

Un Problema de Campo Medio para el Modelo de Ising

Física Teórica 3 - Primer Cuatrimestre de 2020

Juan Herrera Mateos¹ (jdh.1@msn.com)

Enunciado

Guía 6, problema 8

Una segunda aproximación de campo medio consiste en escribir un hamiltoniano efectivo para dos espines vecinos, s_1 y s_2 , conservando de manera exacta su interacción mutua, pero reemplazando los espines de los otros sitios vecinos por su valor medio \bar{s} .

(a) Hallar la ecuación de autoconsistencia para el valor de expectación \bar{s} y con ella una expresión para T_c . Encontrar (numéricamente si es necesario) el valor de T_c para la red cuadrada y comparar con el resultado exacto y con el obtenido en la aproximación de campo medio para un solo espín.

(b) Hallar la energía interna y el calor específico para $T > T_c$.

Comentario sobre la notación: Para ajustarme al enunciado, uso recurrentemente \bar{s} para referirme al valor medio de la orientación de espín; pero también lo represento como $\langle s \rangle$ (no confundir esta notación para un valor medio con $\langle ij \rangle$ que significa que i y j son primeros vecinos). En este caso no apelo a la letra m para la magnetización del sistema.

Aclaraciones previas

El cálculo de la magnetización de un sistema magnético como función de la temperatura y del campo magnético aplicado es en general una tarea ardua, que excepto en algunos pocos modelos en particular, como el modelo de Ising en 1D, no puede abordarse de manera exacta. En ese caso debemos recurrir a diversas aproximaciones. La más importante y probablemente la más simple se conoce como la **aproximación de campo medio. Este método excede al modelo de Ising.**

¿En qué consiste una aproximación de campo medio? Básicamente en reemplazar una cantidad fluctuante por su valor medio. Esto puede hacerse de muchas maneras, pero la forma que trataremos nosotros es la que se conoce como teoría de campo medio de Weiss o teoría de campo medio molecular. ¡La veremos en la forma más simple que podamos!

Para entender un poco mejor en qué consiste esta aproximación, comencemos escribiendo el hamiltoniano del modelo de Ising (a primeros vecinos):

$$H = -\mu_B B \sum_i s_i - J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j, \quad (1)$$

donde μ_B es el magnetón de Bohr, B el campo magnético y J la constante de acoplamiento. La notación $\langle ij \rangle$ significa que la suma se hace sobre los γ primeros vecinos² de la red.

¹La autoría está explícita por cualquier comentario y/o consulta que pueda surgir.

²Este numero no solamente depende de la dimensión, sino también de la geometría.

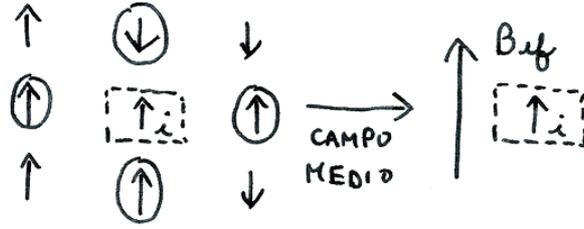


Figura 1: Representación gráfica del modelo de campo medio usual (Weiss) para el modelo de Ising, ilustrado para una red cuadrada de espines. Los círculos denotan las interacciones exactas.

Como el sistema tiene simetría discreta de traslación (ya sea porque es infinito o porque es finito y sobre él se toman condiciones periódicas de contorno), podemos fijar nuestra atención sobre un sitio i de la red, sin pérdida de generalidad; además $\bar{s}_i = \bar{s}_j \equiv \bar{s}$.

El hamiltoniano asociado al espín s_i es:

$$H_i = -\mu_B B s_i - J \sum_{\langle j \rangle} s_i s_j \quad (2)$$

$$H_i = -\mu_B B s_i - J s_i \sum_{\langle j \rangle} s_j, \quad (3)$$

donde $\langle j \rangle$ denota los primeros vecinos de i .

