

Modelo de Ising a partir de ceros de la función de partición de Yang-Lee

Daniel López (2018167452) and Director del proyecto: Gabriel Tellez
Universidad de los Andes, Departamento de Física
(Dated: 3 de junio de 2022)

Resumen: Una comprobación teórica y computacional de los teoremas de Yang Lee aplicados al modelo de Ising fue realizada para una cadena de espines y una red cuadrada de espines. Fue posible comprobar analíticamente y gráficamente que en el modelo de Ising en una dimensión no existen transiciones de fase, mientras que para el modelo de dos dimensiones fue posible comprobar gráficamente que si existe una transición de fase al rededor de $x = e^{\frac{-2J}{K^2T_c}} = 0,1715$ como lo reporta la literatura.

I. INTRODUCCIÓN

El modelo de Ising ha sido ampliamente estudiado desde que fue propuesto en 1920 por Wilhelm Lenz para su estudiante Ernst Ising. Inicialmente, fue pensado para estudiar cambios de fase en materiales ferromagnéticos, cuatro años después, en 1924 Ising lo resolvió en una dimensión usando el método de la matriz de transferencia, encontrando que no existían transiciones de fase [1]. Veinte años más tarde, Lars Onsager lograría resolver el modelo en dos dimensiones, demostrando que existe una transición de fase ferromagnética [2].

El hamiltoniano del modelo de Ising trata las interacciones de espín entre primeros vecinos con una energía de interacción J de una forma altamente anisotrópica, es decir, solo en una coordenada \hat{S}_i^z , además, modela la interacción de los n espines con un campo externo h de la siguiente manera:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - h \sum_{i=1}^n \hat{S}_i^z \quad (1)$$

Posteriormente, en 1952, los famosos físicos Yang Cheng-Ning y Tsung-Dao Lee, postularon su teoría estadística de transiciones de fase para estudiar el modelo de Ising y otros sistemas afines como el modelo de gas en red [3]. En su teoría presentan tres teoremas que acotan el comportamiento de la función de partición gran canónica en el límite termodinámico (número de partículas y volumen tendiendo a infinito). El objetivo de este artículo es presentar las ideas de Yang y Lee aplicadas al modelo de Ising en una y dos dimensiones. Para el caso de una dimensión, se realizará la solución analítica de los ceros de la función de partición mediante el método de matriz de transferencia. Para el modelo de dos dimensiones, se presentará un planteamiento teórico inicial del hamiltoniano y de la matriz de transferencia, para posteriormente encontrar los ceros de la función de partición numéricamente. Se explorará la posibilidad de calcular transiciones de fase debido al rápido escalamiento de la complejidad computacional con la dimensionalidad del sistema.

II. TEORÍA

Supongamos que tenemos un gas general monoatómico con interacción $U = \sum u(r_{ij})$ donde r_{ij} es la distancia entre el i -ésimo y el j -ésimo átomo. La interacción entre átomos es de la siguiente forma:

- Núcleo impenetrable de radio a , $u(r) = \infty$ para $r \leq a$
- Rango finito b , $u(r) = 0$ para $r \leq b$
- $u(r)$ nunca es $-\infty$

Con este gas en mente, los teoremas de Yang Lee tratan las discontinuidades de las funciones termodinámicas como presión y densidad en las transiciones de fase y las relacionan con las raíces de la función de partición cuando es un polinomio de la fugacidad, así:

$$Z_g = \sum_{N=0}^n \frac{Q_N}{N!} y^N \quad (2)$$

Donde Z_g es la función de partición gran canónica del gas, y es la fugacidad, Q_N es la integral de configuración de la función de partición y n es el número de partículas no fijo del sistema. De esta forma, se puede ver que la función de partición es un polinomio de la fugacidad de grado n con n raíces complejas.

A. Teoremas de Yang & Lee

Teniendo en cuenta lo anterior, comenzaremos enunciando y explicando los tres teoremas de Yang & Lee.

1. Teorema I

Si la forma del volumen del gas es lo suficientemente suave como para que su área no aumente más rápido que $V^{2/3}$, en el límite termodinámico, la presión no depende

de la forma del volumen y es una función monotónicamente creciente y continua de la fugacidad para todo valor real de y , es decir, el límite,

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \ln(Z_g) \text{ existe y no depende de la forma de } V \quad (3)$$

Esto lo podemos observar de las funciones termodinámicas del gran potencial $\Omega = F - \mu N = -KT \ln(Z_g)$, $p = \frac{\partial \Omega}{\partial V}$ dado que Ω es extensivo porque depende del número de partículas, en el límite termodinámico $\Omega = V\omega$ entonces $p = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{KT \ln(Z_g)}{V}$.

