

Capítulo 3

Teorías de Campo Medio ó Clásicas

Hemos visto que tanto el modelo de Van der Waals para fluidos como el modelo de Curie-Weiss presentan los mismos exponentes críticos. Ambos se encuadran dentro de lo que se conoce como Teorías o modelos de Campo Medio ó bien Teorías Clásicas. Esta denominación es sumamente amplia y se refiere a un conjunto de teorías y aproximaciones fenomenológicas cuya característica en común es que todas ellas dan los mismos exponentes críticos. Las diferentes teorías nos permiten diferentes interpretaciones de la misma fenomenología y su caracterización general resulta descripta por la Teoría de Landau, la cual veremos al final de esta sección.

Si bien en varios aspectos las teorías de campo medio brindan una descripción cualitativamente correcta de las transiciones de 2do orden, en varios otros aspectos la descripción es incorrecta, especialmente a lo que concierne al rol de la dimensionalidad. Por ejemplo, los exponentes predichos por esta teoría son incorrectos en baja dimensionalidad. Sin embargo, tomadas como aproximaciones, estas teorías brindan una técnica sumamente útil para el cálculo de diagramas de fase y otras propiedades termodinámicas, especialmente si tomamos en cuenta su gran simplicidad. Mas aún, veremos que las mismas permiten desarrollar mejoras sistemáticas en las estimaciones de temperaturas críticas y de otras cantidades.

Comenzaremos con la teoría que da origen al nombre de Campo Medio.

3.1 Teoría de Campo Medio de Weiss

Vamos a considerar a continuación un método para calcular la solución aproximada del modelo de Ising en dimensión arbitraria. Este método fué introducido por Pierre Weiss y es conocido como *aproximación ó teoría de campo medio* se basa en el concepto de *campo efectivo ó molecular*.

Consideremos el Hamiltoniano de Ising con interacciones primeros vecinos en dimensión arbitraria

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - B \sum_{i=1}^N S_i \quad (3.1)$$

Cada spin interactúa con un campo local

$$h_i = J \sum_{j \text{ nn } i} S_j + B$$

generado por los spines vecinos y el campo externo; $\sum_{j \text{ nn } i}$ denota una suma en los sitios j primeros vecinos ("nearest neighbors") del sitio i . Estas cantidades constituyen un conjunto de variables aleatorias que dependen de la configuración particular de spines, las cuales pueden escribirse como

$$h_i = \langle h_i \rangle + \Delta h_i$$

donde $\Delta h_i \equiv h_i - \langle h_i \rangle$ son las fluctuaciones de h_i en torno de su valor medio, el cual tiene la forma

$$\langle h_i \rangle = J \sum_{j \text{ nn } i} \langle S_j \rangle + B \quad (3.2)$$

Para una red con invariancia traslacional la cantidad $\langle S_j \rangle$ es independiente del sitio j y por lo tanto $\langle S_j \rangle = m$, donde

$$m = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle \quad (3.3)$$

es la magnetización media por spin. La aproximación de campo medio consiste en despreciar las fluctuaciones Δh_i . Bajo esta aproximación cada spin se encuentra en presencia de un *campo efectivo* uniforme generado por los restantes spines de la red

$$B_{ef} = Jzm + B \quad (3.4)$$

donde z es el número de coordinación.

La función partición de un conjunto de spines en presencia de un campo uniforme B puede escribirse como $Z = Z_1^N$, donde

$$Z_1 = \sum_{S=\pm 1} e^{\beta BS} = 2 \cosh(\beta B) \quad (3.5)$$

es la función partición de un spin. La magnetización media resulta entonces:

$$m = \langle S_i \rangle = \frac{1}{Z_1} \sum_{S=\pm 1} S e^{\beta BS} = \tanh(\beta B) \quad (3.6)$$

Reemplazando la expresión para el campo efectivo (3.4) arribamos a una ecuación *autoconsistente* para m

$$m = \tanh[\beta(Jzm + B)] \quad (3.7)$$

la cual, excepto por la presencia del número de coordinación, es idéntica a la ecuación de Curie-Weiss (2.99); en este caso la temperatura crítica es $k_B T_c = zJ$, mientras que los exponentes críticos β , γ y δ son exactamente los mismos que en el modelo de Curie-Weiss. Notemos que, mientras para el modelo de Ising esta es una solución aproximada (y cuantitativamente incorrecta) para el modelo de Curie-Weiss es la solución exacta. Esto nos permite discriminar bajo que condiciones la hipótesis del campo molecular, equivalente a despreciar las fluctuaciones del parámetro de orden, resulta válida. Las fluctuaciones resultan despreciables cuando existe una alta conectividad en los spines. Podemos por lo tanto esperar que las predicciones de la teoría del campo medio aproximen mejor los resultados exactos para modelos con interacciones entre primeros vecinos cuanto mayor sea la dimensión espacial de

la red. De hecho, puede verse que los exponentes críticos predichos por la teoría de campo medio para el modelo de Ising resultan exactos en dimensiones $d \geq 4$. La dimensión mínima para la cual las predicciones de la teoría de campo medio resultan exactas se conoce como *dimensión crítica superior*.

Analizemos ahora la energía libre en la aproximación de Weiss. De la Ec.(3.5) tenemos que

$$f(T, B) = -\frac{k_B T}{N} \ln Z = -k_B T \ln Z_1 = -k_B T \ln \{2 \cosh [\beta (Jzm + B)]\} \quad (3.8)$$

A campo nulo $B = 0$ tenemos entonces que

$$f(T, 0) = \begin{cases} -k_B T \ln 2 & \text{para } T > T_c \\ -k_B T \ln \left\{ 2 \cosh \left(\frac{\beta}{\beta_c} m_0 \right) \right\} & \text{para } T \leq T_c \end{cases} \quad (3.9)$$

donde $m_0(T)$ es solución de la Ec.(3.7). Un análisis detallado de esta solución nos muestra que esta energía libre resulta una función convexa de T para $T < T_c$, violando por lo tanto el criterio de estabilidad termodinámica! Significa esto que toda la aproximación está mal? Veremos a continuación que la ecuación de Curie Weiss puede derivarse también utilizando un método variacional, el cual da la expresión correcta para la energía libre.