Hay distintas aproximaciones que podemos tomar desde aquí. La más básica consiste despreciar las fluctuaciones de todos los vecinos de i como se hizo en el problema 6 de la guía; en ese caso $s_j \sim \bar{s}$, y:

$$H_i = -\mu_B B s_i - J s_i \sum_{\langle j \rangle} \bar{s} \quad (4)$$

$$H_i \approx -\mu_B B s_i - J \gamma s_i \bar{s}, \quad (5)$$

donde se usó que el valor medio no depende del sitio y que la suma sobre primeros vecinos de la unidad no es más que el número de primeros vecinos, γ . Podemos pensar entonces que el espín i se encuentra en presencia de un campo efectivo generado por sus primeros vecinos. Ilustramos la representación gráfica de esta aproximación de campo medio -que no es más que otra presentación de la teoría de campo medio de Bragg-Williams- para la red cuadrada en la Figura 1.

$$H_i \approx - \underbrace{(\mu_B B + J \gamma)}_{B_{CM}} s_i \quad (6)$$

En este problema nos dicen que refinemos un poco más esta aproximación **considerando la interacción exacta de dos espines que son primeros vecinos y que despreciemos la fluctuación de los demás**. De esta forma tenemos que considerar el hamiltoniano no solo del sitio i sino también de solamente uno de sus vecinos que llamaremos k . Luego:

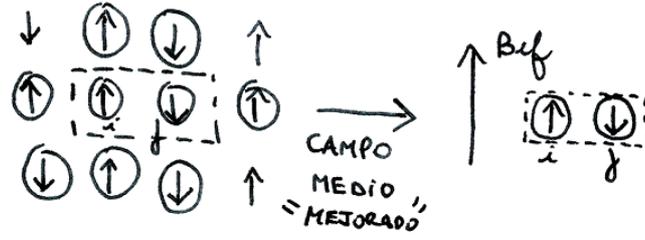


Figura 2: Representación gráfica del método de campo medio “mejorado”. Los círculos representan las interacciones exactas.

$$H_i = -\mu_B B s_i - J s_i \sum_{\langle j \rangle} s_j = -\underbrace{(\mu_B B + J \underbrace{(\gamma - 1)}_{\gamma'}) \bar{s}}_{B_{ef}} s_i - J s_i s_k \quad (7)$$

$$H_k = -\mu_B B s_k - J s_k \sum_{\langle j \rangle} s_j = -\underbrace{(\mu_B B + J \underbrace{(\gamma - 1)}_{\gamma'}) \bar{s}}_{B_{ef}} s_k - J s_k s_i, \quad (8)$$

y el hamiltoniano efectivo para los dos espines i y k estará dado por:

$$H_{ef} = -B_{ef}(s_i + s_k) - J s_i s_k, \quad (9)$$

como se esquematiza en la Figura 2. Notar que no se contó dos veces el término de interacción $J s_i s_k$.

¡Partamos desde aquí para resolver el problema!

(a) Bajo la aproximación de campo medio (9), la función de partición canónica de una celda da de interacción estará dada por:

$$Z_C = \sum_{\nu} e^{-\beta H_{ef}(\nu)}, \quad (10)$$

donde ν representa un estado permitido del sistema de dos espines en el bloque de interacción. En este caso los estados permitidos y sus energías son explícitamente:

s_i	s_j	H_{ef}
↑	↑	$-2B_{ef} - J$
↓	↓	$2B_{ef} - J$
↑	↓	J
↓	↑	J

Entonces:

$$Z_C = 2 e^{-\beta J} + e^{\beta J} \left[e^{2\beta B_{ef}} + e^{-2\beta B_{ef}} \right] = 2 \left[e^{-\beta J} + e^{\beta J} \cosh(2\beta B_{ef}) \right] \quad (11)$$

$$Z_C = 2 \left[e^{-\beta J} + e^{\beta J} \cosh(2\beta(\mu_B B + J\gamma'\bar{s})) \right] \quad (12)$$

Para hallar el valor medio de la orientación de espín, \bar{s} , debemos derivar el logaritmo de la función de partición respecto del multiplicador de Lagrange asociado, $-\beta\mu_B B$. Notamos además que para que el modelo sea consistente, el valor medio de cada espín en la celda de interacción debe coincidir con el valor medio de los demás espines.

En este caso tendremos:

$$\bar{s} \equiv \frac{1}{2} (\bar{s}_1 + \bar{s}_2) = \frac{1}{2} \frac{1}{\beta\mu_B} \frac{\partial \ln(Z_C)}{\partial B} = \frac{\sinh(2\beta(\mu_B B + J\gamma'\bar{s}))}{e^{-2\beta J} + \cosh(2\beta(\mu_B B + J\gamma'\bar{s}))}, \quad (13)$$

pero si hubiésemos tomado un bloque de q espines hubiésemos tenido que dividir no por $1/2$ sino por $1/q$ para hallar el de expectación \bar{s} .

En (13) encontramos una ecuación de autoconsistencia para \bar{s} .

