Introducción a la Teoría de Fenómenos Críticos

https://www.famaf.unc.edu.ar/∼serra/ifc_2023.html

Soluciones a los problemas del Segundo Parcial - 15 de Junio de 2023

Problema 1: *Transformación triángulo-estrella*

Utilizando la Transformación triángulo-estrella y las relaciones de dualidad calcule la temperatura crítica exacta del modelo de Ising con interacciones primeros vecinos en las redes triangular y hexagonal.

Solución:

Sabemos que el punto crítico es a campo externo nulo, por lo que no incluiremos el término correspondiente. Ya vimos que la red dual de la red triangular (T) es la hexagonal (H), y que la relación de dualidad

$$Z_{2N}^{(H)}(K) \,=\, \left(\frac{2}{\sinh^3(2\,K^*)}\right)^{N/2} Z_N^{(T)}(K^*) \quad ; \quad \tanh(K^*) = e^{-2\,K}\,, \tag{1}$$

da un mapeo entre una red a altas T con la otra a bajas T (la cuenta es esencialmente igual a la hecha para la red cuadrada, así que no la repetiremos). Necesitamos una segunda relación entre estas dos redes a altas (bajas) T. Como la red hexagonal es bipartita, y para hacer la notación mas clara llamaremos u_i al spin perteneciente a una subred (A), y s_i al perteneciente a la otra subred (B), así escribimos

$$Z_{2N}^{(H)}(K_H) \,=\, \sum_{\{s,u\}} \Pi_{l\in B}\, e^{K_H\, u_l\,(s_{i,l}+s_{j,l}+s_{k,l})} \,=\, \sum_{\{s\}} \Pi_{l\in B} \sum_{u_l=\pm 1} e^{K_H\, u_l\,(s_{i,l}+s_{j,l}+s_{k,l})}\,, \tag{2}$$

donde $s_{i,l}$, $s_{j,l}$, $s_{k,l}$) son los tres sitios de la subred A primeros vecinos del sitio l de la subred B, esto es,

$$\sum_{\{s\}} \Pi_{l\in B} \sum_{u_l=\pm 1} e^{K_H\, u_l\,(s_{i,l}+s_{j,l}+s_{k,l})} \,=\, \sum_{\{s\}} 2\cosh[K_H\,(s_{i,l}+s_{j,l}+s_{k,l})] \,\equiv\, \sum_{\{s\}} w_T(s_{i,l}, s_{j,l}, s_{k,l}) \tag{3}$$

es una suma sobre todas las configuraciones de una red triangular de N sitios (la subred A de H). La condición de invarianza de forma del Hamiltoniano para lograr el mapeo buscado es exigir que (obviamos el subíndice l)

$$w_T(s_i, s_j, s_k) \,=\, 2\cosh[K_H\,(s_i+s_j+s_k)] \,=\, e^{K_T(s_is_j+s_js_k+s_ks_j)+c}\,, \tag{4}$$

donde incluimos una posible constante aditiva no nula c en $\mathcal{H}_T$. Como trabajamos a campo nulo, solo debemos considerar 4 configuraciones de spin, de estas 4 las 3 correspondientes a 2 spines +1 y uno -1 dan igual resultado en un triángulo, por lo que quedan solo 2 configuraciones que arrojan ecuaciones independientes, para las 2 variables K_T y c,

$$(s_i, s_j, s_k) = \quad (1,1,1) \;\Rightarrow\; 2\,\cosh(3\,K_H) = e^{3\,K_T+c} \tag{5}$$

$$(s_i, s_j, s_k) = \quad (1,1,-1) \;\Rightarrow\; 2\,\cosh(K_H) = e^{-K_T+c}\,, \tag{6}$$

lo que nos da

$$e^{4\,k_T} \,=\, \frac{\cosh(3\,K_H)}{\cosh(K_H)} \quad ; \quad e^{4\,c} = 2^4\,\cosh(3\,K_H)\,\cosh^3(K_H)\,. \tag{7}$$

Vemos de la ecuación (7) que $K_T \to K_H/2$ para $K_H \to 0$ y $K_T \to 4\,K_H$ para $K_H \to \infty$, por lo que este mapeo relaciona bajas (altas) temperaturas en H con bajas (altas) temperaturas en T.

