Problema 1: Campo medio

El Hamiltoniano del modelo de Ising con interacciones de cuatro spines en una red cuadrada es:

$$H = -J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_4 \sum_I \sigma_{I1} \sigma_{I2} \sigma_{I3} \sigma_{I4}, \tag{1}$$

donde la suma sobre I es sobre todos los cuadrados elementales de la red y $J_2, J_4 > 0$.

(a) Desarrolle una aproximación de campo medio para este problema utilizando el método variacional. Para ello obtenga una funcional variacional del parámetro de orden m (magnetización por spin).

(b) Obtenga la ecuación de estado para campo externo nulo.

(c) Calcule el diagrama de fases en las variables T/J_2 y J_4/J_2.

Solución

Proponemos el hamiltoniano de prueba de spines no interactuantes

$$H_0 = -\eta \sum_i \sigma_i \tag{2}$$

y utilizamos la desigualdad de Bogoliuvob-Peierls:

$$f \leq f_\rho = f_0 + \frac{1}{N} \langle H - H_0 \rangle_0. \tag{3}$$

Calculamos la función de partición para el hamiltoniano de prueba:

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}_0 &= \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta H_0} \\
&= \sum_{\{s_i\}} \exp\left[\beta\eta \sum_i s_i\right] \\
&= \sum_{\{s_i\}} \prod_i e^{\beta\eta s_i} \\
&= \prod_i \sum_{s_i = \pm 1} e^{\beta\eta s_i} \\
&= \left[e^{-\beta\eta} + e^{\beta\eta}\right]^N \\
&= \left[2\cosh(\beta\eta)\right]^N \\
&= \mathcal{Z}_{01}^N,
\end{aligned} \tag{4}$$

donde

$$\mathcal{Z}_{01} = 2\cosh(\beta\eta). \tag{5}$$

La energía libre asociada al hamiltoniano de prueba es entonces

$$\begin{aligned}
f_0 &= -\frac{1}{\beta N} \ln \mathcal{Z}_0 \\
&= -\frac{1}{\beta} \ln\left[2\cosh(\beta\eta)\right]
\end{aligned} \tag{6}$$

Calculamos la magnetización:

$$
\begin{aligned}
m_0 &= \langle s_i \rangle_0 \\
&= \frac{1}{\mathcal{Z}_{01}} \sum_{s_i=\pm 1} s_i e^{\beta \eta s_i} \\
&= \frac{1}{\mathcal{Z}_{01}} \left[-e^{-\beta\eta} + e^{\beta\eta} \right] \\
&= \tanh\left(\beta\eta\right)
\end{aligned} \tag{7}
$$

Valores medios de los hamiltonianos respecto del hamiltoniano de prueba:

$$
\begin{aligned}
\langle H_0 \rangle_0 &= -\eta \sum_i \langle s_i \rangle_0 \\
&= -\eta N m_0.
\end{aligned} \tag{8}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle H \rangle_0 &= -J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} \langle s_i s_j \rangle_0 - J_4 \sum_I \langle \sigma_{I1} \sigma_{I2} \sigma_{I3} \sigma_{I4} \rangle_0 \\
&= -J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} \langle s_i \rangle_0^4 - J_4 \sum_I \langle \sigma_{I1} \rangle_0^4 \\
&= -2 J_2 N m_0^2 - J_4 N m_0^4.
\end{aligned} \tag{9}
$$

Proponemos la función variacional

$$
\begin{aligned}
\Phi(\eta) &= f_0 + \frac{1}{N} \langle H - H_0 \rangle_0 \\
&= -\frac{1}{\beta} \ln\left[2\cosh\left(\beta\eta\right)\right] - 2 J_2 m_0^2 - J_4 m_0^4 + \eta m_0
\end{aligned} \tag{10}
$$

La energía libre en la aproximación de campo medio está dada por la expresión que minimiza la función $\Phi(\eta)$ con respecto a η. Es decir,

$$
f_{\mathrm{mf}}(T, B) = \min_\eta \Phi(\eta). \tag{11}
$$

Derivamos con respecto a η e igualamos a cero para hallar el mínimo

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} &= -\tanh\left(\beta\eta\right) - 4 J_2 m_0 \frac{\partial m_0}{\partial \eta} - 4 J_4 m_0^3 \frac{\partial m_0}{\partial \eta} + m_0 + \eta \frac{\partial m_0}{\partial \eta} \\
&= \left(\eta - 4 J_2 m_0 - 4 J_4 m_0^3\right) \frac{\partial m_0}{\partial \eta},
\end{aligned} \tag{12}
$$

donde usamos la igualdad 7.