¿Podemos tener magnetización espontánea? Para responderlo tomamos $B \rightarrow 0$ en (13), de lo cual resulta

$$\bar{s} = \frac{\sinh(2\beta J\gamma'\bar{s})}{e^{-2\beta J} + \cosh(2\beta J\gamma'\bar{s})} \equiv f(\bar{s}), \quad (14)$$

y graficamos en conjuntamente la recta $y = \bar{s}$ y la función $y = f(\bar{s})$ para distintos valores del parámetro adimensional $\alpha = \beta J = \frac{J}{k_B T}$. En la Figura 2 presento los resultados para la red cuadrada, donde $\gamma = 4 \Rightarrow \gamma' = 3$, a alta (línea bordó) y baja (línea azul) temperatura. Se puede observar un cambio cualitativo de comportamiento al variar el parámetro (llamado bifurcación): para temperaturas altas ambas rectas se intersecan en el cero, lo que implica que la magnetización es nula; pero a temperaturas suficientemente bajas, la recta se interseca con la curva $y = f(\bar{s})$ en tres puntos. ¿Qué ha pasado? A temperatura baja el sistema se magnetiza espontáneamente, presenta magnetización a campo magnético nulo, pues la solución $\bar{s} = 0$ no se toma en cuenta ya que es inestable.

Para hallar la temperatura crítica $T_c = \frac{1}{k_B \beta_c}$ por debajo de la cual el sistema presenta magnetización espontánea, notamos que, cerca de ella, $\bar{s} \sim 0$ y por lo tanto los argumentos de las funciones hiperbólicas son muy pequeños. Tenemos entonces, que para $x \ll 1$,

$$\sinh(x) \approx x, \quad (15)$$

$$\cosh(x) \approx 1, \quad (16)$$

$$1 \approx \frac{2\beta_c J \gamma'}{e^{-2\beta_c J} + 1} \quad (17)$$

$$e^{-2\beta_c J} + 1 \approx 2\beta_c J \gamma' \quad (18)$$

Como nos piden que consideremos la red cuadrada, $\gamma' = 3$, por lo que debemos resolver numéricamente la ecuación siguiente:

$$e^{-2\beta_c J} + 1 \approx 6\beta_c J. \quad (19)$$

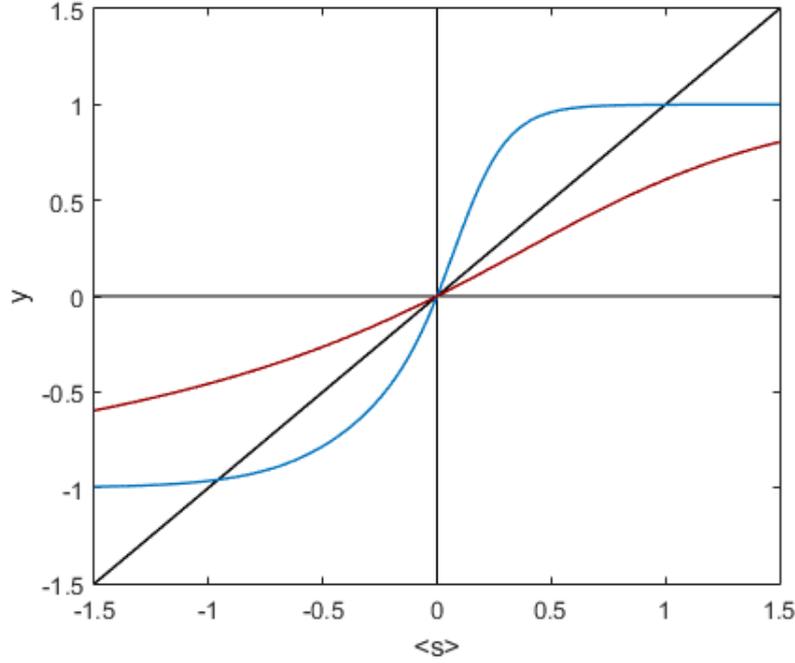


Figura 3: Gráfico conjunto de $y = \bar{s}$ contra $y = f(\bar{s})$ a campo nulo, bajo distintos dos valores de temperatura, para una red cuadrada de espines. En bordó alta temperatura y en azul baja temperatura.

Hay muchas maneras de hacerlo, pero la más sencilla es utilizar los recursos en línea de WolframAlpha³. Resulta entonces para la temperatura crítica:

$$\beta_c J \approx 0,265 \quad (20)$$

Este valor es un poco mejor que el que obtuvimos usando la aproximación de campo medio para un espín, $\beta_c J = \frac{1}{\gamma} = \frac{1}{4}$, pero sigue distando bastante del valor exacto $\beta_c J = -\frac{\ln(\sqrt{2}-1)}{2} \approx 0,44$ obtenido por Onsager en 1944; esto significa que **la temperatura crítica está sobreestimada**. Esto es típico de las teorías de campo medio: no considerar fluctuaciones implica que se sobreestima la tendencia al orden del sistema. La aproximación de campo medio funciona mejor a medida que la dimensión es más alta, ya que el número de coordinación es mayor (por ejemplo para una red FCC tenemos $\gamma = 12$).

