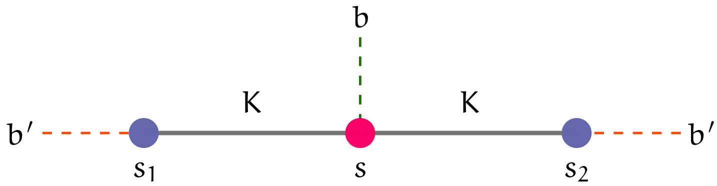
Física Teórica 3 — primer cuatrimestre de 2024

Clase práctica del 10/6

Modelo de Ising. Aproximaciones de campo medio

■ **Problema 7**. Para la cadena lineal en un campo B en el límite $N \to \infty$, calcule la magnetización por espín usando la aproximación de Bethe–Peierls. Muestre que el resultado es exacto.

■ **Solución**. La idea es considerar un sistema auxiliar compuesto por tres espines sucesivos de una cadena lineal, como muestra la figura.



La interacción entre los espines se tiene en cuenta de manera exacta. El espín central interactúa, además, con el campo externo. Las interacciones de los espines laterales con el campo externo y con el resto de la red se modelan por una interacción con un campo efectivo B'. El hamiltoniano de los tres espines es

$$H(s, s_1, s_2) = -Js(s_1 + s_2) - \mu B s - \mu B'(s_1 + s_2). \tag{1}$$

Definiendo $K = \beta J$, $b = \beta\mu B$ y $b' = \beta\mu B'$, la función de partición de este modelo es

$$Z = \sum_{s,s_1,s_2=\pm1} e^{Ks(s_1+s_2)} e^{bs} e^{b'(s_1+s_2)}. \tag{2}$$

Explícitamente, sumando primero sobre s,

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{s_1,s_2=\pm1} 2e^{b'(s_1+s_2)} \cosh\big[K(s_1+s_2)+b\big] \\ &= 2\big[2\cosh b + e^{2b'}\cosh(2K+b) + e^{-2b'}\cosh(2K-b)\big]. \end{aligned} \tag{3}$$

La condición de autoconsistencia es que los valores medios de s_1 y s_2 sean iguales al valor medio de s. El valor medio de s es

$$\bar{s} = \frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial b} = \frac{2\sinh b + e^{2b'}\sinh(2K+b) - e^{-2b'}\sinh(2K-b)}{2\cosh b + e^{2b'}\cosh(2K+b) + e^{-2b'}\cosh(2K-b)}. \tag{4}$$

Por simetría, el valor medio de s_1 es igual al valor medio de s_2,

$$\bar{s}_1 = \frac{1}{2Z}\frac{\partial Z}{\partial b'} = \frac{e^{2b'}\cosh(2K+b) - e^{-2b'}\cosh(2K-b)}{2\cosh b + e^{2b'}\cosh(2K+b) + e^{-2b'}\cosh(2K-b)}. \tag{5}$$

La condición $\bar{s} = \bar{s}_1$, implica

$$e^{2K} \sinh b = \sinh(2b' - b). \tag{6}$$

Recordando que

$$\operatorname{arcsinh} x = \log\left(x + \sqrt{1 + x^2}\right), \tag{7}$$

$$e^{2b'} = e^{b} \left(e^{2K} \sinh b + \sqrt{1 + e^{4K} \sinh^2 b}\right). \tag{8}$$

Para calcular el valor medio de s, debemos reemplazar esta expresión en la Ec. (4) o en la Ec. (5). Esta última ecuación parece un poco más sencilla. Antes convendrá escribir

$$e^{-2b'} = -e^{-b} \left(e^{2K} \sinh b - \sqrt{1 + e^{4K} \sinh^2 b}\right). \tag{9}$$

Definiendo

$$z = e^{2K} \sinh b, \tag{10}$$

queda, de manera más compacta,

$$e^{2b'} = e^{b} \left(z + \sqrt{1 + z^2}\right), \qquad e^{-2b'} = -e^{-b} \left(z - \sqrt{1 + z^2}\right). \tag{11}$$

