



LaCoNGA-Physics

Mecánica Estadística Avanzada

5 Ising en 2-d-Aproxí de Bethe- AF campo medio

Profesora
GLORIA BUENDÍA
Departamento de Física
Universidad Simón Bolívar
Caracas-Venezuela
buendia@usb.ve

Junio-Julio 2023

Contenido General

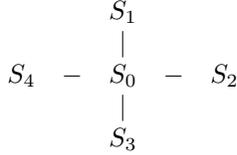
1 Ising en 2-d-Aproximación de Bethe	1
2 Ejemplos:	4
2.1 Antiferromagneto de <i>Ising</i> en 2-d (Campo medio)	4
2.2 Transición líquido-gas. gas de Van der Waals.	6

1. Ising en 2-d-Aproximación de Bethe

(Gould-Tobochnik-Libro)

Idea: en lugar de considerar el campo efectivo sobre un espin, calcular el campo efectivo sobre un conjunto de espines.

Ejemplo: Para una red cuadrada, $d = 2, z = 4$, considere un espin S_0 y sus $z = 4$ vecinos cercanos. Este grupo de espines se llamaría cluster



La interacción de los vecinos cercanos con el espin central se calcula de forma exacta, y la interacción con el resto de los vecinos se aproxima por un campo efectivo calculado de forma autoconsistente.

Energía de éste cluster

$$\begin{aligned}
 E_c &= -JS_0 \sum_{i=1}^z S_i - HS_0 - \bar{H} \sum_{i=1}^z S_i \\
 &= -(JS_0 + \bar{H}) \sum_{i=1}^z S_i - HS_0
 \end{aligned} \tag{1}$$

La función de partición del cluster

$$Z_c = \sum_{S_0=\pm 1} \sum_{S_i=\pm 1} e^{-\beta E_c}$$

Haciendo la primera suma, sobre $S_0 = \pm 1$

$$Z_c = e^{\beta H} \sum_{S_j=\pm 1} e^{\beta(J+\bar{H}) \sum_{S'_j} S'_j} + e^{-\beta H} \sum_{S_j=\pm 1} e^{\beta(-J+\bar{H}) \sum_{S'_j} S'_j}$$

Note que la suma $\sum_{S'_j} S'_j = S_1 + S_2 + S_3 + S_4$

$$\Rightarrow Z_c = e^{\beta H} \sum_{S_j} e^{\beta(J+\bar{H})(S_1+S_2+S_3+S_4)} + e^{-\beta H} \sum_{S_j} e^{\beta(-J+\bar{H})(S_1+S_2+S_3+S_4)}$$

Para todas las combinaciones posibles de S_1, S_2, S_3, S_4

$S_1 + S_2 + S_3 + S_4 = +4$	1 config	$\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow$
$S_1 + S_2 + S_3 + S_4 = -4$	1 config	$\downarrow \downarrow \downarrow \downarrow$
$S_1 + S_2 + S_3 + S_4 = +2$	4 config	$\uparrow \uparrow \uparrow \downarrow$
$S_1 + S_2 + S_3 + S_4 = -2$	4 config	$\downarrow \downarrow \downarrow \uparrow$
$S_1 + S_2 + S_3 + S_4 = 0$	6 config	$\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow$

Si llamamos $\alpha = (J + \bar{H})\beta$, $\gamma = (J - \bar{H})\beta$, tomando en cuenta la degeneración de los niveles de energía

$$\begin{aligned}
 Z_c &= e^{\beta H} [e^{4\alpha} + e^{-4\alpha} + 4e^{2\alpha} + 4e^{-2\alpha} + 6] + e^{-\beta H} [e^{4\gamma} + e^{-4\gamma} + 4e^{2\gamma} + 4e^{-2\gamma} + 6] \\
 &= e^{\beta H} 16 [\cosh^4 \alpha] + e^{-\beta H} 16 [\cosh^4 \gamma] \\
 &= 2^4 \{e^{\beta H} \cosh^4 (J + \bar{H}) \beta + e^{-\beta H} \cosh^4 (J - \bar{H}) \beta\}
 \end{aligned}$$

En general $Z_c = 2^z [(\cosh^z(J + \bar{H})\beta) e^{\beta H} + (\cosh^z(j - \bar{H})\beta) e^{-\beta H}]$ (No se ha demostrado)