2. Teorema 2

Si en el plano complejo de la fugacidad y existe una región R que contiene un segmento del eje real positivo y está libre de raíces de la función de partición, la presión converge analíticamente a su límite y la densidad es una función continua y creciente de y . Es decir, los límites:

$$\frac{P}{KT} = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \ln(Z_g)$$

$$\frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{1}{v} = \lim_{V \rightarrow \infty} z \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{V} \ln(Z_g)$$

Existen y se acercan a límites analíticos respecto a y , donde $\langle N \rangle$ es el número de partículas promedio y v es el volumen intensivo o por partícula. Además, las operaciones de límite y derivada son intercambiables debido a la convergencia uniforme. Si $F_\infty(z) = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \ln(Z_g)$, una fase se define paraméricamente como:

$$\frac{P}{KT} = F_\infty(z) \quad \frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{1}{v} = z \frac{\partial}{\partial z} F_\infty(z) = z \frac{\partial}{\partial z} \frac{P}{KT}$$

Imaginemos que en el espacio complejo y solo existe una región R , entonces el sistema solamente estará en una fase.

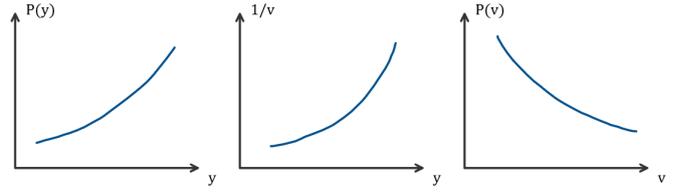
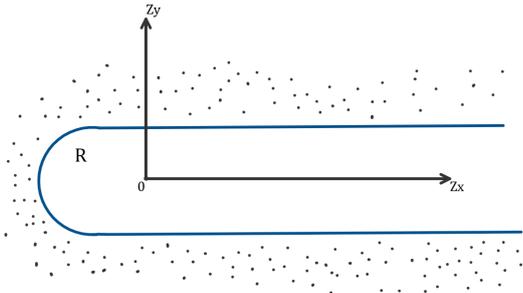


Figura 1. Se observa el comportamiento de las funciones termodinámicas cuando solo existe una región en el plano complejo de la fugacidad z que contiene al eje real positivo.

Sin embargo, si no se cumplen las condiciones del teorema 2, es posible que a cierta temperatura las infinitas raíces del polinomio se acerquen infinitesimalmente al eje real en $y = y_0$, tal que no puede existir una región R como la descrita anteriormente, entonces en ese punto existe una transición de fase, porque la presión es continua, pero su derivada, la densidad no necesariamente es continua.

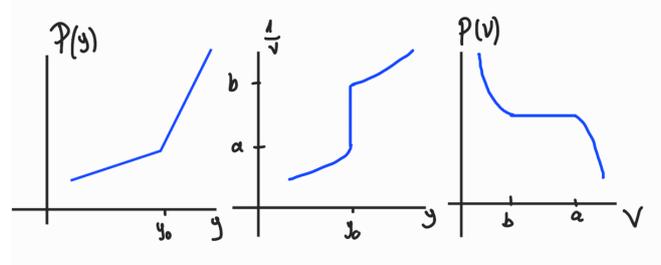
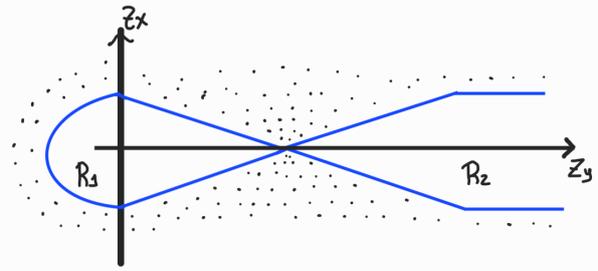


Figura 2. Se observa el comportamiento de las funciones termodinámicas cuando existen dos regiones en el plano complejo de la fugacidad z que contienen al eje real positivo.

Así, también podríamos hablar de una transición de fase de segundo orden, si la densidad es continua en el punto y_0 , pero su derivada no lo es.

3. Teorema 3

El tercer teorema establece que las funciones de partición del modelo de gas en red y sistemas equivalentes como el modelo de Ising, tienen sus ceros sobre el círculo

unitario del plano complejo y , lo que permite estudiar de forma sencilla la distribución angular de las raíces y su comportamiento al variar la temperatura.

B. Modelo de Gas en Red

Yang & Lee establecieron en su teoría una relación de equivalencia entre el modelo de gas en red y el modelo de Ising, para poder usar como ejemplo los recientes avances analíticos realizados por Onsager y aplicarlos al modelo de gas en red para ejemplificar su teoría. Por esta razón, el estudio del gas en red es importante para comprender los teoremas de Yang & Lee.

