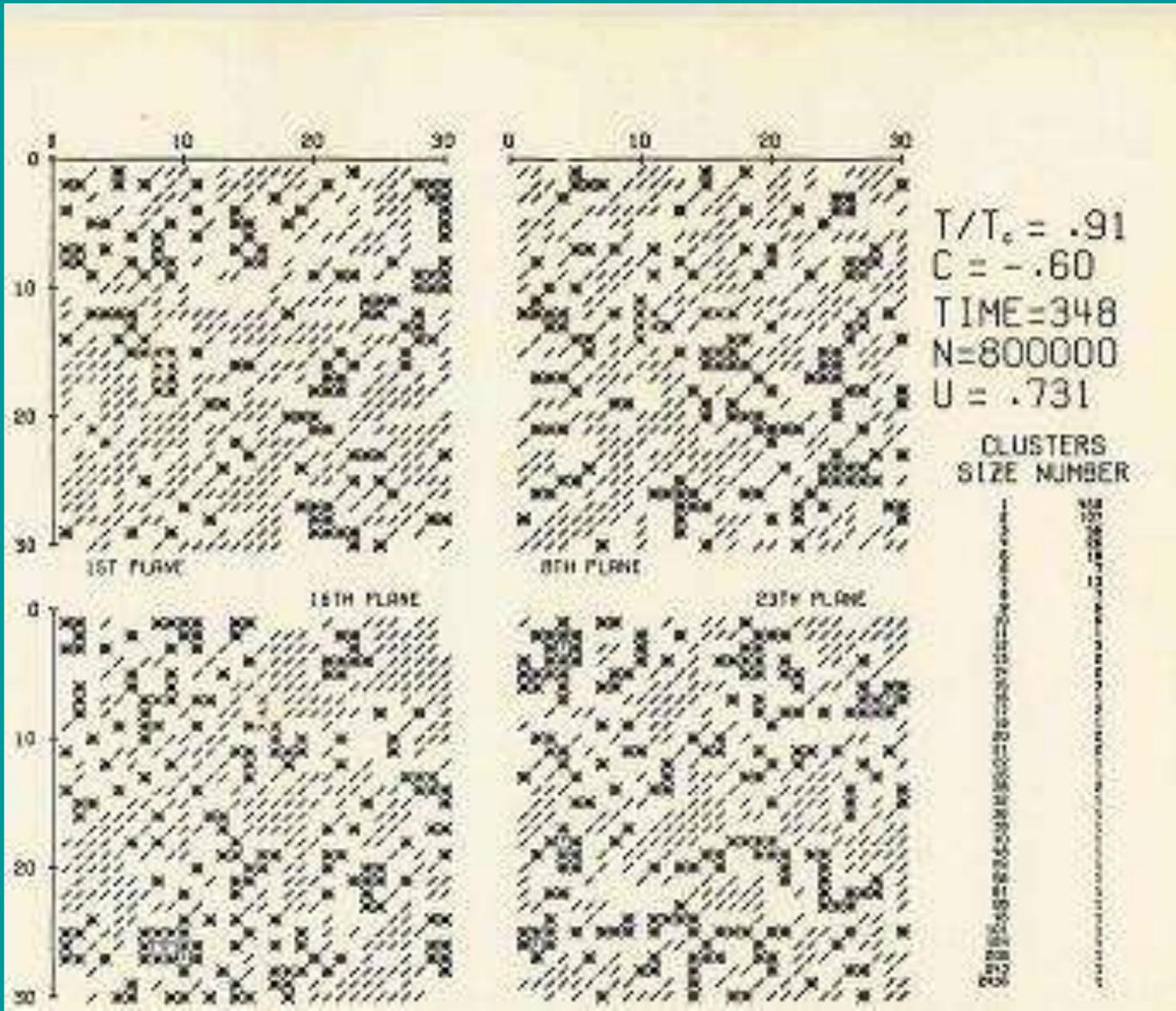
Lo mismo, pero al cabo de un tiempo; se observa la tendencia de las partículas a agruparse con las de su misma especie.



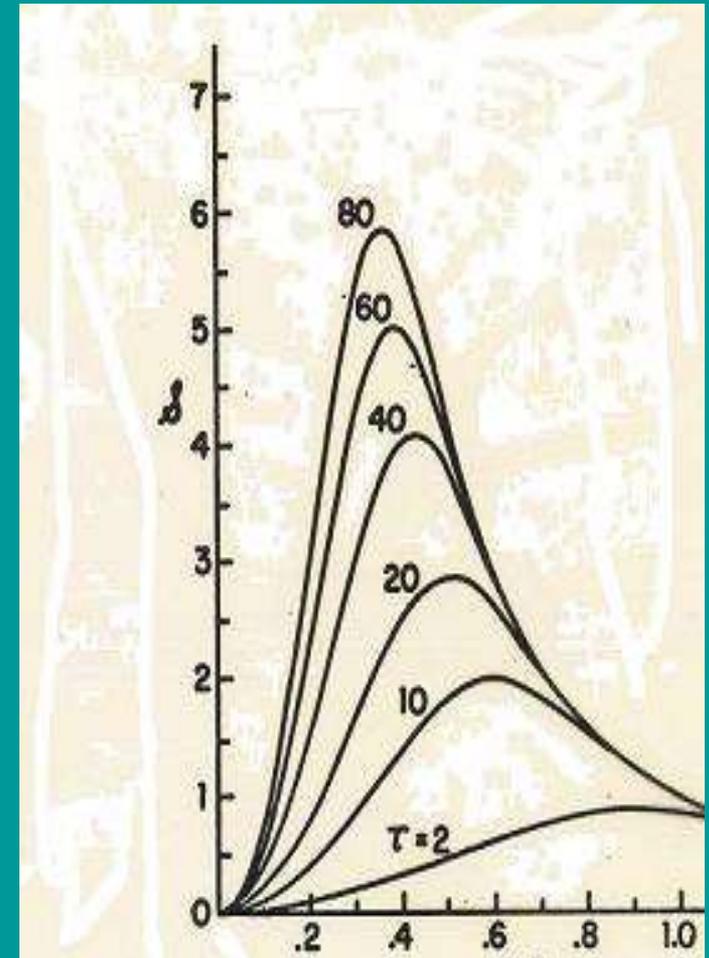
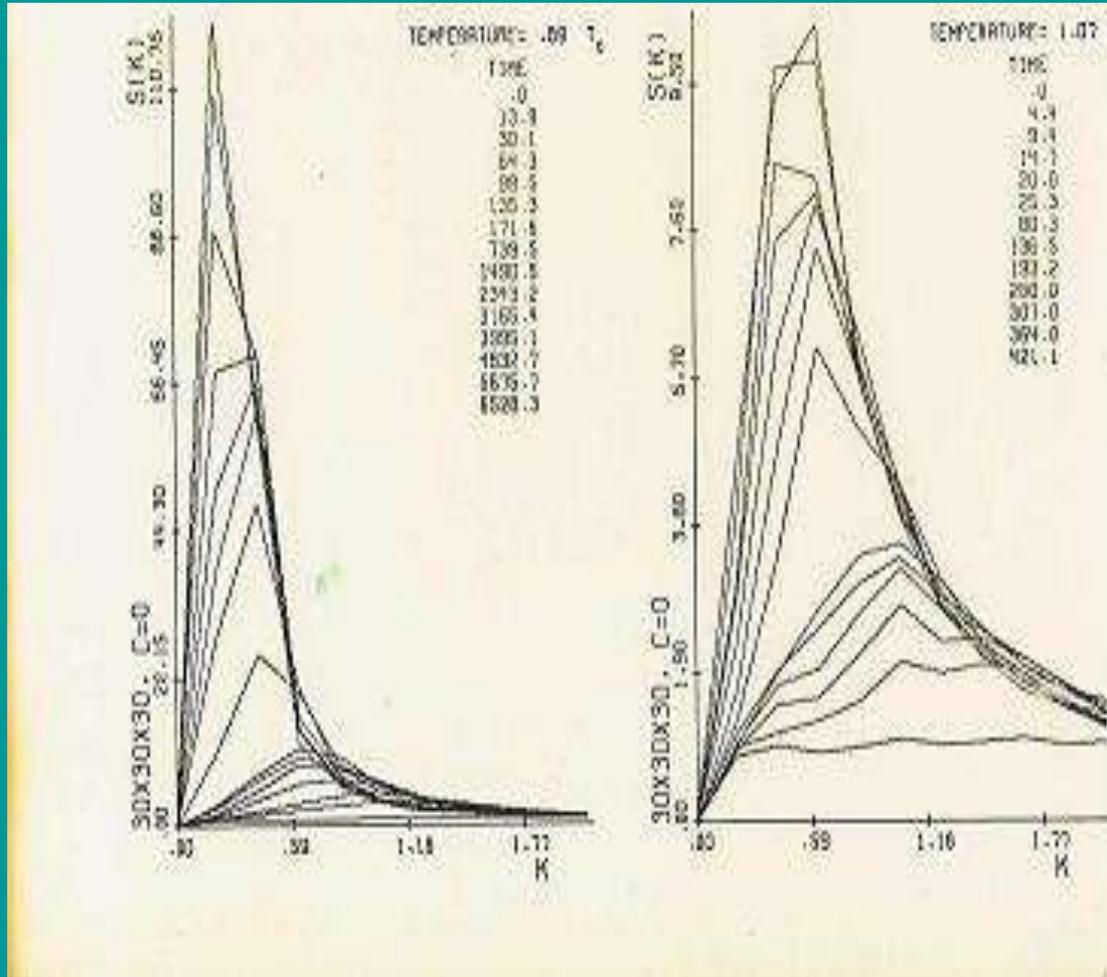
Simulación en el ordenador del comportamiento de una aleación binaria.
 Todavía más tarde: los grupos de partículas A son ya muy compactos.



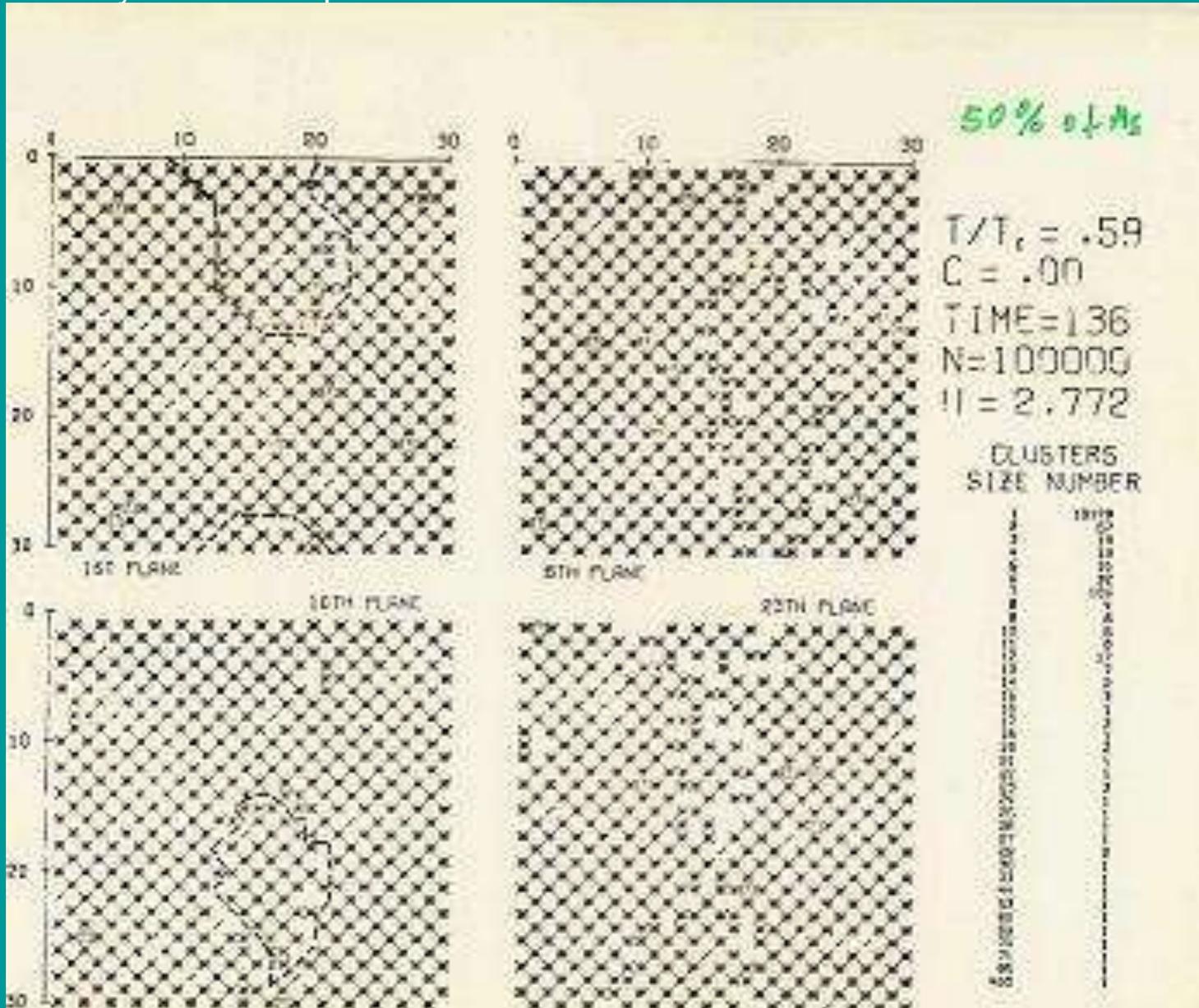
Simulación en el ordenador del comportamiento de una aleación binaria. Aquí se muestra un momento de la evolución en el caso de temperatura alta, pero todavía en la zona de segregación, donde los grupos son menos compactos.



Simulación en el ordenador del comportamiento de una aleación binaria. La evolución puede también seguirse calculando en cada t la función de estructura (transformada de Fourier de la función de correlación espacial) que puede medirse en experimentos reales puesto que es proporcional a la intensidad difundida en experimentos de dispersión. Se muestran la simulada y la real obtenida con neutrones lentos en Al-Zn.