Como el único término que depende de S_0 en el que tiene H

$$\langle S_0 \rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z_c}{\partial H} = \frac{1}{Z_c} 2^z [e^{\beta H} \cosh^z(J + \bar{H})\beta - e^{-\beta H} \cosh^z(J - \bar{H})\beta] \tag{2}$$

$$\begin{aligned} \langle S_j \rangle &= -\frac{1}{\beta_z} \frac{\partial \ln Z_c}{\partial \bar{H}} \\ &= \frac{2^z}{Z_c} \{e^{\beta H} \cosh^{z-1}(J + \bar{H})\beta \sinh(J + \bar{H})\beta - e^{-\beta H} \cosh^{z-1}(J - \bar{H})\beta \sinh(J - \bar{H})\beta\} \end{aligned} \tag{3}$$

Como todos los espines son equivalentes $\langle S_0 \rangle = \langle S_j \rangle = \langle S \rangle$

Por simplicidad tomaremos el campo externo, $H = 0$

$$\langle S_0 \rangle = \langle S_j \rangle \implies \cosh^z \alpha - \cosh^z \gamma = (\cosh^{z-1} \alpha \sinh \alpha - \cosh^{z-1} \gamma \sinh \gamma)$$

Recordando que $\sinh x = \cosh x - e^{-x}$

$$\implies f = \frac{\cosh^{z-1} \alpha}{\cosh^{z-1} \gamma} = e^{\alpha - \gamma} = e^{2\beta \bar{H}} \quad (H = 0)$$

a) Si $H = 0$ y $\bar{H} = 0$ (T grandes)

$$\langle S \rangle = 0 \quad \text{De (3)}$$

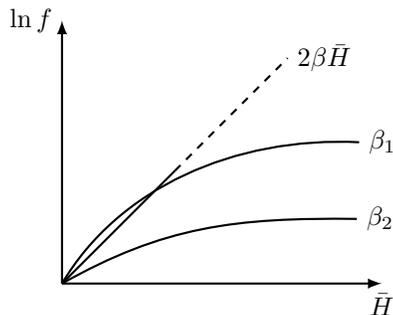
Fase desordenada

b) Si $H = 0$ y $\bar{H} \neq 0 \implies \alpha \rightarrow \infty, \gamma \rightarrow -\infty$ (En esta región $T \rightarrow 0$)

$$\begin{aligned} f &= \frac{e^\alpha + e^{-\alpha}}{e^\gamma + e^{-\gamma}} = e^{2\beta \bar{H}} \\ e^{(\alpha + \gamma)^{z-1}} &= e^{2\beta \bar{H}} \implies e^{2J\beta(z-1)} = e^{2\beta \bar{H}} \rightarrow \infty \end{aligned}$$

En general $\ln f = 2\beta \bar{H}$; $f = \left(\frac{e^\alpha + e^{-\alpha}}{e^\gamma + e^{-\gamma}} \right)^{z-1}$

Si para J fijo graficamos $\ln f = 2\beta \bar{H}$ y $2\beta \bar{H}$



Si la gráfica de f corta la gráfica de $2\beta \bar{H}$ en un punto distinto de cero hay un $\bar{H} \neq 0$

De la gráfica vemos, que si la $T = \frac{1}{K\beta_1}$ hay solución donde hay orden $\bar{H} \neq 0$, si la $T = \frac{1}{K\beta_2}$, la única

solución es $\bar{H} = 0$ desorden.

Notemos que la diferencia entre las dos gráficas de $\ln f$, la calculada a β_1 y la calculada a β_2 , es en la derivada de $\frac{\ln f}{d\bar{H}}$ en $\bar{H} = 0$.

$\ln f = 2\beta\bar{H}$, Si $d \ln f > 2\beta$, la curva f , corta en algún punto a la gráfica $2\beta\bar{H}$ y hay otra solución distinta de $\bar{H} = 0$, \bar{H} fase ordenada.

Si $d \ln f < 2\beta$, la única solución es $\bar{H} = 0$

$$\begin{aligned} \ln f &= (z-1) [\ln \cosh \alpha - \ln \cosh \gamma] & \alpha &= \beta(J + \bar{H}) \\ & & \gamma &= \beta(J - \bar{H}) \\ \frac{d \ln f}{d\bar{H}} &= (z-1) \left[\frac{\sinh \alpha}{\cosh \alpha} + \frac{\sinh \gamma}{\cosh \gamma} \right] \beta \end{aligned}$$

Si evaluamos la derivada en el origen, $\bar{H} = 0 \implies \alpha(\bar{H} = 0) = \gamma(\bar{H} = 0) = \beta J$

$$\left. \frac{d \ln f}{d\bar{H}} \right|_{\bar{H}=0} = (z-1)\beta 2 \tanh \beta J$$