3.2 Aproximación de Campo Medio mediante Método variacional

Sea σ una variable aleatoria arbitraria y sea $P(\sigma) \geq 0$ su distribución de probabilidad asociada, esto es, el valor medio de cualquier función de la variable aleatoria $f(\sigma)$ viene dada por

$$\langle f(\sigma) \rangle = \text{Tr } P(\sigma) f(\sigma)$$

donde Tr denota una suma (integral) sobre todos los valores de la variable σ . La desigualdad de Jensen establece que

$$\langle e^{f(\sigma)} \rangle \geq e^{\langle f(\sigma) \rangle}$$

Consideremos ahora un Hamiltoniano clásico H , función de un conjunto de variables discretas o continuas σ . Sea $\rho(\sigma)$ una distribución de probabilidad arbitraria, esto es, una función de las variables σ que satisface $\text{Tr } \rho = 1$ y $\rho(\sigma) \geq 0$. La función de partición puede ser escrita como

$$Z = e^{-\beta F} = \text{Tr } e^{-\beta H[\sigma]} = \text{Tr } \rho e^{-\beta H[\sigma] - \ln \rho} = \langle e^{-\beta H[\sigma] - \ln \rho} \rangle_\rho$$

donde $\langle \dots \rangle_\rho$ significa un promedio tomado con la distribución ρ y F es la energía libre asociada con H . Aplicando la desigualdad de Jensen

$$e^{-\beta F} \geq \exp\left(-\beta \langle H \rangle_\rho - \langle \ln \rho \rangle_\rho\right)$$

o bien

$$F \leq F_\rho = \langle H \rangle_\rho + k_B T \langle \ln \rho \rangle_\rho = \text{Tr } \rho H + k_B T \text{Tr } \rho \ln \rho \quad (3.10)$$

donde F_ρ es una energía libre aproximada asociada con la distribución ρ . Esta desigualdad es válida para cualquier densidad de probabilidad ρ . Mas aún, si bien este desarrollo fue realizado para una distribución de probabilidad clásica, puede verse que es válida también en el caso cuántico (en cuyo caso ρ es un operador densidad).

En particular, si exigimos que F_ρ sea mínima, sujeta a la única restricción de que $\text{Tr } \rho = 1$ es fácil ver que esto implica

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z}$$

con lo cual $F_\rho = F$. En otras palabras, la desigualdad anterior no es más que el principio de mínima energía libre. No obstante, esto nos permite implementar aproximaciones variacionales para la energía libre, proponiendo formas aproximadas de ρ que contengan parámetros libres; la densidad que mejor aproxime la distribución

de Boltzmann, para una forma funcional dada de ρ será aquella que minimice F_ρ . En particular sea H_0 un Hamiltoniano de prueba, esto es, un Hamiltoniano para el cual conocemos como calcular su función partición

$$Z_0 = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H_0}$$

Si proponemos

$$\rho = \frac{e^{-\beta H_0}}{Z_0} \quad (3.11)$$

tendremos que

$$f \leq f_\rho = f_0 + \frac{1}{N} \langle H - H_0 \rangle_0 \quad (3.12)$$

Esta desigualdad se conoce como *desigualdad de Bogoliubov-Peierls*.

La aproximación de campo medio se obtiene de utilizar una densidad que es un producto de densidades de probabilidad *independientes* para cada partícula. Esto es, si ρ_α es una densidad de probabilidad que depende solamente de los grados de libertad asociados a la partícula α , entonces

$$\rho = \prod_{\alpha=1}^N \rho_\alpha \quad (3.13)$$

En este caso la energía libre variacional de campo medio resulta

$$F_\rho = \langle H \rangle_\rho + k_B T \sum_{\alpha} \text{Tr} \rho_\alpha \ln \rho_\alpha$$

Existen dos maneras de parametrizar las distribuciones ρ_α . Si elegimos ρ de la forma (3.11), con lo cual $H_0 = \sum_{\alpha} H_{\alpha}$, entonces podemos escribir los Hamiltonianos de una partícula en términos de campos efectivos y utilizar estos últimos como parámetros variacionales. Otra manera es la siguiente. Si conocemos que ϕ_α es el parámetro de orden (microscópico) de la transición de interés, podemos minimizar directamente (3.10) sujeta a los vínculos $\text{Tr} \rho_\alpha = 1$ y $\text{Tr} \rho_\alpha \phi_\alpha = \langle \phi_\alpha \rangle$. En este caso los parámetros variacionales son simplemente los parámetros de orden $\langle \phi_\alpha \rangle$. Vamos a ejemplificar ambas modalidades con dos casos particulares.

3.2.1 Aproximación variacional del modelo de Ising

Elijamos H_0 como un Hamiltoniano de spines independientes

$$H_0 = -\eta \sum_i S_i$$

donde η es el campo efectivo variacional. De esta manera la cantidad

$$\Phi(\eta) = f_0 + \frac{1}{N} \langle H - H_0 \rangle_0$$

resulta una función del parámetro η . Podemos entonces definir la energía libre en la aproximación de campo medio como

$$f_{mf}(T, B) = \min_{\eta} \Phi(\eta) \quad (3.14)$$

Calculemos entonces $\Phi(\eta)$. Tomemos por simplicidad el caso $B = 0$. Tenemos que

$$f_0 = -\frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh(\beta\eta)]$$

$$\langle S_i \rangle_0 = m_0 = \tanh(\beta\eta)$$

$$\langle H_0 \rangle_0 = -\eta N m_0$$

$$\langle H \rangle_0 = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \langle S_i S_j \rangle_0$$

Dado que H_0 es un Hamiltoniano de spines independientes tenemos que

$$\langle S_i S_j \rangle_0 = \langle S_i \rangle_0 \langle S_j \rangle_0 = m_0^2$$

de donde

$$\langle H \rangle_0 = -\frac{Jz}{2} N m_0^2.$$

Reuniendo todo esto tenemos

$$\Phi(\eta) = -\frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh(\beta\eta)] - \frac{Jz}{2} m_0^2 + \eta m_0 \quad (3.15)$$