Antes de hacer todos los reemplazos, trabajemos un poco en la expresión (5). Por un lado,

$$\begin{aligned}
&e^{2b'} \cosh(2K + b) - e^{-2b'} \cosh(2K - b) \\
&= \left[e^{b} \cosh(2K + b) + e^{-b} \cosh(2K - b)\right] z + \left[e^{b} \cosh(2K + b) - e^{-b} \cosh(2K - b)\right] \sqrt{1 + z^2} \\
&= \left(e^{2K} \cosh 2b + e^{-2K}\right) z + e^{2K} \sinh 2b \sqrt{1 + z^2} \\
&= \left(e^{2K} \cosh 2b + e^{-2K}\right) z + 2z \cosh b \sqrt{1 + z^2} \\
&= \left[\left(e^{2K} \cosh 2b + e^{-2K}\right) + 2 \cosh b \sqrt{1 + z^2}\right] z.
\end{aligned} \tag{12}$$

En la penúltima línea usamos que $e^{2K} \sinh 2b = 2e^{2K} \sinh b \, \cosh b = 2z \cosh b$. Por otro lado,

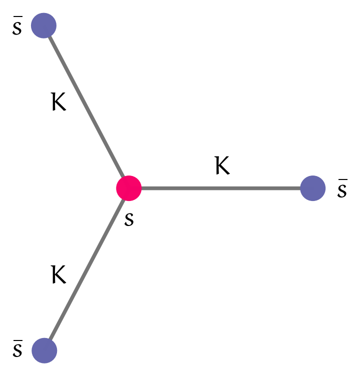
$$\begin{aligned}
&e^{2b'} \cosh(2K + b) + e^{-2b'} \cosh(2K - b) \\
&= \left[e^{b} \cosh(2K + b) - e^{-b} \cosh(2K - b)\right] z + \left[e^{b} \cosh(2K + b) + e^{-b} \cosh(2K - b)\right] \sqrt{1 + z^2} \\
&= e^{2K} \sinh 2b \; z + \left(e^{2K} \cosh 2b + e^{-2K}\right) \sqrt{1 + z^2} \\
&= 2 \cosh b \; z^2 + \left(e^{2K} \cosh 2b + e^{-2K}\right) \sqrt{1 + z^2}.
\end{aligned} \tag{13}$$

Ahora sí, reemplazando en la Ec. (5), resulta

$$\begin{aligned}\bar{s} &= \frac{\left[\left(e^{2K}\cosh 2b + e^{-2K}\right) + 2\cosh b\sqrt{1+z^2}\right] z}{2\cosh b\,(1+z^2) + \left(e^{2K}\cosh 2b + e^{-2K}\right)\sqrt{1+z^2}} \\ &= \frac{\left(e^{2K}\cosh 2b + e^{-2K}\right) + 2\cosh b\sqrt{1+z^2}}{2\cosh b\sqrt{1+z^2} + \left(e^{2K}\cosh 2b + e^{-2K}\right)}\,\frac{z}{\sqrt{1+z^2}} \\ &= \frac{z}{\sqrt{1+z^2}} = \frac{\sinh b}{\sqrt{e^{-4K} + \sinh^2 b}}.\end{aligned} \tag{14}$$

Pero este es, justamente, el valor medio para la cadena lineal infinita. La aproximación de Bethe–Peierls es exacta en una dimensión.

■ **Problema 8**. La aproximación de campo medio más simple para el modelo de Ising en una red infinita consiste en escribir un hamiltoniano efectivo para un solo espín, s, reemplazando la interacción con sus γ primeros vecinos por un término efectivo de la forma $E_1 = -J\gamma s\bar{s}$, donde $\bar{s}$ es el valor medio de cualquier espín. La interacción lineal con un campo magnético externo sigue siendo $-B\mu s$. Escriba la ecuación de autoconsistencia para el valor medio del espín y encuentre el valor crítico del parámetro $K = \beta J$ por debajo del cual hay magnetización espontánea. Para el caso $\gamma = 4$, compare esta solución con el valor exacto, $K_c = \frac{1}{2}\log\left(\sqrt{2}+1\right) \approx 0{,}44$.



Solución. Construimos un hamiltoniano para un sólo espín, en donde las interacciones con los γ primeros vecinos de la red original son reemplazadas por una interacción de la forma $-\gamma J s\bar{s}$,