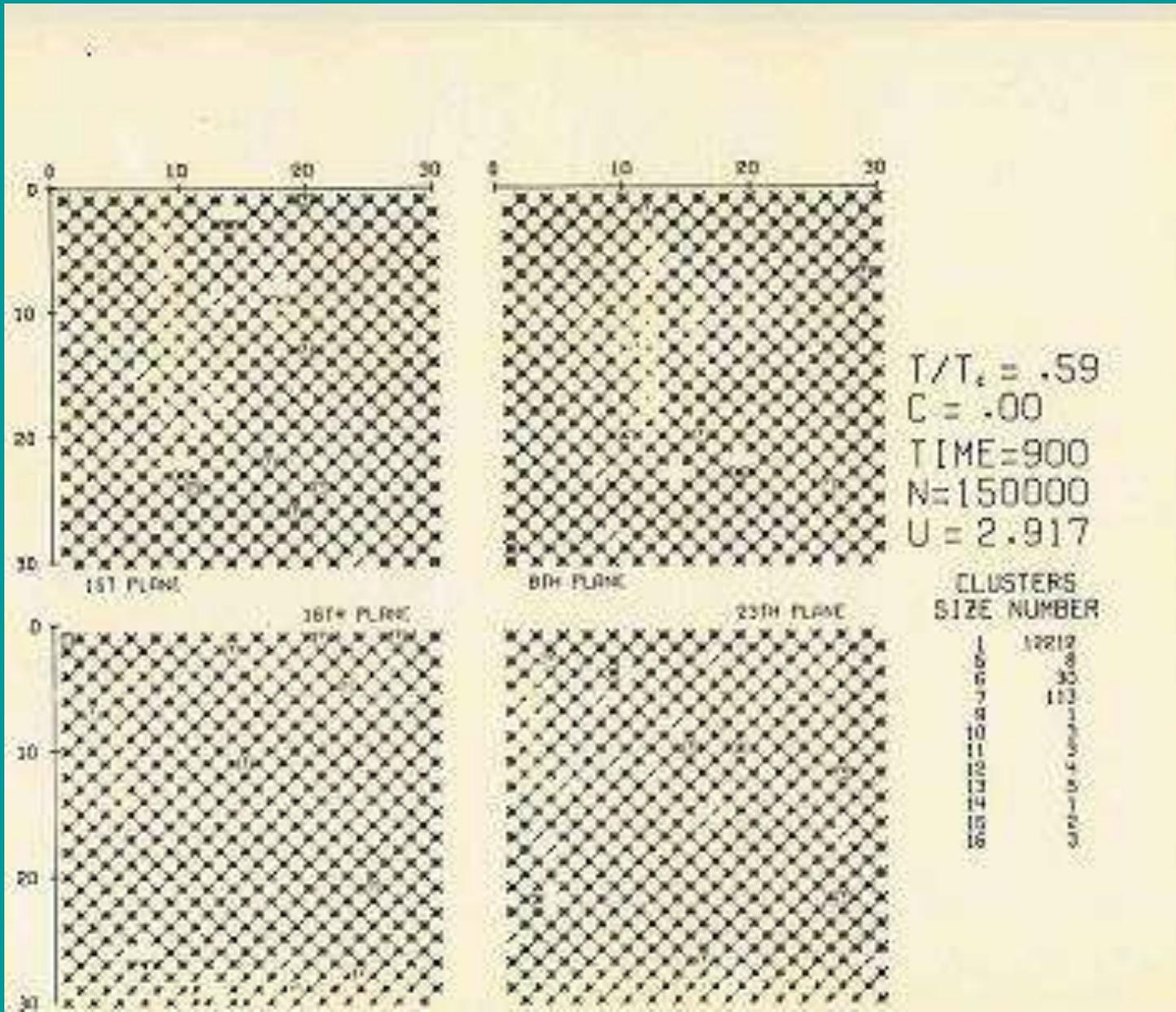


Simulación en el ordenador del comportamiento de una aleación binaria.
 Lo mismo que antes, pero con el *modelo 2* mostrado tendencia a formar dos super-redes cuando hay un 50% de partículas A. Nótese discontinuidades en el orden más general.



Simulación en el ordenador del comportamiento de una aleación binaria.

... y algo más tarde, cuando el orden es casi perfecto (a esta T, que es baja)



Estas situaciones **ocurren de hecho** en aleaciones:

1. Al-Zn, Cu-Ti, Ni-Si, Au-Pt,... tendencia a agrupamientos, como modelo 1, aunque situación más complicada, pues:
 - red cúbica simple –en la que pensábamos– es casi excepción,
 - hay nudos vacíos, y deformaciones y defectos donde quizá la tendencia es a otro tipo de orden,
 - segundos vecinos pueden interaccionar, etc.
2. Au-Cu, Au-Cd, Mg-Cd, Cu-Zn,... presentan tendencia a formar super-redes (también complicada por esos factores)

Si, partiendo orden perfecto, **elevamos T** , la e térmica kT induce aleatoriedad que tiende a destruir orden perfecto

ej, en caso 1, esfera puede segregarse en partes no esféricas que, siendo ricas en As, contienen Bs en interior:

Mayor T , grumos de A son menos compactos y contienen más Bs

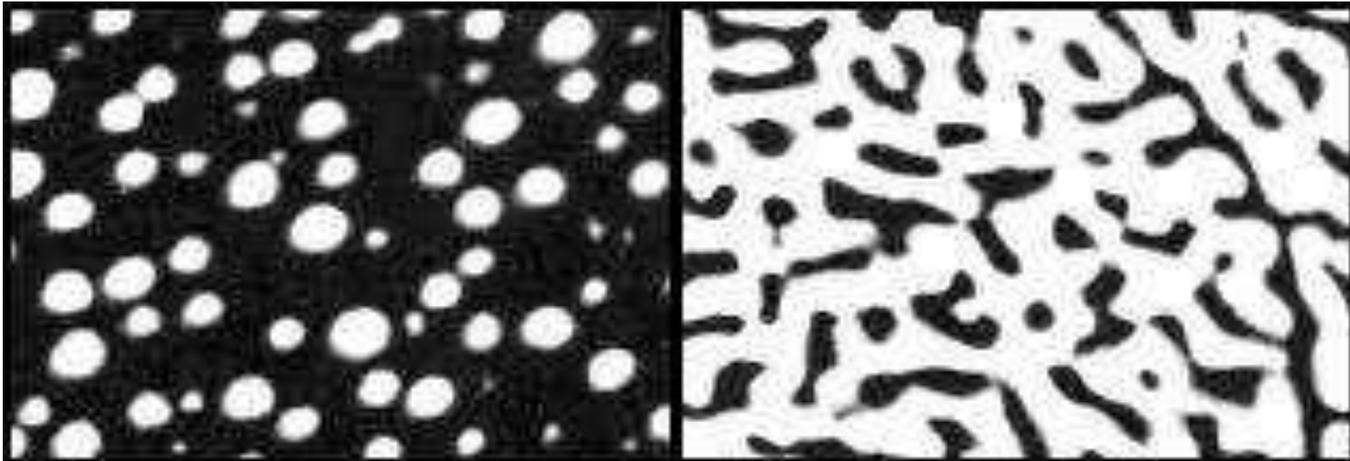
Noticia el 23 de abril de 2008:

Un nuevo material artificial está suscitando una revolución en el desarrollo de aplicaciones electrónicas. Se trata de una nueva "superred" compuesta de óxidos de metal de transición, esto es, una estructura compuesta por múltiples capas alternas de grosor atómico de óxidos distintos (PbTiO_3 y SrTiO_3). Esto dota a la red de propiedades radicalmente distintas de las de los dos óxidos por separado, consecuencia de las interacciones atómicas en las zonas de contacto entre las capas, lo que provoca la llamada ferroelectricidad impropia.

Esta propiedad, un tipo de ferroelectricidad que se produce raras veces en materiales naturales y con efectos suelen demasiado pequeños para poder aprovecharse, tiene muchas aplicaciones, en memorias informáticas no volátiles, máquinas microelectromecánicas o detectores de infrarrojos.

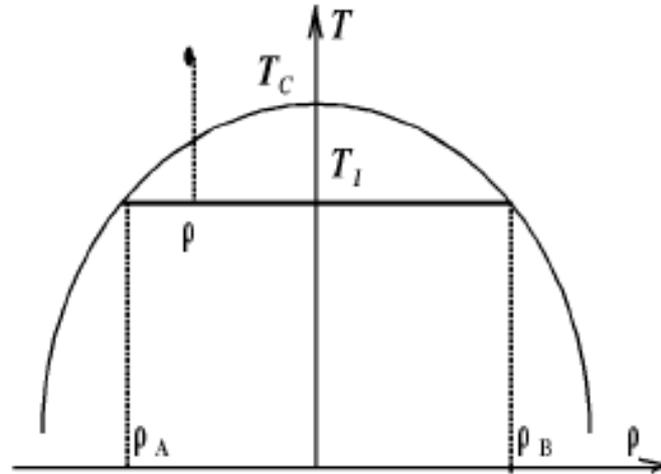
Esos materiales también muestran una nueva propiedad excepcionalmente útil: la dieléctrica. Se trata de la capacidad de poseer una temperatura muy alta y, simultáneamente, ser independiente de la temperatura.

Evidencia experimental de formación de grumos en aleaciones reales (distinta composición y proporción):



Las siguientes ideas parecen importantes aquí:

- Se tiene
$$\rho = x \rho_A + (1-x) \rho_B$$
 con $\rho_A, \rho_B =$ densidades fases ricas en As y Bs, $\rho =$ densidad media sistema. Si $\rho = \text{const.}$ (ej., para aleaciones), x dado y ρ_A, ρ_B son $f(T)$: ρ_A y ρ_B son máximas en $T=0\text{K}$ y disminuyen al aumentar T :

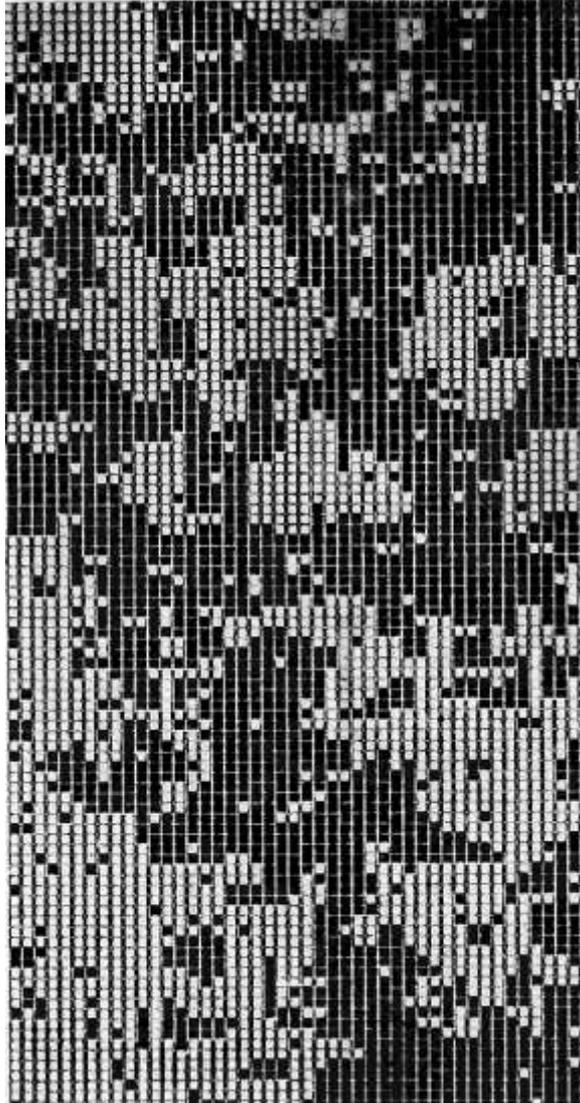


- los trozos en q se divide fase A se caracterizan mediante longitud de correlación, $\xi = f(T)$: mide grumo en $T=0\text{K}$, y crece para $T \rightarrow T_C$ (de hecho, “diverge” en T_C) (volveremos sobre esto)

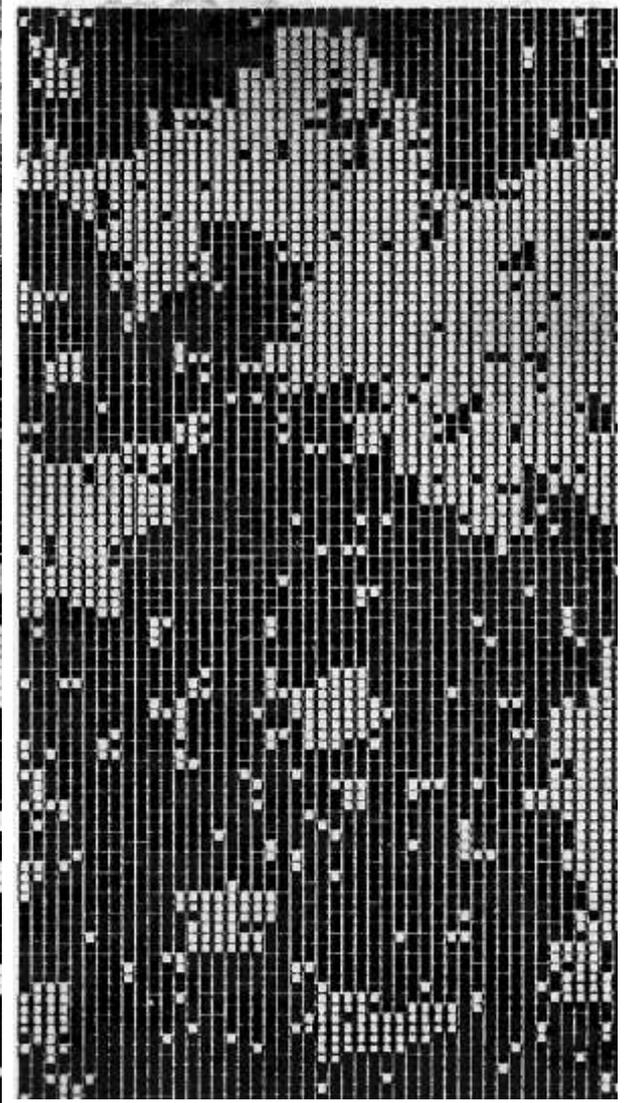
cambio de la longitud de correlación con la temperatura, en una simulación del modelo de Ising, mostrando su divergencia: $\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}$ para $T \rightarrow T_c$



$T = 2 T_c$



$T = 1.05 T_c$



$T = T_c$

Las siguientes ideas parecen importantes aquí:

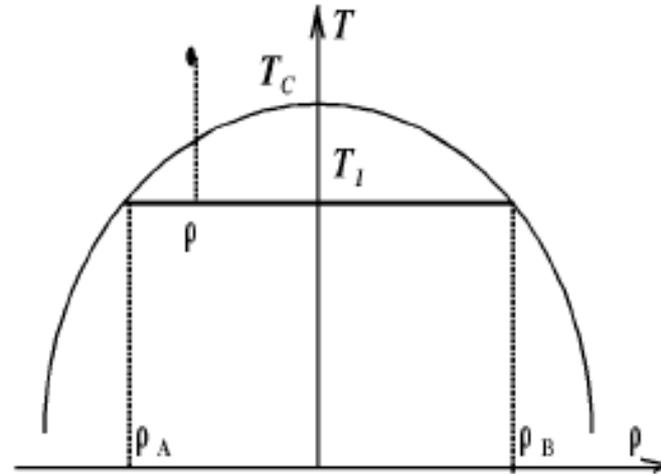
- Se tiene

$$\rho = x \rho_A + (1-x) \rho_B$$

con ρ_A, ρ_B = densidades fases ricas en As y Bs, ρ = densidad media sistema.

Si $\rho = \text{const.}$ (ej., para aleaciones), x dado y ρ_A, ρ_B son $f(T)$:

ρ_A y ρ_B son máximas en $T=0K$ y disminuyen al aumentar T :



- los trozos en q se divide fase A se caracterizan mediante longitud de correlación, $\xi = f(T)$: mide grumo en $T=0K$, y crece para $T \rightarrow T_C$ (de hecho, “diverge” en T_C) (volveremos sobre esto)
- $T > T_C$: fase homogénea, mezcla de As y Bs, pero orden de corto alcance (grumos microscópicos), ej., $\xi \sim$ unas pocas celdas.
- $T \rightarrow \infty$: domina agitación térmica, luego estado completamente homogéneo, desordenado, incluso a nivel microscópico.