Si minimizamos esta expresión obtenemos

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} = -\tanh(\beta\eta) - Jz m_0 \frac{\partial m_0}{\partial \eta} + m_0 + \eta \frac{\partial m_0}{\partial \eta} = \frac{\partial m_0}{\partial \eta} (\eta - Jz m_0) = 0$$

donde hemos usado que $m_0 = \tanh(\beta\eta)$. Tenemos entonces que el mínimo de Φ se obtiene para

$$\eta = Jz m_0$$

de donde obtenemos nuevamente la ecuación de Curie-Weiss (3.7). Reemplazando esta solución en la Ec.(3.15) obtenemos finalmente la expresión para la energía libre

$$f_{mf}(T, B = 0) = -\frac{1}{\beta} \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\beta}{\beta_c} m_0 \right) \right] + \frac{1}{2\beta_c} m_0^2 \quad (3.16)$$

la cual resulta idéntica a la energía libre del modelo de Curie-Weiss y se muestra en la figura (3.1). Vemos que la misma satisface los criterios de estabilidad termodinámica para toda T .

3.2.2 Aproximación variacional del modelo de Potts

El Hamiltoniano de Potts de q estados ferromagnético con interacciones a primeros vecinos y campo externo puede ser escrito como

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (q \delta_{\sigma_i, \sigma_j} - 1) - B \sum_i (q \delta_{\sigma_i, 1} - 1)$$

donde el campo externo B favorece una dirección que arbitrariamente hemos elegido como la 1. Para identificar el parámetro de orden podemos analizar las fases de altas y bajas temperaturas a campo nulo. A temperaturas suficientemente altas, un dado sitio podrá encontrarse en cada uno de los q estados con igual probabilidad. Así,

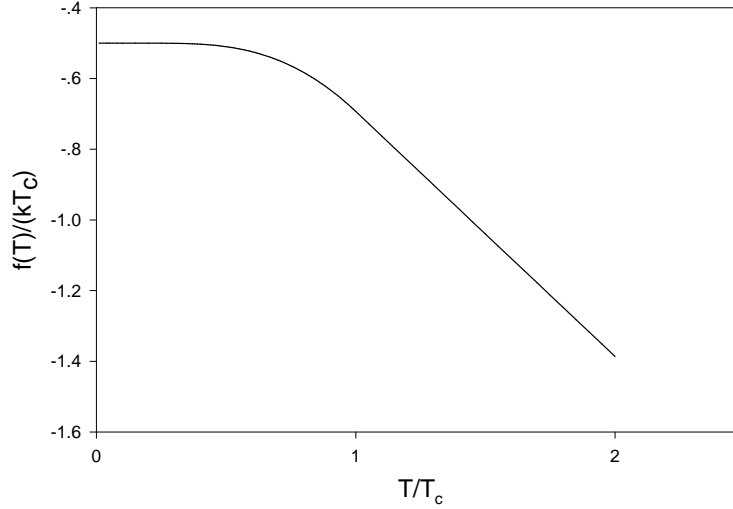


Figura 3.1: Energía libre en la aproximación de campo medio obtenida mediante el método variacional.

$\langle \delta_{\sigma_i, \sigma} \rangle = 1/q$ para $\sigma = 1, \dots, q$. A bajas temperaturas, el estado que minimiza la energía corresponde a todos los spines con el mismo valor σ , y este estado fundamental tiene una degeneración q . De esta manera, los parámetros de orden locales microscópicos asociados al sitio i pueden ser elegidos como

$$\phi_i^\sigma = \frac{1}{q-1}(q\delta_{\sigma_i, \sigma} - 1)$$

para $\sigma = 1, \dots, q$. Notemos que para $q = 2$ este parámetro de orden es precisamente una variable de spin $S_i = \pm 1$. A altas temperaturas $\langle \phi_i^\sigma \rangle = 0 \forall i, \sigma$. A bajas temperaturas $\langle \phi_i^\sigma \rangle = 1$ en el estado fundamental correspondiente a todos los spines alineados en la dirección σ . Si ahora colocamos un campo externo que rompa la simetría en la dirección 1, el parámetro de orden asociado será $\langle \phi_i^1 \rangle$. Como además el sistema es homogéneo, tendremos que $\langle \phi_i^1 \rangle = m \forall i$. Notemos que

$$\sum_{\sigma=1}^q \phi_i^\sigma = 0 \quad (3.17)$$

Por simetría, $\langle \phi_i^\sigma \rangle$ tomará el mismo valor en todos los $q-1$ estados $\sigma \neq 1$. Usando la Ec.(3.17) tenemos entonces que

$$\langle \phi_i^\sigma \rangle = \begin{cases} m & \text{para } \sigma = 1 \\ -\frac{m}{q-1} & \text{para } \sigma = 2, \dots, q \end{cases} \quad (3.18)$$

y por lo tanto

$$\langle \delta_{\sigma_i, \sigma} \rangle = \begin{cases} \frac{1}{q} [1 + (q-1)m] & \text{para } \sigma = 1 \\ \frac{1-m}{q} & \text{para } \sigma = 2, \dots, q \end{cases} \quad (3.19)$$

Podemos también calcular

$$\begin{aligned} \langle \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \rangle &= \sum_{\sigma=1}^q \langle \delta_{\sigma_i, \sigma} \rangle \langle \delta_{\sigma_j, \sigma} \rangle \\ &= \frac{1}{q^2} [1 + (q-1)m]^2 + \frac{q-1}{q^2} (1-m)^2 \end{aligned} \quad (3.20)$$

Usando las Ecs.(3.19) y (3.20) es facil ver que

$$\langle H \rangle_\rho = -(q-1) N \left(\frac{Jz}{2} m^2 + B m \right)$$

La densidad de una partícula ρ_i es función solo de σ_i y debe satisfacer los vínculos

$$\text{Tr} \rho_i = \sum_{\sigma_i=1}^q \rho_i = 1 \quad \text{Tr} \rho_i \phi_i^1 = m$$