$$H = -\gamma J s\bar{s} - \mu B s. \tag{15}$$

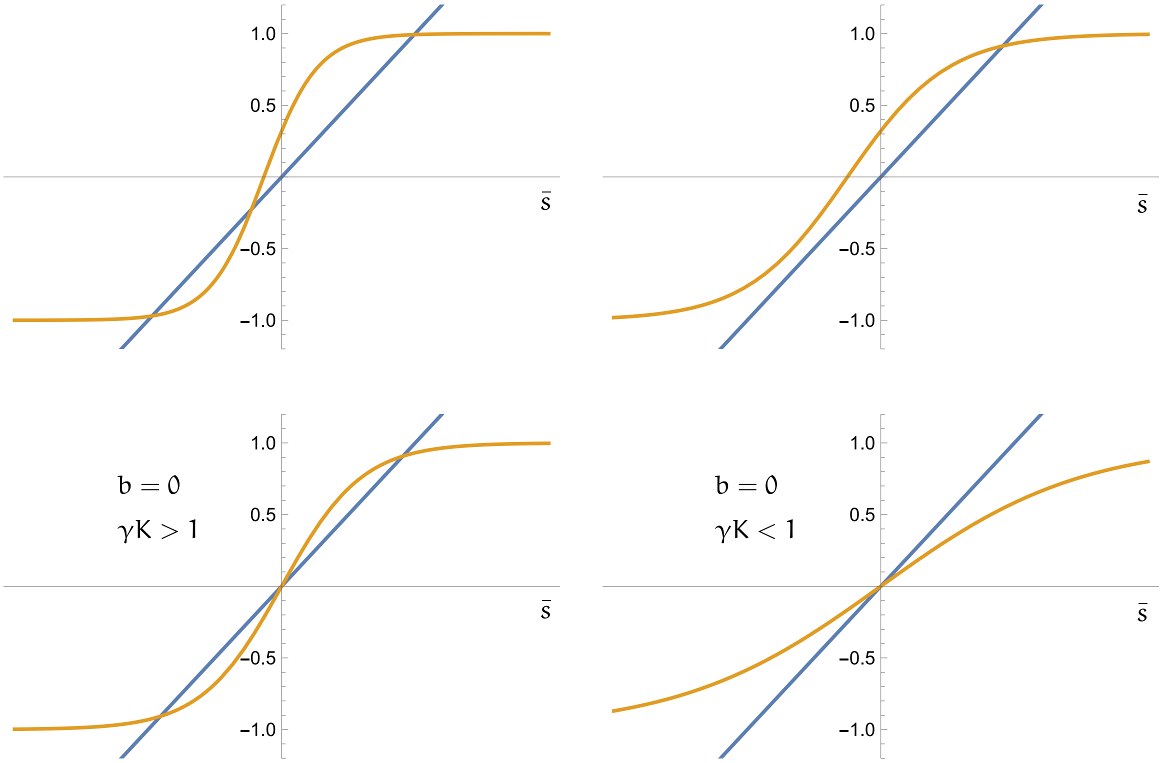
La función de partición de este modelo es

$$Z = \sum_{s=\pm 1} e^{(\gamma\bar{s}K + b)s} = 2\cosh(\gamma\bar{s}K + b), \tag{16}$$

donde $K = \beta J$ y $b = \beta\mu B$. El valor medio de s es

$$\bar{s} = \tanh(\gamma\bar{s}K + b). \tag{17}$$

Esta es la llamada ecuación de autoconsistencia. Como muestra la figura, existen varias alternativas para la intersección de los gráficos de las funciones $\bar{s}$ y $\tanh(\gamma \bar{s} K + b)$.



Las dos figuras inferiores muestran las alternativas cuando $B = 0$. En ese caso,

$$\bar{s} = \tanh(\gamma K \bar{s}). \tag{18}$$

Vemos que $\bar{s} = 0$ siempre es solución. La cuestión es ver si existen otras soluciones. La condición para que los gráficos de las funciones x y $\tanh \alpha x$ se intersecten en otro punto además del origen, es que $\alpha > 1$. En general, si $x = 0$ es solución de la ecuación

$$x = f(x), \tag{19}$$

con $f''(x) < 0$, para que la ecuación tenga por lo menos otra solución positiva, debe ser

$$f'(0) > 1. \tag{20}$$

La condición crítica ocurre en $f'(0) = 1$. Para el problema del espín, la condición crítica es

$$\gamma K_c = 1. \tag{21}$$

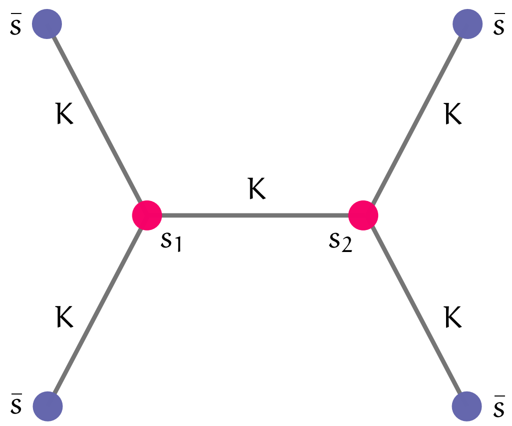
Para la red cuadrada, esto implica $K_c = \frac{1}{4}$. El valor exacto es

$$K_c^{\text{exacto}} = \frac{1}{2} \log\left(\sqrt{2} + 1\right) \approx 0{,}44. \tag{22}$$

El acuerdo entre el resultado del modelo y el resultado exacto es modesto. Peor aún, este modelo predice que habrá magnetización espontánea aún en el caso unidimensional.

