Física Teórica 3 — primer cuatrimestre de 2024

Guía 8: *Fenómenos críticos y grupo de renormalización*

1. El objetivo de este problema, además de demostrar fuera de toda duda razonable la existencia de un ítem r en la naturaleza, es relacionar la energía libre de Gibbs en la aproximación de Bragg–Williams con la energía libre de Landau, para mostrar que esta última tiene una justificación no sólo fenomenológica.

■ Aproximación de Bragg–Williams (Huang §14.4)

a) Considere un modelo de Ising con interacciones a primeros vecinos. El número de espines es N y cada espín tiene γ primeros vecinos. La constante de acoplamiento es J y hay un campo externo B. El momento magnético de los espines es μ. Escriba la energía en términos de los números N_+, N_-, N_{++}, N_{--} y N_{+-}, que son, respectivamente: el número de espines en el sentido del campo, el número de espines en el sentido contrario al campo, el número de pares de vecinos de tipo $++$, etc.

b) Muestre que es posible escribir los cinco números N_+, N_-, N_{++}, N_{--} y N_{+-} en términos de N_+ y N_{++}. Luego, escriba la energía como función de esos dos números.

c) Defina las cantidades $\kappa = \beta\gamma J$ y $b = \beta\mu B$. Escriba la función de partición como una suma sobre N_+ y N_{++}, asumiendo conocida la multiplicidad $g(N_+, N_{++})$ de estados con valores definidos de N_+ y N_{++}. La determinación de $g(N_+, N_{++})$ es un problema combinatorio relativamente sencillo cuando $\gamma = 2$, pero, fuera de ese caso, es muy complicado. Si no lo fuera, no habrían pasado veinte años entre la solución de la red lineal y la solución de Onsager de la red cuadrada.

d) La aproximación de Bragg–Williams consiste en asumir que la fracción de pares de vecinos de tipo N_{++} es igual a la que habría si los espines estuvieran distribuidos al azar. ¿Cuánto vale, entonces, N_{++} en términos de N_+?

e) Escriba la función de partición bajo esta aproximación. Note que ahora la multiplicidad de estados sólo depende de N_+ y es trivial. Debería llegar al siguiente resultado:

$$Z = \sum_{N_+=0}^{N} \sigma(N_+) = \sum_{N_+=0}^{N} \frac{N}{N_+!(N-N_+)!} \exp\left\{ N\left[\frac{\kappa}{2}\left(\frac{2N_+}{N} - 1\right)^2 + b\left(\frac{2N_+}{N} - 1\right)\right]\right\}. \quad (1)$$

f) Aunque la función de partición se ha simplificado notablemente, la suma sólo puede calcularse de manera numérica para un número limitado de espines. Para evaluar la función de partición cuando $N \gg 1$, usaremos el método del término máximo. Para eso, mediante la aproximación de Stirling, escriba el logaritmo del término general de la suma. Debe quedar algo de la forma $\log \sigma(s) = N f(s)$, donde $s = (N_+ - N_-)/N$; es decir, μs es la magnetización por espín.

g) Para aplicar el método del término máximo, es necesario estudiar los puntos estacionarios de $f(s)$. Muestre que la condición $f'(s) = 0$ implica

$$s = \tanh(\kappa s + b). \tag{2}$$

h) Analizando todos los casos posibles, enumere y clasifique los puntos estacionarios de f. En especial, muestre que: cuando $\kappa \leqslant 1$, hay un sólo punto estacionario, que es un máximo; cuando $\kappa > 1$ puede haber o bien uno, o bien tres puntos estacionarios, y que estos son: en el primer caso, un máximo y, en el segundo caso, dos máximos y un mínimo, con un máximo a cada lado del origen. (En rigor, para cierto valor de b, uno de los máximos y el mínimo colapsan en un punto de inflexión).

i) Muestre que, cuando hay dos máximos, para que uno de ellos domine en el cálculo de la función de partición, el campo externo debe ser tal que $|b| \gtrsim 1/Ns_0$, donde $s_0 > 0$ es la posición del máximo a la derecha del origen cuando el campo es cero. Esto implica que, en el límite termodinámico, salvo en el caso excepcional en el que $b = 0$, cuando $\kappa > 1$ siempre uno de los máximos domina sobre el otro.

j) Reuniendo todos estos resultados, grafique cualitativamente el valor medio del espín, $\bar{s}(b)$, para $\kappa > 1$ y $\kappa \leqslant 1$.

k) Recurriendo al sofisticado algoritmo de rotar la hoja, grafique $b(\bar{s})$.

