

1.3.4 Aproximación de Campo Medio - Método variacional.

Como veremos mas adelante, el modelo de Ising también puede resolverse de manera exacta en dos dimensiones, si bien su solución es muchísimo mas complicada que en el caso unidimensional. En tres dimensiones no se conoce la solución exacta de este modelo hasta hoy.

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 constituye la base de una teoría fenomenológica del ferromagnetismo. El mismo, conocido como *aproximación ó teoría de campo medio* se basa en el concepto de *campo efectivo ó molecular*.

Consideremos el Hamiltoniano de Ising en dimensión arbitraria

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (126)$$

Cada spin interactúa con un campo local

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

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 sitios i . Esta 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

$$\langle h_i \rangle = J \sum_{j \text{ nn } i} \langle \sigma_j \rangle + B \quad (127)$$

Para una red infinita homogénea y anisotrópica la cantidad $\langle \sigma_j \rangle$ es independiente del sitio j y por lo tanto $\langle \sigma_j \rangle = m$, donde

$$m = \frac{1}{N} \sum_i \langle \sigma_i \rangle \quad (128)$$

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

$$B_{ef} = Jqm + B \quad (129)$$

donde q es el número de primeros vecinos, conocido como *número de coordinación*, el cual es constante para una red regular ó red de Bravais. Este número depende de la dimensión, siendo $q = 2$ para $d = 1$, $q = 4$ para una red cuadrada, etc..

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

$$Z_1 = \sum_{\sigma=\pm 1} e^{\beta B \sigma} = 2 \cosh(\beta B) \quad (130)$$

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

$$m = \langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{Z_1} \sum_{\sigma=\pm 1} \sigma e^{\beta B \sigma} = \tanh(\beta B) \quad (131)$$

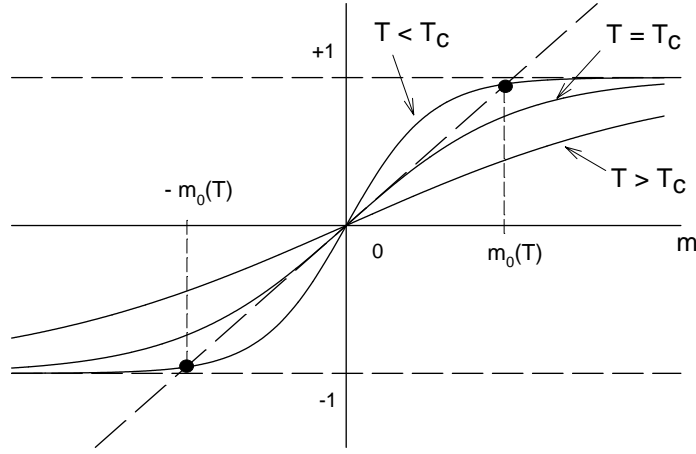


Figura 3: Soluciones gráficas de la ecuación de Curie-Weiss.

Reemplazando la expresión para el campo efectivo (129) arribamos a una ecuación *autoconsistente* para m

$$m = \tanh [\beta (Jqm + B)] \quad (132)$$

que es conocida como *ecuación de Curie-Weiss*, ya que fué derivada independientemente usando otro método por Pierre Curie. Esta es una ecuación trascendente, la cual debe resolverse numéricamente a fin de obtener la ecuación de estado $m = m(T, B)$. Para $B = 0$ es facil analizar las soluciones gráficamente. De la figura (3) vemos que $m = 0$ es siempre solución de

$$m = \tanh (\beta Jqm) \quad (133)$$

Por otra parte, la derivada de la ecuación anterior en $m = 0$ es igual βJq . Vemos entonces que para $\beta Jq > 1$ aparecen otras dos soluciones simétricas $m = \pm m_0$ con $m_0 > 0$. En otras palabras, por debajo de la temperatura crítica

$$T_c = \frac{Jq}{k_B} \quad (134)$$

el sistema presenta magnetización *finita* en ausencia de campo externo. La solución numérica de la ecuación de Curie-Weiss a campo nulo puede verse en la figura (4).

