Ising Cinético

Tema completo:

1. **UN EJEMPLO. Cinética de espines. Ecuación maestra: relajación de un sistema unidimensional de espines. Funciones de correlación espín-espín. Experimentos numéricos.**
2. TEORÍA GENERAL. Deducción perturbativa de la ecuación maestra de Pauli. Deducción rigurosa de una ecuación maestra generalizada.
3. MOTIVACIÓN. Caminos aleatorios. Procesos de Markov. Ecuación de Chapman-Kolmogorov. Movimiento browniano. Ecuación de Langevin. Desplazamiento cuadrático medio. Difusión. Movilidad.
4. ECUACIÓN DE FOKKER-PLANCK. Relación con la ecuación maestra. Caso del movimiento browniano. Ecuación de Zwanzig. Límite browniano. Ecuación de Mori. Discusión.
5. FORMALIZACIÓN. Integrales de camino. Teoría de campos.

- En general, interesan ecs. para magnitudes macrosc., ej., campos *A*(***r***,***t***), regidos por ecs. no-lineales con integrales y derivadas espaciales y temporales.
- Ej típico, ec integrodiferencial de Boltzmann para f. distribución de velocidades y posiciones de las partículas en un gas diluido:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\vec{v}\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{r}}+\underbrace{\frac{f(\vec{r})}{m}}_{\text{aceleración}}\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{v}}\right)F(\vec{r},\vec{v};t)=\left(\frac{\partial F}{\partial t}\right)_{\text{col.}}=\underset{\substack{\text{funcional}\\\text{integral}}}{J}(F)$$

- Hay otras ecs. de este tipo; se diferencian en J (ej., colisiones binarias, ternarias, etc., según densidad); se llaman ecuaciones cinéticas
- Interés: multiplicando por magnitud e integrando, se obtiene ecs. para valor medio, fluctuaciones,...

Cinética de espines - Ejemplos de sencillas ecuaciones cinéticas y maestras

Modelo de Ising:

- Red regular (ej, cs) con nudos $j = 1, 2, \ldots, N$
- En cada nudo, variable dos estados, $s_j = \pm 1$ (ó 0,1)
- Sist, 2^N "configuraciones" posibles, $\boldsymbol{s} \equiv \{s_j = \pm 1\}$
- Se define una "función energía" (*hamiltoniano*)

$$H(\vec{s}) = -\sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j - h \sum_{j=1}^{N} s_j; \quad \vec{s} \equiv \{s_j\}$$

- Primera suma suele tener restricciones (ej, parejas v.p.)
- J = intensidad acoplamiento entre elementos, ej, espines; toda las Js positivas, caso ferromagnético
- h = campo magnético exterior (por ejemplo)

Conocido $H(\boldsymbol{s})$, puede calcularse "función de partición", que es "potencial termodinámico", de donde se siguen todas las propiedades equilibrio del sist (en función de β)

Pero interesa dinámica!

- Problema: los "operadores" s_j conmutan con $H(\boldsymbol{s})$
- Luego son constantes del movimiento
- Luego modelo de Ising **no** tiene dinámica propia
- Glauber, *J. of Mathematical Physics* **4**,294, (1963)
  Kawasaki, *Physical Review* **145**, 224 (1966)
  Hacen la hipótesis de que $P(\boldsymbol{s},t)$ evoluciona según una ecuación maestra marcoviana que describe transiciones inducidas por un "baño".
  Garrido & Marro, *J. of Statistical Phy.ics* **74**, 663 (1994), por ejemplo: Demuestran que el "baño" puede asociarse con grados de libertad del sistema magnético **no** incluidos en $\boldsymbol{s}$
  Heims, *Physical Review* **138**, A587 (1965), por ejemplo
  Perturba $H(\boldsymbol{s})$ y, partiendo de la ec microscópica de Liouville, llega a la ec maestra de Glauber usando ciertas aproximaciones

Espín único acoplado a baño térmico

Un hipotético baño térmico a temperatura $T = \beta^{-1}$ induce cambios al azar entre los estados $s = \pm 1$ con probabilidad ω de transición por unidad de tiempo

Descripción completa: $p(s,t)$: $p(+1,t) + p(-1,t) = 1$, $\forall\, t$
Suponemos que ("ec maestra")

$$\mathrm{d}p(s,t)/\mathrm{d}t = -\omega\, p(s,t) + \omega\, p(-s,t)\,, \quad s = \pm 1$$

$\uparrow$ disminuye $p(s,t)$ debido a transiciones $s \to -s$

Sea (valor esperado del espín en función de t)

$$q(t) \equiv p(+1,t) - p(-1,t) = \sum_{j=1}^{2} s_j\, p(s_j,t) \equiv \langle s(t) \rangle$$

Restamos las dos EM:

$$\frac{\mathrm{d}q(t)}{\mathrm{d}t} = -2\omega q(t) \;\Rightarrow\; q(t) = q(0)\,\mathrm{e}^{-2\omega\, \mathrm{t}},$$

i.e., cualquier valor inicial decae hacia valor esperado nulo, $q(\infty)=0$ en "tiempo de relajación" $\tau = 1/2\omega$