■ ENERGÍA LIBRE DE GIBBS

l) Para un sistema magnético, en términos de la energía libre de Gibbs, cuando el número de partículas está fijo, el primer principio se escribe como

$$dG = -SdT + BdM. \tag{3}$$

Es conveniente definir $g = \beta G/N$. Muestre entonces que, a temperatura constante,

$$dg = bds. \tag{4}$$

m) A partir de los gráficos de $b(s)$ de la primera parte del problema, integre gráficamente la ecuación anterior cuando $\kappa > 1$ y cuando $\kappa \leqslant 1$. Es decir, mirando los gráficos de $b(s)$, grafique cualitativamente $g(s)$ en cada caso.

n) Para calcular $g(s)$ formalmente, puede usarse la función de partición calculada en la primera parte del problema. Muestre que

$$g = a + bs, \tag{5}$$

donde $a = -\frac{1}{N}\log Z$.

o) Muestre que, cuando $\kappa \leqslant 1$, $g(s) = -f(s) + bs$, pero que, cuando $\kappa > 1$, $g(s) = -f(s) + bs$ sólo la región en la que $g'(s) > 0$. Para convencerse, grafique $g(s)$ y $\psi(s) = -f(s) + bs$ cuando $\kappa > 1$.

■ Energía libre de Landau

p) Desarrolle $\psi(s)$ en potencias de s alrededor de $s = 0$ hasta orden s^4.

q) Muestre que este desarrollo es formalmente idéntico al de la energía libre de Landau cuando $b = 0$.

r) Muestre que, cuando $b \neq 0$, la función $-f(s)$ puede identificarse con la energía libre de Landau y que, no sólo son iguales sus desarrollos alrededor de $s = 0$, sino que tienen el mismo significado operacional.

2. La energía libre de Landau para un ferromagneto en presencia de un campo externo es:

$$f(m, T) = -hm + a(T)m^2 + \tfrac{1}{2}b(T)m^4. \tag{6}$$

a) Asumiendo que existe T_c tal que la magnetización espontánea es nula para $T > T_c$ y no nula para $T < T_c$, ¿qué condiciones deben cumplir $a(T)$ y $b(T)$?

b) Sea $a(T) = (T - T_c)a_0$ y $b(T) = b_0$, con a_0 y b_0 mayores que cero. Cuando la temperatura es cercana a T_c quedan definidos los siguientes comportamientos asintóticos:

$$m(T) \sim (T_c - T)^\beta, \qquad \text{para } T < T_c \text{ y } h = 0,$$

$$c(T) \sim |T - T_c|^{-\alpha}, \qquad \text{para } h = 0,$$

$$\chi(T) = \left.\frac{\partial m}{\partial h}\right|_{h=0} \sim |T - T_c|^{-\gamma},$$

$$m(h) \sim h^{1/\delta}, \qquad \text{para } T = T_c.$$

Calcule los exponentes críticos asociados a la energía libre de Landau.

3. (Stanley, *Introduction to phase transitions...*, §11.2-3). La hipótesis de *scaling* de Widom supone que, cerca del punto crítico, la energía libre de Gibbs de un sistema magnético es una función homogénea generalizada,

$$G(\lambda^a t, \lambda^b H) = \lambda G(t, H),$$

donde $t = (T - T_c)/T_c$ es la temperatura reducida y H es el campo magnético.

a) Calcular los exponente críticos α, β, γ y δ en función de a y b.

b) Verificar que se satisfacen las igualdades:

i) Identidad de Griffiths, $\alpha = 2 - \beta(1 + \delta)$.

ii) Identidad de Rushbrooke, $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$.

iii) Identidad de Widom, $\gamma = \beta(\delta - 1)$.

■ Grupo de renormalización

4) (Dalvit *et. al.*, problema 5.28) Considere una cadena de Ising lineal, cerrada, con $N = 2^k$ espines. El conjunto de todos los espines, $\{s_i\} = \{s_1, s_2, \ldots, s_N\}$, puede separarse en los espines que ocupan posiciones pares y los espines que ocupan posiciones impares: $\{s_i\} = \{s_{2i}\} \cup \{s_{2i+1}\}$. El hamiltoniano es una función del conjunto de todos los espines,

$$\mathcal{H}(\{s_i\}, b, K) = -\beta H(\{s_i\}, b, K) = K \sum_{i=1}^{N} s_i s_{i+1} + b \sum_{i=1}^{N} s_i, \tag{7}$$

con $s_{N+1} = s_1$. La distribución de probabilidad en el ensamble canónico es

$$P(\{s_i\}, b, K) = \frac{e^{\mathcal{H}(\{s_i\}, b, K)}}{Z(N, b, K)}, \tag{8}$$

donde la función de partición está dada por

$$Z(N, b, K) = \sum_{\{s_i\}} e^{\mathcal{H}(\{s_i\}, b, K)}. \tag{9}$$

El primer objetivo del problema es eliminar de la descripción a los espines impares, calculando la probabilidad marginal de los espines pares.