La expresión anterior implica que la solución al problema variacional es

$$
\eta = 4 J_2 m_0 + 4 J_4 m_0^3. \tag{13}
$$

Reemplazando el valor de η en 7, obtenemos la ecuación de estado a campo nulo

$$
m_0 = \tanh\left[\beta(4 J_2 m_0 + 4 J_4 m_0^3)\right]. \tag{14}
$$

Para simplificar notación en el resto del desarrollo, definimos las variables $\tilde{\beta} \equiv 4 J_2 \beta$ y $J \equiv J_4/J_2$. De este modo, la ecuación anterior queda

$$m_0 = \tanh\left[\tilde{\beta}(m_0 + Jm_0^3)\right]. \tag{15}$$

Utilizando 10 y 13, tenemos

$$f_{\mathrm{mf}}(T, B=0) = -\frac{1}{\beta}\ln\left[2\cosh\left(\beta(4J_2 m_0 + 4J_4 m_0^3)\right)\right] + 2J_2 m_0^2 + 3J_4 m_0^4. \tag{16}$$

Reescalamos la energía en unidades de J_2, definiendo $\tilde{f}_{\mathrm{mf}} \equiv f_{\mathrm{mf}}/J_2$. Así obtenemos

$$\tilde{f}_{\mathrm{mf}}(T, B=0) = -4\tilde{\beta}^{-1}\ln\left[2\cosh\left(\tilde{\beta}(m_0 + Jm_0^3)\right)\right] + 2m_0^2 + 3Jm_0^4. \tag{17}$$

Haciendo un desarrollo de Taylor a orden 6,

$$\begin{aligned}\tilde{f}_{\mathrm{mf}}(T, B=0) = a_0 + 2(1-\tilde{\beta})m_0^2 + \left(3J - 4J\tilde{\beta} + \frac{\tilde{\beta}^3}{3}\right)m_0^4 \\ + \left(-2J^2\tilde{\beta} + \frac{4J\tilde{\beta}^3}{3} - \frac{4\tilde{\beta}^5}{45}\right)m_0^6 + \mathcal{O}(m_0^8)\end{aligned} \tag{18}$$

donde $a_0 = -4\ln(2)/\tilde{\beta}$ es un término aditivo que resulta irrelevante. Vemos entonces que la energía libre queda expresada en forma de función de Landau

$$\tilde{f}_{\mathrm{mf}}(T, B=0) = a_0 + \frac{a_2}{2}m_0^2 + \frac{a_4}{4}m_0^4 + \frac{a_6}{6}m_0^6 + \mathcal{O}(m_0^8), \tag{19}$$

con coeficientes

$$\begin{aligned}a_2(T,J) &= 4(1-\tilde{\beta}) \\ a_4(T,J) &= 4\left(3J - 4J\tilde{\beta} + \frac{\tilde{\beta}^3}{3}\right) \\ a_6(T,J) &= 6\left(-2J^2\tilde{\beta} + \frac{4J\tilde{\beta}^3}{3} - \frac{4\tilde{\beta}^5}{45}\right)\end{aligned}$$

Para construir el diagrama de fases, comencemos analizando si existe transición de segundo orden. La línea de segundo orden se obtiene cuando $a_2 = 0$ y $a_4 > 0$. De la primera condición, obtenemos que $\tilde{\beta}_c = 1$, mientras que de la segunda,

$$J < \frac{\tilde{\beta}_c^3}{3(4\tilde{\beta}_c - 3)} = \frac{1}{3}. \tag{20}$$

De la definición de $\tilde{\beta}$, se deduce que $k_B T/J_2 = 4/\tilde{\beta}$, por lo que la temperatura crítica satisface $k_B T_c/J_2 = 4$. La línea de segundo orden se muestra como línea sólida en el gráfico de la figura 1. En particular, vemos que para $J_4 = 0$, $k_B T_c = 4J_2$, que es el resultado para la aproximación variacional del modelo de Ising a primeros vecinos.

La línea de segundo orden termina en el punto tricrítico, el cual se ubica en $(\tilde{\beta}_t, J_t) = (1, 1/3)$. A partir de allí, comienza la línea de primer orden que, suficientemente cerca al punto tricrítico, consiste en los puntos $(\tilde{\beta}, J)$ que satisfacen

$$a_4(T,J) = -\frac{\sqrt{a_2(T,J)\, a_6(T,J)}}{3}, \tag{21}$$

junto con las condiciones $a_2 > 0$ y $a_6 > 0$. La línea punteada de la figura 1 representa la línea de primer orden.