Dado que los $q-1$ estados $\sigma = 2, \dots, q$ resultan equivalentes, por simetría, $\rho_i(\sigma_i)$ solo tomará dos valores diferentes: uno para $\sigma = 1$ y el otro para $\sigma = 2, \dots, q$. Por otra parte, dado que el sistema es homogéneo, la forma funcional de $\rho_i(\sigma_i)$ será independiente de i . Así, podemos escribir:

$$\rho(\sigma) = a + b \delta_{\sigma,1}$$

Aplicando los vínculos es facil verificar que

$$\rho(\sigma) = \frac{1}{q} [1 + m (q \delta_{\sigma,1} - 1)]$$

y por lo tanto

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \text{Tr } \rho_i \ln \rho_i &= \frac{N}{q} \sum_{\sigma=1}^q [1 + m(q\delta_{\sigma,1} - 1)] \ln \left[\frac{1 + m(q\delta_{\sigma,1} - 1)}{q} \right] \\ &= \frac{N}{q} \left\{ [1 + m(q-1)] \ln \left[\frac{1 + m(q-1)}{q} \right] + (q-1)(1-m) \ln \left[\frac{1-m}{q} \right] \right\} \end{aligned}$$

y la funcional energía libre de campo medio por partícula resulta

$$\frac{\beta f_{\rho}(m)}{q-1} = -\frac{Kz}{2} m^2 - h m + \frac{1}{q} \left\{ \frac{[1 + m(q-1)]}{q-1} \ln \left[\frac{1 + m(q-1)}{q} \right] + (1-m) \ln \left[\frac{1-m}{q} \right] \right\} \quad (3.21)$$

derivando respecto de m :

$$\frac{\partial}{\partial m} \left(\frac{\beta f_{\rho}(m)}{q-1} \right) = -(Kzm + h) + \frac{1}{q} \ln \left[\frac{1 + (q-1)m}{1-m} \right] = 0$$

de donde, definiendo el campo efectivo

$$h_e \equiv Kzm + h$$

obtenemos la ecuación de campo medio para m :

$$m = \frac{e^{qh_e} - 1}{e^{qh_e} + (q-1)} \quad (3.22)$$

Para $q = 2$ esta ecuación se reduce a la de Curie-Weiss. Para $q \geq 3$ a campo nulo debemos resolver la ecuación $m = f(m)$ con

$$f(m) = \frac{e^{qKzm} - 1}{e^{qKzm} + (q-1)} \quad (3.23)$$

La forma típica de $f(m)$ para $q \geq 3$ se muestra en la Fig.3.2. a altas temperaturas solo existe la solución $m = 0$. a temperaturas intermedias aparecen tres soluciones: $m = 0$ y dos soluciones no nulas. Un análisis cuidadoso de la energía libre muestra que la solución con menor valor de m es siempre inestable (máximo de f_{ρ}), mientras que aquella con mayor valor y la solución $m = 0$ son mínimos locales. A medida que la temperatura disminuye el mínimo absoluto pasa de la solución $m = 0$ a la solución $m \neq 0$. A la temperatura

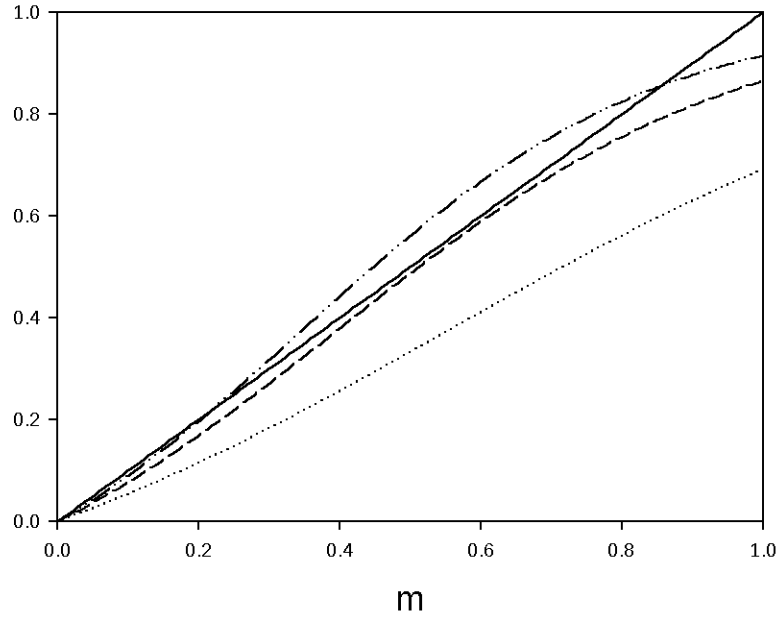


Figura 3.2: Forma típica de la función (3.23) para para $q \geq 3$ a diferentes temperaturas en el entorno de T_c .

$$k_B T_c = \left(\frac{q-2}{q-1} \right) \frac{zJ}{2 \ln(q-1)}$$

ambos mínimos corresponden a la misma energía libre. En este punto, la solución no nula toma el valor $m = (q-2)/(q-1)$. De esta manera, vemos que en T_c la solución ordenada surge con un valor del parámetro de orden no nulo. Esta es por lo tanto una transición de *primer orden*. Analizaremos en mayor detalle esta transición mas adelante en el marco de la Teoría de Landau.

