

# Solución exacta del modelo de Ising en una red triangular

Juan José Gómez Navarro

13 de junio de 2005

## 1. Introducción

La función de partición del modelo de Ising es

$$z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j}.$$

Esta suma es equivalente a la siguiente suma sobre gráficos:

$$z = 2^N (1 + x^2)^{-N\gamma/4} S \quad ; \quad S = \sum_{l=0}^{\infty} x^l g_l$$

donde  $x = \tanh(\beta J \gamma)$  y  $g_l$  es el número de gráficos posibles cerrados<sup>1</sup> **conexos** o **no conexos** en la red triangular de longitud  $l$ . Sin embargo  $S$  es todavía difícil de calcular con estos elementos. Vamos a hacer un cambio, de manera que nuestro cálculo involucre solo gráficos conexos. se puede demostrar que la expresión para  $S$  es equivalente a:

$$S = \exp\left[-\sum_{l=1}^{\infty} x^l f_l\right]$$

donde ahora  $f_l$  es la contribución de todos los gráficos **conexos** pesados con un factor  $-1$  teniendo en cuenta el número de cruces del gráfico de longitud  $l$ . De esta manera, la energía libre es

$$F = -KT \log(z) = -NKT \left[ \log(2) - \frac{\gamma}{4} \log(1 + x^2) \right] - KT \log(S)$$

El comportamiento no analítico de la transición de fase vendrá dado por  $S$ . En adelante tomaré  $\gamma$ , el número de vecinos igual a 6 como corresponde a la red triangular.

---

<sup>1</sup>Cerrados en este contexto significa que cada vértice recibe un número par de segmentos.

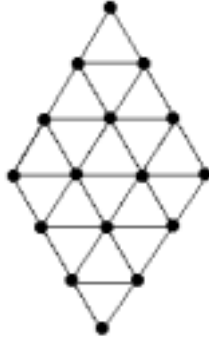


Figura 1: Ejemplo de red triangular de 4x4

## 2. $f_l$ y el caminante aleatorio

El factor  $f_l$  da cuenta de todos los posibles caminos cerrados sobre sí mismos trazados de una vez. Esto es totalmente análogo a un caminante aleatorio que pasea por la red. Para que la relación sea total hemos de hacer que el caminante no vuelva sobre sus propios pasos, así como hacer que en cada giro, se multiplique por una fase  $e^{i\phi/2}$ . Este factor no tiene significado en sí en el problema del caminante, pero es necesario para relacionar los problemas.

## 3. Solución del caminante aleatorio en red triangular.

Pasemos a resolver el camino del borracho en la red triangular. Esta red está caracterizada por dos vectores, llamémoslos  $\hat{x}$  y  $\hat{z}$ . Sin embargo por comodidad vamos a introducir otro vector, el  $\hat{y}$ , como se muestra en la figura 2. Obviamente los tres vectores no pueden ser linealmente independientes, pues se trata de una red de Bravais en dos dimensiones. La relación es

$$\hat{x} + \hat{z} = \hat{y}$$

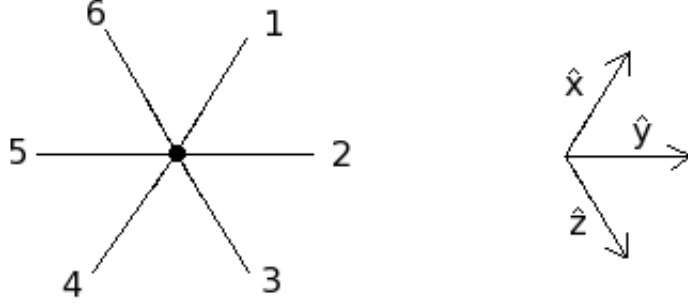


Figura 2: Convenios para resolver el problema

Un punto de la red está dada por tres valores enteros:

$$\vec{r} = \bar{\alpha}\hat{x} + \bar{\beta}\hat{y} + \bar{\gamma}\hat{z}$$

pero puede ser reescrita dependiendo sólo de dos:

$$\vec{r} = \alpha\hat{x} + \gamma\hat{z}$$

que está relacionados con los anteriores mediante

$$\begin{aligned}\alpha &= \bar{\alpha} + \bar{\beta} \\ \gamma &= \bar{\gamma} + \bar{\beta}\end{aligned}$$