■ **Problema 10**. 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 $\bar{s}$. Hallar la ecuación de autoconsistencia para el valor de expectación $\bar{s}$ y con ella una expresión para K_c. Encontrar (numéricamente si es necesario) el valor de K_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.

■ Solución. Ahora construimos un modelo como el de la figura.



La función de partición es

$$Z = \sum_{s_1,s_2=\pm 1} e^{Ks_1s_2} e^{[(\gamma-1)K\bar{s}+b](s_1+s_2)}. \tag{23}$$

Explícitamente

$$Z = 2e^K\Big\{\cosh\big[2(\gamma-1)K\bar{s}+2b\big] + e^{-2K}\Big\}. \tag{24}$$

La ecuación de autoconsistencia se obtiene calculando el valor medio de cualquiera de los dos espines,

$$\bar{s} = \frac{1}{2Z}\frac{\partial Z}{\partial b} = \frac{\sinh[2(\gamma-1)K\bar{s}+b]}{e^K\cosh[2(\gamma-1)K\bar{s}+2b]+e^{-2K}}. \tag{25}$$

Para buscar la condición crítica, evaluamos la expresión anterior en $b=0$,

$$\bar{s} = \frac{\sinh[2(\gamma-1)K\bar{s}]}{\cosh[2(\gamma-1)K\bar{s}]+e^{-2K}}. \tag{26}$$

La representación gráfica de esta ecuación tiene el mismo aspecto que la del problema 8. La condición crítica se encuentra igualando a uno la derivada respecto de $\bar{s}$, evaluada en

$\bar{s} = 0$, de la función que aparece en el miembro de la derecha de la Ec. (26). La derivada es

$$\begin{aligned} f(\bar{s}) &= 2(\gamma-1)K \, \frac{\{\cosh[2(\gamma-1)K\bar{s}]\}\left\{\cosh[2(\gamma-1)K\bar{s}] + e^{-2K}\right\} - \sinh^2[2(\gamma-1)K\bar{s}]}{\{\cosh[2(\gamma-1)K\bar{s}] + e^{-2K}\}^2} \\ &= 2(\gamma-1)K \, \frac{1 + \cosh[2(\gamma-1)K\bar{s}]\, e^{-2K}}{\{\cosh[2(\gamma-1)K\bar{s}] + e^{-2K}\}^2}. \end{aligned} \tag{27}$$

Entonces,

$$f'(0) = \frac{2(\gamma-1)K}{1+e^{-2K}}. \tag{28}$$

La condición crítica es

$$\frac{2(\gamma-1)K_c}{1+e^{-2K_c}} = 1. \tag{29}$$

La ecuación $x = ye^y$ aparece con frecuencia. La solución es la función W de Lambert,

$$y = W(x). \tag{30}$$

En términos de esta función, es fácil demostrar que

$$K_c = \frac{1}{2}\Big[x + W(xe^{-x})\Big], \tag{31}$$

donde $x = (\gamma-1)^{-1}$. Pero esto no es tan importante. Para la red cuadrada, basta con encontrar numéricamente la solución de la Ec. (29). Alcanza una calculadora científica. Primero hay que reescribir la ecuación como una ecuación de punto fijo,

$$K_c = \frac{1+e^{-2K_c}}{2(\gamma-1)}. \tag{32}$$

Luego hay que elegir algún valor tentativo de K_c, digamos x_0, e iterar la ecuación

$$x_n = \frac{1+e^{-2x_{n-1}}}{2(\gamma-1)} \tag{33}$$

hasta que la solución converja con el número de cifras requerido. Por ejemplo, cuando $\gamma = 4$, usando como valor inicial el valor de K_c que obtuvimos en el problema 8, obtenemos la siguiente sucesión:

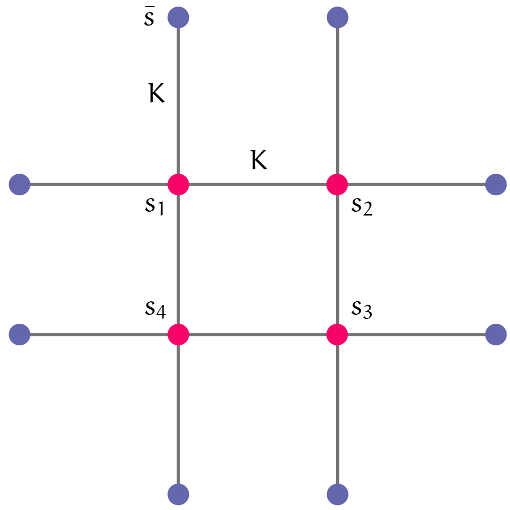
$$\{x_n\} = \big\{0{,}25;\ 0{,}2678;\ 0{,}2642;\ 0{,}2649;\ 0{,}2648;\ 0{,}2648; \ldots\big\}. \tag{34}$$

Así,

$$K_c \approx 0{,}2648. \tag{35}$$

Antes habíamos obtenido $K_c = \frac{1}{4}$. Comparado con el valor exacto, $K_c^{\text{exacto}} \approx 0{,}44$, es muy poco lo que avanzamos.

■ **Problema 11**. Encontrar numéricamente la temperatura crítica para una red cuadrada en una aproximación de campo medio en donde la interacción de cuatro espines en una celda fundamental sea descripta de manera exacta. Comparar con el resultado exacto y con las aproximaciones de los problemas anteriores.



■ **Solución**. La función de partición es

$$Z = \sum_{s_1,s_2,s_3,s_4=\pm 1} e^{K(s_1 s_2+s_2 s_3+s_3 s_4+s_4 s_1)} e^{(2K\bar{s}+b)(s_1+s_2+s_3+s_4)}. \tag{36}$$

Esquemáticamente, todas las configuraciones pertenecen a una de estas seis clases, que indicamos con sus respectivas multiplicidades:

$$\left\{ \begin{matrix} + & + \\ + & + \end{matrix}, \quad 4\begin{matrix} + & - \\ + & + \end{matrix}, \quad 4\begin{matrix} + & - \\ + & - \end{matrix}, \quad 2\begin{matrix} + & - \\ - & + \end{matrix}, \quad 4\begin{matrix} + & - \\ - & - \end{matrix}, \quad \begin{matrix} - & - \\ - & - \end{matrix} \right\}. \tag{37}$$

Entonces,

$$\begin{aligned} Z &= e^{4K+8K\bar{s}+4b} + 4e^{4K\bar{s}+2b} + 4 + 2e^{-4K} + 4e^{-4K\bar{s}-2b} + e^{4K-8K\bar{s}-4b} \\ &= 2\Big\{ e^{4K}\cosh[4(2\bar{s}K+b)] + 4\cosh[2(2\bar{s}K+b)] + e^{-4K} + 2 \Big\}. \end{aligned} \tag{38}$$

Luego,

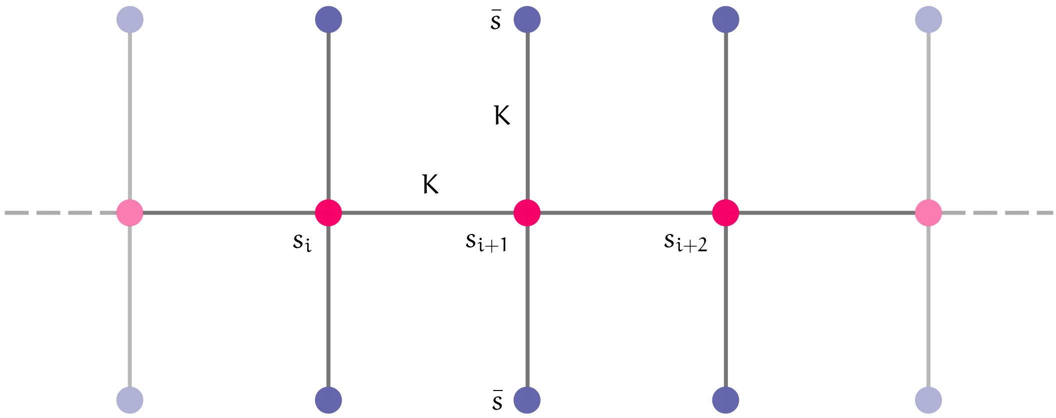
$$\bar{s} = \frac{1}{4Z}\frac{\partial Z}{\partial b}\bigg|_{b=0} = \frac{e^{4K}\sinh(8\bar{s}K) + 2\sinh(4\bar{s}K)}{e^{4K}\cosh(8\bar{s}K) + 4\cosh(4\bar{s}K) + e^{-4K} + 2}. \tag{39}$$