3.3 Aproximación de Bethe-Peierls

Podemos obtener otras aproximaciones de campo medio relajando parcialmente la condición de fluctuación cero en el campo local, esto es, considerando fluctuaciones, pero solo en un rango limitado. En la aproximación de Weiss podemos pensar que

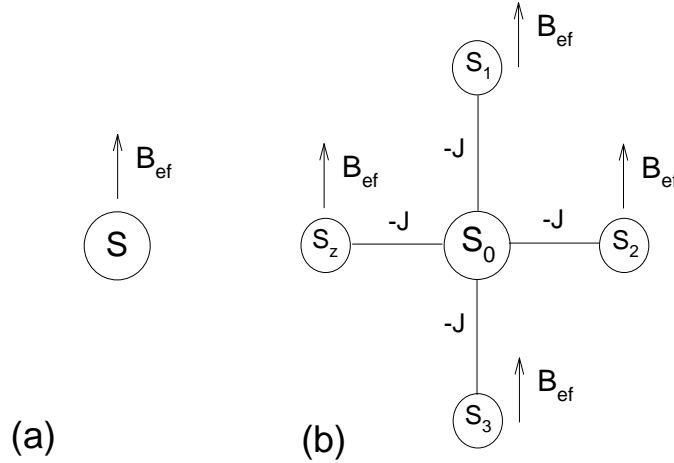


Figura 3.3: Comparación esquemática entre las aproximaciones de Weiss (a) y de Bethe-Peierls (b).

tomamos un spin arbitrario de referencia y que reemplazamos el resto de la red por un campo efectivo. La aproximación de Bethe Peierls consiste en tomar un spin arbitrario de referencia en la red, el cual interactua con sus z primeros vecinos y reemplazar el resto de la red por un campo efectivo B_{ef} , el cual se determina de manera autoconsistente (ver Fig.3.3). Así, el Hamiltoniano efectivo en esta aproximación toma la forma

$$H_{BP} = -BS_0 - B_{ef} \sum_{i=1}^z S_i - JS_0 \sum_{i=1}^z S_i$$

donde S_0 es el spin de referencia. Tomemos por simplicidad el caso $B = 0$. La función de partición es

$$Z_{BP} = \sum_{S_0=\pm 1} \sum_{\{S_i\}} \exp \left((h_{ef} + KS_0) \sum_{i=1}^z S_i \right) = \sum_{S_0=\pm 1} \left[\sum_{S=\pm 1} e^{(h_{ef}+KS_0)S} \right]^z$$

$$Z_{BP} = 2^z [\cosh^z(h_{ef} + K) + \cosh^z(h_{ef} - K)]$$

donde $h_{ef} \equiv \beta B_{ef}$. La condición de consistencia para B_{ef} se obtiene exigiendo que los resultados obtenidos sean independientes del sitio de referencia. Esto puede obtenerse exigiendo a su vez que la distribución de probabilidad de cada spin $P(S_i)$ sea independiente del sitio i . Dado que

$$P(S_i) = \frac{1}{Z} \sum_{\{S_j \neq i\}} e^{-\beta H} = 1 - P(-S_i)$$

y

$$P(S_0 = 1) = \frac{1}{Z_{BP}} \sum_{S_1=\pm 1} \dots \sum_{S_z=\pm 1} e^{-\beta H_{BP}} \Big|_{S_0=1} = \frac{\cosh^z(h_{ef} + K)}{\cosh^z(h_{ef} + K) + \cosh^z(h_{ef} - K)}$$

$$\begin{aligned} P(S_i = 1) &= \frac{1}{Z_{BP}} \sum_{S_0=\pm 1} \sum_{\{S_j \neq i\}} e^{-\beta H_{BP}} \Big|_{S_i=1} \quad i = 1, \dots, z \\ &= \frac{e^{h_{ef}+K} \cosh^{z-1}(h_{ef} + K) + e^{h_{ef}-K} \cosh^{z-1}(h_{ef} - K)}{2(\cosh^z(h_{ef} + K) + \cosh^z(h_{ef} - K))} \end{aligned}$$

Imponiendo entonces que $P(S_0 = 1) = P(S_i = 1) \quad i = 1, \dots, z$ obtenemos la ecuación para h_{ef} :

$$2 \cosh^z(h_{ef} + K) = e^{h_{ef}+K} \cosh^{z-1}(h_{ef} + K) + e^{h_{ef}-K} \cosh^{z-1}(h_{ef} - K)$$

Introduciendo la variable $v = e^{2h_{ef}}$ la ecuación anterior resulta equivalente a

$$v = g(v) = \left(\frac{1 + ve^{2K}}{v + e^{2K}} \right)^{z-1} \quad (3.24)$$

Notemos que $v = 1$ ($h_{ef} = 0$) es siempre solución de la Ec.(3.24) $\forall z, K$. La pendiente de $g(v)$ en $v = 1$ resulta

$$g'(1) = (z-1) \frac{e^{4K} - 1}{(1 + e^{2K})^2}$$

Para $g'(1) < 1$ la Ec.(3.24) solo tiene por solución $v = 1$. Para $g'(1) > 1$ aparecen dos nuevas soluciones v_0 y $1/v_0$ (que corresponden a invertir el campo h_{ef}), tal

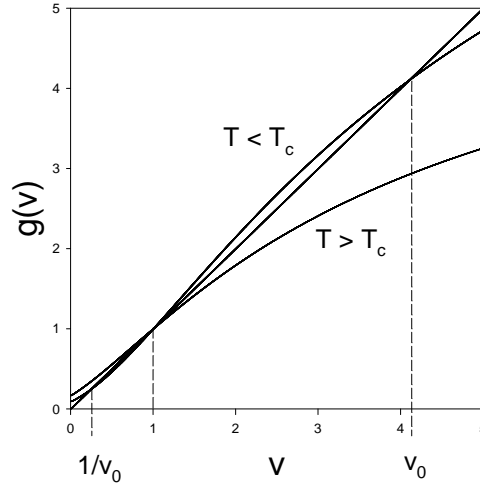


Figura 3.4: Solución gráfica de la Ec.(3.24).

como se muestra en la Fig.3.24. La temperatura crítica viene entonces dada por la condición $g'(1) = 1$, cuya solución es

$$K_c = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{z}{z-2} \right) \quad (3.25)$$

Trabajando las expresiones anteriores puede verse entonces que

$$\langle S \rangle = \begin{cases} 0 & \text{si } T > T_c \\ \frac{\operatorname{tanh}(h_{ef}+K) + e^{-\frac{2h_{ef}z}{z-1}} \operatorname{tanh}(h_{ef}-K)}{1 + e^{-\frac{2h_{ef}z}{z-1}}} & \text{si } T < T_c \end{cases}$$