Sigamos de momento con los tres parámetros con raya. Las direcciones del caminante han sido elegidas como indica la figura. Si denotamos  $W_{l+1}(\alpha, \beta, \gamma, \nu)$  el número de caminos que partiendo de un origen arbitrario llegan al punto dado por  $\alpha, \beta, \gamma$  en la dirección  $\nu$  en  $l+1$  pasos, entonces podemos calcular esta magnitud en función de las similares de grado  $l$ . Explícitamente, tenemos para cada una de los valores de  $\nu^2$ :

$$\begin{aligned}W_{l+1}(\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}, 1) &= \\ &= 1 W_l(\bar{\alpha} - 1, \bar{\beta}, \bar{\gamma}, 1) + e^{i\pi/6} W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta} - 1, \bar{\gamma}, 2) + e^{i\pi/3} W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma} - 1, 3) + \\ &+ 0 W_l(\bar{\alpha} + 1, \bar{\beta}, \bar{\gamma}, 4) + e^{-i\pi/3} W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta} + 1, \bar{\gamma}, 5) + e^{-i\pi/6} W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma} + 1, 6)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}W_{l+1}(\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}, 2) &= \\ &= e^{-i\pi/6} W_l(\bar{\alpha} - 1, \bar{\beta}, \bar{\gamma}, 1) + 1 W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta} - 1, \bar{\gamma}, 2) + e^{i\pi/6} W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma} - 1, 3) + \\ &+ e^{i\pi/3} W_l(\bar{\alpha} + 1, \bar{\beta}, \bar{\gamma}, 4) + 0 W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta} + 1, \bar{\gamma}, 5) + e^{-i\pi/3} W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma} + 1, 6)\end{aligned}$$

<sup>2</sup>Como he dicho antes, estas expresiones incluyen un factor de fase sin significado para el caminante (sí el factor 0, que hace que no pueda regresar sobre sus pasos) pero son necesarios para relacionarlo con el modelo de Ising

$$\begin{aligned}
W_{l+1}(\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}, 3) &= \\
&= e^{-i\pi/3} W_l(\bar{\alpha} - 1, \bar{\beta}, \bar{\gamma}, 1) + e^{-i\pi/6} W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta} - 1, \bar{\gamma}, 2) + 1 W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma} - 1, 3) + \\
&+ e^{i\pi/6} W_l(\bar{\alpha} + 1, \bar{\beta}, \bar{\gamma}, 4) + e^{i\pi/3} W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta} + 1, \bar{\gamma}, 5) + 0 W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma} + 1, 6)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{l+1}(\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}, 4) &= \\
&= 0 W_l(\bar{\alpha} - 1, \bar{\beta}, \bar{\gamma}, 1) + e^{-i\pi/3} W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta} - 1, \bar{\gamma}, 2) + e^{-i\pi/6} W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma} - 1, 3) + \\
&+ 1 W_l(\bar{\alpha} + 1, \bar{\beta}, \bar{\gamma}, 4) + e^{i\pi/6} W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta} + 1, \bar{\gamma}, 5) + e^{i\pi/3} W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma} + 1, 6)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{l+1}(\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}, 5) &= \\
&= e^{i\pi/3} W_l(\bar{\alpha} - 1, \bar{\beta}, \bar{\gamma}, 1) + 0 W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta} - 1, \bar{\gamma}, 2) + e^{-i\pi/3} W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma} - 1, 3) + \\
&+ e^{-i\pi/6} W_l(\bar{\alpha} + 1, \bar{\beta}, \bar{\gamma}, 4) + 1 W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta} + 1, \bar{\gamma}, 5) + e^{i\pi/6} W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma} + 1, 6)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{l+1}(\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}, 6) &= \\
&= e^{i\pi/6} W_l(\bar{\alpha} - 1, \bar{\beta}, \bar{\gamma}, 1) + e^{i\pi/3} W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta} - 1, \bar{\gamma}, 2) + 0 W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma} - 1, 3) + \\
&+ e^{-i\pi/3} W_l(\bar{\alpha} + 1, \bar{\beta}, \bar{\gamma}, 4) + e^{-i\pi/6} W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta} + 1, \bar{\gamma}, 5) + 1 W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma} + 1, 6)
\end{aligned}$$