De nuevo, obtenemos algo de la forma $\bar{s} = f(\bar{s})$. Calcular la derivada de esta función respecto de $\bar{s}$, teniendo en cuenta que la vamos a evaluar en $\bar{s} = 0$, no es tan engorroso:

$$f'(0) = 8K\frac{1+e^{4K}}{e^{4K}+e^{-4K}+6}. \tag{40}$$

La solución numérica de la ecuación $f'(0) = 1$, da $K_c \approx 0{,}2857$. Estamos más cerca del valor exacto, pero avanzamos muy lentamente.

■ **Problema 12**. Ídem al anterior, pero en un modelo de campo medio que incluya exactamente las interacciones de toda una hilera de espines, como en el problema 1.



■ **Solución**. Este problema parece ofrecer un salto cualitativo importante. Sabemos que para la cadena lineal el espín medio es

$$\bar{s} = \frac{e^{2K}\sinh b}{\sqrt{1 + e^{4K}\sinh^2 b}}. \tag{41}$$

Se trata de reemplazar el campo b externo por $2K\bar{s}$, como si cada espín de la cadena interactuase con dos espines medios. La ecuación de autoconsistencia se lee como

$$\bar{s} = \frac{e^{2K}\sinh(2K\bar{s})}{\sqrt{1 + e^{4K}\sinh^2(2K\bar{s})}}. \tag{42}$$

Nuevamente obtenemos una ecuación de la forma

$$\bar{s} = f(\bar{s}). \tag{43}$$

La condición crítica se lee de la ecuación $f'(0) = 1$. Explícitamente

$$f'(0) = 2Ke^{2K}. \tag{44}$$

La condición crítica es

$$2K_c e^{2K_c} = 1. \tag{45}$$

La solución queda otra vez en términos de la función de W de Lambert,

$$K = \frac{1}{2}W(1) \approx 0{,}2836. \tag{46}$$

Da peor que el problema anterior. Esperábamos que al considerar exactamente la interacción de los infinitos espines de una cadena, la aproximación mejorase muchísimo. No está claro para mí por qué la aproximación empeora.

■ **Problema 13**. Ídem al anterior, pero en un modelo de campo medio que incluya exactamente las interacciones de dos hileras vecinas de espines, como en el problema 6.

■ **Solución**. Este caso es más complicado de resolver, porque en el problema 6 asumimos que no había campo externo. Ahora necesitamos incluir un campo externo para emular las interacciones con los espines del resto de la red. No parece un problema que pueda resolverse sin el auxilio de un programa de cálculo simbólico. Primero hay que encontrar los autovalores de la matriz de transferencia y ver cuál es el mayor. Hay un autovalor trivial; la ecuación para el resto de los autovalores es una cúbica. No sé si hay una manera compacta de escribir la solución. Graficando los autovalores se descubre cuál es el que tiene mayor valor absoluto. Con este autovalor se calcula el valor medio del espín y se escribe la ecuación de autoconsistencia. La constante de acoplamiento crítica resulta ser

$$K_c \approx 0{,}316\,864. \tag{47}$$

Es un minúsculo progreso hacia 0,44, teniendo en consideración lo engorroso del cálculo. La buena noticia es que resulta imposible inventar más problemas de este tipo. Un requisito esencial es que todos los espines sean equivalentes. Los problemas que hemos visto agotan todas las posibilidades para una red cuadrada.

■ Toda esta serie de problemas de campo medio está formada por aproximaciones muy rudimentarias. La aproximación de Bethe–Peierls para la red cuadrada tiene sólo cinco espines y da un resultado mucho mejor que todos los que hemos obtenido hasta ahora. El modelo de Bethe–Peierls con cinco espines da $K_c \approx 0{,}3466$. Pero incluso este resultado es difícil de mejorar usando versiones más complicadas del modelo de Bethe–Peierls. Por ejemplo, la figura de la derecha muestra un modelo en donde hay cuatro espines centrales y ocho espines periféricos. Las interacciones de los 12 espines se tienen en cuenta exactamente; los espines periféricos interactúan con un campo medio B'. Ya son tantos espines que sólo es razonable hacer los cálculos en la computadora. En este modelo se obtiene $K_c \approx 0{,}3532$. Es una mejora ínfima comparada con la complicación que agregamos al modelo de los cinco espines.