El modelo de gas en red es un sistema monoatómico en el que los átomos se mantienen fijos en un sitio de la red, o el sitio está vacío. El sistema es relevante porque en el límite termodinámico, sus funciones termodinámicas tienden a las del gas real. Se asume que la red es una red cuadrada, es decir, tenemos un número de coordinación igual a $2d$ donde $d = 1, 2, 3$ es la dimensión del modelo. Para que los átomos no ocupen un mismo lugar en la red, éstos poseen una interacción de la forma:

$$u(r) = \begin{cases} \infty & \text{Si los átomos están en el mismo sitio} \\ -2\epsilon & \text{Si los átomos son primeros vecinos} \\ 0 & \text{De lo contrario} \end{cases}$$

Note que la energía de interacción es de la forma del gas que se usó para los teoremas de Yang & Lee. Si $\epsilon > 0$ entonces los átomos se van a atraer a distancias cortas, si $\epsilon < 0$, se van a repeler. Así, se puede definir una variable binaria para cada sitio, para definir si está lleno o vacío (con $\epsilon > 0$):

$$P_i = \begin{cases} 1 & \text{Si el sitio está lleno} \\ 0 & \text{Si el sitio está vacío} \end{cases}$$

De esta forma, la energía del modelo de gas en red es de la forma

$$H_{gas} - \mu N = - \sum_{\langle i,j \rangle} 2\epsilon P_i P_j - \sum_i \mu P_i \quad (4)$$

C. Modelo de Ising y Gas en red

Ahora podemos explorar la equivalencia entre el modelo de Ising y el modelo de gas en red. Para esto, hagamos las siguientes definiciones generales para el modelo de Ising en cualquier dimensión real.

- $[\uparrow]$ = Número de espines hacia arriba
- $[\downarrow]$ = Número de espines hacia abajo
- $[\uparrow\uparrow]$ = Número de parejas de vecinos de espines apuntando hacia arriba
- $[\downarrow\downarrow]$ = Número de parejas de vecinos de espines apuntando hacia abajo
- $[\uparrow\downarrow]$ = Número de parejas de vecinos de espines antiparalelos

Se cumplen las siguientes relaciones para el modelo de Ising en una red cuadrada de espines:

$$2[\uparrow\uparrow] + [\uparrow\downarrow] = 2d[\uparrow] \quad (5)$$

$$2[\downarrow\downarrow] + [\uparrow\downarrow] = 2d[\downarrow] \quad (6)$$

Donde d es la dimensión del modelo. Observemos que el número total de espines está relacionado con el volumen del gas (numero de sitios \times volumen del átomo) y el número de espines abajo se pueden relacionar con el número de átomos en el gas (sitios ocupados), así $[\downarrow\downarrow]$ es el número de primeros vecinos en el gas en red, entonces la función de partición en términos de parámetros del modelo de Ising es:

$$e^{\beta np} = \sum y^{[\downarrow]} e^{2\beta J[\downarrow\downarrow]}$$

Donde p es la presión, $\beta = 1/KT$ y n es el número de sitios en la red. Ahora, para establecer la relación entre el modelo de Ising y el de gas en red, escribimos la función de partición de el modelo de Ising con esta notación:

$$\begin{aligned} e^{\beta n F} &= \sum e^{-\beta h([\downarrow] - [\uparrow]) - \beta J[\uparrow\downarrow]} \\ e^{\beta n F} &= \sum e^{-\beta h([\downarrow] - [\uparrow]) - \beta J(2d[\downarrow] - 2[\downarrow\downarrow])} \\ e^{\beta n F} &= \sum e^{-2\beta h[\downarrow] + h([\uparrow] + [\downarrow]) - 2\beta J(d[\downarrow] - [\downarrow\downarrow])} \\ e^{\beta n(F-h)} &= \sum e^{-2\beta(h+Jd)[\downarrow] - 2\beta J[\downarrow\downarrow]} \end{aligned} \quad (7)$$

Comparando, $p = F - h$ y $y = e^{-2\beta(h+Jd)}$, con esta información, resumimos las características más importantes de los modelos y sus relaciones en la siguiente tabla,

Modelo de Ising	Modelo de gas en red
$n = [\uparrow] + [\downarrow]$	Volumen del gas
$[\downarrow]$	Número de átomos en el gas
$[\downarrow\downarrow]$	Número de átomos primeros vecinos
p	$F - h$
$\frac{1-M}{2}$	Densidad $\rho = \frac{1}{v}$
y	$e^{-2\beta(h+Jd)}$

Cuadro I. Se observan las equivalencias entre los modelos de Ising y gas en red. M es la magnetización en el modelo de Ising.

Adicionalmente, notemos que hay una relación entre las variables dicotómicas de los modelos de la forma $S_i = 1 - 2P_i$, cuando $S_i = -1$, $P_i = 1$ (El número de espines abajo equivale al número de átomos en el gas) y cuando $S_i = 1$, $P_i = 0$.