He hecho este cálculo con los tres parámetros porque es más intuitivo, ahora utilizaré la relación entre parámetros con raya y sin ella para reducir las ecuaciones a dos parámetros. Esta relación se puede escribir como:

$$\begin{aligned}
W_l(\bar{\alpha} \pm 1, \bar{\beta}, \gamma, \nu) &= W_l(\alpha \pm 1, \gamma, \nu) \\
W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta} \pm 1, \gamma, \nu) &= W_l(\alpha \pm 1, \gamma \pm 1, \nu) \\
W_l(\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \gamma \pm 1, \nu) &= W_l(\alpha, \gamma \pm 1, \nu)
\end{aligned}$$

de manera que finalmente, la tabla que relaciona  $W_{l+1}$  con  $W_l$  con sólo los dos parámetros característicos de la red  $\alpha, \gamma$ es:

$$\begin{aligned}
W_{l+1}(\alpha, \gamma, 1) &= \\
&= 1 W_l(\alpha - 1, \gamma, 1) + e^{i\pi/6} W_l(\alpha - 1, \gamma - 1, 2) + e^{i\pi/3} W_l(\alpha, \gamma - 1, 3) + \\
&+ 0 W_l(\alpha + 1, \gamma, 4) + e^{-i\pi/3} W_l(\alpha + 1, \gamma + 1, 5) + e^{-i\pi/6} W_l(\alpha, \gamma + 1, 6)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{l+1}(\alpha, \gamma, 2) &= \\
&= e^{-i\pi/6} W_l(\alpha - 1, \gamma, 1) + 1 W_l(\alpha - 1, \gamma - 1, 2) + e^{i\pi/6} W_l(\alpha, \gamma - 1, 3) + \\
&+ e^{i\pi/3} W_l(\alpha + 1, \gamma, 4) + 0 W_l(\alpha + 1, \gamma + 1, 5) + e^{-i\pi/3} W_l(\alpha, \gamma + 1, 6)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{l+1}(\alpha, \gamma, 3) &= \\
&= e^{-i\pi/3} W_l(\alpha - 1, \gamma, 1) + e^{-i\pi/6} W_l(\alpha - 1, \gamma + 1, 2) + 1 W_l(\alpha, \gamma - 1, 3) + \\
&+ e^{i\pi/6} W_l(\alpha + 1, \gamma, 4) + e^{i\pi/3} W_l(\alpha + 1, \gamma + 1, 5) + 0 W_l(\alpha, \gamma + 1, 6)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{l+1}(\alpha, \gamma, 4) &= \\
&= 0 W_l(\alpha - 1, \gamma, 1) + e^{-i\pi/3} W_l(\alpha - 1, \gamma - 1, 2) + e^{-i\pi/6} W_l(\alpha, \gamma - 1, 3) + \\
&+ 1 W_l(\alpha + 1, \gamma, 4) + e^{i\pi/6} W_l(\alpha + 1, \gamma + 1, 5) + e^{i\pi/3} W_l(\alpha, \gamma + 1, 6)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{l+1}(\alpha, \gamma, 5) &= \\
&= e^{i\pi/3} W_l(\alpha - 1, \gamma, 1) + 0 W_l(\alpha - 1, \gamma - 1, 2) + e^{-i\pi/3} W_l(\alpha, \gamma - 1, 3) + \\
&+ e^{-i\pi/6} W_l(\alpha + 1, \gamma, 4) + 1 W_l(\alpha + 1, \gamma + 1, 5) + e^{i\pi/6} W_l(\alpha, \gamma + 1, 6)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{l+1}(\alpha, \gamma, 6) &= \\
&= e^{i\pi/6} W_l(\alpha - 1, \gamma, 1) + e^{i\pi/3} W_l(\alpha - 1, \gamma - 1, 2) + 0 W_l(\alpha, \gamma - 1, 3) + \\
&+ e^{-i\pi/3} W_l(\alpha + 1, \gamma, 4) + e^{-i\pi/6} W_l(\alpha + 1, \gamma + 1, 5) + 1 W_l(\alpha, \gamma + 1, 6)
\end{aligned}$$

Estas expresiones pueden ser escritas de manera compacta como

$$\begin{aligned}
W_{l+1}(\alpha, \gamma, \nu) &= \\
&= a_\nu W_l(\alpha - 1, \gamma, 1) + b_\nu W_l(\alpha - 1, \gamma - 1, 2) + c_\nu W_l(\alpha, \gamma - 1, 3) + \quad (1) \\
&+ d_\nu W_l(\alpha + 1, \gamma, 4) + e_\nu W_l(\alpha + 1, \gamma + 1, 5) + f_\nu W_l(\alpha, \gamma + 1, 6)
\end{aligned}$$