Así, componiendo la relación triángulo-estrella con dualidad obtenemos una transformación de altas (bajas) a bajas (altas) temperaturas en cada red. Asumiendo que ambas redes presentan un y solo un punto de no analiticidad en sus respectivas energías libres, este debe ser el punto crítico. La relación de dualidad da $\exp(4\,K_T) = 1/u^2$, donde definimos $u = \tanh(K_H)$, reemplazando esto en la primera ecuación de (7) tenemos

$$\frac{1}{u^2} = \frac{\cosh(3\,K_H)}{\cosh(K_H)} = \frac{3\,u^2+1}{1-u^2} \;\Rightarrow\; 3\,u^4 + 2\,u^2 - 1 = 0 \;\Rightarrow\; \tanh(K_{H,c}) = \frac{1}{\sqrt{3}}\,. \tag{8}$$

Volviendo a la relación de dualidad tenemos que

$$e^{K_T} = \frac{1}{\sqrt{u}} = 3^{1/4} \;\Rightarrow\; \tanh(K_{T,c}) = \frac{3^{1/4} - 3^{-1/4}}{3^{1/4} + 3^{-1/4}} = \frac{1}{2+\sqrt{3}}\,. \tag{9}$$

Problema 2: *Modelo de Blume-Capel - Versión Curie-Weiss*

Considere la versión Curie-Weiss del modelo de Blume-Capel

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N}\sum_{i,j} s_i s_j + D\sum_i s_i^2 - H\sum_i s_i$$

donde $s_i = 0, \pm 1$, $D, J, H > 0$.

1. Obtenga una forma asintótica para la función partición en el $\lim N \to \infty$, y muestre que la energía libre puede escribirse como

$$f(T,H) = \min_m \Psi(T,H;m)$$

donde la variable m puede identificarse con la magnetización.

Solución:

De manera similar a lo hecho con el modelo de Ising, podemos escribir el Hamiltoniano como:

$$H = -\beta\mathcal{H} = \frac{K}{2\,N}\left(\sum_i s_i\right)^2 - d\sum_i s_i^2 + h\sum_i s_i\,;\; K = \beta\,J\,;\; d = \beta\,D\,;\; h = \beta\,H\,. \tag{10}$$

Debemos ahora calcular Z_N, para esto usamos la identidad Gaussiana

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2 + a\,x}\,\frac{dx}{\sqrt{\pi}} = e^{a^2/2}\,, \tag{11}$$

para calcular la función partición, eligiendo $a = \sqrt{K/N}\,\sum_i s_i$ obtenemos

$$\begin{aligned} Z_N = \;& Tr(e^H) = Tr\left(\int_{-\infty}^{\infty} \tfrac{dx}{\sqrt{\pi}}\, e^{-x^2/2 + \sqrt{K/N}\,x\,\sum_i s_i - d\sum_i s_i^2 + h\sum_i s_i}\right) = \\ & \int_{-\infty}^{\infty} \tfrac{dx}{\sqrt{\pi}}\, e^{-x^2/2}\left(e^{\sqrt{K/N}\,x - d + h} + 1 + e^{-\sqrt{K/N}\,x - d - h}\right)^N = \\ & \int_{-\infty}^{\infty} \tfrac{dx}{\sqrt{\pi}}\left[2\,e^{-d}\cosh(\sqrt{K/N}\,x + h) + 1\right]^N = \\ & \sqrt{\tfrac{N\,K}{2\,\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dy\, e^{-N\,K\,y^2/2 + N\,\ln\left(2\,e^{-d}\cosh(K\,y + h) + 1\right)}\,, \end{aligned} \tag{12}$$

donde la última igualdad se obtiene haciendo el cambio de variable $y = x/\sqrt{N\,K}$. Podemos escribir entonces

$$Z_N \;=\; \sqrt{\frac{N\,K}{2\,\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dy\, e^{-N\,\Phi(K,d,h;y)}\;;\;\Phi(K,d,h;y)\;=\;\frac{K}{2}\,y^2-\ln\left[2\,e^{-d}\,\cosh(K\,y\;+\;h)+1\right]\,. \tag{13}$$