Para la red cuadrada $z = 4$ y tenemos entonces que $K_c = \ln(2)/2 = 0.346\dots$, el cual puede compararse con la predicción de Weiss $K_c = 1/z = 0.25$ y con el resultado exacto de Onsager $K_c = 1/\ln(\sqrt{2}-1) = 0.441\dots$. Notemos por otra parte, que para $d = 1$ ($z = 2$) tenemos que $K_c = \infty$ ($T_c = 0$), esto es, la aproximación de BP predice que no hay transición de fase a temperatura finita, a diferencia de la aproximación de Weiss que predice transición incluso en $d = 1$. Puede verse además, que el calor específico en esta aproximación no se anula para $T > T_c$, dando por lo tanto una estimación mejor del resultado exacto. Por otra parte, puede verse con un poco de trabajo que los exponentes críticos en la aproximación de BP siguen siendo

los mismos que en la aproximación de Weiss. Finalmente, la aproximación de BP puede generalizarse, incluyendo clusters mayores de spines, en lugar de considerar solamente los primeros vecinos, lo cual permite obtener mejoras sistemáticas en la aproximación de T_c . Las soluciones obtenidas por este procedimiento tienden a la solución exacta en el límite de clusters infinitos. No obstante, para todo cluster finito los exponentes críticos serán siempre los mismos, como quedará claro al analizar la Teoría de Landau.

3.4 Árboles de Cayley y Red de Bethe

La universalidad del comportamiento crítico nos permite varias libertades en la formulación de los modelos. Una de estas libertades es la elección de la red en la cual definimos el modelo, permitiendo utilizar incluso redes artificiales (no realistas) que facilitan el desarrollo aproximaciones analíticas bastante útiles. Un tipo de redes que se utilizan para formular aproximaciones de campo medio se conocen como *árboles de Cayley*. Estas redes se construyen de manera recursiva a partir de un sitio central (numerado como sitio 0) de acuerdo con las siguientes restricciones: a) la coordinación z de todos los sitios, excepto los mas externos (los de la “última generación”) es constante y b) no se permiten caminos cerrados en la red. La red se construye así conectando z sitios al sitio central en la primera generación. En cada generación sucesiva se conectan $z - 1$ sitios a cada uno de los sitios de la generación anterior. En la Fig.3.5 se muestra un ejemplo para el caso $z = 3$. Notemos que para $z = 2$ ($d = 1$), reobtenemos la cadena lineal.

Por construcción, el número de sitios en la n -ésima capa (generación) es

$$N_s(n) = z(z - 1)^{n-1} \quad n \geq 1$$

$$N_s(0) = 1$$

y el número total de sitios para una red de m capas es

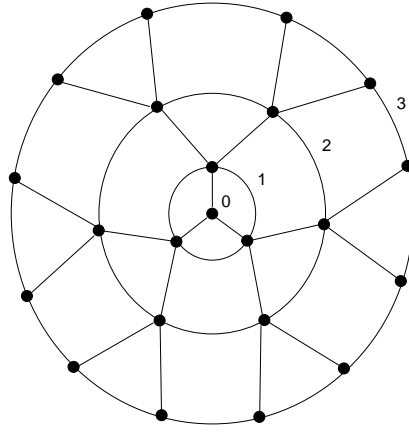


Figura 3.5: Ejemplo de un árbol de Cayley de coordinación $z = 3$. Los círculos numerados indican la generación y son solo una guía para el ojo.

$$N_m = \sum_{n=0}^m N_s(n) = 1 + z \sum_{n=0}^{m-1} (z-1)^n = 1 + z \frac{(z-1)^m - 1}{z-2} = \frac{z(z-1)^m - 2}{z-2}$$

Notemos que la relación superficie-volumen, esto es, el cociente entre el número de sitios en la superficie al número total de sitios, tiende a un valor constante en el límite termodinámico en estas redes, a diferencia de lo que ocurre en redes regulares, donde este cociente tiende a cero:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{N_s(m)}{N_m} = \frac{z-2}{z-1}$$

Esto hace que las soluciones en estas redes presenten propiedades peculiares, no representativas de lo que ocurre en redes de Bravais. Esto es, las propiedades termodinámicas de cualquier modelo en un árbol de Cayley son inhomogéneas, con efectos superficiales no despreciables. Una manera de evitar este problema es calcular las propiedades termodinámicas de un dado modelo en la zona central del árbol de Cayley, en la cual se espera sus propiedades sean semejantes a las de una red de

Bravais. Con este tipo de aproximación se obtienen resultados razonables, que para modelos con interacciones de primeros vecinos coinciden con la aproximación de Bethe-Peierls. De ahí que a este tipo de aproximación se la denomina solución en la red de Bethe. Veremos a continuación como se implementan este tipo de soluciones.

3.4.1 Modelo de Ising en la Red de Bethe

Tomemos el modelo de Ising a primeros vecinos

$$-\beta H = K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + h \sum_i S_i$$

donde los sitios i están definidos en un árbol de Cayley de coordinación z . Para una red de n generaciones, notemos que este árbol puede descomponerse en z subárboles de n generaciones, como se muestra en la Fig.(3.6a). La función partición del árbol completo puede escribirse como

$$Z = \sum_{S_0=\pm 1} e^{hS_0} [Z_n(S_0)]^z = e^h [Z_n(+)]^z + e^{-h} [Z_n(-)]^z$$

donde $Z_n(S_0)$ denota la función partición de un subárbol de n generaciones, que incluye todas las interacciones dentro del subárbol, más la interacción con el spin S_0 . Cada subárbol puede a su vez descomponerse en $z - 1$ subárboles de $n - 1$ generaciones (ver Fig.(3.6b)). Esta descomposición puede repetirse recursivamente para subárboles de generaciones superiores. De esta manera

$$Z_n(S_0) = \sum_{S_1=\pm 1} e^{(KS_0+h)S_1} [Z_{n-1}(S_1)]^{z-1}$$

esto es

$$Z_n(+)= e^{K+h} [Z_{n-1}(+)]^{z-1} + e^{-K-h} [Z_{n-1}(-)]^{z-1}$$

$$Z_n(-)= e^{-K+h} [Z_{n-1}(+)]^{z-1} + e^{K-h} [Z_{n-1}(-)]^{z-1}$$

Estas ecuaciones de recurrencia nos permiten calcular las funciones de partición Z_n iterando para los sucesivos subárboles. La magnetización en el sitio central es