Donde los coeficientes están explícitamente arriba. Esta expresión puede ser vista como una relación vectorial. Para ello, agrupamos los índices  $\alpha, \gamma, \nu$  en uno sólo  $i$ , de manera que  $W_{l+1}$  puede ser visto como un vector relacionado con los vectores  $W_l$  mediante una matriz. Explícitamente y mediante inducción:

$$W_{l+1}(i) = \sum_{i_1} \Lambda_{ii_1} W_l(j) = \sum_{i, i_1, \dots, i_l} \Lambda_{ii_1} \Lambda_{i_1 i_2} \cdots \Lambda_{i_{l-1} i_l} W_0(i_l)$$

que es una multiplicación matricial. Por tanto, el número de caminos está dado por la matriz  $\Lambda^l$ . Pero en lo que estamos realmente interesados es en calcular  $f_l$ . Hay una degeneración en el número de caminos, ya que un caminante puede hacer un mismo camino empezando en cualquiera de sus vértices además de hacerlo en ambos sentidos, mientras que el  $f_l$  correspondiente es el mismo. Es por esto que la relación se puede escribir como

$$f_l = \frac{1}{2l} \sum_{\alpha\gamma\nu} W_l(\alpha, \gamma, \nu) = \frac{1}{2l} \text{Tr}(\Lambda^l) = \frac{1}{2l} \sum_{i=1}^{6N} \lambda_i^l$$

Donde en el último paso he supuesto que  $\lambda_i$  son los autovalores. Nuestro problema se ha visto reducido por tanto a calcular la traza de una matriz<sup>3</sup>  $6N \times 6N$ . Volvamos ahora al cálculo de  $S$  ya que tenemos una expresión para  $f_l$ :

$$S = \text{Exp} \left[ - \sum_{l=1}^{\infty} x^l f_l \right] = \text{Exp} \left[ - \sum_{i=1}^{6N} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{2l} (\lambda_i x)^l \right]$$

y utilizando el desarrollo del logaritmo:

$$S = \text{Exp} \left[ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{6N} \log(1 - x\lambda_i) \right] = \prod_{i=1}^{6N} \sqrt{1 - x\lambda_i} = \sqrt{\det[I - x\Lambda]}$$

Ahora ya está claro que con los autovalores de  $\Lambda$  tenemos  $S$  y con éste  $F$ .

Podemos reducir nuestro problema a una  $6 \times 6$  utilizando sabiamente el teorema de Bloch, que nos va a permitir diagonalizar a bloques la matriz. Para ello, ensayamos el vector siguiente

$$V_l(q_\alpha, q_\gamma, \nu) = \sum_{\alpha, \gamma} e^{i(\alpha q_\alpha + \beta q_\beta)} W_l(\alpha, \gamma, \nu)$$

con

$$\begin{aligned} q_\alpha &= \frac{2\pi}{L} m & m &= 1, 2, \dots, L-1 \\ q_\beta &= \frac{2\pi}{L} n & n &= 1, 2, \dots, L-1 \end{aligned}$$

que tiene la simetría de la red. Aplicándole  $\Lambda$  encontramos

$$\Lambda V_l(q_\alpha, q_\gamma, \nu) = \sum_{\alpha, \gamma} e^{i(\alpha q_\alpha + \beta q_\beta)} \Lambda W_l(\alpha, \gamma, \nu)$$

Pero la última parte es justo la ec. (1), que ya conocemos. Ahora por ejemplo, para un sólo elemento de (1) tenemos:

$$\sum_{\alpha\gamma} e^{i(\alpha q_\alpha + \beta q_\beta)} a_\nu W_l(\alpha - 1, \gamma, 1) = \sum_{\alpha\gamma} e^{i q_\alpha} e^{i((\alpha-1)q_\alpha + \beta q_\beta)} W_l(\alpha - 1, \gamma, 1) =$$

<sup>3</sup>Como la traza es invariante, basta con calcular la traza de la matriz diagonal, lo que va a resultar más sencillo

$$= e^{iq_\alpha} \sum_{\alpha-1\gamma} e^{i((\alpha-1)q_\alpha + \beta q_\beta)} W_l(\alpha-1, \gamma, 1) = e^{iq_\alpha} W_l(\alpha, \gamma, 1)$$

Donde en el último paso he utilizado las condiciones periódicas y la elección de los  $q$  que respetan la simetría. Procediendo análogamente en los otros casos, encuentro en general que la expresión (1) se convierte en:

$$\begin{aligned} W_{l+1}(\alpha, \gamma, \nu) &= \Lambda W_l(\alpha, \gamma, \nu) = \\ &= a_\nu e^{iq_\alpha} W_l(\alpha, \gamma, 1) + b_\nu e^{i(q_\alpha + q_\gamma)} W_l(\alpha, \gamma, 2) + c_\nu e^{iq_\gamma} W_l(\alpha, \gamma, 3) + \\ &+ d_\nu e^{-iq_\alpha} W_l(\alpha, \gamma, 4) + e_\nu e^{-i(q_\alpha + q_\gamma)} W_l(\alpha, \gamma, 5) + f_\nu e^{-iq_\gamma} W_l(\alpha, \gamma, 6) \end{aligned} \quad (2)$$