D. Matriz de transferencia y modelo de Ising 1D

Con este marco teórico anterior, comenzamos a explorar el modelo de Ising en una dimensión, su función de partición (que depende de n, T, h) se escribe a continuación

$$Z_g = \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \dots \sum_{S_n=\pm 1} e^{\beta(J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z + h \sum_{i=1}^n \hat{S}_i^z)}$$

$$Z_g = \sum_{S_1=\pm 1} \dots \sum_{S_n=\pm 1} \prod_{i=1}^n e^{\beta(JS_i S_{i+1} + h S_i)}$$

De esta forma, tomamos la interacción entre todos los primeros vecinos con $S_i S_{i+1}$. Sin embargo, hace falta considerar los extremos, siendo así, asumimos condiciones de contorno periódicas de la forma $S_{n+1} = S_1$. Esto lo único que dice es que el último elemento de la cadena, interactúa con el primero, formando una especie de malla circular.

Tomemos el factor dentro de la productoria como un factor que depende de los espines, es decir

$$Z_g = \sum_{S_1=\pm 1} \dots \sum_{S_n=\pm 1} \prod_{i=1}^n T_{S_i S_{i+1}}$$

Ahora, podemos realizar las siguientes agrupaciones y notar que tenemos n productos de matrices, donde

$T_{S_i S_{i+1}}$ es el elemento matricial de una matriz T .

$$Z_g = \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_3=\pm 1} \dots \sum_{S_n=\pm 1} \left(\sum_{S_2=\pm 1} T_{S_1 S_2} T_{S_2 S_3} \right) T_{S_3 S_4 \dots T_{S_n S_1}}$$

$$= \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_4=\pm 1} \dots \sum_{S_n=\pm 1} \left(\sum_{S_2=\pm 1} T_{S_1 S_2}^2 T_{S_2 S_3} T_{S_3 S_4} \right) T_{S_4 S_5 \dots T_{S_n S_1}}$$

$$\vdots$$

$$= \sum_{S_1=\pm 1} T_{S_1, S_1}^n$$

$$= Tr(T^n)$$

Además, la función de partición se pudo escribir como la traza de esta misma matriz. Notemos que para el caso de dos espines cualquiera en una dimensión, $T_{S_i S_{i+1}}$ solo toma cuatro valores, cuando los dos espines están arriba, las dos combinaciones antiparalelas y cuando los dos espines están abajo, así, la matriz T , llamada matriz de transferencia, queda,

$$T = \begin{pmatrix} T_{++} & T_{+-} \\ T_{-+} & T_{--} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{\beta(-J+h)} \\ e^{-\beta(J+h)} & e^{\beta(J-h)} \end{pmatrix} \quad (8)$$

Dado que la traza es un invariante ante diagonalización, podemos diagonalizar la matriz T y en la diagonal quedarán los valores propios, es decir que,

$$Z_g = Tr(T^n) = \lambda_+^n + \lambda_-^n \quad (9)$$

Realizando el cálculo de los valores propios de la matriz, obtenemos

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J} \left(\cosh(\beta h) \pm \sqrt{\sinh^2(\beta h) - e^{-4\beta J}} \right) \quad (10)$$

El propósito es calcular la magnetización para ver que no existen cambios de fase espontáneos, es decir a campo $h = 0$. Para esto, primero calculamos la energía libre de Helmholtz.

$$\beta F = -\ln(Z_g) = -n \ln(\lambda_+) - \ln \left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^n \right)$$

$$F \approx -\frac{n}{\beta} \ln(\lambda_+)$$

Notemos que en el límite termodinámico, la energía libre de Helmholtz solo requiere el valor propio más grande. Para hallar la magnetización:

$$M = -\frac{\partial F}{\partial h}$$

Después de realizar el cálculo, la magnetización queda proporcional a $\sinh(\beta h)$. Al hacer el límite cuando h tiende a cero, la magnetización da cero, es decir que no existe una transición de fase espontánea.

Ahora nos proponemos a comprobar esto usando los teoremas de Yang&Lee. Sabemos que la función de partición se puede escribir:

$$Z_g = \sum_{S_1 \dots S_n} \prod_{i=1}^n e^{\beta(J S_i S_{i+1} + h S_i)} \quad (11)$$

Ahora queremos poner esta función de partición en términos de la fugacidad. Recordando la ecuación 7, definimos $x = e^{-2\beta J}$ y $z = e^{-2\beta h}$ tal que con $d = 1$, $y = e^{-2\beta(h+J)} = xz$. Veamos que la función de partición se puede escribir como un polinomio de grado n de la variable z con coeficientes funciones de x . El truco es factorizar el término más grande de la matriz, esta es la componente T_{++}^n , así:

$$Z_g = e^{\beta n(J+h)} \sum_{S_1 \dots S_n} \prod_{i=1}^n e^{\beta(J(S_i S_{i+1} - 1) + h(S_i - 1))}$$