No debemos desdeñar tampoco el procedimiento: en 2D reproducimos la fenomenología básica y de forma sencilla.

(b) Como el enunciado se refiere a una temperatura superior a la temperatura crítica del sistema T_c , tácitamente nos indican que debemos operar a campo magnético nulo. ¿Pero cómo calculamos lo que nos piden? Lo más sencillo es derivar el logaritmo de la función de partición notando que para $B = 0$ y $T > T_c$, $\bar{s} = 0$. En ese caso tenemos:

$$Z_C = 2 \left[e^{-\beta J} + e^{\beta J} \right] = 4 \cosh(\beta J), T > T_c, \quad (21)$$

³<https://www.wolframalpha.com/input/?i=1%2Bexp%28-2x%29%3D6x>

y por lo tanto⁴:

$$U = -\frac{\partial \ln(Z_C)}{\partial \beta} = -J \tanh(\beta J), \quad T > T_C. \quad (22)$$

$$c = \frac{1}{2} \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{1}{2} \frac{d\beta}{dT} \frac{\partial U}{\partial \beta} = \frac{k_B \beta^2}{2} J^2 \operatorname{sech}^2(\beta J) = \frac{k_B}{2} \frac{(J\beta)^2}{\cosh^2(\beta J)}. \quad (23)$$

Si la temperatura es muy alta, i.e. $J \ll k_B T$, entonces:

$$c \sim \frac{k_B}{2} \left(\frac{J}{k_B T} \right)^2. \quad (24)$$

Notamos en primer lugar que ni la energía interna ni el calor específico son nulos a temperatura mayor que la crítica. Esto discrepa con lo obtenido bajo la aproximación de campo medio usual para un espín. Recordémoslo:

- Aproximación de campo medio usual

Para calcular la energía interna si bien podríamos derivar el logaritmo de la función de partición, es más sencillo trabajar con el hamiltoniano. Tomando su valor medio, tenemos:

$$U = \langle H \rangle = -\mu_B B \sum_i \underbrace{\langle s_i \rangle}_{\bar{s}} - J \sum_{\langle ij \rangle} \langle s_i s_j \rangle \quad (25)$$

$$U = -N\mu_B B \bar{s} - J \frac{N\gamma}{2} \bar{s}^2, \quad (26)$$

donde se ha usado que esta aproximación de campo medio se desprecian las correlaciones ($\langle s_i s_j \rangle = \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$) y que el número de pares de interacción en una red de N espines es $\gamma N/2$. A campo nulo, entonces, se obtiene que:

$$U = -J \frac{N\gamma}{2} \bar{s}^2 = \begin{cases} -J \frac{N\gamma}{2} \bar{s}^2, & T < T_c \\ 0 & T > T_c \end{cases}. \quad (27)$$

El calor específico puede calcularse inmediatamente por medio de :

$$c = \frac{1}{N} \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{-k\beta^2}{N} \frac{\partial U}{\partial \beta} = \begin{cases} J\gamma \bar{s} \frac{\partial \bar{s}}{\partial \beta}, & T < T_c \\ 0 & T > T_c \end{cases}. \quad (28)$$

Si bien podríamos explicitar a forma que tiene la energía interna y el calor específico a temperatura menor que la crítica, lo importante es percatarnos de que, para temperatura mayor que ésta, ambas cantidades son nulas. Esto es debido a que las fluctuaciones se desprecian en este modelo para temperaturas superiores a la crítica, por lo cual el sistema no tendría capacidad para absorber calor. Y más aún, la teoría de campo medio predice un salto en el calor específico a través de la transición; por lo tanto, ésta es de segundo orden.

- Volviendo al problema nuestro:

⁴El 1/2 que aparece en la expresión del calor específico es consecuencia de que haya dos espines en el bloque de interacción.

Lo que cambia respecto de la aproximación de campo medio estándar es que consideramos la interacción exacta entre dos espines que forman distintos bloques. ¡No despreciamos del todo las correlaciones! Ahora bien, cuando energía térmica es lo suficientemente alta, muchísimo mayor que la constante de acoplamiento, las mismas son despreciables tanto la energía interna como el calor específico son nulos.