Esta ecuación es justo la demostración de que tenemos la matriz diagonalizada a bloques, ya que los índices  $\alpha, \gamma$  no se mezclan, como sí pasa con los  $\nu$ . Mirando los coeficientes de (1) y (2) combinados, podemos encontrar que la matriz a diagonalizar es:

$$\begin{pmatrix} e^{iq_\alpha} & e^{i(q_\alpha + q_\gamma)} e^{i\pi/6} & e^{i+q_\gamma} e^{i\pi/3} & 0 & e^{-i(q_\alpha + q_\gamma)} e^{-i\pi/3} & e^{-i+q_\gamma} e^{-i\pi/6} \\ e^{iq_\alpha} e^{-i\pi/6} & e^{i(q_\alpha + q_\gamma)} & e^{i+q_\gamma} e^{i\pi/6} & e^{-iq_\alpha} e^{i\pi/3} & 0 & e^{-i+q_\gamma} e^{-i\pi/3} \\ e^{iq_\alpha} e^{-i\pi/3} & e^{i(q_\alpha + q_\gamma)} e^{-i\pi/6} & e^{i+q_\gamma} & e^{-iq_\alpha} e^{i\pi/6} & e^{-i(q_\alpha + q_\gamma)} e^{i\pi/3} & 0 \\ 0 & e^{i(q_\alpha + q_\gamma)} e^{-i\pi/3} & e^{i+q_\gamma} e^{-i\pi/6} & e^{-iq_\alpha} & e^{-i(q_\alpha + q_\gamma)} e^{i\pi/6} & e^{-i+q_\gamma} e^{i\pi/3} \\ e^{iq_\alpha} e^{i\pi/3} & 0 & e^{i+q_\gamma} e^{-i\pi/3} & e^{-iq_\alpha} e^{-i\pi/6} & e^{-i(q_\alpha + q_\gamma)} & e^{-i+q_\gamma} e^{i\pi/6} \\ e^{iq_\alpha} e^{-i\pi/6} & e^{i(q_\alpha + q_\gamma)} e^{i\pi/3} & 0 & e^{-iq_\alpha} e^{-i\pi/3} & e^{-i(q_\alpha + q_\gamma)} e^{-i\pi/6} & e^{-i+q_\gamma} \end{pmatrix}$$

Realizando los cálculos con *Mathemática* podemos encontrar el determinante  $6 \times 6$ :

$$\det[I_6 - x\Lambda_6] = 1 + x^2(3 + x(8 + 3x + x^3)) - 2x(-1 + x^2) [\cos(q_\alpha) + \cos(q_\gamma) + \cos(q_\alpha - q_\gamma)]$$

El determinante total será el producto de los  $N$  determinantes  $6 \times 6$ . De esta manera la energía libre del modelo de Ising es finalmente:

$$\begin{aligned} F &= -KT \log(z) = -NKT \left[ \frac{2}{\log(1 + x^2)^{3/2}} \right] - \frac{KT}{2} \log[\det(I - x\Lambda)] = \\ &= -NKT \left[ \frac{2}{\log(1 + x^2)^{3/2}} \right] - \\ &- \frac{KT}{2} \sum_{\alpha=0}^{L-1} \sum_{\gamma=0}^{L-1} \log[1 + x^2(3 + x(8 + 3x + x^3)) - 2x(-1 + x^2)^2 [\cos(q_\alpha) + \cos(q_\gamma) + \cos(q_\alpha - q_\gamma)]] \end{aligned}$$

donde  $q_\alpha = \frac{2\pi}{L}\alpha$ ,  $q_\gamma = \frac{2\pi}{L}\gamma$ .

## 4. Propiedades de la solución

Ahora podemos calcular algunas de las propiedades del modelo. Sin embargo necesitaremos hacer alguna aproximación. De hecho esta función es analítica y no puede presentar transición de fase. Para encontrar comportamiento no analítico tendremos que tomar el límite de tamaño infinito. En el caso  $L \gg 1$

$$\sum_{\alpha=0}^{L-1} q_\alpha \longrightarrow \frac{2\pi}{L} \int_0^{2\pi} \theta_1$$

$$L \longrightarrow \infty$$

de manera que la solución puede ser escrita en el límite de tamaño tendiente a infinito como:

$$F = -NKT \left[ \frac{2}{\log(1+x^2)^{3/2}} \right] - \frac{NKT}{2(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\theta_1 \int_0^{2\pi} d\theta_2 \log[1+x^2(3+x(8+3x+x^3))-2x(-1+x^2)^2 [\cos(\theta_1) + \cos(\theta_2) + \cos(\theta_1 - \theta_2)]]$$