Recordando que $S_i = 1 - 2P_i$, podemos hacer ese cambio de variable en la anterior ecuación y obtener:

$$\begin{aligned} Z_g &= e^{\beta n(J+h)} \sum_{P_1 \dots P_n} \prod_{i=1}^n e^{-2\beta J(P_i + P_{i+1} - 2P_i P_{i+1})} e^{-2\beta h P_i} \\ &= e^{\beta n(J+h)} \sum_{P_1 \dots P_n} \prod_{i=1}^n x^{P_i + P_{i+1} - 2P_i P_{i+1}} z^{P_i} \\ &= e^{\beta n(J+h)} \sum_{P_1 \dots P_n} \prod_{i=1}^n T_{P_i P_{i+1}} \\ &= e^{\beta n(J+h)} P(z) \end{aligned} \quad (12)$$

Ahora el objetivo es encontrar los ceros del polinomio $P(z)$, para esto aplicaremos la misma técnica de función de transferencia para obtener $P(z)$

$$T = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{10} \\ T_{01} & T_{00} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z & xz \\ x & 1 \end{pmatrix} \quad (13)$$

Encontramos los valores propios de la matriz de transferencia,

$$\lambda_{\pm} = \frac{(1+z) \pm \sqrt{(1+z)^2 - 4z(1-x^2)}}{2} \quad (14)$$

Como son solamente dos valores propios, se puede resolver la ecuación analíticamente teniendo en cuenta que tenemos n ceros, así

$$\lambda_+^N = \lambda_-^N$$

$$\lambda_+ = \lambda_- e^{i\frac{\pi}{n}(2k+1)}, \quad k \in \{1, 2, 3, \dots, n-1\}$$

$$(1+z_k)^2 = ((1-z_k)^2 - 4x^2 z_k) \left(\frac{1+e^{ik}}{1-e^{ik}} \right)^2$$

Se llega a la siguiente ecuación para los ceros:

$$\frac{1}{2}(z_k + z_k^{-1}) = -x^2 + (1-x^2) \cos\left(\frac{(2k+1)\pi}{n}\right) \quad (15)$$

De la anterior ecuación, se puede mostrar que los ceros deben estar en el círculo unitario, esto nos lleva a que $|z_k| = |z_k^{-1}| = 1$, entonces $z_k = e^{i\theta_k}$ y $z_k^{-1} = e^{-i\theta_k}$, por lo tanto,

$$\cos(\theta_k) = -x^2 + (1-x^2) \cos\left(\frac{(2k+1)\pi}{n}\right) \quad (16)$$

E. Modelo de Ising 2D

Para estudiar el modelo de Ising en 2D consideramos una red cuadrada $n \times n$, es decir con n filas y columnas. Nuestra idea es volver a usar la técnica de matriz de transferencia, sin embargo, ahora debemos iterar sobre dos índices, el número de fila, y el número de espín asociado a la fila. Definimos, μ_α como el conjunto de coordenadas de espín de la fila α -ésima:

$$\mu_\alpha = \{S_1, S_2, \dots, S_n\}_\alpha \quad (17)$$

Para volver a tener condiciones de frontera periódicas, asumimos $\mu_{n+1} = \mu_1$ y para todo n , $S_{n+1} = S_1$. Así entonces, la configuración completa de la red, se especifica con $\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n\}$. Como el modelo de Ising solo supone interacción con primeros vecinos, la única interacción nueva es la de cualesquiera dos filas adyacentes, es decir, se supone que la fila α solo interactúa con la fila $\alpha-1$ y la fila $\alpha+1$. Así entonces, definimos la energía de interacción entre las filas α y $\alpha+1$ como $E(\mu_\alpha, \mu_{\alpha+1})$ y $E(\mu_\alpha)$ como la energía de interacción de los espines dentro de la fila α y con el campo externo. Entonces para cualquier par de filas adyacentes μ y μ' :

$$E(\mu, \mu') = -J \sum_{k=1}^n S_k S_{k'} \quad (18)$$

$$E(\mu) = -J \sum_{k=1}^n S_k S_{k+1} - h \sum_{k=1}^n S_k \quad (19)$$

Así, entonces la energía total de configuración queda

$$E_T(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) = \sum_{\alpha=1}^n [E(\mu_\alpha, \mu_{\alpha+1}) + E(\mu_\alpha)] \quad (20)$$

La función de partición queda:

$$Z_g = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_n} \prod_{i=1}^n e^{\beta(JS_k S_{k'} + JS_k S_{k+1} + hS_i)} \quad (21)$$

Similarmente al modelo en una dimensión, la función de partición es una multiplicación de elementos matriciales $\langle \mu | P | \mu' \rangle = e^{\beta(JS_k S_{k'} + JS_k S_{k+1} + hS_i)}$ de la matriz P sumados.