Hamiltoniano para el modelo de aleación binaria

- Sea red dimensión d con *variables concentración* en nodos $i=1, \dots, N$ tq:

$$\text{A en } i: \quad c_i^A = 1 \quad \text{y} \quad c_i^B = 0$$

$$\text{B en } i: \quad c_i^A = 0 \quad \text{y} \quad c_i^B = 1$$

- Es razonable considerar el hamiltoniano

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} \left[c_i^A c_j^A \varphi_{AA}(r_{ij}) + c_i^B c_j^B \varphi_{BB}(r_{ij}) + 2c_i^A c_j^B \varphi_{AB}(r_{ij}) \right] - \sum_i \left[c_i^A \mu_A(\vec{r}_i) + c_i^B \mu_B(\vec{r}_i) \right]$$

donde $\langle ij \rangle$ = parejas v. próximos y μ = potencial químico local cada especie.

- Introducimos *variables ocupación* tq:

$$s_i = +1 \text{ (A)} \quad \text{ó} \quad -1 \text{ (B)} \quad c_i^A = \frac{1}{2} (1 + s_i) \quad c_i^B = \frac{1}{2} (1 - s_i)$$

y el hamiltoniano queda:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} s_i s_j - \sum_i \mathcal{H}_i s_i$$

donde

$$2J_{ij} \equiv \varphi_{AB}(r_{ij}) - \frac{1}{2} \left[\varphi_{AA}(r_{ij}) + \varphi_{BB}(r_{ij}) \right]$$

$$\mathcal{H}_i \equiv \sum_{j(\neq i)} \left[\varphi_{BB}(r_{ij}) - \varphi_{AA}(r_{ij}) \right] + \mu_A(\vec{r}_i) - \mu_B(\vec{r}_i)$$

Este hamiltoniano puede todavía simplificarse:

(así toma la forma que luego llamamos “hamiltoniano de Ising”)

$$H = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} s_i s_j - \sum_i \mathcal{H}_i s_i \longrightarrow H = -J \sum_{\langle ij \rangle}^{qN/2} s_i s_j - \mathcal{H} \sum_i s_i$$

donde hemos supuesto

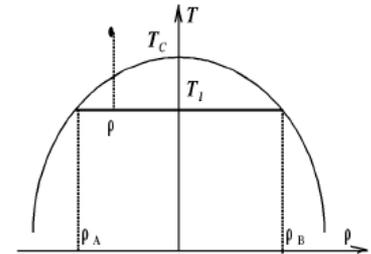
- isotropía, de modo que $J_{ij} = J$ para toda pareja i, j , donde
 - $J > 0$: se favorecen los productos $s_i s_j = +1$, ee, parejas AA y BB, luego hay tendencia a la formación de grumos,
 - $J < 0$: se favorecen los productos $s_i s_j = -1$, ee, parejas AB, luego hay tendencia a la formación de super-redes
- homogeneidad, de modo que $\mathcal{H}_i = \mathcal{H} > 0$ en todo nudo i .

- Una medida del orden (si las dos “especies” son intercambiables, $A \leftrightarrow B$) es el exceso de una sobre la otra (promediado sobre configuraciones):

$$\langle M \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^N s_i \right\rangle = N(\rho_A - \rho_B)$$

- En efecto, según la *curva de coexistencia* que vimos, el modelo tiene transición a un estado ordenado si:

$$\langle M \rangle \neq 0 \quad (\rho_A - \rho_B \neq 0) \quad \text{para} \quad \mathcal{K} \rightarrow 0, \quad T < T_C$$



- Para ver si el modelo presenta esta propiedad, hemos de calcular la FP canónica, puesto que se tiene (ya lo vimos explícitamente; comprobad):

$$\langle M \rangle = \sum_{s_i = \pm 1} \dots \sum_{s_N = \pm 1} M e^{-\beta \mathcal{H}(\{s_i\})} = kT \frac{\partial}{\partial \mathcal{K}} \ln Z_N(T, \mathcal{H})$$

donde

$$Z_N(T, \mathcal{H}) = \sum_{s_i = \pm 1} \dots \sum_{s_N = \pm 1} \exp \left[-\beta \left(-J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - \mathcal{K} \sum_i s_i \right) \right]$$

Para calcular $Z_N(T, \mathcal{H})$, hemos de escribirla explícitamente:

- las configuraciones son muy degeneradas; H no depende del valor de todas las s_i , sino del de unos pocos parámetros:
 - $N_A = n^0$ total de partículas A (o de nodos con partículas A), y
 - $N_{AA} = n^0$ total de parejas AA que sean vecinos próximos.
- para comprobar este hecho, definimos también:
 - $N_B = n^0$ total de partículas tipo B; se tiene $N_B = N - N_A$
 - $N_{BB} = n^0$ total de parejas BB que sean vecinos próximos
 - $N_{AB} = N_{BA} = n^0$ total de parejas AB que sean vecinos próximos
- Se tiene inmediatamente ($q = n^0$ de coordinación de la red):
 - $qN_A = 2N_{AA} + N_{AB}$
 - $qN_B = 2N_{BB} + N_{AB}$

En efecto, tomemos un nudo A cualquiera y lanzamos uniones a sus vp 's: habremos dibujado q líneas,

Repetimos con todos los A 's: habremos dibujado qN_A líneas.

Pero éstas pueden también contarse notando que:

entre cada AA habrá dos líneas $\rightarrow 2N_{AA}$

entre cada AB habrá una línea $\rightarrow N_{AB}$

no habrá línea entre las parejas BB

Esto justifica la 1ª igualdad; un argumento similar lleva a la 2ª.

Para calcular $Z_N(T, \mathcal{H})$, hemos de escribirla explícitamente:

- las configuraciones son muy degeneradas; H no depende del valor de todas las s_i , sino del de unos pocos parámetros:
 - $N_A = n^0$ total de partículas A (o de nodos con partículas A), y
 - $N_{AA} = n^0$ total de parejas AA que sean vecinos próximos.
- para comprobar este hecho, definimos también:
 - $N_B = n^0$ total de partículas tipo B; se tiene $N_B = N - N_A$
 - $N_{BB} = n^0$ total de parejas BB que sean vecinos próximos
 - $N_{AB} = N_{BA} = n^0$ total de parejas AB que sean vecinos próximos
- Se tiene inmediatamente ($q = n^0$ de coordinación de la red):
 - $qN_A = 2N_{AA} + N_{AB}$
 - $qN_B = 2N_{BB} + N_{AB}$
- y podemos escribir sucesivamente:
 - $N_{AB} = qN_A - 2N_{AA}$
 - $N_{BB} = \frac{1}{2}qN_B - \frac{1}{2}N_{AB} = \frac{1}{2}q(N - N_A) - \frac{1}{2}(qN_A - 2N_{AA})$
 $= \frac{1}{2}qN - \frac{1}{2}qN_A - \frac{1}{2}qN_A + N_{AA} = \frac{1}{2}qN - qN_A + N_{AA}$

de donde

$$\sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j = N_{AA} + N_{BB} - N_{AB} = 4N_{AA} - 2qN_A + \frac{1}{2}qN$$
$$\sum_i s_i = N_A - N_B = 2N_A - N$$

- En consecuencia, el hamiltoniano es

$$\begin{aligned} H(N_A, N_{AA}) &= -J(4N_{AA} - 2qN_A + \frac{1}{2}qN) - \mathcal{H}(2N_A - N) \\ &= -4JN_{AA} + 2(qJ - H)N_A - (\frac{1}{2}qJ - \mathcal{H})N \end{aligned}$$

- y la FP (1º suma sobre N_A ; luego sobre los N_{AA} compatibles):

$$\begin{aligned} Z_N(T, \mathcal{H}) &= \sum_{N_A, N_{AA}} g(N_A, N_{AA}) \exp[-\beta H(N_A, N_{AA})] \\ &= e^{\beta \left(\frac{1}{2}qJ - \mathcal{H} \right) N} \sum_{N_A=0}^N e^{-2\beta(qJ - \mathcal{H})N_A} \sum_{N_{AA}} g(N_A, N_{AA}) e^{\beta 4JN_{AA}} \end{aligned}$$

- Ee, la dificultad reside en el cálculo de $g(N_A, N_{AA})$, definido:
 - nº de configuraciones posibles con N_A y N_{AA} , o bien
 - nº de formas distintas de colocar N objetos A y B en la red de modo q se tengan los número dados para N_A y N_{AA} .

¡CALCULAR Z_N SE REDUCE A UN PROBLEMA* COMBINATORIAL!

aprenderemos a resolverlo (exacta o aproximadamente) en algunos caos interesantes

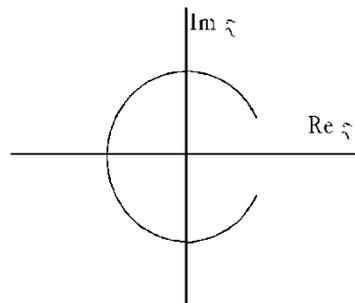
Problema: calculad distribución ceros para Ising ferromagnético en $d = 1$. Usad colectividad macrocanónica, campo 0 e interacciones vecinos próx.

Es caso particular T. de Lee: Si energía interacción entre dos elementos es +infinito cuando ocupan el mismo nudo d la red y 0 o negativa en otro caso, **todos** los 0 de FP en un círculo, en el plano complejo, con centro en $z=0$.

Se llega con facilidad a que los ceros se encuentran en

$$z = \eta^2 \exp(i\vartheta), \quad \eta \equiv \exp(-2\beta J), \quad \cos \vartheta \equiv -\eta^2 + (1-\eta^2) \cos (2k-1)\pi N^{-1}$$

con $k = 1, 2, \dots, N = n^\circ$ espines en sistema y $J =$ magnitud de la interacción entre dos vecinos próximos. Para $N \rightarrow \infty$, esta distribución se hace continua, formando especie de herradura:



que sólo cierra sobre el eje real para $\eta = 0$, ee, para $T = 0^\circ\text{K}$, lo que implica que este sistema (**unidimensional**) sólo presenta transición **para** \rightarrow **ferro** en el cero absoluto.

Modelo de Lenz—Ising

- Lenz (1920) propuso a su alumno doctoral Ising en un tiempo en el que Uhlenbeck+Goudsmit trataban de convencer de q el electrón tenía espín $\frac{1}{2}$ con dirección cuantizada en presencia de c. magnético explicar el ferromagnetismo a partir del concepto de espín

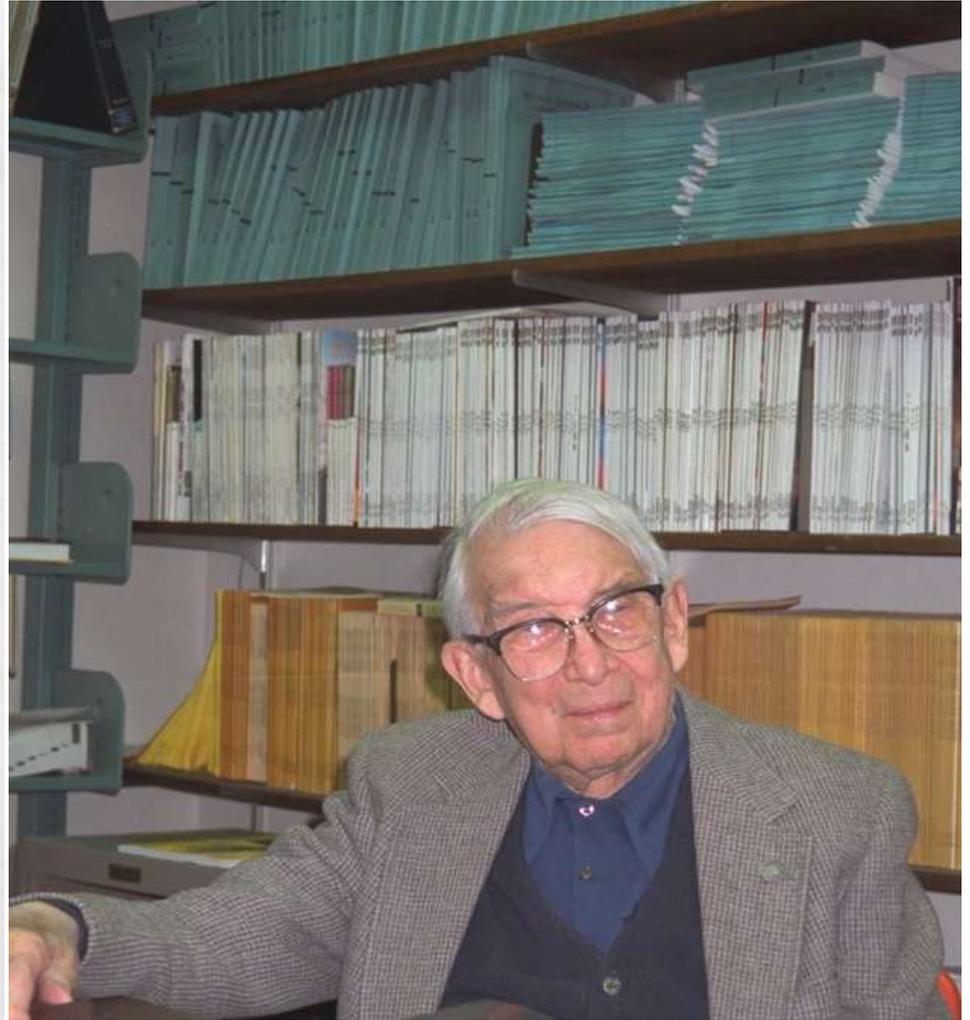
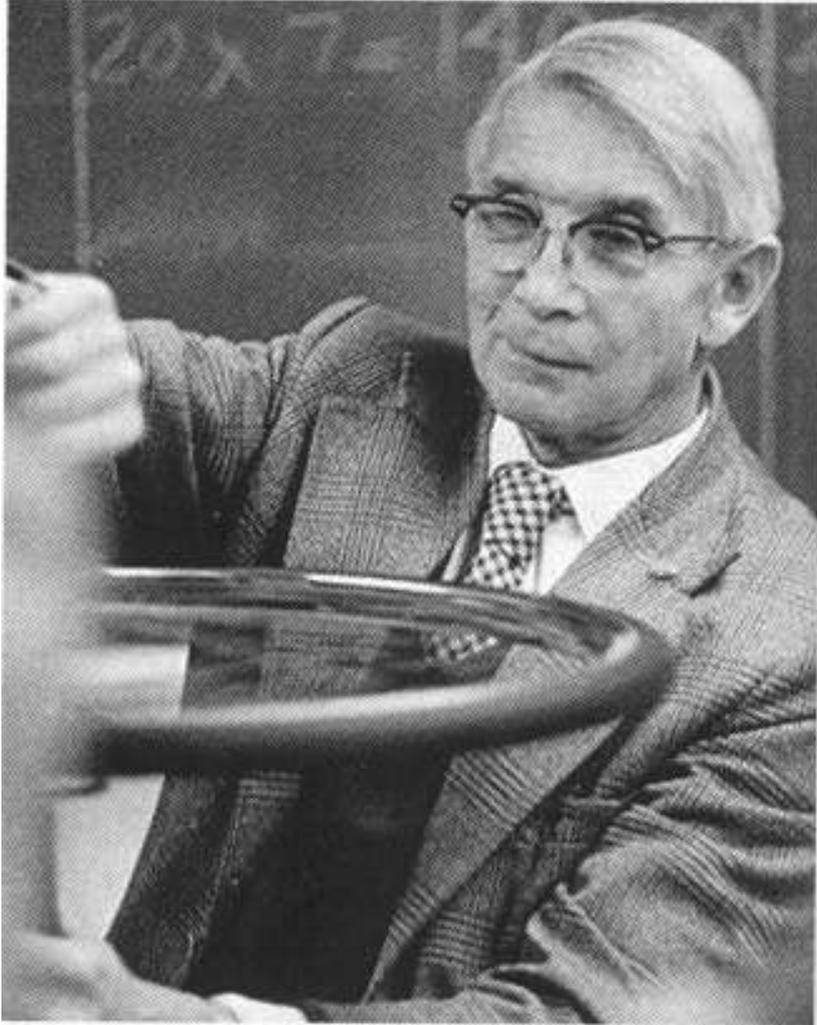
Lenz intuyó q existencia de estado magnéticamente ordenado ($M \neq 0$) a baja T en ausencia de campo, consecuencia de interacción entre espines en red cristalina; si ocurría por debajo T bien definida, se tendría **1er modelo ferromagnetismo***

- Se intentó con el hamiltoniano: con la interpretación $s_i = \pm 1$, correspondientes a los posibles estados del espín electrónico.