La única posibilidad de que el sistema presente divergencias es cuando el argumento del logaritmo se anule. Pero esto es sólo posible en un punto, ya que de caso contrario la integral divergería. Éste punto ha de ser cuando la combinación de cosenos sea lo más positiva posible. Esto se da cuando

$$\begin{aligned} q_\alpha &= 0 \\ q_\gamma &= 0 \end{aligned}$$

en cuyo caso la combinación vale 3 y tenemos que buscar el cero de la función

$$f(x) = 1 + x^2(3 + x(8 + 3x + x^3)) - 6x(-1 + x^2)^2$$

Nuevamente con Matemática encontramos la solución

$$x_c = \tanh(\beta_c J \gamma) = 2 - \sqrt{3}$$

de donde finalmente

$$\beta_c J 6 = 0,274653 \Rightarrow T_c = \frac{6J}{0,274653 k_B}$$

## 5. Solución al modelo de Ising en una red hexagonal.

La red hexagonal no es de hecho una red de Bravais, sino una red con base. Elegimos la celda unitaria como se indica en el dibujo de manera que éstas sí forman ahora una red de Bravais.

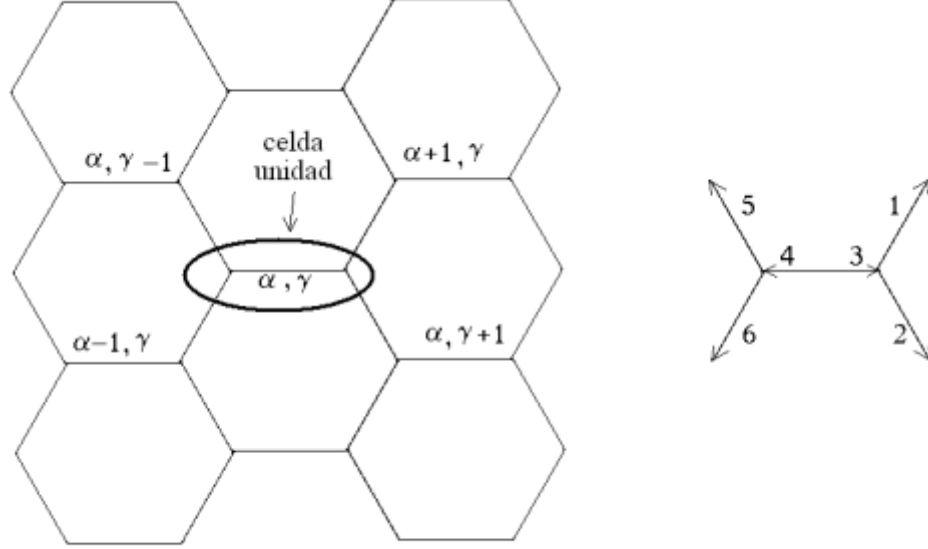


Figura 3: Red hexagonal y convenios sobre direcciones y posiciones.

Elegimos los vectores de la red con la misma notación que en el caso anterior. La diferencia es que en este caso tenemos un número mayor de orientaciones dependiendo de en que punto de la red estemos, pues no son todos equivalentes. Elegimos la numeración de las orientaciones como se indica en el dibujo y obtenemos las siguientes leyes de recurrencia:

$$\begin{aligned}
 W_{l+1}(\alpha, \gamma, 1) &= e^{i\pi/6} W_l(\alpha, \gamma, 3) + e^{-i\pi/6} W_l(\alpha, \gamma + 1, 5) \\
 W_{l+1}(\alpha, \gamma, 2) &= e^{-i\pi/6} W_l(\alpha, \gamma, 3) + e^{i\pi/6} W_l(\alpha + 1, \gamma, 6) \\
 W_{l+1}(\alpha, \gamma, 3) &= e^{-i\pi/6} W_l(\alpha - 1, \gamma, 1) + e^{i\pi/6} W_l(\alpha, \gamma - 1, 2) \\
 W_{l+1}(\alpha, \gamma, 4) &= e^{i\pi/6} W_l(\alpha, \gamma + 1, 5) + e^{-i\pi/6} W_l(\alpha + 1, \gamma, 6) \\
 W_{l+1}(\alpha, \gamma, 5) &= e^{i\pi/6} W_l(\alpha - 1, \gamma, 1) + e^{-i\pi/6} W_l(\alpha, \gamma, 4) \\
 W_{l+1}(\alpha, \gamma, 6) &= e^{-i\pi/6} W_l(\alpha, \gamma - 1, 2) + e^{i\pi/6} W_l(\alpha, \gamma, 4)
 \end{aligned}$$