$$\begin{aligned} Z_g &= \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_n} \langle \mu_1 | P | \mu_2 \rangle \langle \mu_2 | P | \mu_3 \rangle \dots \langle \mu_n | P | \mu_1 \rangle \\ &= \sum_{\alpha_1} \langle \mu_1 | P^n | \mu_1 \rangle = \text{Tr}(P^n) = \sum_{\alpha=1}^{2^n} \lambda_{\alpha}^n \end{aligned}$$

Como se observa, la matriz tiene 2^n valores propios, es decir que es una matriz $2^n \times 2^n$, esto tiene sentido si pensamos que 2^n son las posibles combinaciones de espines en una sola fila, y la matriz tiene en total $2^n \times 2^n$ posibles combinaciones entre las configuraciones de dos filas. Esto pone una restricción en el sentido computacional pues el tamaño de la matriz escala exponencialmente y obtener los valores propios y solucionar el polinomio de grado n se vuelve cada vez más complejo computacionalmente, esto se explora en la siguiente sección.

III. CÁLCULOS NUMÉRICOS

A. Modelo de Ising 1D

Se realizó una exploración gráfica de la distribución de los ceros de la función de partición con la ecuación 16, los resultados se pueden ver a continuación:

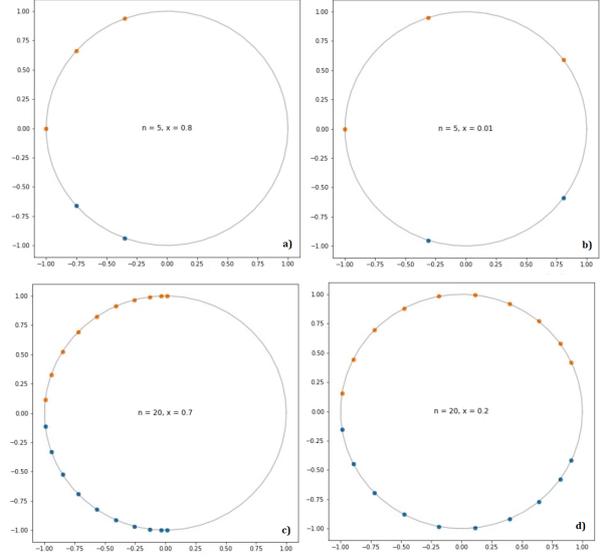


Figura 3. En las figuras a) y b) se observan los ceros para $n = 5$ para x grande y x pequeño respectivamente. En las figuras c) y d) se observa algo similar pero para $n = 20$

Podemos observar que los ceros se separan más cuando x es pequeño, cuando el número de ceros aumentó, estos se van repartiendo casi equitativamente en el círculo unitario. Todavía no se aprecia que los ceros se cierran hacia el eje real positivo, pero si se aprecia que se acercan.

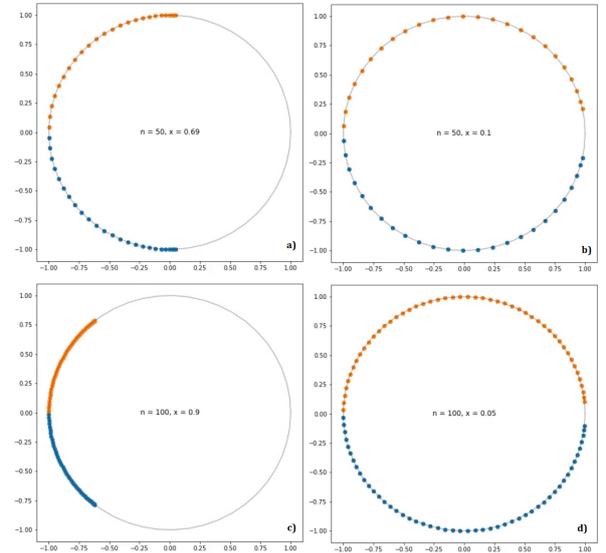


Figura 4. En las figuras a) y b) se observan los ceros para $n = 50$ para x grande y x pequeño respectivamente. En las figuras c) y d) se observa algo similar pero para $n = 100$

Lo observado anteriormente se incrementa bastante, a temperatura igual a cero o $x = 0$, los ceros se cierran

hacia el eje real positivo.