Esta integral puede evaluarse exactamente solo en el límite termodinámico por el método de Laplace: Sea $f(x)$ continua y con un mínimo absoluto en $x = x_0$, entonces vale:

$$I_N = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-N\,f(x)} \;\Rightarrow\; \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\ln(I_N) = -f(x_0)\,. \tag{14}$$

Aplicando Laplace en la ecuación (13) tenemos

$$-\beta\,f(T,h)\;=\;\min_y\,\Phi(K,d,h;y)\;=\;\Phi(K,d,h;y^*)\,, \tag{15}$$

donde y^* es el mínimo absoluto de Φ, que se encuentra derivando,

$$\left.\frac{d\Phi}{dy}\right|_{y^*}\;=\;0\;=\;K\,y^*-\frac{2\,K\,e^{-d}\,\sinh(K\,y^*\;+\;h)}{2\,e^{-d}\,\cosh(K\,y^*\;+\;h)+1}\,. \tag{16}$$

Vemos ahora el significado físico de y^*, por definición de m,

$$m\;=\;-\frac{df}{dh}\;=\;-\frac{d}{dh}\Phi(K,h;y^*)\;=\;\left.\frac{d\Phi}{dy}\right|_{y^*}\frac{dy^*}{dh}+\frac{2\,K\,e^{-d}\,\sinh(K\,y^*\;+\;h)}{2\,e^{-d}\,\cosh(K\,y^*\;+\;h)+1}\,, \tag{17}$$

ecuaciones (16) y (17) implican $y^* = m$.

Nota: el funcional obtenido aquí es formalmente idéntico al obtenido en clase utilizando la aproximación variacional de Bogoliubov, por lo que las cuentas de los puntos que siguen ya fueron hechas en detalle y nos las repetiremos.

2. Obtenga, a campo nulo, una expansión para $\Psi(T, H = 0; m)$ en potencias de m

$$\Psi(T,H=0;m)\;=\;A_0\;+\;A_2m^2\;+\;A_4m^4\;+\;A_6m^6+...$$

3. Considere el diagrama de fases a campo nulo ($D/J vs.T = 1/(\beta J)$). Obtenga una expresión para la linea de segundo orden y localice el punto tricrítico.
4.- Grafique el diagrama de fases a campo nulo para coordinación q=4, incluyendo la linea de transición de primer orden (que debe calcularse haciendo una construcción de Maxwell).

Problema 3: *Modelo de Ising en la red de Bethe*
1. Calcule los exponentes críticos β y δ del Modelo de Ising en la red de Bethe. compare con los exponentes clásicos, discuta el resultado.

Solución:

La ecuación de recurrencia para $x_m = Z_m(-)/Z_m(+)$ obtenida en el teórico es

$$x_m\;=\;\frac{e^{K-h}\,x_{m-1}^{q-1}+e^{-K+h}}{e^{-K-h}\,x_{m-1}^{q-1}+e^{K+h}}\,, \tag{18}$$

que en un punto fijo x^* podemos escribir como

$$e^{2\,h}\;=\;\frac{e^{2\,K}-x^*}{e^{2\,K}\,x^*-1}\;(x^*)^{q-1}\;, \tag{19}$$

o, definiendo $x = e^{-2\,s}$,

$$h \;=\; -(q-1)\,s + \frac{1}{2}\,\ln\left(\frac{\sinh(K+s)}{\sinh(K-s)}\right)\,. \tag{20}$$