=> sólo interacciones entre muchos genera comportamiento no-trivial

Glauber: N espines en baño térmico

$\boldsymbol{s}$ cambia por inversiones de alguno de los s_j, con prob. por u. de tiempo: $\omega(\boldsymbol{s}\rightarrow\boldsymbol{s}^j)$, $\boldsymbol{s}^j \equiv \{s_1,\ldots,-s_j,\ldots, s_N\}$

$\omega(\boldsymbol{s}\rightarrow\boldsymbol{s}^j)$ sólo depende de $\boldsymbol{s}$, antes de ocurrir

$\boldsymbol{s}(t)$ es una "cadena de Markov", i.e., $\exists$ 2^N ecs:

$$\frac{\mathrm{d}\,p(\vec{s},t)}{\mathrm{d}t} = \sum_{\vec{s}^{\,j}} \left[-\omega\left(\vec{s}\rightarrow\vec{s}^{\,j}\right)p(\vec{s},t) + \omega\left(\vec{s}^{\,j}\rightarrow\vec{s}\right)p\left(\vec{s}^{\,j},t\right)\right]$$

$$= \sum_{j} \left[-\omega_j(s_j)p(s_j,t) + \omega_j(-s_j)p(-s_j,t)\right]$$

una deducción de esta ec a partir de 1os principios daría expresiones para ω_j , pero aquí son parte del modelo, y hemos de fijarlas; criterios:

Si $p_0(s_j)$ es la estacionaria, ha de tenerse:

$$\sum_j \omega_j(s_j)p_0(s_j) = \sum_j \omega_j(-s_j)p_0(-s_j)$$

Pero no basta; una condición suficiente (<u>**no** necesaria</u>) es el "principio de balance detallado" (tipo de revers. microsc.):

$$\omega_j(s_j)p_0(s_j) = \omega_j(-s_j)p_0(-s_j)$$

Consecuencias de balance detallado

- Sup. queremos estado estacionario = equilibrio canónico a temperatura $\beta = 1/kT$ y energía $H(\mathbf{s})$.
  - Teoría general exige $p_0 \propto \exp\left[-\beta H(\mathbf{s})\right]$
  - Balance detallado condiciona entonces funciones ω_j
  - En efecto, (vemos antes algo de notación)

    H' parte de $H(\mathbf{s})$ no alterada por inversión de s_j :

$$H' = \sum_{\substack{i,k=1 \\ i\neq j}}^{N} {}' J_{ik} s_i s_k - h \sum_{\substack{i=1 \\ i\neq j}}^{N} s_i$$

$$H = H' - \sum_k {}' J_{jk} s_j s_k - h s_j$$

$$= H' - s_j \left(\sum_k {}' J_{jk} s_k - h \right) = H' - s_j E_j$$

luego $H(\mathbf{s}) = H' - s_j E_j$ y $H(\mathbf{s}^j) = H' + s_j E_j$.

balance detallado $\Rightarrow$

$$\frac{\omega_j(s_j)}{\omega_j(-s_j)} = \frac{p_0(-s_j)}{p_0(s_j)} = \frac{\exp\left[-\beta H(-s_j)\right]}{\exp\left[-\beta H(s_j)\right]} = \mathrm{e}^{-\beta\Delta H}$$

$$\Delta H \equiv H\left(\vec{s}^{\,j}\right) - H\left(\vec{s}\right) = 2 s_j E_j = \text{ costo energético inversión}$$

- Ejemplo,

$$\omega_j(s_j) = \alpha \exp\left[-\beta \Delta H\right]$$

α = cte (puede depender de *T*, densidad,...), relacionada con difusión, con dimensiones de frecuencia que determina escala temporal del proceso dinámico

- En general,

$$\omega(\boldsymbol{s} \to \boldsymbol{s}^j) = \mathrm{f}\,(\beta \Delta H)$$

donde

$f(\lambda)$ positiva $\quad f(\lambda = 0) = 1$

$f(\lambda) \to 0$ cuando $\lambda \to \infty$

$f(\lambda) = \exp(-\lambda)\, f(-\lambda)$

- Casos familiares:

$f(\lambda) = 1 - \tanh(\lambda/2)$ Glauber

$f(\lambda) = \text{mín}\,[1, \exp(-\lambda)]$ Metrópolis (MC)

$f(\lambda) = \exp(-\lambda/2)$ vBS

- "Kawasaki" ≡ proceso dinámico elemental en el que se <u>intercambian</u> los valores de las variables en lugares vp (se conserva valor medio $\langle s \rangle$, pero resto formalmente idéntico)

Si modelo no cumple balance detallado, estados estacionarios <u>no</u> son de equilibrio, en general.

Solución, d = 1 y campo medio, etc.

cadena lineal de espines

condiciones límites periódicas, $s_{N+1} = s_1$

interacción isotrópica entre v.p., $J_{j,i} = J$

sin campo exterior, $h = 0$

toda magnetizac. inicial decae exponencialmente hacia 0

revela que no hay magnetización espontánea (esto es, estados ordenados a baja T) en Ising unidimensional con interacciones a v.p.

Si comparamos con caso espín único: el efecto de poder interaccionar con vecinos se traduce en reducción del exponente de relajación

Físicamente trivial, pero sol. es matemáticamente interesante! y, ej., pueden calcularse funciones de correlac. desplazadas en el tiempo $\langle s_j(t)\, s_k(t+t') \rangle$

Glauber (1963), Stanley (1972)