Podemos entonces calcular los exponentes críticos en esta aproximación. Recordemos que los exponentes críticos se definen a partir de los comportamientos asintóticos cerca del punto crítico

$$m \sim (-t)^\beta \quad \text{para } T < T_c$$

$$\chi_0 \sim |t|^{-\gamma}$$

etc, donde $t \equiv (T - T_c)/T_c$. Cerca del punto crítico $m \ll 1$. Invirtiendo la ecuación (133) y desarrollando en serie de potencias en torno de $m = 0$ tenemos

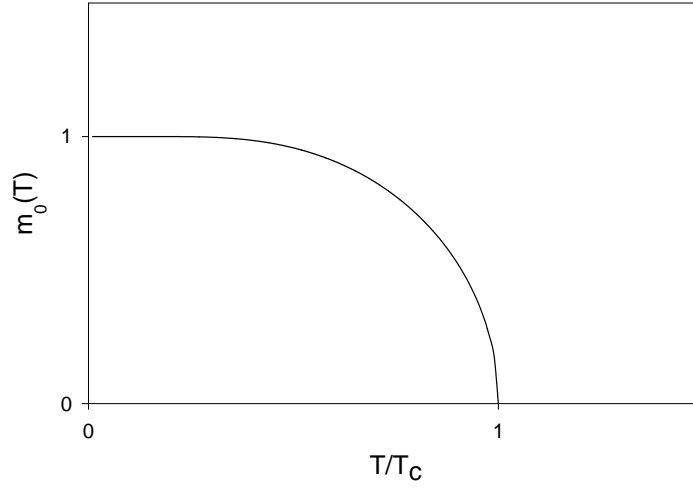


Figura 4: Ecuación de estado a campo nulo $m = m_0(T)$ en la aproximación de campo medio.

$$\frac{\beta}{\beta_c} m = \tanh^{-1} m = m + \frac{1}{3} m^3 + \frac{1}{5} m^5 + \dots \quad (135)$$

Reteniendo hasta el orden cúbico en el desarrollo nos queda

$$\frac{T_c}{T} m = m + \frac{1}{3} m^3$$

de donde $m^2 \approx -3t$, esto es

$$m(T, B = 0) \sim \sqrt{3} (-t)^{1/2}$$

El esponente crítico para el parámetro de orden resulta $\beta = 1/2$. En forma semejante puede obtenerse que $\gamma = 1$. Estos valores difieren en gran medida de los observados experimentalmente para la mayoría de los sistemas y, como veremos mas adelante, de los valores exactos en dos y tres dimensiones. Mas aún, la teoría de campo medio predice una transición de fase en cualquier dimensión con exponentes críticos que no dependen de la misma. Esto es incorrecto ya que los exponentes exactos dependen de la dimensión y ademas sabemos que en una dimensión el sistema ni siquiera presenta transición de fase. No obstante, la solución obtenida describe de manera cualitativamente correcta el fenómeno en dimensiones mayores.

Analizaremos a continuación la energía libre. De la Ec.(130) tenemos que

$$f(T, B) = -\frac{k_B T}{N} \ln Z = -k_B T \ln Z_1 = -k_B T \ln \{2 \cosh [\beta (J q m + B)]\} \quad (136)$$

A campo nulo $B = 0$ tenemos entonces que

$$f(T, 0) = \begin{cases} -k_B T \ln 2 & \text{para } T > T_c \\ -k_B T \ln \left\{ 2 \cosh \left(\frac{\beta}{\beta_c} m_0 \right) \right\} & \text{para } T \leq T_c \end{cases} \quad (137)$$

donde $m_0(T)$ es solución de la Ec.(133). Un análisis detallado de esta solución nos muestra que esta energía libre tiene la forma que se muestra en la figura (5). Vemos que para $T < T_c$ f es una función convexa de T , violando por lo tanto el criterio de estabilidad termodinámica! Significa esto que toda la aproximación esta mal? Veremos a continuación que en realidad la ecuación de Curie Weiss puede derivarse también utilizando un método variacional, el cual dá la expresión correcta para la energía libre.

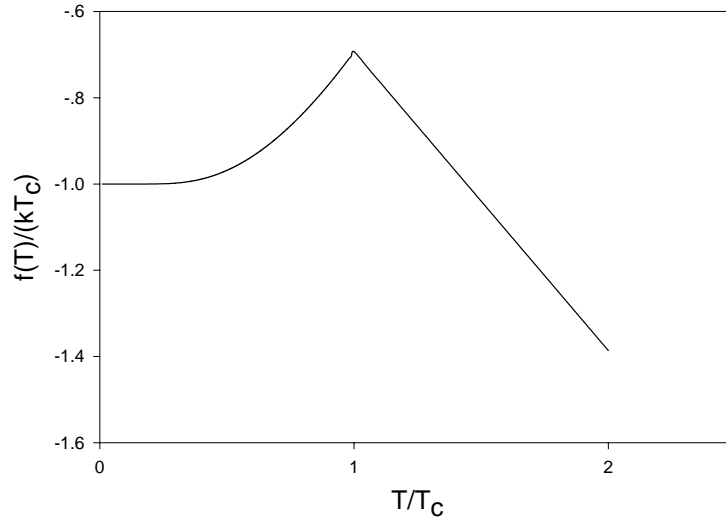


Figura 5: Energía libre en la aproximación de Weiss.