a) Sumando la probabilidad sobre los espines impares, muestre que la probabilidad de los espines pares tiene la misma forma que la probabilidad original,

$$\sum_{\{s_{2i+1}\}} P(\{s_i\}, b, K) = P(\{s_{2i}\}, \overline{b}, \overline{K}) = \frac{e^{\mathcal{H}(\{s_{2i}\}, \overline{b}, \overline{K})}}{Z(\overline{N}, \overline{b}, \overline{K})}, \tag{10}$$

con $\overline{N} = \frac{1}{2}N$ y acoplamientos $\overline{b} = \overline{b}(b, K)$ y $\overline{K} = \overline{K}(b, K)$. Estas son las ecuaciones de transformación del grupo de renormalización. Resulta más cómodo expresar estas ecuaciones en términos de $\eta = e^{-2b}$ y $\tau = e^{-4K}$. Escriba las ecuaciones de transformación para estos parámetros.

Si $N = 2^k$, con k tan grande como se quiera, la transformación puede iterarse indefinidamente, dando lugar a una secuencia de parámetros renormalizados, $\eta^{(n)}$ y $\tau^{(n)}$. Un punto fijo de la transformación es un par de valores (η^*, τ^*) tales que $\overline{\eta}(\eta^*, \tau^*) = \eta^*$ y $\overline{\tau}(\eta^*, \tau^*) = \tau^*$. Suponga que los parámetros iniciales difieren poco de los de un punto fijo, $\eta = \eta^* + \delta\eta$ y $\tau = \tau^* + \delta\tau$, y que la transformación se linealiza alrededor de este punto. Se dice que el punto fijo es linealmente estable con respecto a las perturbaciones en η si $\delta\eta^{(n)} \to 0$ cuando $n \to \infty$, e inestable si $|\delta\eta^{(n)}| \to \infty$. Análogamente, se define la estabilidad lineal respecto de τ.

b) Encuentre todos los puntos fijos en la región $[0, 1] \times [0, 1]$ y muestre que $(\eta^*, \tau^*) = (1, 0)$ es un punto fijo linealmente inestable respecto de los dos parámetros.

El valor medio de la magnetización por espín tiene que ser el mismo tanto si se lo calcula con la probabilidad detallada como si se lo calcula con la probabilidad del sistema decimado. Eso significa que

$$\frac{1}{N}\frac{\partial \log Z(N,b,K)}{\partial b} = \frac{1}{\overline{N}}\frac{\partial \log Z(\overline{N},\overline{b},\overline{K})}{\partial \overline{b}}. \tag{11}$$

En los dos miembros de la ecuación aparece, en realidad, la misma función

$$m(N,b,K) = \frac{1}{N}\frac{\partial \log Z(N,b,K)}{\partial b}. \tag{12}$$

De forma que lo que en verdad se está afirmando es que

$$m(N,b,K) = m(\overline{N},\overline{b},\overline{K}). \tag{13}$$

Asumiendo que el sistema es extensivo, en el límite en el que $N \to \infty$, la función $m(N,b,K)$ debe tender a una función independiente de N.

c) Use la transformación de grupo de renormalización para mostrar que, en el límite $N \to \infty$, cerca de $T = 0$ y $B = 0$, la función m satisface la siguiente ley de escala

$$m(b,\tau) \simeq \mathcal{M}\big(b\tau^{-\Delta}\big)\,. \tag{14}$$

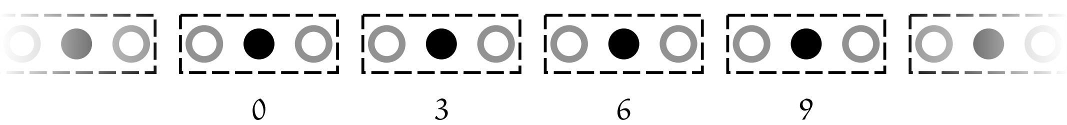
Encuentre el exponente Δ y compare con la solución exacta en el mismo límite.

d) Mediante los mismos argumentos y las mismas condiciones, demuestre que la longitud de correlación se comporta como

$$\xi(b,\tau) \simeq \tau^{-\nu}\mathcal{X}\big(b\tau^{-\Delta}\big)\,. \tag{15}$$

Encuentre el exponente ν y compare con la solución exacta (problema 5 de la Guía 7).