Hay soluciones para $\bar{H} \neq 0$ si $(z-1)\beta 2 \tanh \beta J > 2\beta$

La única solución es $\bar{H} = 0$ si $(z-1)\beta 2 \tanh \beta j < 2\beta$

$$\implies \text{Punto crítico} \quad (z-1)2\beta_c \tanh \beta_c J = 2\beta_c$$

$$\implies \tanh \beta_c J = \frac{1}{z-1}$$

$$\text{Si } z = 4 \text{ (Red Cuadrada)} \implies \beta_c(z=4) = \frac{1}{J} \tanh^{-1} \left(\frac{1}{3} \right)$$

$$\implies \frac{KT_c}{J} = 2,888 \quad (\text{para } z = 4, \text{ el resultado exacto es } 2.269)$$

$$\text{Si } z = 2 \text{ (Cadena de } 1-d) \implies \beta_c(z=1) = \frac{1}{J} \tanh^{-1}(1) = \infty$$

$$\implies KT_c(z=2) = 0 \quad \checkmark$$

Se pueden conseguir resultados mejores para T_c aumentando el tamaño del cluster, pero si calculamos los exponentes críticos nos darán los mismos que con campo medio, ya que cerca del punto crítico las fluctuaciones son enormes, y este modelo siempre limita las correlaciones.

[Note que podemos decir en ésta aproximación que $\bar{H} = 3J\langle S \rangle + H$, ya que cada uno de los espines j de (1), sienten un campo debido a los otros 3 vecinos que no se han considerado y el campo externo]

2. Ejemplos:

2.1. Antiferromagneto de Ising en 2-d (Campo medio)

$$\mathcal{H} = -J' \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i \quad \text{Ahora } J' < 0, J = -J'$$

Del caso general que ya resolvimos, utilizando la aproximación de campo medio si $H = 0$

$$m = \langle S \rangle = \tanh[-Jz\langle S \rangle] = -\tanh[Jz\langle S \rangle]$$

Única solución es $m = 0$. El problema es que en éste caso m no es un buen parámetro de orden, y que tanto en la fase ordenada como en la desordenada, $m = 0$. El problema es considerar que todos los espines son equivalentes.

Consideremos una red en que se alternan espines de “Tipo A” y espines de de “Tipo B”

A B A B A B
 B A B A B A
 A B A B A B
 B A B A B A

Los espines vecinos del Tipo A son todos del Tipo B y viceversa

$$Z = \left\{ \sum_{S_A} e^{\beta(H - Jz\langle S_B \rangle)S_A} \right\}^{\frac{N}{2}} \left\{ \sum_{S_B} e^{\beta(H - Jz\langle S_A \rangle)S_B} \right\}^{\frac{N}{2}}$$

Donde ya hemos aplicado la aproximación de campo medio

$$\mathcal{H} \approx -\bar{h}_A \sum S_A - \bar{h}_B \sum S_B$$

$$N_A = N_B = \frac{N}{2}$$

Donde h_i es el campo medio que siente un espin de Tipo i debido a sus z vecinos que son de Tipo j

$$\bar{h}_A = H - Jz\langle S_B \rangle, \quad \bar{h}_B = H - Jz\langle S_A \rangle$$

$$Z = [2 \cosh \beta \bar{h}_A]^{\frac{N}{2}} [2 \cosh \beta \bar{h}_B]^{\frac{N}{2}}$$

$$m_A = \langle S_A \rangle = \frac{1}{N_A \beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial \bar{h}_A}; \quad m_B = \langle S_B \rangle = \frac{1}{N_B \beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial \bar{h}_B}$$

$$m_A = \tanh [\beta(H - JZm_B)]$$

$$m_B = \tanh [\beta(H - JZm_A)]$$

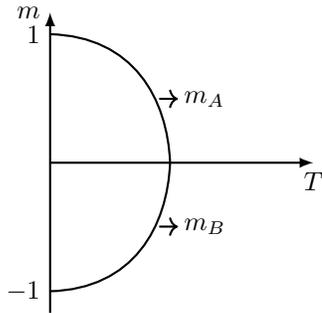
Ahora asumimos que si $H = 0$ (válido solo en éste caso),

$$m_A = -m_B = m'$$

Entonces $m' = \tanh(\beta Jz m') \rightarrow$ La misma ecuación que para el caso ferromagnético, pero ahora para cada subred

$$\beta_c = \frac{1}{Jz}, \quad \text{ahora } m = m_A + m_B = 0 \quad \forall T$$