Consideremos la siguiente cota para la función exponencial

$$e^x \geq 1 + x.$$

Sea g una variable aleatoria. Se cumple entonces que

$$\langle e^g \rangle = e^{\langle g \rangle} \langle e^{g - \langle g \rangle} \rangle \geq e^{\langle g \rangle} \langle 1 + g - \langle g \rangle \rangle = e^{\langle g \rangle}$$

Es decir

$$\langle e^g \rangle \geq e^{\langle g \rangle} \quad (138)$$

Sea H_0 un Hamiltoniano (de spines) de prueba, esto es, un Hamiltoniano para el cual conocemos como calcular su función partición

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

Tenemos que

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H} = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta(H-H_0)} e^{-\beta H_0} = Z_0 \langle e^{-\beta(H-H_0)} \rangle_0$$

donde

$$\langle \dots \rangle_0 \equiv \frac{1}{Z_0} \sum_{\{\sigma_i\}} \dots e^{-\beta H_0}$$

Usando la cota (138) tenemos que

$$Z \geq Z_0 e^{-\beta \langle H-H_0 \rangle_0}$$

de donde la energía libre satisface

$$f \leq f_0 + \frac{1}{N} \langle H - H_0 \rangle_0 \quad (139)$$

Esta desigualdad, la cual vale para un Hamiltoniano H_0 *arbitrario*, se conoce como *desigualdad de Bogoliubov-Peierls* y puede demostrarse que vale incluso para sistemas cuánticos. Elijamos ahora H_0 como un Hamiltoniano de spines independientes

$$H_0 = -\eta \sum_i \sigma_i$$

donde η es un parámetro a determinar. De esta manera la cantidad

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

resulta una función del parámetro η . La energía libre exacta resulta ser una cota inferior $f \leq \Phi(\eta)$ para cualquier valor de η . Así, la mejor aproximación a f la obtendremos eligiendo el valor de η que minimice $\Phi(\eta)$. Podemos entonces definir la energía libre en la aproximación de campo medio como

$$f_{mf}(T, B) = \min_{\eta} \Phi(\eta) \quad (140)$$

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

$$f_0 = -k_B T \ln [2 \cosh (\beta \eta)]$$

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

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

$$\langle H \rangle_0 = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_0$$

Dado que H_0 es un Hamiltoniano de spines independientes tenemos que

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_0 = \langle \sigma_i \rangle_0 \langle \sigma_j \rangle_0 = m_0^2$$

de donde

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

Reuniendo todo esto tenemos

$$\Phi(\eta) = -\frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh (\beta \eta)] - \frac{Jq}{2} m_0^2 + \eta m_0 \quad (141)$$

Si minimizamos esta expresión obtenemos

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

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

$$\eta = Jq m_0$$

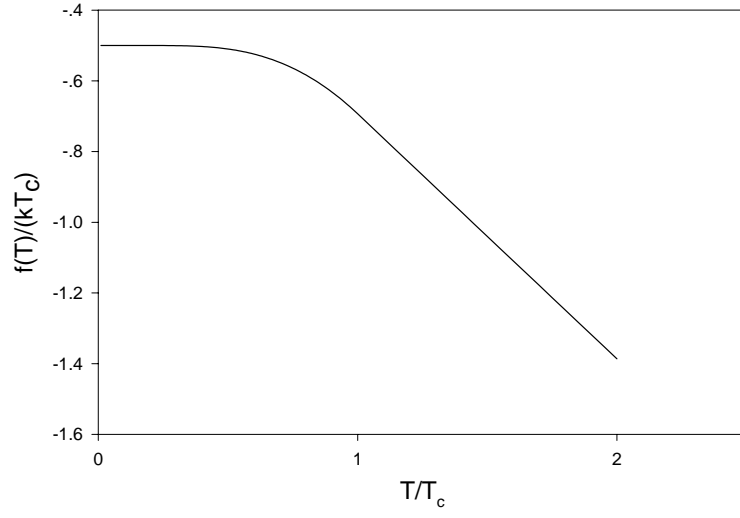


Figura 6: Energía libre en la aproximación de campo medio obtenida mediante el método variacional.

de donde obtenemos nuevamente la ecuación de Curie-Weiss.

$$m_0 = \tanh(\beta J q m_0).$$

Reemplazando esta solución en la Ec.(141) obtenemos finalmente la expresión para la energía libre

$$f_{mf}(T, B = 0) = -\frac{1}{\beta} \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\beta}{\beta_c} m_0 \right) \right] + \frac{1}{2\beta_c} m_0^2 \quad (142)$$

la cual se muestra en la figura (6). Vemos que la misma satisface los criterios de estabilidad termodinámica para toda T .