

Introducción a la Teoría de Fenómenos Críticos
Soluciones de los problemas del primer parcial - 25 de Abril de 2023

Problema 1: *Ecuación de Curie-Weiss de Ferromagnetismo*

Considere la ecuación de Curie-Weiss

$$m = \tanh[\beta(h + \lambda m)] .$$

1. Calcule la temperatura crítica T_c .

R.: T_c es dada por la condición límite de que la solución de la ecuación de Curie-Weiss a campo nulo pasa de tener solo una solución real (fase paramagnética) a tres (fase ferromagnética), esto es:

$$\left. \frac{d}{dm_0} \tanh[\beta_c \lambda m_0] \right|_{m_0=0} = 1 \Rightarrow \left. \frac{\beta_c \lambda}{\cosh(\beta_c \lambda m_0)} \right|_{m_0=0} = \beta_c \lambda \Rightarrow T_c = \lambda .$$

2. Obtenga el exponente crítico β definido por la relación

$$m_0(T) \sim (T_c - T)^\beta ; T \rightarrow T_c^- .$$

R.: A campo nulo reescribimos C-W como $\beta \lambda m_0 = \tanh^{-1}(m_0)$. Cerca del punto crítico $m_0 \ll 1$, por lo que podemos escribir $\tanh^{-1}(m_0) \sim m_0 + m_0^3/3$, lo que reduce C-W a

$$\beta \lambda m_0 = m_0 + \frac{m_0^3}{3} \Rightarrow \begin{cases} m_0 = 0 \\ m_0^2 = 3(\beta \lambda - 1) = 3\left(\frac{T_c}{T} - 1\right) \end{cases} .$$

Notamos que $m_0^2(T > T_c) < 0$, por lo que la única solución aceptable en este caso es la paramagnética $m_0 = 0$. De las soluciones para $T < T_c$ y la definición del exponente β obtenemos $\beta = 1/2$.

3. Obtenga el exponente crítico δ definido por la relación

$$h(T_c, m) \sim |m|^\delta \text{sign}(m) ; m \rightarrow 0 .$$

R.: Despejando h de C-W tenemos

$$h(T, m) = T \tanh^{-1}(m) - \lambda m ,$$

como cerca del punto crítico $m \ll 1$, nuevamente expandemos la arcotangente hiperbólica y evaluamos además en $T = T_c$,

$$h(T, m) \sim T \left(m + \frac{m^3}{3} \right) - \lambda m \Big|_{T=T_c} = \frac{T_c}{3} m^3 \Rightarrow \delta = 3 .$$

Problema 2: *El modelo de Blume-Capel*

Considere el modelo de Blume-Capel a campo nulo en $d = 1$ con condiciones periódicas de contorno :

$$\mathcal{H}_N = -J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} + D \sum_i s_i^2 \quad ; \quad s_i = 0, \pm 1 \quad ; \quad s_{N+1} = s_1 .$$

1. Escriba la función partición utilizando el método de la matriz de transferencia.

R.: Comenzamos simetrizando el Hamiltoniano,

$$\mathcal{H}_N = \sum_{i=1}^N \left[-J s_i s_{i+1} + \frac{D}{2} (s_i^2 + s_{i+1}^2) \right] \quad ; \quad s_i = 0, \pm 1 \quad ; \quad s_{N+1} = s_1 .$$

$$\mathcal{Z}_N = \text{tr} \left(e^{-\beta \mathcal{H}_N} \right) = \text{tr} \left(e^{-\beta \sum_i [-J s_i s_{i+1} + \frac{D}{2} (s_i^2 + s_{i+1}^2)]} \right) = \sum_{\{s_i\}} \left(\prod_i e^{K s_i s_{i+1} - \frac{d}{2} (s_i^2 + s_{i+1}^2)} \right) ,$$

donde $K = \beta J$ y $d = \beta D$. Definiendo la matriz 3×3

$$T_{s,s'} = e^{K s s' - \frac{d}{2} (s^2 + s'^2)} \Rightarrow T = \begin{pmatrix} e^{K-d} & e^{-d/2} & e^{-K-d} \\ e^{-d/2} & 1 & e^{-d/2} \\ e^{-K-d} & e^{-d/2} & e^{K-d} \end{pmatrix} ,$$

escribimos la función partición como

$$\mathcal{Z}_N = \sum_{s_1=0,\pm 1} \cdots \sum_{s_N=0,\pm 1} T_{s_1,s_2} T_{s_2,s_3} \cdots T_{s_{N-1},s_N} T_{s_N,s_1} = \sum_{s_1=0,\pm 1} T_{s_1,s_1}^N = \text{tr} (T^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N ,$$

donde $\lambda_1; \lambda_2; \lambda_3$ son los autovalores de T . Como esta es real simétrica, estos son reales. Además, por el teorema de Perron-Frobenius, el mayor es positivo y no degenerado, lo que asegura que los autovalores cumplen $\lambda_1 > \lambda_2 \geq \lambda_3$.