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i$$

- Puede resolverse exactamente en $d = 1$, y en $d = 2$ con $h = 0$.
- Ising (1925) resolvió caso $d=1$, que no presenta la transición buscada, ee, $T_C = 0$.

Uno de los hombres más citados en física teórica:



Dr. Ernest ISING, born 10 MAY 1900 in Koeln, passed away on 11 MAY 1998 in Peoria.
Biographical notes in: S.Kobe, "Ernst Ising - physicist and teacher", *J. Stat. Phys.* **88**, 991 (1997)

Bibliografía más relevante (consúltense también página Web del curso):

- Wilhelm Lenz (1888-1957) introduce el modelo en
W. Lenz, *Phys. Zeitschrift* **21**, 613 (1920)
- Solución para $d=1$ y extensión –errónea – a $d=3$ aparecieron en
E. Ising, Thesis (in German), Hamburg, 1924, y
E. Ising, *Zeitschrift f. Physik* **31**, 253 (1925)
- Otros trabajos pioneros que mencionaremos son
W. Heisenberg, *Zeitschrift f. Physik* **49**, 619 (1928)
R. Peierls, *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **32**, 477 (1936)
L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944)
B. Kaufman & L. Onsager *Phys. Rev.* **76**, 1232, 1244 (1949)
S.G. Brush, *Rev. Mod. Phys.* **39**, 883 (1967) (historia)

Importancia de la dimensión en fenómenos cooperativos

Ausencia de transición $d=1$ puede entenderse:

- Sea estado ordenado, con todos los espines “down”: fluctuación térmica del equilibrio puede invertir serie de espines consecutivos en la cadena.
- Tal inversión no puede ser contrarrestada por efecto espines no invertidos en los extremos, pues hay tendencias misma intensidad y distinto signo:



- En consecuencia, fluct pueden destruir, y destruirán, estado ordenado, ee, no es estable en $d=1$ para $T>0$.
- Mismo argumento válido si interacción sobrepasa vps; condición: que sea de alcance limitado y menor que la anchura de la fluctuación.
- Prob no nula de una fluct, por grande que sea, aunque sea orden del tamaño del sist, luego el modelo $d=1$ sólo puede tener $T_C > 0$ para interacciones de alcance ilimitado o infinito.
- **Argumento falla si $d>1$: interacciones pueden propagarse por otros caminos.**

- Ernst Ising (1900-1998) demostró que el modelo unidimensional no presentaba la transición esperada, pero no reparó en papel fundamental de la dimensión en este problema.
- Este fallo (aparente) llevó a Heisenberg a proponer en 1928 interacción más complicada entre espines, que consideró vectoriales.
- Pero Peierls demostró la existencia de estados ordenados en el modelo de Ising en $d=2$ a bajas T s y
- Onsager presentó en 1944 el primer cálculo exacto de la FP del modelo de Ising con red cuadrada sin campo.*
- El caso $d=3$ sigue sin solución exacta, pero sí aproximada con extraordinaria exactitud (Monte Carlo + Grupo de Renormalización).

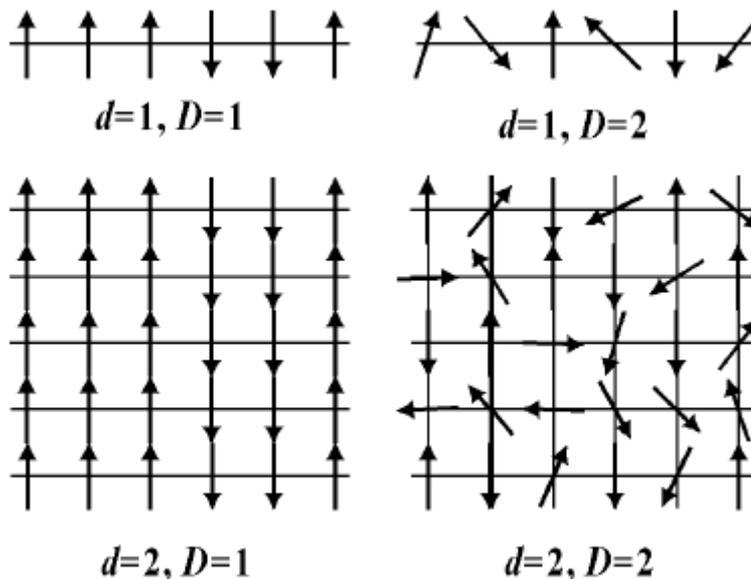
Modelo de Heisenberg y variantes

El h. de (en lo sucesivo) Ising tiene su generalización natural en

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} \vec{s}_i^{(D)} \vec{s}_j^{(D)} - \vec{h} \cdot \sum_i \vec{s}_i^{(D)}$$

donde

- las 3 sumas se extienden a todo nodo de red d -dimensional*
- las variables de espín son vectores unidad D -dimensionales, donde $D \neq d$, en general; por ejemplo:



- los espines son cuantizados, con $2s+1$ estados, de modo q se requiere tratamiento cuántico, con límite clásico $s \rightarrow \infty$

- Tratamiento de este H, cierta sencillez matemática en pocos casos, no siempre los d + interés físico, aunque caso + sencillo ($D=1$, para toda d : Ising), el + relevante: de hecho, muchas propiedades, incluso las críticas, débil dependencia en s .
- Modelo de Heisenberg: $d=D=3$. Heller & Kramers (1934) estudian versión clásica ($s \rightarrow \infty$) a bajas T 's. La cuántica (s finito) representa bien algunos materiales.*
 - $D > 3$, sigue bien definido; interesante pues tiene solución exacta cuando:
 - $D \rightarrow \infty$ con $d=1,2,3$, incluso para $h > 0$ e interacciones varias (ej, vp's e interacciones de largo alcance de la forma $J(r) \sim r^a$, $a > d$.
Este modelo coincide, en el sentido de que ambos tienen la misma FP, con el celebrado modelo esférico de Kac (1947), cuyos espines tienen longitud arbitraria (no necesariamente unidad) restringida por la condición $\sum s_i = N$
 - $d=1$ para cualquier D
 - $D = 2$ (cualquier d) es el modelo planar de Heisenberg, estudiado (Vaks & Larkin 1966) en relación con la superfluidez en sistema de bosones

Hemos de entender por qué el hamiltoniano de Heisenberg es un buen modelo de cristal magnético, esto es, en qué pudo basar Lenz su intuición.

Modelo de cristal magnético

- cristal magnético ideal: red con átomos con momento magnético:*

$$\boldsymbol{\mu} = g \mu_B \mathbf{s}$$

donde $g, \mu_B = \text{const.}$, $\mathbf{s} = \text{m. angular total}$, con $2s+1$ orientaciones, luego $(2s+1)^N$ configuraciones posibles, cada una con cierta e. (degenerada) consecuencia interacción mutua entre los $\boldsymbol{\mu}$ s y con campo magn. externo.

- Limitándonos a ferromagnetismo, efectos consecuencia** del espín (no del movimiento orbital) electrónico, luego $s = 1/2$, 2 posibles orientaciones del m. magnético, $\mu_z = \pm \mu_B$, y 2^N configuraciones.

- La MQ nos dice que la interacción entre s_i y s_j vp's es:

$$K_{ij} \pm J_{ij}$$

donde K representa interacción directa o culombiana, J e. cuántica de intercambio, y el signo es para espines:

+ : “antiparalelos”, estado *singlete* $\uparrow\downarrow$ antis., de espín total $S=0$

– : “paralelos”, estado *triplete* $\uparrow\uparrow$ simétrico, de $S=1$

- En consecuencia, la diferencia de e. entre estados singlete y triplete es:

$$\varepsilon_{\uparrow\uparrow} - \varepsilon_{\uparrow\downarrow} = K_{ij} - J_{ij} - (K_{ij} + J_{ij}) = -2 J_{ij},$$

donde vemos que

$J_{ij} > 0 \Rightarrow \varepsilon_{\uparrow\uparrow} < \varepsilon_{\uparrow\downarrow} \Rightarrow$ triplete ($\uparrow\uparrow$) favorecido, luego:
puede presentarse ferromagnetismo

$J_{ij} < 0 \Rightarrow \varepsilon_{\uparrow\uparrow} > \varepsilon_{\uparrow\downarrow} \Rightarrow$ singlete ($\uparrow\downarrow$) fovorecido, luego:
puede presentarse antiferromagnet.

- Pues bien, aquella propiedad está implicada por el H. de Heisenberg, ee, es un caso particular de la expresión de Heisenberg para la e. de una pareja de vp que (incluyendo un 2 arbitrario) es:

$$\varepsilon_{ij} = -2 J_{ij} (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j),$$

donde se supone que ε_{ij} representa indistintamente $\varepsilon_{\uparrow\uparrow}$ o $\varepsilon_{\uparrow\downarrow}$.

- Demostración: Notamos $\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j = \frac{1}{2} [(\mathbf{s}_i + \mathbf{s}_j)^2 - \mathbf{s}_i^2 - \mathbf{s}_j^2]$ que tiene valores propios $\frac{1}{2}[S(S+1) - s(s+1) - s(s+1)] = \frac{1}{2} S(S+1) - s(s+1) \equiv \alpha$, de modo que se tiene para cada una de las posibilidades:

triplete ($s = \frac{1}{2}, S=1$):	$\alpha = \frac{1}{4}$,	$\epsilon_{\uparrow\uparrow} = -2 J_{ij} (\frac{1}{4})$
singlete ($s = \frac{1}{2}, S=0$):	$\alpha = -\frac{3}{4}$,	$\epsilon_{\uparrow\downarrow} = -2 J_{ij} (-\frac{3}{4})$

luego $\epsilon_{\uparrow\uparrow} - \epsilon_{\uparrow\downarrow} = -2J_{ij} (\frac{1}{4}) + 2J_{ij} (-\frac{3}{4}) = -2J_{ij}$ QED*

- En este contexto, Ising equivale a reemplazar el producto $\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j = s_{ix}s_{jx} + s_{iy}s_{jy} + s_{iz}s_{jz}$ por uno de sus términos, $s_{iz}s_{jz}$.
 - desde pto de vista matemático, esto se justifica por sencillez resultante: no es necesario tratamiento cuántico puesto que los ope conmutan
 - desde un pto de vista físico, esto es una aproximación anisotrópica: sólo hay cuantización a lo largo del eje z, luego sólo el tno $s_{iz}s_{jz}$ es diagonal (y nulos los valores esperados de los otros tnos)**
- El tno con campo exterior \mathcal{H} representa acción de éste (en dirección z), lo que produce e. potencial adicional de esa forma, como justificado ya en la lección obre paramagnetismo.
- Restricción a vp's es consecuencia de que J_{ij} , aunque del mismo orden de magnitud que K_{ij} , decrece mucho más rápidamente con la distancia y, de hecho, es relativamente pequeña para vecinos segundos.

Gas reticular de Yang y Lee

- Modificaciones, a veces sólo conceptuales, extienden modelo de Ising a otras situaciones físicas con cooperatividad consecuencia de interacciones.
- 1^{er} ejemplo: interpreta $s_i = \pm 1$ como **partícula o hueco** en nodo i , lo que simula un potencial entre partículas:

$$\varphi(r) = \begin{cases} \infty & r = 0 \\ -\varepsilon_0 & r = a = \text{cte. red} \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases}$$

que, como muchos realistas, contiene esfera dura + atracción.

- propuesto por Yang y Lee (1952) trata de representar propiedades cooperativas en fluidos, incluidos sus cambios de fase
 - puede hacerse $a \rightarrow 0$ y añadirle la FP del gas ideal, q representaría la contribución cinética adicional a esta *contribución potencial*
 - para $\varepsilon_0 > 0$ se tienen atracciones y modelo puede ilustrar la transición gas—líquido, mientras que $\varepsilon_0 < 0$ simula repulsiones y puede mimetizar solidificación

Problema planteado puede interpretarse: distribuir N_A partículas entre N nodos, en red con nº coordinación q . Cada configuración tendrá energía:

$$E = -\varepsilon_0 N_{AA},$$

luego (nota: N hace papel de volumen, en unidades de celda básica en la red)

$$Z_{N_A}(T, N) = \sum_{N_{AA}} g(N_A, N_{AA}) \exp(\beta \varepsilon_0 N_{AA})$$

es decir, como en el problema de Ising, todo se reduce aquí a calcular la degeneración $g(N_A, N_{AA})$.

Problema: comparar con detalle el formalismo de los tres modelos introducidos, ee, aleación, Ising magnético y gas.

Aparte de otros hechos interesantes, puede establecerse el isomorfismo que ilustra la siguiente tabla:

mezcla binaria	gas reticular	Ising ferromagn.
N_A	N_A	N_+
N_B	$N - N_A$	N_-
$\varphi_{AA} - 2\varphi_{AB} + \varphi_{BB}$	$-\varepsilon_0$	$4J$
$G - \frac{1}{2}q\varphi_{BB}N - q(\varphi_{AB} - \varphi_{BB})N_A$	G	$-\left(\frac{G}{N} + \frac{1}{2}qJ + \mathcal{H}\right)$

Relevancia física del hamiltoniano de (Lenz–) Ising

- modelo magnético:
 - ferromagnetismo
 - antiferromagnetismo
 - sistemas desordenados:
 - magneto diluido
 - vidrio de espines, etc
 - campos locales al azar
- aleación binaria:
 - agrupamientos, Al-Zn
 - super-redes, Au-Cu
- gas reticular:
 - condensación
 - solidificación
- biología:
 - encimas, hemoglobina, DNA (Thompson)
 - redes de neuronas
- otros:
 - votantes, invasión, fuegos,... (M&D)
 - autómatas celulares, ej. en hidrodinámica

=> Contiene física esencial en fenómenos cooperativos, por doquier; clases de universalidad, Ising muy amplia; simetrías!!

solución Ising d=1; método matricial

Caso d=1 muy interesante, aunque no cambio de fase, pues solución exacta y permite estudiar la naturaleza de métodos para problemas más complejos. Veamos método matricial de Kramers & Wannier (1941) usado por Onsager (1944) para resolver el caso d=2.