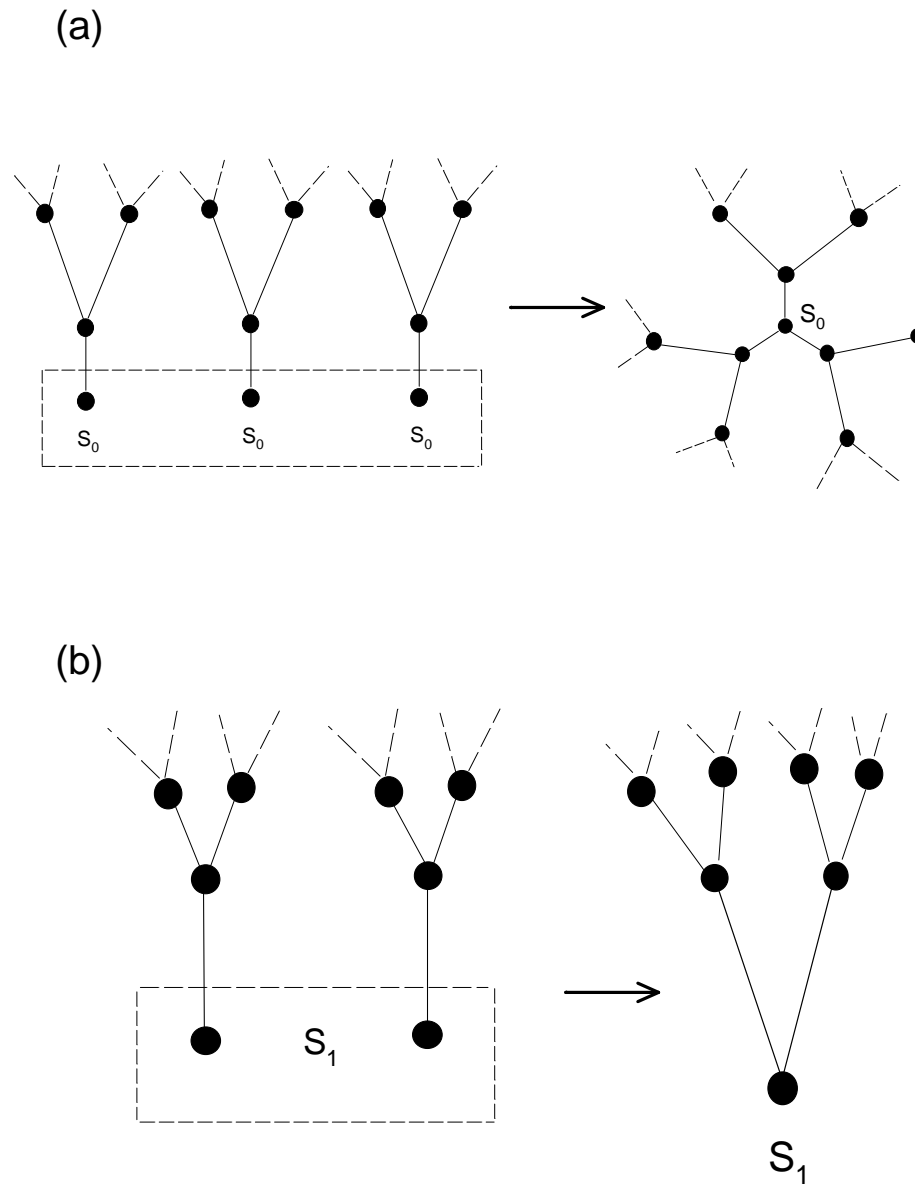


Figura 3.6: (a) Construcción de un árbol de Cayley de n generaciones a partir de z subárboles, para $z = 3$; (b) Composición de un subárbol de n generaciones a partir de $z - 1$ subárboles de $n - 1$ generaciones.

$$m = \frac{1}{Z} \sum_{S_0=\pm 1} e^{hS_0} S_0 [Z_n(S_0)]^z = \frac{e^h [Z_n(+)]^z - e^{-h} [Z_n(-)]^z}{e^h [Z_n(+)]^z + e^{-h} [Z_n(-)]^z}$$

Definiendo la cantidad

$$x_n \equiv \frac{Z_n(-)}{Z_n(+)} = \frac{e^{-K+h} [Z_{n-1}(+)]^{z-1} + e^{K-h} [Z_{n-1}(-)]^{z-1}}{e^{K+h} [Z_{n-1}(+)]^{z-1} + e^{-K-h} [Z_{n-1}(-)]^{z-1}}$$

obtenemos la ecuación de recurrencia

$$x_n = \frac{e^{-K+h} + e^{K-h} x_{n-1}^{z-1}}{e^{K+h} + e^{-K-h} x_{n-1}^{z-1}}$$

y la magnetización viene dada por

$$m = \frac{e^h - e^{-h} x_n^z}{e^h + e^{-h} x_n^z}$$

donde x_n se obtiene entonces de iterar n veces la ecuación de recurrencia $x' = F(x)$ donde

$$F(x) = \frac{e^{-K+h} + e^{K-h} x^{z-1}}{e^{K+h} + e^{-K-h} x^{z-1}} \quad (3.26)$$

esto es, $x_n = F(x_{n-1})$, $x_{n-1} = F(x_{n-2})$, etc.. En el límite termodinámico la magnetización en el sitio central resulta

$$m = \frac{e^h - e^{-h} (x^*)^z}{e^h + e^{-h} (x^*)^z}$$

donde x^* es el límite de la sucesión que se obtiene de iterar infinitas veces la ecuación $x' = F(x)$. Si este valor límite existe, el mismo es una solución de la ecuación

$$x^* = F(x^*)$$

ya que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = \lim_{n \rightarrow \infty} x_{n-1} = x^*$$