2. Calcule todos los autovalores de la matriz de transferencia y la energía libre $f(J, D; T)$.

R.: Para el cálculo de autovalores deberíamos resolver un polinomio característico de grado 3. En vez de esto es conveniente usar la simetría de \mathcal{H}_N , y por lo tanto de T ante inversión de spines. Así definimos una nueva base,

$$|sim\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+1\rangle + |-1\rangle) \quad ; \quad |0\rangle = |0\rangle \quad \text{simétricos ante inversión de spines}$$

$$|as\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+1\rangle - |-1\rangle) \quad \text{antisimétrico ante inversión de spines,}$$

con lo que obtenemos explícitamente la matriz T' en esta base:

$$T' = \begin{pmatrix} 2e^{-d} \cosh K & \sqrt{2}e^{-d/2} & 0 \\ \sqrt{2}e^{-d/2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2e^{-d} \sinh K \end{pmatrix}.$$

Un autovalor queda aislado, pero sabemos que el mayor esta en el bloque simétrico 2×2 , cuyos autovalores son

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left(2e^{-d} \cosh K + 1 \pm \sqrt{(2e^{-d} \cosh K - 1)^2 + 8e^{-d}} \right)$$

trivialmente $\lambda_+ > \lambda_-$, por lo que

$$f(k, d) = -k_B T \ln(\lambda_+) = -k_B T \ln \left[\frac{1}{2} \left(2e^{-d} \cosh K + 1 + \sqrt{(2e^{-d} \cosh K - 1)^2 + 8e^{-d}} \right) \right]$$

Problema 3: *El modelo de Ashkin-Teller*

Considere una cadena unidimensional de N sitios con condiciones periódicas de contorno (por simplicidad considere N par), donde en cada sitio de red se tiene una *molécula* con dos variables tipo Ising:

$$\mathcal{H}_N = - \sum_{i=1}^N [J(\sigma_i \sigma_{i+1} + t_i t_{i+1}) + I \sigma_i t_i \sigma_{i+1} t_{i+1}] \quad ; \quad \sigma_i = \pm 1 ; t_i = \pm 1 \quad ; \quad \sigma_{N+1} = \sigma_1 ; t_{N+1} = t_1 .$$

1. Grafique el diagrama de fases a $T = 0$ en todo el plano $J - I$.

R: Claramente si $I > 0$ el sistema será ferromagnético (F) si $J > 0$ y antiferromagnético (AF) si $J < 0$, ya que en ambos casos la contribución de I baja la energía, siendo $J = 0$ la línea de separación (coexistencia) de estas fases.

Para el caso $I < 0$ las fases F y AF dan una contribución positiva en I , así que debemos analizar esta competencia en más en detalle. Las energías F y AF son iguales:

$E_F = E_{AF} = -2N|J| + N|I|$, mientras que si dos moléculas primeras vecinas tienen 3 spines en una dirección y uno en la opuesta, fase que llamaremos *super antiferromagnética* (SAF), la contribución en J se anula, obteniendo $E_{SAF} = -N|I|$. Estas energías se igualan cuando $|J| = |I|$, siendo estas las líneas de transición. El diagrama se muestra en la figura 1.

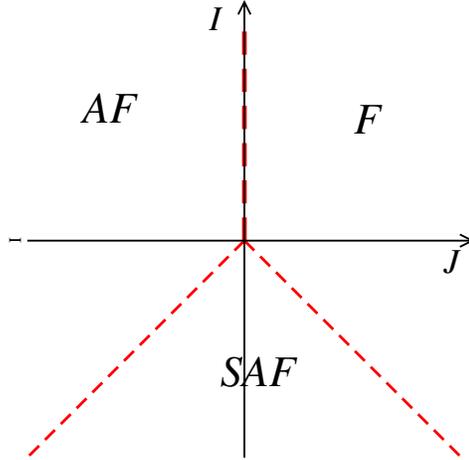


Figure 1: Diagrama de fase a temperatura nula de la cadena de Ashkin-Teller. Las líneas cortadas rojas marcan las curvas de coexistencia de fases

2. De la degeneración del estado fundamental y la entropía $s = \lim_{N \rightarrow \infty} S/N$ en cada región encontrada (no incluya las líneas de transición de fase como regiones).

R: Para analizar la degeneración en cada fase, definiremos arbitrariamente un sitio como 1, y veremos como es el estado fundamental (el primer sitio denota σ , el segundo t):

- Fase F. tenemos 4 configuraciones posibles para el sitio 1: $\uparrow\uparrow$; $\uparrow\downarrow$; $\downarrow\uparrow$; $\downarrow\downarrow$, y una vez elegida una de estas 4 configuraciones, el resto queda unívocamente definido por la condición ferromagnética, por lo que la degeneración es $g_F = 4 \Rightarrow s_F = \lim_{N \rightarrow \infty} \ln(4)/N = 0$.
- Fase AF. tenemos las mismas 4 configuraciones posibles para el sitio 1 que en F: $\uparrow\uparrow$; $\uparrow\downarrow$; $\downarrow\uparrow$; $\downarrow\downarrow$, y, nuevamente, una vez elegida una de estas 4 configuraciones, el resto queda unívocamente definido por la condición antiferromagnética (recordar que N es par, por lo que no aparecen "efectos de borde"), obtenemos entonces que la degeneración es $g_{AF} = 4 \Rightarrow s_{AF} = \lim_{N \rightarrow \infty} \ln(4)/N = 0$.
- Fase SAF. Aquí debemos ser más cuidadosos en el análisis, ya que si bien tenemos las mismas 4 configuraciones para el sitio 1, c/u de estas **no** determina unívocamente la configuración de toda la red. Tomemos una de ellas, digamos $\uparrow\uparrow$, tendremos ahora 2 configuraciones posibles para el sitio 2: $\uparrow\downarrow$; $\downarrow\uparrow$, y cualquiera de estas 2 que tomemos nos dará 2 configuraciones posibles para el sitio 3: $\uparrow\uparrow$; $\downarrow\downarrow$, y así siguiendo, por lo que obtendremos (nuevamente N par nos evita efectos de borde) $g_{SAF} = 4 \times 2^{N-1} \Rightarrow s_{SAF} = \lim_{N \rightarrow \infty} \ln(4 \times 2^{N-1})/N = \ln(2) > 0$. Este resultado es típico en sistemas con degeneración exponencial del estado fundamental, como la fase SAF, y se los denomina *sistemas frustrados*.