Sea cadena lineal N espines, interacciones vp 's, campo magn. externo H
Suponiendo condiciones periódicas en los límites

de la cadena (ee, $\sigma_{N+1} \equiv \sigma_1$):

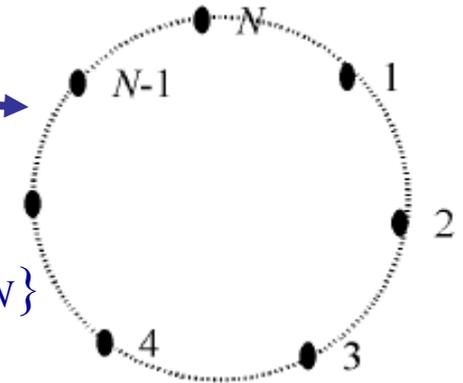
la energía de cada configuración es

$$H(\boldsymbol{\sigma}) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - \mathcal{H} \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad \boldsymbol{\sigma} = \{\sigma_i = \pm 1; i = 1, \dots, N\}$$

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

$$= - \sum_{i=1}^N \left[J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} \mathcal{H} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right]$$

y se tiene la FP:



$$Z(\mathcal{H}, T) = \sum_{\boldsymbol{\sigma}} e^{-\beta H(\boldsymbol{\sigma})} = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp \left\{ \beta \sum_{i=1}^N \left[J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} \mathcal{H}(\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \right\}$$

que, si definimos la matriz:

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+\mathcal{H})} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-\mathcal{H})} \end{pmatrix} \Rightarrow \langle \sigma_i | \mathbf{P} | \sigma_{i+1} \rangle = \exp \left\{ \beta \left[J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} \mathcal{H}(\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \right\}$$

queda:

$$\begin{aligned} Z(\mathcal{H}, T) &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \underbrace{\langle \sigma_1 | \mathbf{P} | \sigma_2 \rangle}_{=1} \underbrace{\langle \sigma_2 | \mathbf{P} | \sigma_3 \rangle}_{=1} \cdots \underbrace{\langle \sigma_{N-1} | \mathbf{P} | \sigma_N \rangle}_{=1} \underbrace{\langle \sigma_N | \mathbf{P} | \sigma_1 \rangle}_{=1} \\ &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \langle \sigma_1 | \mathbf{P}^N | \sigma_1 \rangle = \text{traza}(\mathbf{P}^N) = \lambda_+^N + \lambda_-^N \end{aligned}$$

en términos de los valores propios de la matriz \mathbf{P} .

λ_{\pm} son las soluciones de la ecuación secular,

$$\begin{vmatrix} e^{\beta(J+\mathcal{H})} - \lambda & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-\mathcal{H})} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 - 2\lambda e^{\beta J} \cosh(\beta \mathcal{H}) + 2\sinh(\beta J) = 0$$

de donde

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J} \cosh(\beta \mathcal{H}) \pm \sqrt{e^{2\beta J} \cosh^2(\beta \mathcal{H}) - 2\sinh(2\beta J)} = e^{\beta J} \left[\cosh(\beta \mathcal{H}) \pm \sqrt{e^{-4\beta J} + \sinh^2(\beta \mathcal{H})} \right]$$

Aquí vemos que $\lambda_+ > \lambda_- \geq 0$ para todo H , luego

$$\frac{1}{N} \ln Z(\mathcal{H}, T) = \frac{1}{N} \ln(\lambda_+^N + \lambda_-^N) = \frac{1}{N} \ln \left(\lambda_+^N \frac{\lambda_+^N + \lambda_-^N}{\lambda_+^N} \right) = \ln \lambda_+ + \frac{1}{N} \ln \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right] \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \ln \lambda_+$$

En definitiva:

$$\frac{1}{N} \ln Z(\mathcal{H}, T) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{J}{kT} + \ln \left[\cosh(\beta \mathcal{H}) + \sqrt{e^{-4\beta J} + \sinh^2(\beta \mathcal{H})} \right]$$

de donde se siguen las propiedades del sistema:

- energía libre de Helmholtz por espín:

$$a(\mathcal{H}, T) = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z(\mathcal{H}, T)$$

$$= -J - kT \ln \left[\cosh(\beta \mathcal{H}) + \sqrt{e^{-4\beta J} + \sinh^2(\beta \mathcal{H})} \right]$$

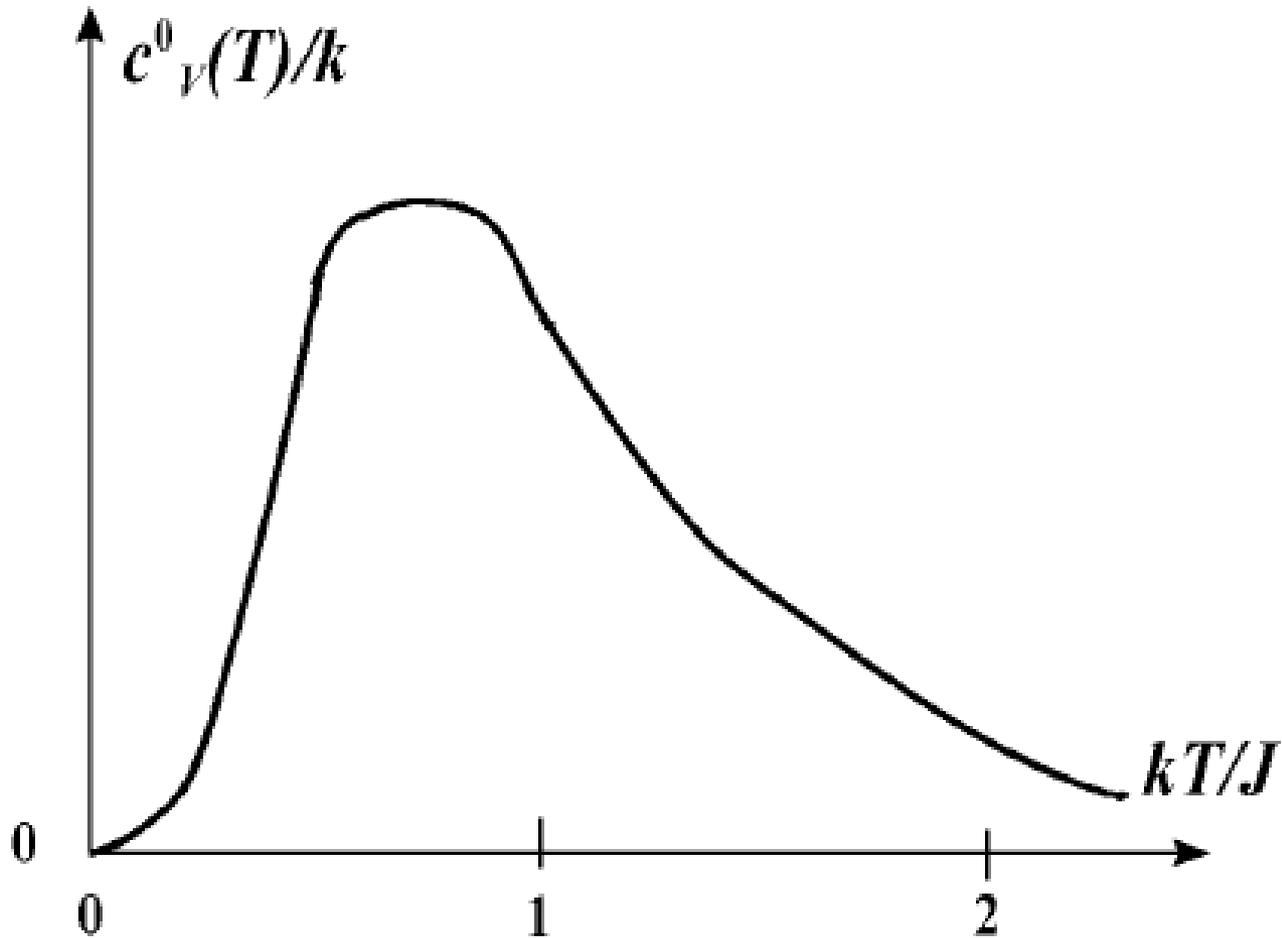
- energía libre para campo exterior nulo:

$$a(0, T) = -J - kT \ln(1 + e^{-2\beta J}) = -kT \ln[2 \cosh(\beta J)]$$

- calor específico:

$$c_V = -T \left(\frac{\partial^2 a}{\partial T^2} \right)_{N, V} = k (\beta J)^2 \operatorname{sech}^2(\beta J) \quad \text{para campo nulo}$$

que se comporta:

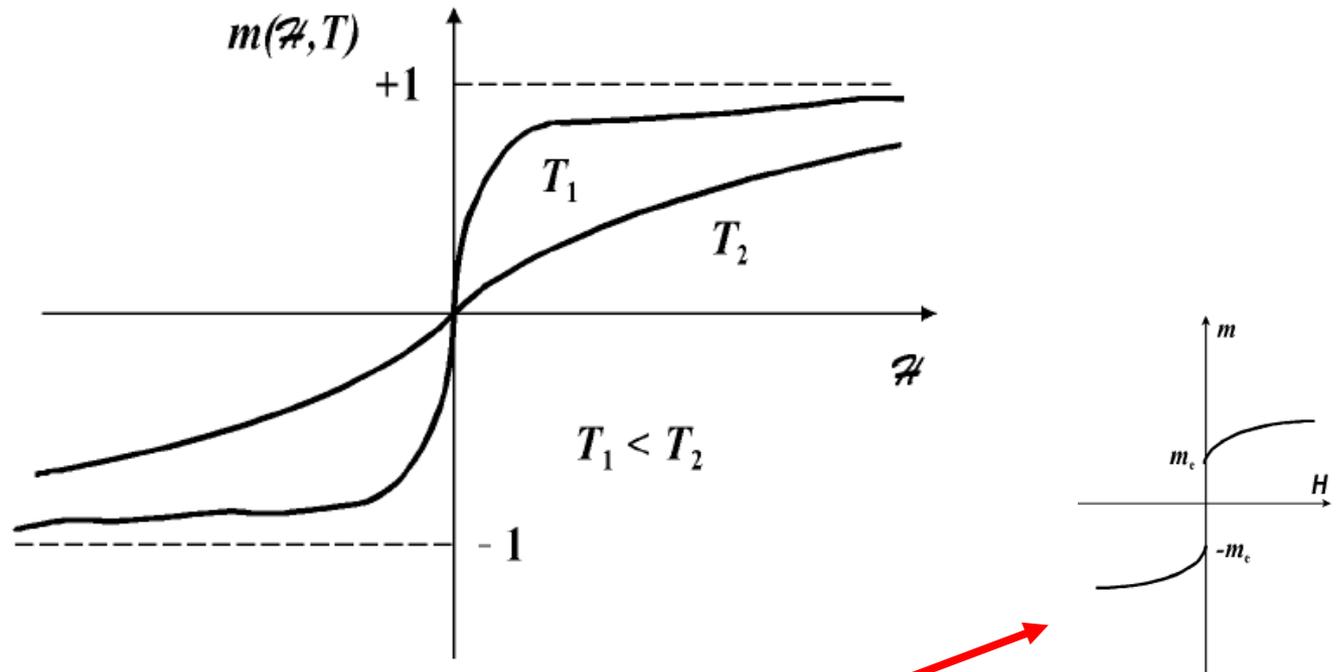


No presenta comportamiento singular como el que habría que esperar en un cambio de fase, sino un pico ancho en $kT/J \sim 1$ (asociado con los dos estados del espín) y una transición suave al variar la T .

- magnetización por espín

$$m(\mathcal{H}, T) = -\left(\frac{\partial a}{\partial \mathcal{H}}\right)_T = \frac{1}{\lambda_+} \sinh(\beta \mathcal{H}) = \frac{\sinh(\beta \mathcal{H})}{\cosh(\beta \mathcal{H}) + \sqrt{e^{-4\beta J} + \sinh^2(\beta \mathcal{H})}}$$

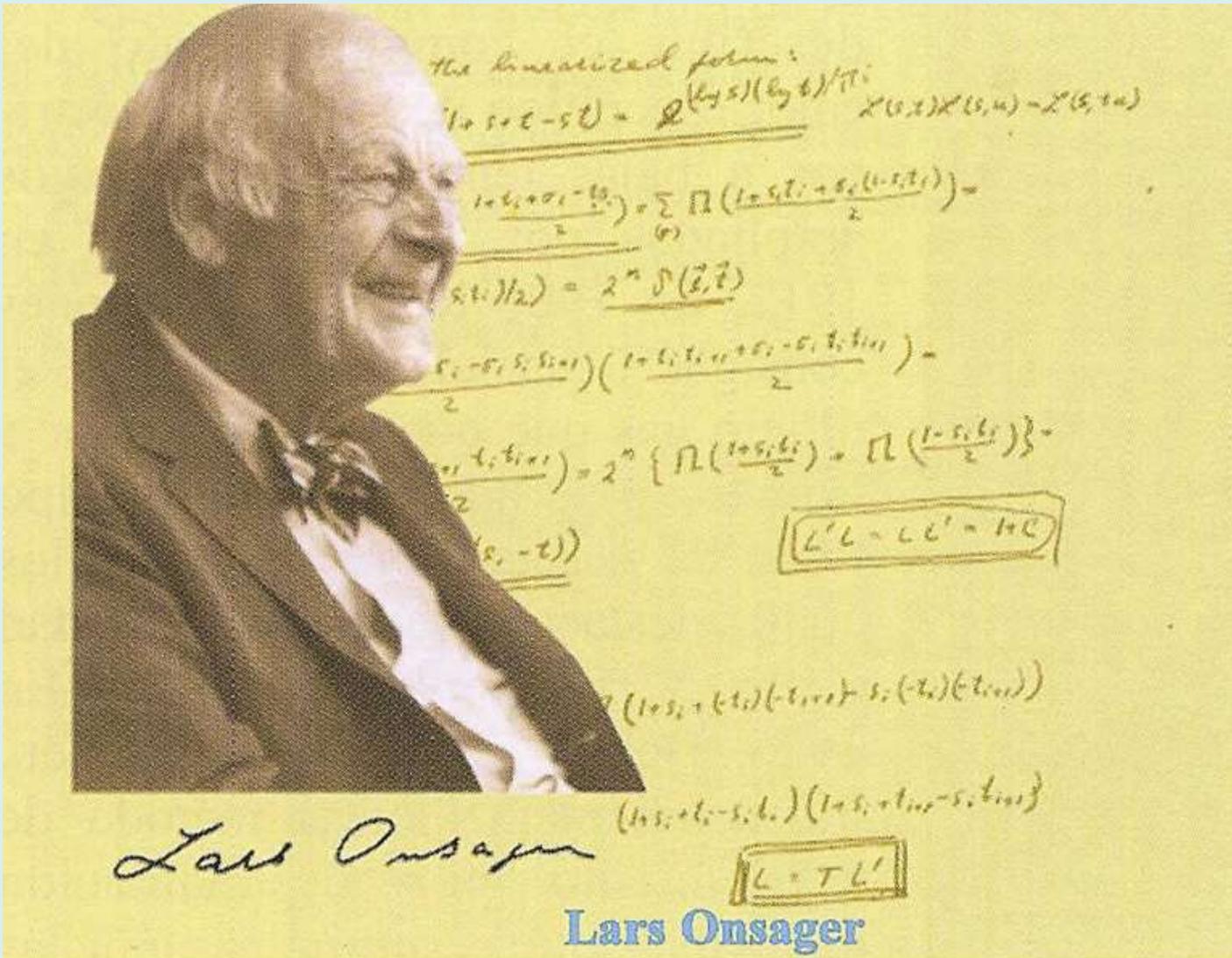
que se comporta



q contrasta con caso en el q hay transición para $T < T_C$ a un estado ferromagnético con magnetización espontánea $m(\mathcal{H} = 0, T) \neq 0$

otros modelos interesantes con solución exacta

- El método matricial fue generalizado por Onsager –con gran ingenio– para $d=2$, $\mathcal{H}=0$, vp's.



otros modelos interesantes con solución exacta

- Sugiero estudiar esta solución, por ejemplo en:
 - C.J. Thompson, *Mathematical Statistical Mechanics*, Princeton Univ. Press, 1970
 - C. Itzykson & J.M. Drouffe, *Statistical Field Theory*, vol. 1, Cambridge Monographs on Mathematical Physics, 1990
 - C.J. Thompson, “Algebraic Derivation of the Partition Function of a Two-D Ising Model”, *Journal of Mathematical Physics* **6**, 1392-1395 (1965)
 - T.D. Schultz, D.C. Mattis & E.H. Lieb, “Two-dimensional Ising Model as a Soluble Problem of Many Fermions”, *Review of Modern Physics* **36**, 856-871 (1964)
 - T.T. Wu, “Theory of Toeplitz Determinants and the Spin Correlations of the Two-dimensional Ising Model, I”, *Phys. Review* **149**, 380-401 (1966)
 - McKoy & Wu, *The Two-dimensional Ising Model*, Harvard Univ. Press 1973.
 - L.P. Kadanoff, “Spin-spin Correlations in the Two-dimensional Ising Model”, *Il Nuovo Cimento* **XLIVB**, 276-304 (1966)
 - R.P. Feynmann, *Statistical Mechanics*, Benjamin (1981), p.127.
 - etc.