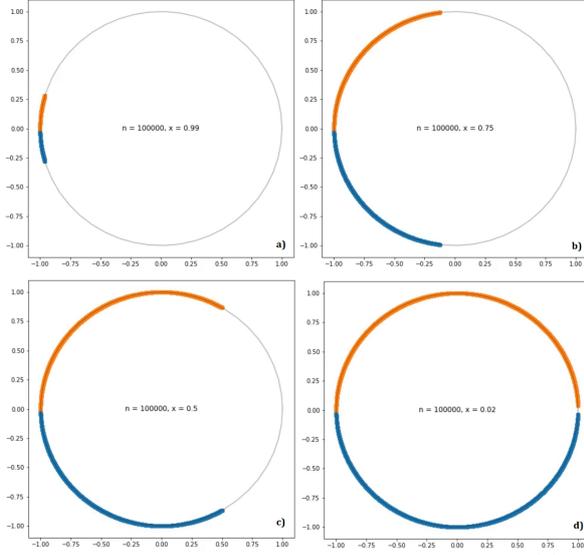


Figura 5. En todas las figuras se observa una progresión de x desde 1 hasta 0 para el n que más se acerca al límite termodinámico.

En el límite termodinámico hay tantos ceros, que se puede observar que se cierran a temperatura cero, pero que no tocan el eje real positivo. Esto nos indica que no existen transiciones de fase a una temperatura finita y diferente de cero en campo cero.

B. Modelo de Ising 2D

Inicialmente, calculamos en Mathematica la matriz de transferencia del modelo de Ising en 2D, sin ningún cambio de variable, a continuación el ejemplo de $n = 3$:

$$\begin{pmatrix} e^{3h+6J} & e^{3h+4J} & e^{3h+4J} & e^{3h+2J} & e^{3h+4J} & e^{3h+2J} & e^{3h+2J} & e^{3h} \\ e^h & e^{h+2J} & e^{h-2J} & e^h & e^{h-2J} & e^h & e^{h-4J} & e^{h-2J} \\ e^h & e^{h-2J} & e^{h+2J} & e^h & e^{h-2J} & e^{h-4J} & e^h & e^{h-2J} \\ e^{-h-2J} & e^{-h} & e^{-h} & e^{-h+2J} & e^{-h-4J} & e^{-h-2J} & e^{-h-2J} & e^{-h} \\ e^h & e^{h-2J} & e^{h-2J} & e^{h-4J} & e^{h+2J} & e^h & e^h & e^{h-2J} \\ e^{-h-2J} & e^{-h} & e^{-h-4J} & e^{-h-2J} & e^{-h} & e^{-h+2J} & e^{-h-2J} & e^{-h} \\ e^{-h-2J} & e^{-h-4J} & e^{-h} & e^{-h-2J} & e^{-h} & e^{-h-2J} & e^{-h+2J} & e^{-h} \\ e^{-3h} & e^{-3h+2J} & e^{-3h+2J} & e^{-3h+4J} & e^{-3h+2J} & e^{-3h+4J} & e^{-3h+4J} & e^{-3h+6J} \end{pmatrix}$$

Figura 6. Matriz de transferencia

Sin embargo, para dejarlo en términos de las variables x y z , se hizo algo similar para obtener la ecuación 12, pero con la respectiva dimensionalidad del sistema, obteniendo

$$\langle \mu | P | \mu' \rangle = e^{n(2J+h)} \prod_{k=1}^n x^{P_{k'}+P_{k+1}+2P_k(1-P_k-P_{k+1})} z^{P_k} \quad (22)$$

El ejemplo de $n = 3$ se muestra a continuación:

$$\begin{pmatrix} 1 & x & x & x^2 & x & x^2 & x^2 & x^3 \\ x^3 z & x^2 z & x^4 z & x^3 z & x^4 z & x^3 z & x^5 z & x^4 z \\ x^3 z & x^4 z & x^2 z & x^3 z & x^4 z & x^5 z & x^3 z & x^4 z \\ x^4 z^2 & x^3 z^2 & x^3 z^2 & x^2 z^2 & x^5 z^2 & x^4 z^2 & x^4 z^2 & x^3 z^2 \\ x^3 z & x^4 z & x^4 z & x^5 z & x^2 z & x^3 z & x^3 z & x^4 z \\ x^4 z^2 & x^3 z^2 & x^5 z^2 & x^4 z^2 & x^3 z^2 & x^2 z^2 & x^4 z^2 & x^3 z^2 \\ x^4 z^2 & x^5 z^2 & x^3 z^2 & x^4 z^2 & x^3 z^2 & x^4 z^2 & x^2 z^2 & x^3 z^2 \\ x^3 z^3 & x^2 z^3 & x^2 z^3 & x z^3 & x^2 z^3 & x z^3 & x z^3 & z^3 \end{pmatrix}$$

Figura 7. Matriz de transferencia

Posteriormente, se realizó el proceso de multiplicar las matrices de transferencia n veces ya que Mathematica no obtenía expresiones analíticas para los valores propios de la matriz. Este proceso fue posible realizarlo hasta $n = 6$ ($2^n = 64$), puesto que con n mas grandes se excedía el tiempo de computo permitido. Así, obtuvimos la traza de la matriz y encontramos los ceros de la función de partición. Se realizó un estudio alrededor de la temperatura crítica reportada por la literatura [4] $e^{\frac{-J}{kT_c}} = \sqrt{2} - 1$ entonces $x_c = (\sqrt{2} - 1)^2 \approx 0,17157$ A continuación se muestran los resultados.