En el punto critico $x^* = x_c = 1 \;\Rightarrow\; s_c = 0$, por lo que podemos desarrollar (20) en s,

$$h \;=\; \left(\frac{\cosh(K)}{\sinh(K)} - q + 1\right)\,s + \frac{1}{3}\frac{\cosh(K)}{\sinh^3(K)}\,s^3 \;+\; O(s^5)\,. \tag{21}$$

En $T = T_c \;\rightarrow\; \tanh(K_c) = 1/(q-1) \;\;\Rightarrow\;\; h(T_c) \sim s^3$, por lo que cerca del punto crítico tenemos

$$\frac{1}{\tanh(K)} - (q-1) \;=\; q\,(q-2)\,K_c\,t + O(t^2) \;\Rightarrow\; \frac{H}{T_c} \;\sim\; q\,(q-2)\,\left(K_c\,t\,s + \frac{1}{3}(q-1)\,s^3\right)\,. \tag{22}$$

Usando la expresión para la magnetización obtenida en el teórico,

$$m \;=\; \frac{e^{2\,h} - x^q}{e^{2\,h} + x^q} \;=\; \frac{e^{h+s} - e^{-h-s}}{e^{h+s} + e^{-h-s}} \;=\; \tanh(h + q\,s)\,, \tag{23}$$

para $h \ll q\,s$ tenemos

$$\frac{H}{T_c} \;=\; q\,(q-2)\,\left(\frac{K_c\,t\,m}{q} + \frac{q-1}{3\,q^3}\,m^3\right) \;+\; O(m^5)\,, \tag{24}$$

obteniendo finalmente en $t = 0$: $H \sim m^3 \;\;\Rightarrow\;\; \delta = 3$, y en $H = 0$: $m^2 \sim (-t) \;\Rightarrow\; \beta = 1/2$. Como era de esperar, ya que la red de Bethe es una red de dimensión espacial infinita, los exponentes críticos son clásicos.

2. Muestre que en el limite $q \rightarrow \infty$; $J \rightarrow 0$; $q\,J = \alpha =$ constante finita, la ecuación de estado de la red de Bethe se reduce a la de Curie-Weiss.

Solución:

Partiendo de la ecuación (18) ya valuada en un punto fijo y tomando $q - 1 \simeq q$ y de la expresión (23) para la magnetización obtenemos

$$(x^*)^q \;=\; \frac{1-m}{1+m}\,e^{2\,h}\,, \tag{25}$$

expandiendo x^* en $1/q$,

$$x^* \;=\; 1 + \frac{1}{q}\;\ln\left(\frac{1-m}{1+m}\,e^{2\,h}\right) \;+\; O(1/q^2) \;\simeq\; \frac{e^{K+h}\,(1-m) \;+\; e^{-K+h}\,(1+m)}{e^{-K+h}\,(1-m) \;+\; e^{K+h}\,(1+m)}\,, \tag{26}$$

y usando que $K = \beta\,\alpha/q$ tenemos

$$x^* \;\simeq\; \frac{(1+\beta\,\alpha/q)\,(1-m) \;+\; (1-\beta\,\alpha/q)\,(1+m)}{(1-\beta\,\alpha/q)\,(1-m) \;+\; (1+\beta\,\alpha/q)\,(1+m)} \;=\; 1 - \frac{2\,\beta\,\alpha\,m}{q}\,, \tag{27}$$

y usando que

$$\frac{1}{2}\ln\left(\frac{1+z}{1-z}\right) \;=\; \tanh^{-1}(z)$$

obtenemos de (26) y (27)

$$1 \;+\; \frac{1}{q}\,[2\,h - 2\,\tanh^{-1}(m)] \;=\; 1 - \frac{2\,\beta\,\alpha\,m}{q} \;\;\Rightarrow\;\; m \;=\; \tanh(\beta\,\alpha\,m + h) \tag{28}$$

que es la ecuación de Curie-Weiss.