5) En el modelo de Ising en una dimensión, en lugar de sumar sobre los espines impares, se pueden definir otras formas de decimar el sistema. Por ejemplo, una posible forma de decimar es sumar sobre dos de cada tres espines, lo que equivale a formar celdas de Kadanoff de longitud 3.



Los espines cuyo índice es un múltiplo de 3 permanecen en la red, y los demás se suman. Muestre que para esta elección la transformación del grupo de renormalización también puede ser calculada en forma cerrada y encuentre los puntos fijos.

6) Considere el modelo de Potts en una dimensión, cuyo hamiltoniano es

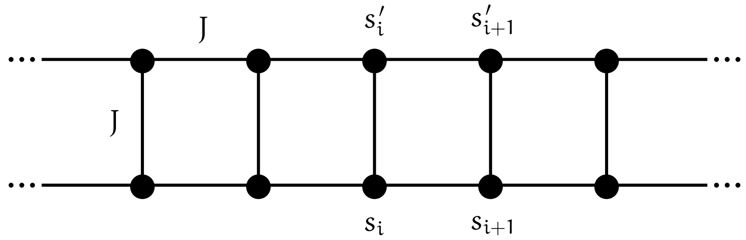
$$H(s_1, s_2, \ldots, s_N) = -J \sum_{i=1}^{N} \delta_{s_i s_{i+1}}.$$

Cada s_i puede tomar $p \geqslant 2$ valores distintos.

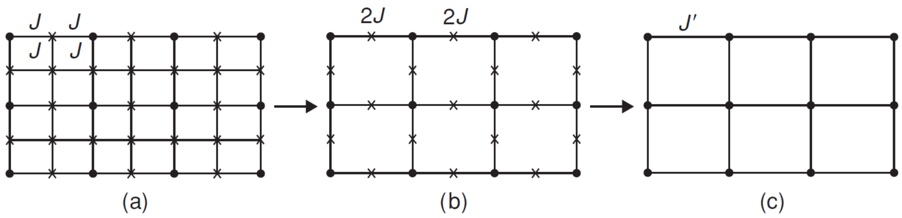
a) Obtenga las ecuaciones del grupo de renormalización correspondientes a decimar el sistema sumando sobre todos los sitios pares.

b) Encuentre los puntos fijos y estudie su estabilidad.

7) Considerar la doble cadena de Ising con interacciones a primeros vecinos. Decimar el sistema sumando sobre los escalones pares. Encontrar la transformación de grupo de renormalización para este primer paso y mostrar que aparecen nuevas interacciones.



8) (Pathria 3ra. ed., problema 14.5). Una forma aproximada de implementar una transformación del grupo de renormalización en una red cuadrada es la llamada transformación de Migdal–Kadanoff, que se muestra en la figura.



La transformación consta de dos pasos. Primero, la mitad de los enlaces en la red simplemente se elimina, de manera que la escala de longitud de la red se multiplica por 2; para compensar eso, la constante de acoplamiento de los enlaces restantes se cambia de J a 2J. Eso lleva de la figura (a) a la figura (b). En segundo lugar, los sitios marcados con cruces en la figura (b) se eliminan por medio de transformaciones de decimación unidimensionales, lo cual lleva a la figura (c) con constante de acoplamiento J'.

a) Muestre que la relación de recurrencia para un modelo de Ising de espín 1/2 en una red cuadrada, de acuerdo con esta transformación, es

$$x' = \frac{2x^2}{1 + x^4},$$

donde $x = e^{-2K}$, con $K = \beta J$. Hay dos puntos fijos triviales, $x = 0$ y $x = 1$. Muestre que hay un punto fijo no trivial dado por

$$x^* = \frac{1}{3}\left\{-1 + 2\sqrt{2}\sinh\left[\frac{1}{3}\sinh^{-1}\left(\frac{17}{2\sqrt{2}}\right)\right]\right\} \approx 0{,}5437.$$

Compare con el valor exacto de x_c.

b) Linealizando alrededor de este punto fijo, muestre que el autovalor λ de esta transformación es

$$\lambda = \frac{2(1-x^*)}{x^*} \approx 1{,}6786,$$

y por lo tanto $\nu = \log 2/\log\lambda \approx 1{,}338$. Compare con el valor exacto.