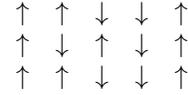
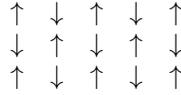
Cada subred presenta una transición a T_c



Si $H = 0$

$T < T_c$ sist está ordenado

$T > T_c$ desordenado



Si $H \neq 0$ no es correcto asumir que $m_A = -m_B = m'$, ya que el campo externo favorece un alineamiento

$$m_A = \tanh [\beta(H - Jzm_B)] \quad ; \quad m_B = \tanh [\beta(H - Jzm_A)]$$

$$m = m_A + m_B$$

$$\chi_A = \left. \frac{\partial m_A}{\partial H} \right|_{H=0} = \text{sech}^2 [\beta Jzm_B] [1 - \beta Jz\chi_B] \quad \text{Si } H = 0$$

$$\chi_B = \left. \frac{\partial m_B}{\partial H} \right|_{H=0} = \text{sech}^2 [\beta Jzm_A] [1 - \beta Jz\chi_A]$$

Pero como cuando $H = 0 \quad m_A = -m_B = m'$

$$\implies \chi_A = \left. \frac{\partial m_A}{\partial H} \right|_{H=0} = - \left. \frac{\partial m_B}{\partial H} \right|_{H=0} = -\chi_B \quad (H = 0)$$

$$\implies \chi_A = \text{sech}^2 [\beta Jzm'] [1 + \beta Jz\chi_A]$$

$$\chi_A [1 - \beta Jz \text{sech}^2(\beta Jzm')] = \text{sech}^2 [\beta Jzm'] \tag{4}$$

Cerca del punto crítico, $m' \approx 0$

$$\text{sech}^2(\beta Jzm') \approx [1 - (\beta Jzm')^2]^2 \approx 1 - 2(\beta Jzm')^2$$

$$\implies \chi_A(1 - \beta Jz) \approx (1 - 2\beta^2 J^2 z^2 m'^2)$$

Pero $Jz = \frac{1}{\beta_c} \quad \beta Jz = \frac{T_c}{T} \quad , \quad 1 - \frac{T_c}{T} = t$

$$\chi_A t \approx 1 \implies \chi_A \sim t^{-1}$$

El exponente crítico para $\chi(H = 0) \sim t^{-\gamma}$

$$\implies \gamma = 1 \rightarrow \text{Resultado campo medio}$$

Note que en éste caso el parámetro de orden sería $p = \frac{1}{2}(m_A - m_B)$

$$\text{Si } \begin{matrix} T < T_c & p \neq 0 \\ T > T_c & p = 0 \end{matrix} \quad p(T = 0) = \pm 1 \quad (H = 0)$$

2.2. Transición líquido-gas. gas de Van der Waals.

La ecuación de *Van der Waals* puede considerarse como una Teoría de campo medio para las transiciones líquido-gas.

Recordemos que ésta ecuación es una mejora de la ecuación del gas ideal, toma en cuenta que las moléculas no son puntuales, si no que tienen un volumen b , y que entre las moléculas hay un potencial repulsivo si $r < r_0$. Débilmente atractivo si $r > r_0$.

Éste es realmente el potencial promedio que siente una molécula debida al efecto de las otras. La ecuación de gas ideal se modifica de la forma

$$p = \frac{NKT}{V - Nb} - \left(\frac{N^2}{V^2}\right)a^2$$

El $V - Nb$ viene de la corrección de que las moléculas ocupan un espacio finito Nb , por lo que el volumen "real" que dispone cada molécula es menor, y el término negativo toma en cuenta que la presión que ejercen las paredes del contenedor es menor debido a la atracción molecular, y proporcional a la densidad al cuadrado.

En física estadística I vimos que la ecuación de *Van der Waals* se podía escribir como

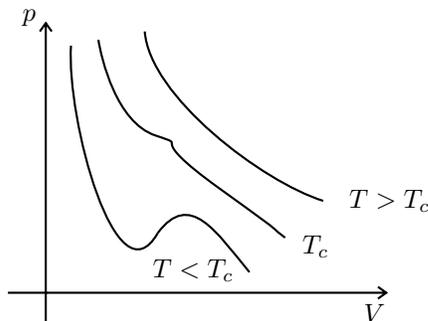
$$\left(\bar{p} + \frac{3}{\bar{V}^2}\right) \left(\bar{V} - \frac{1}{3}\right) = \frac{8}{3}\bar{T} \quad * \quad \left(\bar{p} + \frac{3}{\bar{V}^2}\right) = \frac{8}{3}\bar{T} \left(\bar{V} - \frac{1}{3}\right)^{-1}$$