- modelo unidimensional de Heisenberg para espín infinito
 - M.E. Fisher, "Magnetism in One-dimensional Systems - the Heisenberg Models for Infinite Spin", *American Journal of Physics* 343 (1963)

La solución es sencilla; el hamiltoniano en cuestión es:

$$H = -2J \sum_{i=1}^N \vec{s}_i \cdot \vec{s}_{i-1} - g \sum_{i=1}^N \vec{\mathcal{H}} \cdot \vec{s}_i, \quad |\vec{s}| \rightarrow \infty$$

- cadena unidimensional con espines de dimensión arbitraria
 - H.E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford 1971, p. 124.

Es interesante; la solución es sencilla, aunque necesita elaborarse algo. Se refiere al hamiltoniano:

$$H^{(D)} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{s}_i^{(D)} \cdot \vec{s}_j^{(D)}$$

- Interacción coulombiana en $d=1$

- A. Lenard, “Exact Statistical Mechanics of a One-dimensional System with Coulomb Forces”, *J. Math. Phys.* **2**, 682 (1961)

Reimpresiones de éste y de otros de los trabajos citados en esta sección en *Mathematical Physics in One Dimension*, E.H. Lieb & D.C. Mattis, Academic Press, New York 1966.

Se trata de un sistema de planos infinitos cargados moviéndose perpendicular a su dirección. Muy bien explicado. También interesante por introducir colectividad a presión cte., y usar grafos para calcular la FP y fracciones continuas.

- K.D. Scholte & T.T. Truong, “Phase Transition of a One-dimensional Coulomb System”, *Phys. Rev. A* **22**, 2183 (1980)

Planos infinitos cargados en un circuito alternando cargas. Usa colectividad MC, introduce un interesante truco. Muestra \exists de cambio de fase de 2º orden, lo que es excepción del T. de van Hove –debida a las interacciones de largo alcance.

- R.J. Baxter, “Statistical Mechanics of a One-dimensional Coulomb System with a Uniform Charge Background”, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **69**, 779 (1963)

Similar al caso de Lenard. Al incluir sustrato de carga opuesta, es modelo de plasma. Claridad y belleza de la exposición.

- Vidrios de espines unidimensionales

Sistema Ising con valores J_{ij} al azar de acuerdo con una distribución que genera competencia ferro-antiferro. Motivado por aleaciones magnéticas diluidas. Es muy interesante el uso de la teoría de réplicas. Recomendado.

- J. Joffrin, “Disordered Systems –Experimental Viewpoint”, *Ill-condensed Matter, Les Houches 1978*, p. 63, North-Holland.
- S. Kirkpatrick *et al*, “Infinite-ranged Models of Spin-glasses”, *Phys. Rev. B* **13**, 4384 (1978)
- D.C. Mattis, “Solvable Spin Systems with Random Interactions”, *Physics Letters A* **56**, 421 (1976)
- P.W. Anderson, “Lectures on Amorphous Systems”, *Ill-condensed Matter, Les Houches 1978*, p. 159, North-Holland.

- Redes de neuronas

caso en que todas las neuronas actúan sobre una dada: puede resolverse por completo con técnica de réplicas; interesa estudio estabilidad

- D.J. Amit, H. Gutfreund & H. Sompolinsky, “Spin Glass Models of Neural Networks”, *Phys. Rev. A* **32**, 1007 (1985)
- J.L. van Hemmen, “SG Models of a NN”, *Phys. Rev. A* **34**, 3435 (1986)

- Ising con energía de intercambio aleatoria

No es un vidrio de espines pues no hay competencia ferro-antiferro. Interesante. Uno de mis artículos con Labarta. Tiene solución en $d=1$ para N finito. Ecuaciones integrales.

- C. Fau & B. McCoy, “One-dimensional Ising Model with Random Exchange Energy”, *Phys. Rev.* 182, 614 (1969)
- McKoy & Wu, *The Two-D Ising Model*, Harvard Univ. Press 1973, p. 345.

- Ising diluido

dos versiones: (1) *site dilution* –el espín es cero en una fracción p de nudos elegida al azar– y (2) *bond dilution* –la interacción J entre parejas de espines es nula para una fracción de éstas elegida al azar. Modelan impurezas en sistemas reales y resulta especialmente importante la dependencia de las propiedades críticas con dimensión y dilución.

- Stinchcombe, en *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 7, Academic Press (1983)
- Dotsenko & Dotsenko, *Advances in Physics* **32**, 129 (1983)
- Labarta, Marro & Tejada, *J. Phys. C* **19** (1986), y otros papers míos

- Gas de Takahashi

Ilustra el teorema de van Hove (potenciales de corto alcance no inducen cambio de fase). Es un gas reticular con $\phi(r) = \psi(r-a)$ a medias distancias (si $2a > |r| > a$), mientras que $\phi(r) = \infty, 0$ para $|r| < a$ y $|r| \geq 2a$, respec.

- Lieb & Mattis, eds., *Mathematical Physics in One Dimension*, Academic Press, New York 1966, p.6
- Thompson, *Mathematical Statistical Mechanics*, citado, p.81

- Modelo esférico de gas

Sistema dividido en celdas, cada una con 1 ó 0 partículas; entre celdas hay un potencial de interacción. Su solución ilustra física interesante.

- Lieb & Mattis eds., *Mathematical Physics in One Dimension*, p. 81

- Modelo X-Y

Se trata del hamiltoniano $H = -\sum_{ij} J_{ij} (s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y)$ en el que $s^x s^y$ no conmutan. Si parámetro de orden es $m = \sum_i s_i^x$, no conmuta con $H \Rightarrow$ estado fundamental no es con todos los espines alineados

- D.D. Betts, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Domb & Green, eds., vol. 6, p. 569
- Simulación: <http://www.compadre.org/osp/items/detail.cfm?ID=8642>

casos interesantes que vemos explícitamente

- Teorema de Lebowitz & Penrose

Solución exacta en el límite termodinámico para potencial tipo Kac (alcance infinito pero infinitamente débil)

- Thompson, *Mathematical Statistical Mechanics*, p.218

- Modelo de Ising cinético

La cadena unidimensional tiene solución exacta. Ecuación maestra; probabilidades de transición. Dinámica para solución campo medio. *Retardamiento crítico*. Muy interesante como base para otros casos.

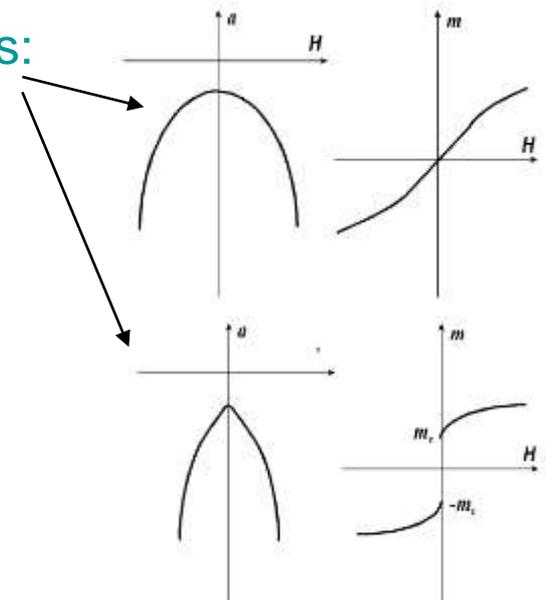
- R.J. Glauber, “Time Dependent Statistics of the Ising Model”, *Journal of Mathematical Physics* **4**, 294 (1963)
- Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, p. 284
- S.P. Heins, “Master Equation for Ising Models”, *Phys. Rev. A* **138**, 587 (1965)
- B. Felderhof, “Spin Relaxation of the Ising Chain”, *Reports on Mathematical Physics* **1**, 215 (1971)

Teorema de Peierls

- Vamos a ver los argumentos de Peierls* que, además de su belleza e interés histórico, se han usado con éxito en otros problemas
- Sea el hamiltoniano ferromagnético ($J > 0$) de Ising, H_Ω , asociado a Ω , un conjunto de N_Ω nodos de una red. Se sigue una FP y, de ésta una e. libre por nodo, a_Ω , que sabemos** es función cóncava de \mathcal{H} , incluso en el límite-T, y una magnetización $m = -\partial a / \partial \mathcal{H}$ que es no-decreciente y bien definida***.
- También se siguen (de la misma definición) las simetrías:

$$H_\Omega(\mathcal{H}, \sigma_i, \sigma_j) = H_\Omega(-\mathcal{H}, -\sigma_i, -\sigma_j) \Rightarrow a_\Omega(\mathcal{H}) = a_\Omega(-\mathcal{H}) \Rightarrow m(\mathcal{H}) = -m(-\mathcal{H})$$

- En definitiva, ha de tenerse una de las situaciones:
y se trata de demostrar si el modelo puede comportarse como la segunda de ellas, ee, si (como en el ferromagnetismo) puede tener magnetización espontánea



$$m_e \equiv \lim_{\mathcal{H} \rightarrow 0} m(\mathcal{H}) > 0$$

T. Peierls demuestra q éste es el caso si $d \geq 2$.

Dividimos la prueba en dos partes:

- **parte 1:** la magnetización por nodo en el sistema finito Ω con una condición límite especial (que indicaremos con prima en la magnitud en cuestión), ee,

$$m'_{\Omega} = -\frac{\partial a'_{\Omega}}{\partial \mathcal{H}} = \frac{1}{N_{\Omega}} \sum_{i \in \Omega} \langle \sigma_i \rangle_{i \in \Omega}, \quad \text{con } \langle \sigma_i \rangle_{\Omega} \equiv \frac{\text{Tr}(\sigma_i e^{-\beta H_{\Omega}})}{\text{Tr}(e^{-\beta H_{\Omega}})}$$

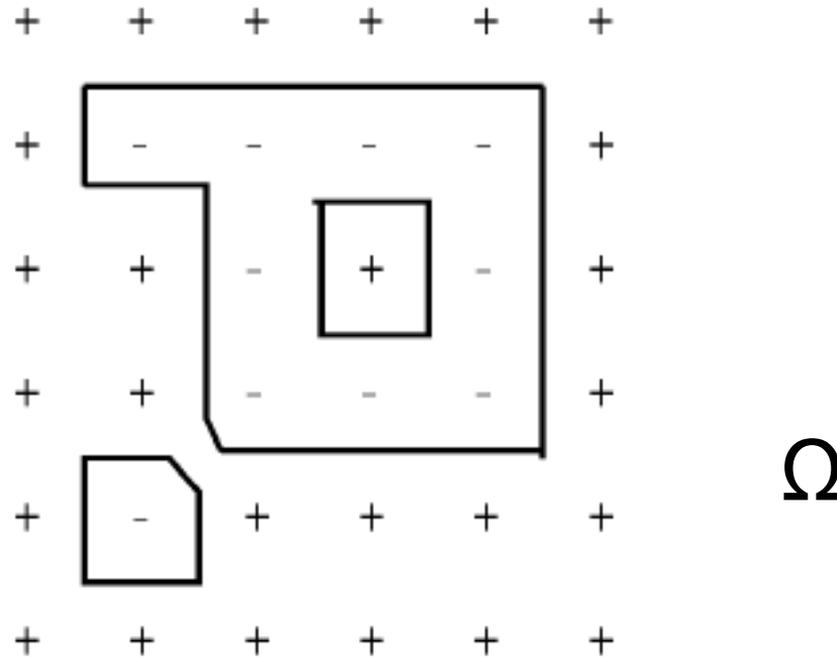
donde la 2ª igualdad es una definición equivalente y se ha indicado el promedio canónico, tiene, en ciertas condiciones, una cota inferior:

$$m'_{\Omega} \geq \alpha \geq 0, \quad \text{con } \alpha \text{ independiente de } \Omega$$

- **parte 2:** α es también un límite inferior para m_e (definida antes)

Parte 1:

Sea $\Omega = \text{cuadrado}$, y la condición límite especial: $\sigma_i = +1$ en el contorno del cuadrado,* como en este ejemplo:



Dada configuración σ cualquiera, dibujamos líneas que separen espines con distinta orientación, encerrando los negativos. Con las condiciones límites elegidas, obtendremos polígonos cerrados o *fronteras* (físicamente, la interfase). (Para evitar ambigüedades es necesario a veces recortar esquinas, como en la figura.)

¿Qué propiedades tienen estas fronteras?

- Si $b =$ perímetro (n° líneas unidad), la frontera contiene $\leq (b/4)^2$ espines (caso de un polígono regular sin huecos)
- Sea $v_b = n^\circ$ de fronteras distintas con perímetro b que pueden formarse en Ω (para cualquier σ); las numeramos $j = 1, \dots, v_b$. Se sigue cota, ej:

$$v_b \leq 4N_\Omega 3^{b-1}/b$$

- En efecto, para formar estos polígonos de b lados, podemos partir de un nudo cualquiera de la red, y seguir en cualquiera de las direcciones del espacio, luego hay $4N_\Omega$ formas distintas de empezar en red cuadrada.
- Cada uno de los restantes lados puede trazarse, como mucho, en 3 direcciones, pues no puede volverse por el camino recorrido, luego pueden formarse $4N_\Omega 3^{b-1}$ fronteras de longitud b siguiendo este método.
- Puesto que cualquiera de los b vértices del polígono podría haberse tomado como punto de partida, se sigue lo indicado, **QED**.
- Dado que $b \geq 4$, también puede escribirse $v_b \leq N_\Omega 3^{b-1}$, pero no es necesario para el argumento.
- Nótese también que, de hecho, v_b es menor de lo indicado, pues el polígono ha de ser cerrado, y la frontera no puede cortarse a sí misma, pero no es necesario afinar más en la práctica.

¿Qué propiedades tienen estas fronteras?