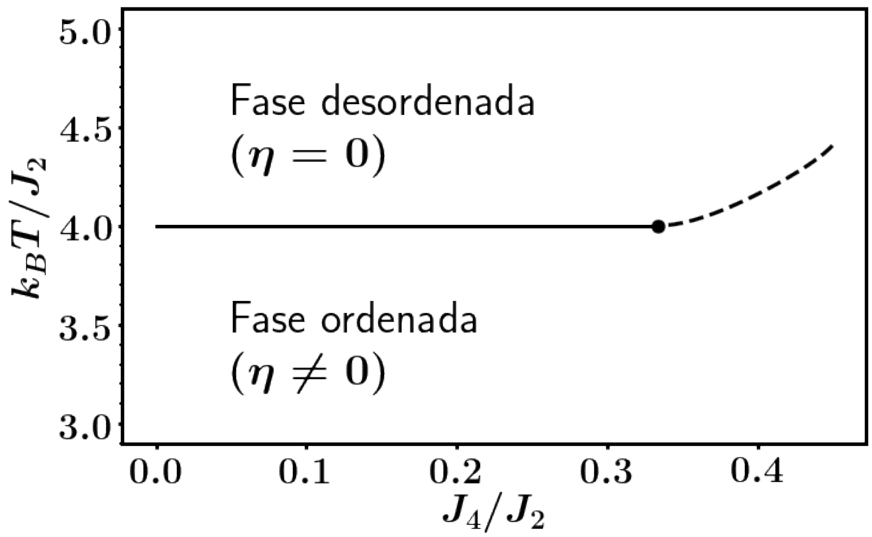

Figure 1: Diagrama de fases.

Problema 2: Grupo de renormalización

Utilizando el método de Niemeijer–Van Leeuwen calcule la temperatura crítica y todos los exponentes críticos del modelo de Ising en la red cuadrada, utilizando el desarrollo hasta primer orden en cumulantes con un bloque de Kadanoff de 4 sitios. En este caso la regla de la mayoría debe generalizarse para incluir el caso de empate, en el cual se asigna igual probabilidad a ambas orientaciones del spin de bloque. Compare los resultados obtenidos con los exactos.

Solución

El hamiltoniando (reducido) de Ising es

$$\mathcal{H} = K \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + h \sum_i s_i, \tag{22}$$

donde $\mathcal{H} \equiv -\beta H$ $K \equiv \beta J$ y $h \equiv \beta B$.

Renormalizamos utilizando bloques de Kadanoff cuadrados de 4 sitios. La regla de la mayoría puede expresarse como

$$P(s', s) = \prod_I P_I(s', s), \tag{23}$$

donde

$$P_I(s', s) = \frac{1}{2}\left[1 + S'_I \operatorname{sgn}(S_1^I + S_2^I + S_3^I + S_4^I)\right]. \tag{24}$$

Podemos ver que, en el caso de empate, la expresión anterior asigna la misma probabilidad a cada uno de los dos posibles valores del spin de bloque.

Descomponemos nuestro hamiltoniano en la forma

$$\mathcal{H}(s) = \mathcal{H}_0(s) + \mathcal{V}_0(s), \tag{25}$$

donde $\mathcal{H}_0(s)$ incluye sólo interacciones simétricas internas de cada bloque y $\mathcal{V}_0(s)$ incluye el resto de las interacciones. La función de partición interna puede expresarse como

$$\mathcal{Z}_0 = \sum_{\{s\}} P(s', s) e^{\mathcal{H}_0(s)} = \sum_I \mathcal{Z}_0^I, \tag{26}$$

donde

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}_0^I &= \sum_{s_i \epsilon I} \sum_{s_i = \pm 1} P_I(s', s) e^{\mathcal{H}_0(s)} \\
\mathcal{Z}_0^I &= 1 \times e^{4K} + 1 \times 4 + \frac{1}{2} \times 4 + \frac{1}{2} \times 2e^{-4K} \\
&= e^{4K} + 6 + e^{-4K} \\
&= 2\cosh(4K) + 6.
\end{aligned} \tag{27}$$

Como todos los spines del bloque son equivalentes, el promedio de spin de sitio es

$$\begin{aligned}
\langle S_i^I \rangle_0 &= \frac{1}{\mathcal{Z}_0} \sum_{\{s\}} P(s', s) e^{\mathcal{H}_0}(s) S_i^I \\
&= \frac{e^{4K} + 2}{\mathcal{Z}_0^I} S_I' \\
&= a(K) S_I',
\end{aligned} \tag{28}$$

donde

$$a(K) = \frac{e^{4K} + 2}{2\cosh(4K) + 6}. \tag{29}$$

El promedio del término no simétrico es

$$\langle \mathcal{V}(s) \rangle_0 = K \sum_{\langle I, J \rangle} \langle V_{IJ} \rangle_0 + 4h \sum_I \langle S_i^I \rangle_0, \tag{30}$$

donde

$$V_{IJ} = \sum_{\substack{\langle I, J \rangle / \\ i \epsilon I, j \epsilon J}} S_i S_j. \tag{31}$$