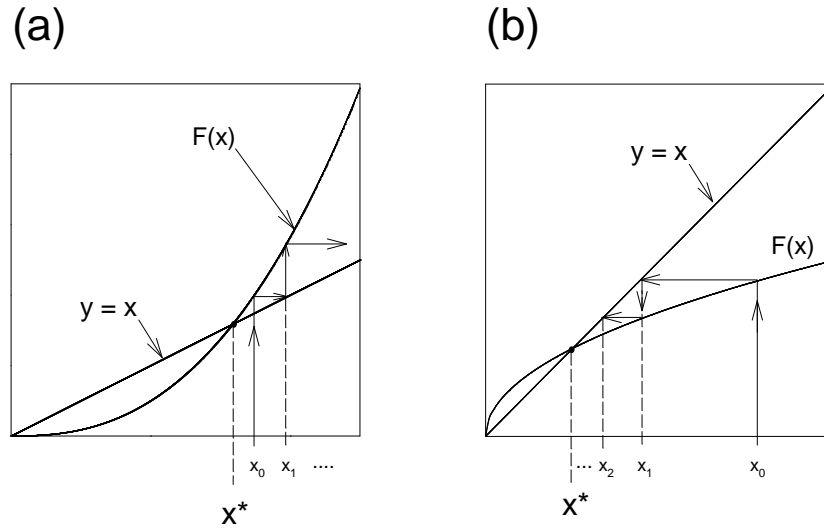


Figura 3.7: Puntos fijos de una ecuación de recurrencia $x' = F(x)$ y sucesión de puntos $x_{n+1} = F(x_n)$. (a) Punto fijo inestable. (b) Punto fijo estable

Una solución de este tipo se conoce como un *punto fijo* de la ecuación de recurrencia. Si la sucesión converge, el límite es necesariamente un punto fijo, pero no todo punto fijo es un límite de la ecuación de recurrencia. Esto depende de la *estabilidad* del punto fijo. De la Fig.3.7 vemos que valores cercanos a un punto fijo x^* van a *alejarse* del mismo al iterar la ecuación de recurrencia si $F'(x^*) > 1$; estos puntos fijos se dicen *inestables*. Por el contrario, puntos cercanos al punto fijo van a *converger* al mismo al iterar la ecuación de recurrencia si $F'(x^*) < 1$; estos puntos fijos se dicen *estables*. El límite de la sucesión, por lo tanto, solo puede corresponder a un punto fijo estable. Derivando la Ec.(3.26) podemos ver que $F'(x) > 0 \forall x > 0, \forall K$ y $\forall h$. Así, $F(x)$ en este caso es monótona creciente con $F(0) = e^{-2K}$ y $F(\infty) = e^{2K}$. Existen entonces solo dos posibilidades para la ecuación de punto fijo (ver Fig.3.8a) : i) un único punto fijo estable ó ii) tres puntos fijos, dos estables y uno inestable (ver Fig.3.8b). Para $h = 0$ tenemos que

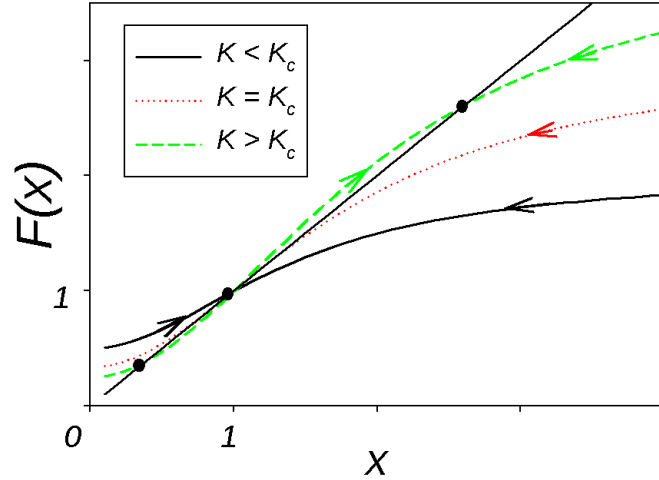


Figura 3.8: Puntos fijos posibles de la función (3.26). Para $K \geq K_c$ hay un único punto fijo estable $x^* = 1$. Para $K > K_c$ el punto fijo $x^* = 1$ se vuelve inestable y surgen dos nuevos puntos fijos estables.

$$x^* = \frac{1 + e^{2K}(x^*)^{z-1}}{e^{2K} + (x^*)^{z-1}} \quad (3.27)$$

Notemos que $x^* = 1$ es siempre solución de la Ec.(3.27), para la cual $m = 0$, correspondiendo por lo tanto a la solución paramagnética. Además, si x^* es solución entonces $1/x^*$ también lo es, de manera que si m es la magnetización correspondiente a x^* , la solución $1/x^*$ tiene magnetización $-m$. Estas dos soluciones van a corresponder por lo tanto a la solución ferromagnética. El punto crítico se obtiene entonces a partir de la condición $F'(1) = 1$. Una cuenta directa nos lleva entonces a la condición

$$\operatorname{tgh}(K_c) = \frac{1}{z-1}$$

Usando que

$$\operatorname{tgh}^{-1}(x) = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{1+x}{1-x} \right]$$

llegamos finalmente a la misma temperatura crítica obtenida mediante la aproximación de Bethe-Peierls:

$$K_c = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{z}{z-2} \right]$$

Notemos finalmente que para $z = 2$ ($d = 1$) la ecuación de punto fijo queda

$$x^* = \frac{1 + e^{2K} x^*}{e^{2K} + x^*} \Rightarrow (x^*)^2 = 1$$

y recuperamos el resultado esperado de que no hay solución ferromagnética a campo nulo.