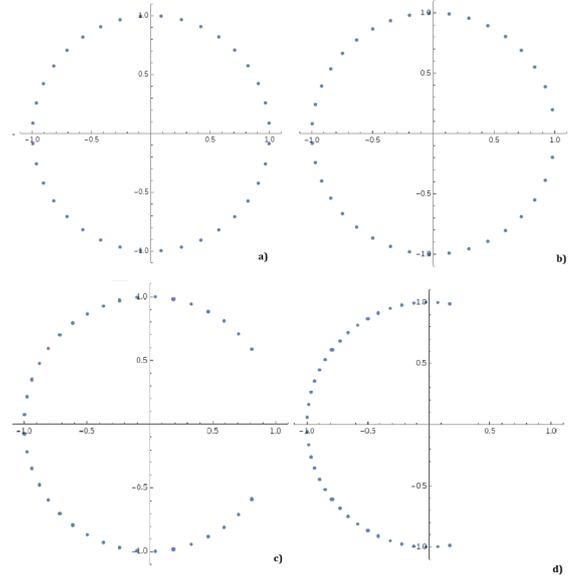


Figura 8. Todas las figuras fueron hechas para $n = 6$, la figura a) $x = 0,17157$, b) $x = 0,3431$, c) $x = 0,5147$ d) $0,85786$

Observamos que los ceros están en el círculo unitario como predice el teorema 3 de Yang & Lee, además, podemos observar que a medida que el valor de x se aleja

de x_c los ceros se alejan del eje real positivo. Sin embargo, ya que la temperatura es cercana a $x = 0$, falta precisión por el lado izquierdo, es decir, pruebas realizadas con $x < x_c$ no observan muchos cambios respecto a $x = x_c$, como se observa en la siguiente figura.

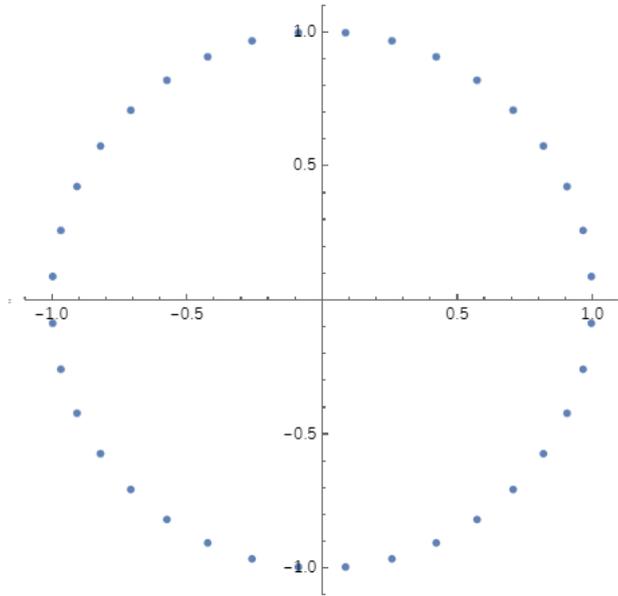


Figura 9. Ceros de la función de partición para $n = 6$ y $x = 0,08578$

Si fuera posible aumentar el n tal vez veríamos un pequeño retroceso en los ceros antes de que vuelvan a cerrarse al rededor del eje cuando $x = 0$. Sin embargo, se pudo comprobar que existe una transición de fase en el modelo de Ising en dos dimensiones a una temperatura diferente de cero y a campo cero.

IV. CONCLUSIONES

- Fue posible comprender los modelos de Ising en una y dos dimensiones, su relación con el modelo de gas en red y los teoremas de Yang y Lee, así como la aplicación de la técnica de matriz de transferencia para sus funciones de partición.
- Fue posible comprobar gráficamente que los teoremas de Yang Lee se cumplen para el modelo de Ising.
- Fue posible determinar analítica y gráficamente que el modelo de Ising en una dimensión no posee transiciones de fase a campo cero y a temperatura finita diferente de cero.
- Fue posible comprobar computacional y gráficamente que el modelo de Ising en dos dimensiones posee una transición de fase a campo cero y a temperatura finita diferente de cero al rededor de $x = 0,17157$

[1] E. Ising, *Zeitschrift für Physik* **31**, 253 (1925).
 [2] L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
 [3] C. N. Yang and T. D. Lee, *Phys. Rev.* **87**, 404 (1952).

[4] H. Kerson Huang, *Statistical Mechanics* (John Wiley Sons, 1987).