Aplicando como antes el Teorema de Bloch obtenemos la matriz:

$$M = \begin{pmatrix}
 0 & 0 & e^{i\pi/6} & 0 & e^{-i(\pi/6+q_\gamma)} & 0 \\
 0 & 0 & e^{-i\pi/6} & 0 & 0 & e^{i(\pi/6-q_\alpha)} \\
 e^{i(q_\alpha-\pi/6)} & e^{i(q_\gamma+\pi/6)} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-i(q_\gamma-\pi/6)} & e^{-i(q_\alpha+\pi/6)} \\
 e^{i(q_\gamma+\pi/6)} & 0 & 0 & e^{-i\pi/6} & 0 & 0 \\
 0 & e^{i(q_\gamma-\pi/6)} & 0 & e^{i\pi/6} & 0 & 0
 \end{pmatrix}$$

Podemos observar que esta nueva matriz tiene muchos más ceros que la anterior. Esto es porque debido a la construcción de la red, sólo tenemos dos



direcciones de las que hemos podido llegar, de manera que sólo hay dos elementos no nulos en cada fila.

Para obtener el punto crítico, como antes tenemos que calcular el determinante de la matriz y ver cuando se anula. Nuevamente, con ayuda de Mathematica obtenemos

$$\det[I_6 - x\Lambda] = g(x) = 1 + 3x^4 + 2x^2(-1 + x^2)[\cos q_\alpha + \cos q_\gamma + \cos(q_\alpha - q_\gamma)].$$

Para que haya divergencias, necesitamos que se anule  $g$ , que es el argumento del logaritmo en la expresión para la energía libre. Como antes, esto sólo ocurrirá cuando

$$\begin{aligned} q_\alpha &= 0 \\ q_\gamma &= 0 \end{aligned}$$

en cuyo caso, la solución que obtenemos es

$$x_c = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

de donde

$$k_c = \frac{0,658479}{6} \Rightarrow T_c = \frac{6J}{0,658479k_B}$$

## 6. Generalización de la red triangular con enlaces diferentes

Vamos a generalizar el problema de la red triangular permitiendo que los enlaces en las tres direcciones diferentes de la red tengan diferente energía. De esta manera, tendremos tres variables en lugar de una:

$$\begin{aligned} x_1 &= \tanh(\beta J_1 \gamma) \\ x_2 &= \tanh(\beta J_2 \gamma) \\ x_3 &= \tanh(\beta J_3 \gamma) \end{aligned}$$

Entonces, en la expresión para  $S$  en la que aparecen términos  $f_l x^l$  se verá modificada, ya que el término  $x^l$  habrá ahora un producto en general de  $x_i$  de orden  $l$ . Esto repercute en que a la hora de calcular el determinante  $\det[I_6 - x\Lambda]$  no podamos sacar el factor  $x$  común en toda la matriz. En cada paso del caminante tendrá que multiplicarse un factor que además del factor de fase incluya el valor de la constante de energía de ese enlace que ahora no es la misma dependiendo de la dirección en la que nos movamos. De esta manera, la matriz generalizada incluirá en cada columna un factor  $x_i$  correspondiente y el determinante a calcular no lleva el  $x$  multiplicando a la matriz, puesto que ya está incluido. Elegimos arbitrariamente que los enlaces  $J_1$  sean los que van en la dirección de  $\hat{x}$ ,  $J_1$  en la  $\hat{y}$  y  $J_3$  en la  $\hat{z}$ . De esta manera la matriz generalizada es simplemente:

$$\begin{pmatrix} x_1 e^{iq_\alpha} & x_2 e^{i(q_\alpha + q_\gamma)} e^{i\pi/6} & x_3 e^{i+q_\gamma} e^{i\pi/3} & 0 & x_2 e^{-i(q_\alpha + q_\gamma)} e^{-i\pi/3} & x_3 e^{-i+q_\gamma} e^{-i\pi/6} \\ x_1 e^{iq_\alpha} e^{-i\pi/6} & x_2 e^{i(q_\alpha + q_\gamma)} & x_3 e^{i+q_\gamma} e^{i\pi/6} & x_1 e^{-iq_\alpha} e^{i\pi/3} & 0 & x_3 e^{-i+q_\gamma} e^{-i\pi/3} \\ x_1 e^{iq_\alpha} e^{-i\pi/3} & x_2 e^{i(q_\alpha + q_\gamma)} e^{-i\pi/6} & x_3 e^{i+q_\gamma} & x_1 e^{-iq_\alpha} e^{i\pi/6} & x_2 e^{-i(q_\alpha + q_\gamma)} e^{i\pi/3} & 0 \\ 0 & x_2 e^{i(q_\alpha + q_\gamma)} e^{-i\pi/3} & x_3 e^{i+q_\gamma} e^{-i\pi/6} & x_1 e^{-iq_\alpha} & x_2 e^{-i(q_\alpha + q_\gamma)} e^{i\pi/6} & x_3 e^{-i+q_\gamma} e^{i\pi/3} \\ x_1 e^{iq_\alpha} e^{i\pi/3} & 0 & x_3 e^{i+q_\gamma} e^{-i\pi/3} & x_1 e^{-iq_\alpha} e^{-i\pi/6} & x_2 e^{-i(q_\alpha + q_\gamma)} & x_3 e^{-i+q_\gamma} e^{i\pi/6} \\ x_1 e^{iq_\alpha} e^{-i\pi/6} & x_2 e^{i(q_\alpha + q_\gamma)} e^{i\pi/3} & 0 & x_1 e^{-iq_\alpha} e^{-i\pi/3} & x_2 e^{-i(q_\alpha + q_\gamma)} e^{-i\pi/6} & x_3 e^{-i+q_\gamma} \end{pmatrix}$$

Haciendo el determinante  $\det[I_6 - \Lambda]$  en contramos que depende de las tres variables  $x_i$  mediante:

$$\det[I_6 - \Lambda] = 8x_1x_2x_3 + (1 + x_2^2)(1 + x_3^2) + x_1^2(1 + x_2^2)(1 + x_3^2) - 2(-1+x_2^2)(x_1(-1+x_3^2) \cos(q_\alpha) + (-1+x_1^2)x_3 \cos(q_\gamma)) - 2(-1+x_1^2)x_2(-1+x_3^2) \cos(q_\alpha - q_\gamma)$$

Podemos comprobar que cuando hacemos  $x_1 = x_2 = x_3 = x$  obtenemos el mismo caso que en el problema de la red triangular con enlaces iguales. Además si hacemos  $x_1 = x_3 = x$  y  $x_2 = 0$  deberíamos obtener la solución para una red cuadrada, como efectivamente ocurre:

$$\det[I_6 - \Lambda]_{red\ cuadrada} = (1 + x^2)^2 + 2x(-1 + x^2)[\cos q_\alpha - \cos q_\gamma]$$

Por último, estudiaremos el caso en que uno de los enlaces sea de energía positiva. Esto quiere decir que los vecinos prefieren estar en diferentes estados para disminuir su energía. Debido a la geometría particular de la red triangular, si los enlaces tienen energía positiva no podrán alcanzar un estado de mínima energía realmente fundamental. El estado fundamental se dice que está *frustrado*. Esto es debido a que tres próximos vecinos no tienen forma de colocarse para tener la mínima energía, ya que sólo hay dos estados para tres vecinos y dos de ellos han de tener la misma orientación con el consiguiente aumento de la energía. Esto aumenta la entropía del estado de mínima energía lo que rompe la transición de fase. Supongamos que dos enlaces son iguales (negativos) y uno de ellos tiene energía positiva. Concretamente tomemos

$$J_1 = J_2 = -J_3$$

entonces se verifica

$$x_1 = x_2 = -x_3 = x$$

que podemos sustituir en la expresión para el determinante:

$$\det[I_6 - \Lambda] = (1+x^2(3+x(8+3x+x^3))) + 2x(-1+x^2)^2[-\cos q_\alpha + \cos q_\gamma + \cos(q_\alpha + q_\gamma)]$$

Esta expresión consta de dos sumandos. Por construcción  $x$  ha de ser siempre positiva, ya que en caso contrario implicaría temperaturas negativas, ya que el signo de los  $J$  ya ha sido tomado en cuenta y fijado. La única forma de que se anule el término es cuando la combinación de cosenos tome su valor más pequeño, que podemos comprobar que es  $-3$  cuando  $q_\alpha = 0, q_\gamma = \pi$ . Aún en este caso, el determinante sólo se anula cuando  $x = 1$ , lo que corresponde a temperatura infinita. Por este motivo el determinante nunca se anula y no es posible esperar transiciones de fase puesto que la energía libre no deja de ser analítica en ningún punto.