En el caso de bloques cuadrados de 4 sitios,

$$V_{IJ} = S_1^I S_4^J + S_2^I S_3^J. \tag{32}$$

Dado que la distribución de probabilidad $P(s', s) e^{\mathcal{H}_0}$ factoriza por bloques, podemos expresar

$$\langle V_{IJ} \rangle_0 = 2 \langle S_i^I \rangle_0 \langle S_i^J \rangle_0. \tag{33}$$

Luego,

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{V}(s) \rangle_0 &= 2K \sum_{\langle I, J \rangle} \langle S_i^I \rangle_0 \langle S_i^J \rangle_0 + 4h \sum_I \langle S_i^I \rangle_0 \\
&= 2K a^2(K) \sum_{\langle I, J \rangle} S^I S^J + 4a(K) h \sum_I S^I
\end{aligned} \tag{34}$$

Las ecuaciones de renormalización son entonces

$$K' = 2K\, a^2(K) \tag{35}$$
$$h' = 4h\, a(K) \tag{36}$$

Calculamos K^* en el subespacio invariante $h = 0$:

$$a^2(K^*) = \frac{1}{2} \tag{37}$$
$$e^{4K} + 2 = \frac{\sqrt{2}}{2}\Big(2\cosh(4K) + 6\Big) \tag{38}$$

Definimos $u \equiv e^{4K}$, entonces

$$u + 2 = \frac{\sqrt{2}}{2}\Big(u + u^{-1} + 6\Big) \tag{39}$$
$$\left(1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\right)u^2 + \Big(2 - 3\sqrt{2}\Big)u - \frac{\sqrt{2}}{2} = 0 \tag{40}$$

La única solución física (con $u > 1$) es $u^* = 1 + 2\sqrt{2} + \sqrt{5(2+\sqrt{2})}$. Luego,

$$K^* = \frac{\log\left[1 + 2\sqrt{2} + \sqrt{5(2+\sqrt{2})}\right]}{4} \simeq 0.5186. \tag{41}$$

Por las relaciones de paridad, que se pueden chequear directamente de las ecuaciones de renormalización, la matriz jacobiana es diagonal e igual a

$$\mathcal{L}_b = \begin{pmatrix} b^{y_T} & 0 \\ 0 & b^{y_B} \end{pmatrix},$$

donde

$$b^{y_T} = \left(\frac{\partial K'}{\partial K}\right)_{K^*, h=0} = 2a^2(K^*) + 4K^* a(K^*) a'(K^*) \tag{42}$$
$$b^{y_B} = \left(\frac{\partial h'}{\partial h}\right)_{K^*, h=0} = 4a(K^*) \tag{43}$$

Despejando y evaluando en K^*, y teniendo en cuenta que $b = 2$, tenemos

$$y_T = \frac{\log\left[\left(\frac{\partial K'}{\partial K}\right)_{K^*, h=0}\right]}{\log(b)} = 1.006 \tag{44}$$
$$y_B = \frac{\log\left[\left(\frac{\partial h'}{\partial h}\right)_{K^*, h=0}\right]}{\log(b)} = 3/2 \tag{45}$$

Una vez obtenidos los exponentes y_T y y_B, todos los demás exponentes se pueden calcular utilizando las relaciones entre exponentes

Comparación entre exponentes		
Magnitud	GR	Exacto
K^*	0.5186	0.4409
y_T	1.006	1
y_B	1.500	1.875
ν	0.9941	1
α	0.0117	0
β	0.4971	0.125
γ	0.9941	1.75
δ	3	15

Table 1: Comparación de exponentes y temperatura crítica entre el método propuesto de grupo de renormalización y los valores exactos.

$$\nu = \frac{1}{y_T} = 0.9941 \tag{46}$$

$$\alpha = \frac{2dy_T - 1}{y_T} = 0.0117 \tag{47}$$

$$\beta = \frac{d - y_B}{y_T} = 0.4971 \tag{48}$$

$$\gamma = \frac{2y_B - d}{y_T} = 0.9941 \tag{49}$$

$$\delta = \frac{y_B}{d - y_B} = 3. \tag{50}$$

En la tabla 1 se muestra la comparación con los valores obtenidos mediante este método y los valores exactos.