- Si $b =$ perímetro (n° líneas unidad), la frontera contiene $\leq (b/4)^2$ espines (caso de un polígono regular sin huecos)
- Sea $v_b = n^\circ$ de fronteras distintas con perímetro b que pueden formarse en Ω (para cualquier σ); las numeramos $j = 1, \dots, v_b$. Se sigue cota, ej:

$$v_b \leq 4N_\Omega 3^{b-1}/b$$

- Dada una σ , sea

$$X_{b,j} = \begin{cases} 1 & \text{si la frontera } (j,b) \text{ ocurre en } \sigma \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

- $\rightarrow n^\circ$ espines \downarrow (en toda σ con las condiciones elegidas) está acotado: $\rightarrow \langle N_- \rangle \leq \sum_{b=4,6,\dots} \left(\frac{b}{4}\right)^2 \sum_{j=1}^{v_b} \langle X_{b,j} \rangle$

donde he tomado promedios. Se trata de demostrar q la dcha. satisface: $\rightarrow \langle N_- \rangle \leq (1-\alpha) \frac{N_\Omega}{2}$, $\alpha \geq 0$

puesto q se seguirá entonces:

$$m'_\Omega = \frac{\langle N_+ \rangle - \langle N_- \rangle}{N_\Omega} \underset{\langle N_+ \rangle + \langle N_- \rangle = N_\Omega}{=} 1 - 2 \frac{\langle N_- \rangle}{N_\Omega} \geq 1 - (1-\alpha) = \alpha$$

Para demostrar: $\langle N_- \rangle \leq (1 - \alpha) \frac{N_\Omega}{2}, \quad \alpha \geq 0$

- sea $\{C\}$ = conjunto de todas las σ en las q aparece una frontera dada (b,j)
- sea C^* la σ obtenida de C invirtiendo $(\sigma_i \rightarrow -\sigma_i)$ todos los espines dentro de esa frontera (nota: en la del ejemplo, también se invierte el espín central, $+ \rightarrow -$)
- Entonces, para $\mathcal{H} = 0$ (el caso en cuestión): $H(C^*) = H(C) - 2bJ$, pues, al hacer $C \rightarrow C^*$, se pierden b parejas distintas $(+ -)$ en los bordes, cada una con energía $-J\sigma_i\sigma_j = J$, y se ganan b iguales $(++)$ con $-J\sigma_i\sigma_j = -J$.
- Se sigue:

$$\begin{aligned}
 \langle X_{b,j} \rangle &\equiv \frac{\sum_{\text{toda } \sigma} X_{b,j} e^{-\beta H}}{\sum_{\text{toda } \sigma} e^{-\beta H}} = \frac{\sum_{\{C\}} e^{-\beta H(C)}}{\sum_{\text{toda } \sigma} e^{-\beta H}} \stackrel{\leq}{\text{"toda } \sigma \geq \{C^*\}} \frac{\sum_{\{C\}} e^{-\beta H(C)}}{\sum_{\{C^*\}} e^{-\beta H(C^*)}} \\
 &= \frac{\sum_{\{C\}} e^{-\beta H(C)}}{e^{+\beta 2bJ} \sum_{\{C^*\}} e^{-\beta H(C)}} \stackrel{\text{correspondencia uno a uno entre } \{C\} \text{ y } \{C^*\}}{=} e^{-\beta 2bJ}
 \end{aligned}$$

En consecuencia:

$$\langle N_- \rangle \leq \sum_{b=4,6,\dots} \left(\frac{b}{4} \right)^2 \sum_{j=1}^{v_b} \underbrace{\langle X_{b,j} \rangle}_{\leq e^{-\beta 2bJ}} \leq \sum_{b=4,6,\dots} \frac{b^2}{16} \frac{4N_\Omega 3^{b-1}}{b} e^{-\beta 2bJ} = \frac{N_\Omega}{12} \sum_{b=4,6,\dots} b (3e^{-\beta 2J})^b$$

Comparando con

$$\langle N_- \rangle \leq (1-\alpha) \frac{N_\Omega}{2}$$

se sigue que, para completar la parte 1, hemos de probar:

$$\frac{1}{6} \sum_{b=4,6,\dots} b (3e^{-\beta 2J})^b \leq 1-\alpha$$

Pero esto siempre es posible para β suficientemente grande (T pequeña). En efecto, la serie a sumar converge para $x \equiv 3\exp(-2\beta J) \ll 1$, esto es, para $T \ll 2J(k\ln 3)^{-1}$. Cuando se cumple esta condición, puede hacerse la suma y se tiene

$$\langle N_- \rangle / N_\Omega \leq \frac{1}{6} x^4 (2-x^2)(1-x^2)^{-2}$$

QED

(ej., si T suf. baja para que $x^2 = 1/2$, se tiene $\langle N_- \rangle / N_\Omega \leq 1/4$ y, en consecuencia, $m'_\Omega \geq 1/2$)

Parte 2: α es también un límite inferior para $m_e \equiv \lim_{\mathcal{H} \rightarrow 0} m(\mathcal{H}) > 0$

- Se sabe que $m'_\Omega \geq \alpha$ implica $a'_\Omega(\mathcal{H}) \leq a'_\Omega(0) - \alpha\mathcal{H}$,

Consecuencia de que $\hat{a}_\Omega(\mathcal{H})$ es función cóncava de \mathcal{H} y \hat{m}_Ω es monótonamente creciente. De hecho (alternativamente), notar sucesivamente que

$$H_\Omega(\mathcal{H}) = H_\Omega(0) - \mathcal{H} \sum_{i \in \Omega} \langle \sigma_i \rangle$$

$$H_\Omega(\mathcal{H}) = H_\Omega(0) - \mathcal{H} m_\Omega N_\Omega$$

$$H_\Omega(\mathcal{H}) \leq H_\Omega(0) - \alpha N_\Omega \mathcal{H}$$

luego, dado que

$$\sum_{\{\vec{\sigma}\}} e^{-\beta H_\Omega} = e^{-\beta N_\Omega a_\Omega}$$

se sigue

$$e^{-\beta N_\Omega a_\Omega(\mathcal{H})} \geq e^{\beta \alpha N_\Omega \mathcal{H}} e^{-\beta N_\Omega a_\Omega(0)}$$

que implica lo indicado.

Parte 2: α es también un límite inferior para $m_e \equiv \lim_{\mathcal{H} \rightarrow 0} m(\mathcal{H}) > 0$

- Se sabe que $m'_\Omega \geq \alpha$ implica $a'_\Omega(\mathcal{H}) \leq a'_\Omega(0) - \alpha\mathcal{H}$, **luego**

$$\lim_{\Omega \rightarrow \infty} a'_\Omega(\mathcal{H}) \leq \lim_{\Omega \rightarrow \infty} a'_\Omega(0) - \alpha\mathcal{H}$$

- Pero es $\lim_{\Omega \rightarrow \infty} a'_\Omega(\mathcal{H}) = a(\mathcal{H})$, luego $a(\mathcal{H}) \leq a(0) - \alpha\mathcal{H}$, $\mathcal{H} \geq 0$, que implica

En efecto, se tiene de este resultado, en particular:

$$-\frac{a(\Delta\mathcal{H}) - a(0^+)}{\Delta\mathcal{H}} \geq \alpha$$

luego

$$\lim_{\Delta\mathcal{H} \rightarrow 0} \left[-\frac{a(\Delta\mathcal{H}) - a(0^+)}{\Delta\mathcal{H}} \right] = \lim_{\mathcal{H} \rightarrow 0^+} \left(-\frac{\partial a}{\partial \mathcal{H}} \right) \equiv \lim_{\mathcal{H} \rightarrow 0^+} m(\mathcal{H}) \equiv m_e \geq \alpha.$$

Parte 2: α es también un límite inferior para $m_e \equiv \lim_{\mathcal{H} \rightarrow 0} m(\mathcal{H}) > 0$

- Se sabe que $m'_\Omega \geq \alpha$ implica $a'_\Omega(\mathcal{H}) \leq a'_\Omega(0) - \alpha\mathcal{H}$, luego

$$\lim_{\Omega \rightarrow \infty} a'_\Omega(\mathcal{H}) \leq \lim_{\Omega \rightarrow \infty} a'_\Omega(0) - \alpha\mathcal{H}$$

- Pero es $\lim_{\Omega \rightarrow \infty} a'_\Omega(\mathcal{H}) = a(\mathcal{H})$, luego $a(\mathcal{H}) \leq a(0) - \alpha\mathcal{H}$, $\mathcal{H} \geq 0$, que implica $m_e \geq 0$, **QED**

En definitiva, Peierls establece q el modelo Ising bidimensional con interacciones entre vp's ha de psentar magnetización espontánea no-nula (en ausencia de campo aplicado) a T 's suficientemente bajas –en consecuencia, la e libre tiene una 1ª derivada discontinua– lo q implica la existencia de un cambio de fase en el sentido usual

Implicaciones, extensiones y aplicaciones del T. Peierls

- Un cambio de fase de 2º orden, el caso en cuestión, puede también caracterizarse por sensibilidad especial de las funciones de correlación a las condiciones límites, aun cuando el sistema sea infinito (ee, la longitud de correlación diverge en el pto crítico); ver teoremas de Landford y Ruelle (1968).

En consecuencia, es interesante comprobar cómo el TP implica esta sensibilidad. En efecto, hemos visto que la condición $\sigma_i = +1$ en los bordes conduce a $\langle \sigma_i \rangle_\Omega \geq A > 0$ para T baja. Pero el mismo argumento puede aplicarse para la condición $\sigma_i = -1$ en los bordes con el resultado de que $\langle \sigma_i \rangle_\Omega \leq -A$ para T baja. De estos hechos llega a inferirse esa sensibilidad de $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ para $\Omega \rightarrow \infty$.

- El TP puede extenderse inmediatamente a $d=3$. En este caso, hay que colocar cuadrados de área a_0^2 , con a_0 la distancia entre nudos, para separar parejas de vp's con distinta orientación; las fronteras (interfase) son ahora poliedros. Prácticamente la única diferencia es que $(b/4)^2$ ha de reemplazarse por $(b/6)^{2/3}$. La extensión a $d > 3$ resulta trivial.

- Más compleja es la extensión al caso de magnetización constante (como conviene a las mezclas binarias) con fases separadas. El formalismo adecuado entonces es el canónico (en lugar del macrocanónico que hemos usado hasta ahora).

En la práctica, sólo hay que aplicar las relaciones generales entre los dos formalismos. Por ej, la prob de que $\text{mag} = m_\Omega$ es

$$\Pi_{m_\Omega} \propto \sum_{\sigma_1} \cdots \sum_{\sigma_N} P_{m_\Omega} e^{-\beta H_\Omega} = e^{-\beta N_\Omega a_\Omega(m_\Omega)}$$

donde

$$P_{m_\Omega} = \begin{cases} 1 & \text{si } \sum_i \sigma_i = m_\Omega N_\Omega \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

y $a_\Omega(m_\Omega)$ es la e libre a magn fija.

Usando métodos similares a los descritos para la \exists del lím-T, puede entonces mostrarse que $a_\Omega(m_\Omega) \rightarrow a(m)$ para $\Omega \rightarrow \infty$ si $m_\Omega \rightarrow m$, con $a(m)$ convexa y simétrica en m , y que está relacionada con $a(\mathcal{H})$ por una transformación generalizada de Legendre: $a(m) = \sup_{\mathcal{H}} [a(\mathcal{H}) - m\mathcal{H}]$ dada T .

El TP permite entonces estudiar las propiedades de $a_\Omega(m_\Omega)$ y de su límite $a(m)$, para mostrar la \exists de separación de fases, e incluso describir algunas de las propiedades de las fases separadas (Minlos & Sinai 1967, 1968).

Por ej, se demuestra, con espines $+$ en los bordes, que los espines $-$ tienden a agruparse dentro de una gran frontera que, para T 's suficientemente bajas, tiene aproximadamente la forma de un cuadrado.

El sistema resulta entonces homogéneo dentro de esta frontera¹¹ que se interpreta como la fase líquida, y lo mismo es cierto con la fase vapor. En definitiva, las fronteras de Peierls juegan un papel fundamental en este problema.¹²

¹¹en el sentido de que la distribución de prob de pequeñas fronteras que rodeen 'burbujas' ($\sigma_i = +1$) es independiente de la posición en el sistema.

¹²R.A. Minlos & Ya. G. Sinai, *Sov. Phys. Dokl.* **12**, 688 (1967)

- Más compleja es la extensión al caso de magnetización constante (como conviene a las mezclas binarias) con fases separadas. El formalismo adecuado entonces es el canónico (en lugar del macrocanónico que hemos usado hasta ahora).
- Extender el TP a sistemas distintos del Ising generalmente se reduce a saber encontrar la transformación $C \rightarrow C^*$ que permita una cota superior para $\langle X_{b,j} \rangle$. Se ha resuelto en $d=2$, por ej:
 - espín semientero, $s=n/2$: casi trivial. Se concluye (hacerlo) que cota superior para T_C tiende a cero si $n \rightarrow \infty$. Luego este caso no es muy interesante, salvo por mostrar una de las limitaciones del TP: el modelo tiene transición, pero el TP establece una cota demasiado baja para T_C .
 - espín entero, $s=n$: se llega al mismo resultado, pero la demostración es más complicada (Lebowitz & Gallavotti 1971). En el caso más sencillo, $s=1$ (3 posibles orientaciones), la $C \rightarrow C^*$ que disminuya siempre la energía configuracional no puede ser una simple inversión, pero no es difícil encontrarla (Bortz 1971 p.1526).

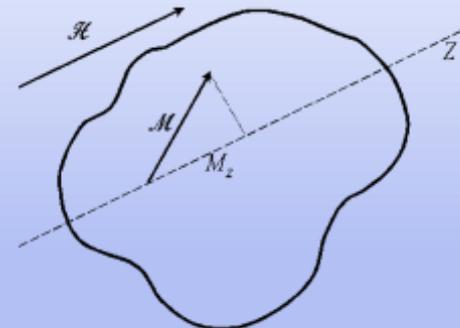
- modelo de Heisenberg: dada la interacción isotrópica, $E_{ij} = -J\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j / s^2$, si los componentes de \mathbf{s} no toman valores cuantizados, se sigue una solución equivalente a tomar $s \rightarrow \infty$, y (para $d=2$ y $J>0$ -interacción ferromagnética) puede demostrarse que no hay transición (Mermin & Wagner 1966).
 - Problema interesante: cuánta anisotropía es necesaria para que este modelo presente magnetización espontánea: argumentos cualitativos de Bortz (1971), basados en el modelo de gotas de Fisher parecen indicar que cualquier anisotropía es suficiente para que presente transición
 - alternativamente, uno puede estudiar $E_{ij} = -J [s_{iz} s_{jz} + \alpha (s_{ix} s_{jx} + s_{iy} s_{jy})] / s^2$, que describe desde total anisotropía (Ising con $s \rightarrow \infty$) para $\alpha=0$ hasta la isotropía de Heisenberg para $\alpha=1$. Puedo uno convencerse con facilidad (Bortz & Griffiths 1972) de que \exists transición para $0 \leq \alpha \leq 0.0298$, al menos.

Este es un buen ejemplo de la versatilidad del TP.

- Con la misma técnica se han estudiado, por ej,
 - modelo de Ising antiferromagnético (Griffiths, en Domb & Gree II, p. 5-13),
 - modelos no-reticulares y modelos cuánticos, y
 - ciertas propiedades especiales de modelos familiares: por ej: a T 's suficientemente bajas, todo estado de equilibrio invariante para Ising con $d \geq 2$ e interacciones ferromagn entre vp 's es una combinación lineal y convexa de sólo dos estados extremos.
- Véase J.L. Lebowitz & A.E. Mazel, “Improved Peierls Argument for High-D Ising Models”, *J. Stat. Phys.* **90**, 1051 (1998)

Sobre el modelo de Ising y variantes

- Veremos con detalle utilidad en modelado de funciones cerebrales, pero hay muchas aplicaciones en biología (ver libro de Thompson) y en otros campos (ver).
- Simulación de estados de la mezcla binaria al variar T : www.doitpoms.ac.uk/tlplib/solid-solutions/simul2.php, pero se pueden buscar simulaciones mejores que ésta.
- En la motivación de modelos magnéticos es conveniente notar que uno se refiere a la magnetización M_z



Más reticulares: *spreading of opinion*

voter model: describes *invasion process* (Clifford & Sudbury 1973).