Vamos a ver que ésta ecuación proviene de una aproximación tipo campo medio para transiciones líquido-gas. Es decir se obtienen de minimizar una energía libre tipo *Landau* con respecto a un parámetro de orden

* Se puede obtener de una energía libre F , tal que

$$\left. \frac{\partial F}{\partial V} \right|_{T,p} = 0 \quad \text{Integrando * respecto a } V$$

$$F(T, p, V) = pV - \frac{3}{V} - \frac{8}{3}T \ln \left(V - \frac{1}{3}\right) + C(T, p)$$



- Si $T < T_c$ hay dos valores de p el mismo volumen (coexistencia líquido-gas)
- Si $T = T_c$ ocurre una transición de fase

[Recordemos que cuando $T < T_c$, hay una región en que $\frac{\partial p}{\partial V} > 0$, lo que viola el criterio de estabilidad, esto se corrige con la construcción de *Maxwell-Estad I*]

Para fluidos. Exponentes críticos-Transición gas \leftrightarrow líquido

$$\begin{aligned}\kappa_T &\sim (T - T_c)^{-\gamma} \\ \delta_\ell(T) - \delta_g(T) &= (T - T_c)^\beta, \quad \delta_\ell - \delta_g = \text{parámetro de orden} \\ C_V &\sim (T - T_c)^\alpha \quad p - p_c \sim (\delta - \delta_c)^\delta \\ H, M, T &\longrightarrow p, V, T\end{aligned}$$

Minimizando F respecto de \bar{V}

$$\frac{\partial F}{\partial \bar{V}} \Big|_T = 0, \quad \frac{\partial^2 F}{\partial \bar{V}^2} \Big|_t > 0 \quad \text{Recordemos que en el punto crítico } \bar{V}_c = \bar{T}_c = \bar{p}_c = 1$$

$$\Rightarrow \bar{p} + \frac{3}{\bar{V}^2} - \frac{8}{3} \bar{T} \frac{1}{\bar{V} - \frac{1}{3}} = 0$$

Tiene dos soluciones si $\bar{T}_c < \bar{T}$

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{V}} - \frac{6}{\bar{V}^3} + \frac{8}{3} \bar{T} \frac{1}{(\bar{V} - \frac{1}{3})^2} > 0$$

En el punto crítico la segunda derivada es cero

$$\Rightarrow \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{V}} = \frac{6}{\bar{V}^3} - \frac{8}{3} \bar{T} \frac{1}{(\bar{V} - \frac{1}{3})^2}$$

Supongamos que $\bar{V} = 1$, y nos aproximamos al punto crítico desde $\bar{T} > 1$ ($\bar{T} > \bar{T}_c = 1$)

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{V}} \Big|_{\bar{T} \gtrsim \bar{T}_c} \approx 6 - \frac{8}{3} \frac{\bar{T}}{(1 - \frac{1}{3})^2} = 6(1 - \bar{T}) = 6(\bar{T}_c - \bar{T}) ; 1 = \bar{T}_c$$

$$= 6(-t)$$

$$\kappa_T = -\frac{1}{\bar{V}} \frac{\partial \bar{V}}{\partial \bar{p}} \sim t^{-\gamma} \quad \text{Cerca del punto crítico (compresibilidad)}$$

\Rightarrow Con ésta aproximación Tipo campo medio $\gamma = 1$

κ_T es el equivalente a χ

Cerca del punto crítico, $\bar{T} \gtrsim 1$, hay una sola solución para v

Definimos

$$\begin{aligned} \bar{T} &= 1 + t \\ \bar{p} &= 1 + p \\ \bar{V} &= 1 + v \end{aligned} \quad \bar{V}_c = \bar{T}_c = \bar{p}_c = 1$$

La ecuación de *Van der Waals*

$$\left[(1+p) + \frac{3}{(1+v)^2} \right] \left[1+v - \frac{1}{3} \right] = \frac{8}{3}(1+t)$$

$$\Rightarrow v^3 + p(1+v)^3 = \frac{1}{3}(p+8t)(1+v)^2$$

Si $t = 0$, y v es pequeño

$$v^3 + p \approx \frac{1}{3}p \Rightarrow p \approx -\frac{3}{2}v^3 \quad t > 0$$

$$p \sim (-v)^3 \Rightarrow \delta = 3$$

Isoterma crítica ($t = 0$)