- Consists of lattice \mathbf{Z}^d whose sites r are territory held by one of two competing populations, represented by $\sigma_r = 0, 1$ respectively.
- A site is invaded, i.e., σ_r changes
 - from 0 to 1 at rate $(2d)^{-1} \delta_{\sigma_r, 0} \sum_{\{r', |r-r'|=1\}} \delta_{\sigma_{r'}, 1}$, and
 - from 1 to 0 at rate $(2d)^{-1} \delta_{\sigma_r, 1} \sum_{\{r', |r-r'|=1\}} \delta_{\sigma_{r'}, 0}$.

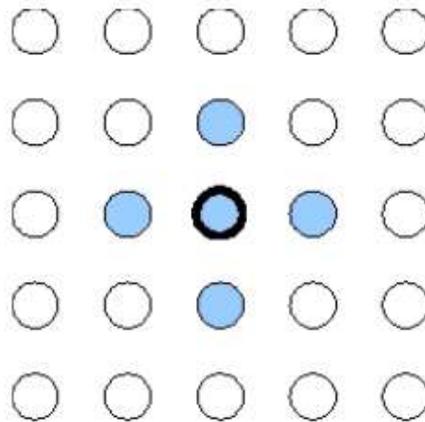
Equivalently (Holley & Liggett 1975): occupied sites represent persons who are either in favor or opposed to some issue, and change opinion at a rate proportional to the number of neighbors who have the opposite opinion.

- Quite simple-minded voters: observer whose time scale is e^t (instead of t) see the voters to adopt the opinion of a neighbor chosen at random.

Configurations with voters same opinion, $\{\sigma_r = 1 \text{ or } 0, \forall r\} =$ (trivial) steady, *absorbing* states. No further solutions for $d \leq 2$, but a phase transition for $d \geq 3$ corresponding to the possible persistence of disagreements.

Voter model:

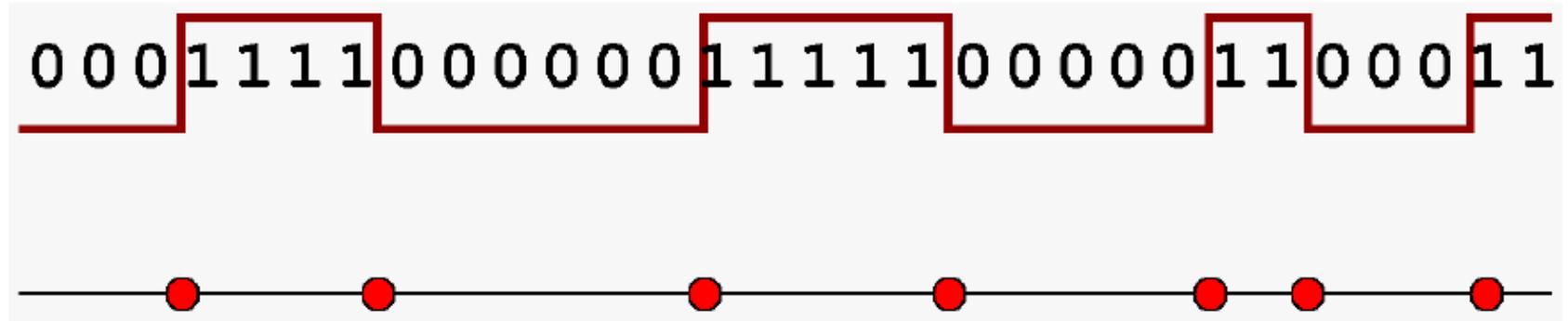
If you can't make up your mind...



with two states:
 Z_2 -symmetry.

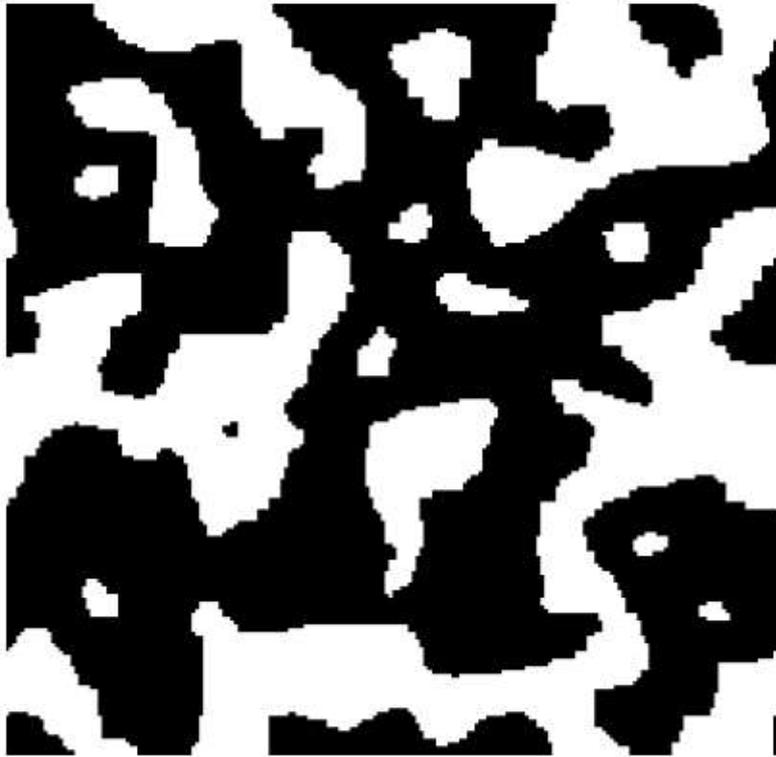
simply adopt the opinion of a
randomly chosen nearest neighbour.

In 1d the voter model is like Glauber-Ising dynamics at $T = 0$:

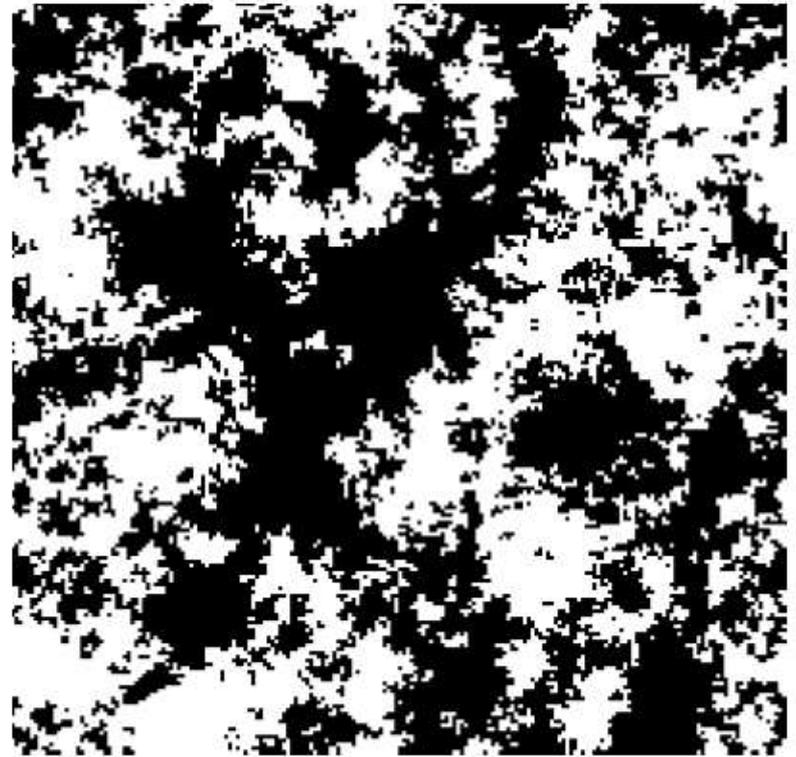


In 1d the kinks between Z_2 -symmetric domains
can be interpreted as particles:

$$2A \rightarrow 0$$



Glauber-Ising model at $T=0$



Classical voter model

Más reticulares: *spreading of opinion*

majority vote process (Liggett 1985, Gray 1985):

each person looks at neighbors, and adopts majority opinion with prob. p and the minority opinion with prob. $1-p$.

(Rule often adopted in life is with $p \approx 1$, i.e., it is even simpler than this.)

Note: corresponds to $T = 0$ limit of *non-equilibrium, dynamic Ising glass*" (Marro and Dickman 2005; this also reports on the critical, equilibrium behavior of the majority vote rule from computer simulations).

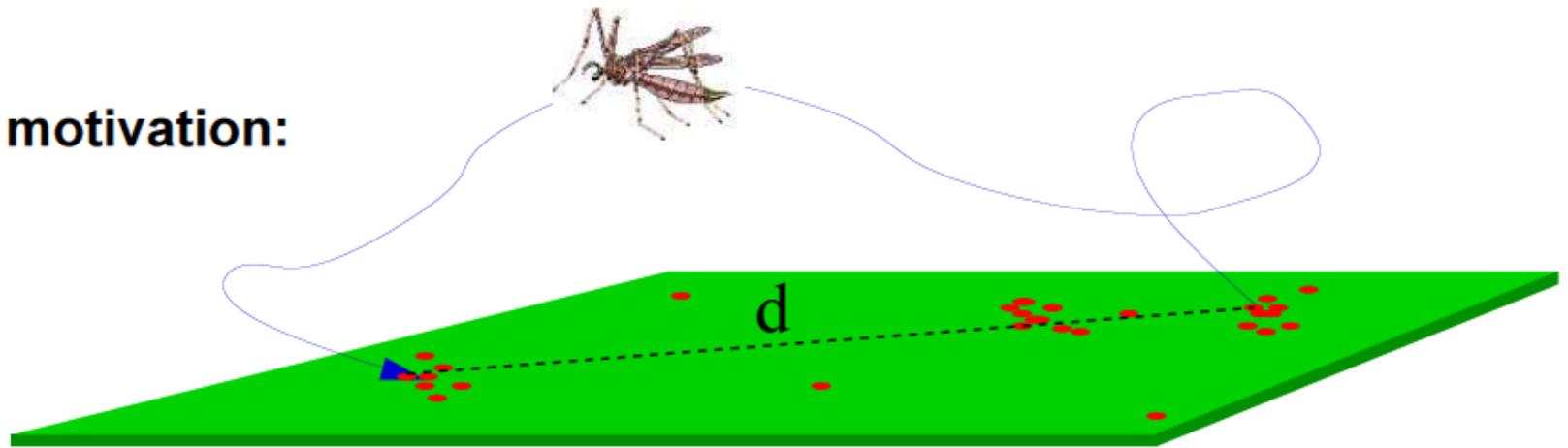
Toom model (Toom 1980); van Enter, Fernández, & Sokal 1993):

“geographical” modification of above in which voter opinion changes to:

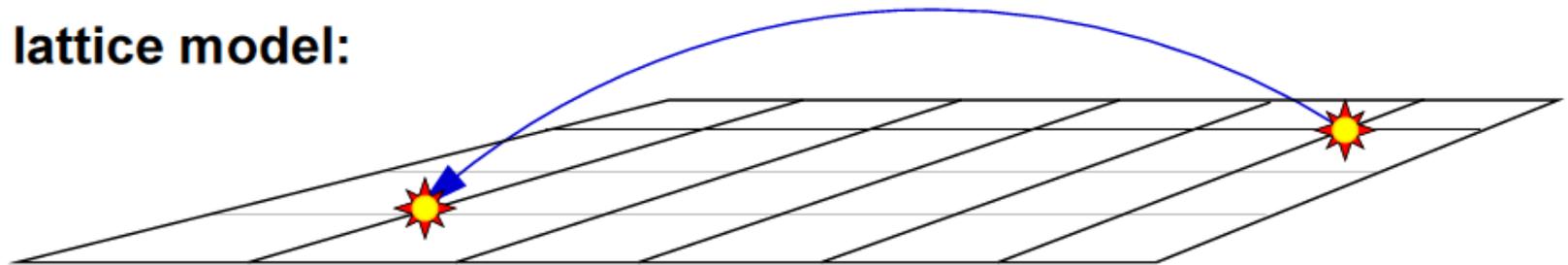
- majority of itself and its N and E neighbors with probability $1-q-p$,
- one with probability p ,
- zero with probability q .

Thus, bias if the two noise parameters p and q take different values.

motivation:



lattice model:



Más reticulares: *contact process*

contact process CP (Harris 1974) is a toy model of an epidemic, and it is the paradigm of absorbing state transitions

- d -dimensional cubic lattice, \mathbf{Z}^d , each site represents organism that exists in one of two states, healthy (or vacant) or infected (or occupied by a particle)
- Infection spreads through NN contact: infected site passes disease to its healthy neighbors at rate λ/q , q = lattice coordination number Infected sites recover at unit rate, and are immediately susceptible to reinfection.
- The rates for the $d=1$ possible events are:

● ○ ●	○ ○ ●	● ○ ○	●
↓	↓	↓	↓
●	●	●	○
λ	$\frac{1}{2}\lambda$	$\frac{1}{2}\lambda$	1

Más reticulares: *contact process*

Since an organism must have sick neighbor to be infected, the disease-free state is absorbing; persistence of epidemic depends on the infection rate λ .

We may view CP as process in which some transient condition or excitation spreads by a short-range influence, excited species becoming extinct unless it spreads sufficiently rapidly. The boundary between survival and extinction is marked by a critical point that typifies transitions into an absorbing state.

Though CP = continuous- t Markov process, it admits discrete- t formulation. Each step then involves randomly choosing a lattice site \mathbf{x} and a process:

- creation with probability $v = \lambda/(1+\lambda)$,
- annihilation with probability $1 - v$

In an annihilation event, particle (if any) at \mathbf{x} is removed. Creation proceeds only if \mathbf{x} is occupied and randomly chosen NN \mathbf{y} is vacant; if so, new particle is placed at \mathbf{y} . Time is incremented by Δt after each step, successful or not. (Normally one takes $\Delta t=1/N$ on lattice of N sites, so that a unit time interval, or MC step, corresponds, on average, to one attempted event per site.)

Más reticulares: *contact process*

To simulate the continuous-time process one replaces the fixed interval Δt with an exponentially-distributed waiting time. While they differ somewhat at short times, discrete and continuous formulations share same stationary properties and long-time dynamics. (Efficiency greatly improved through use of a particle list, as often done in simul. If \mathbf{x} is chosen from a list of N_{occ} sites, $\Delta t = 1/N_{\text{occ}}$.)

The phase diagram. Can epidemic persist indef., or must it become extinct? When is the stationary density —the fraction of occupied sites— nonzero?

A mean-field analysis gives a preliminary answer. Let $\rho(\mathbf{x}, t) \equiv \text{Prob} [\sigma_{\mathbf{x}}(t) = 1]$. For the simplest mean-field approx. and spatial homogeneity, $\rho(\mathbf{x}) \equiv \rho$, one has the Malthus-Verhulst equation: $d\rho/dt = (\lambda - 1)\rho - \lambda\rho^2$.

$\lambda \leq 1$: the only stationary solution is the vacuum, $\rho = 0$.

$\lambda > 1$: there is also an active stationary state with $\rho = 1 - \lambda^{-1}$.

Notice that for $\lambda > \lambda_c = 1$ the active state is stable, the vacuum unstable.

λ_c marks critical point: stat. density changes in a continuous but singular manner at λ_c . ρ is the order parameter; it is nonzero only for $\lambda > \lambda_c$.

More details in Marro & Dickman (2005)