Mecánica Estadística II - Curso 2016
Práctica 6: Aproximación de Campo Medio

1 Preguntas previas.

a Explique, utilizando la teoría de ensambles y una medida de probabilidad sobre sus elementos, en qué consiste el método de campo medio.

b Explique por qué el método de campo medio aplicado a un problema con ruptura espontánea de simetría puede dar un valor de parámetro de orden no nulo aún al calcular el mismo en ausencia de un campo conjugado (puede tomar, como ejemplo, el caso del modelo de Ising Ferromagnético). Tenga en cuenta las simetrías presentes.

c Comente si espera que la teoría de campo medio pueda explicar un fenómeno basado en la inhomogeneidad del sistema, como por ejemplo la opalescencia crítica.

d Explique por qué en el caso ferromagnético, no espera que haya discontinuidades en ninguna propiedad cuando hay aplicado un campo magnético finito.

e Dibuje el diagrama de fases T vs B y las curvas B vs. M para el modelo de Ising, señalando la presencia o no de transiciones de fase de 1er o 2do orden. Compare similitudes y diferencias con los diagramas esperados para un fluido. Utilice lo aprendido al estudiar el gas de red.

f Pensando en la teoría de Weiss y en la susceptibilidad de un paramagneto: explique por qué la auto-consitencia lleva al orden sólo a bajas temperaturas.

g Interprete la solución gráfica de campo medio para un ferromagneto de spin 1/2 en términos de la magnetización M esperada para un paramagneto de Brioullin en función de un campo efectivo proporcional a M.

h En la interpretación anterior, es fácil entender que una fluctuación térmica en M cambia el campo efectivo (que a su vez, altera a M). Recordando que para $T < \theta$ las curvas se cruzan en tres puntos distintos, muestre gráficamente que la solución $M = 0$ es inestable, mientras que las otras dos son estables.

h Muestre cuantitativamente que no puede haber orden ferromagnético para un modelo de Ising para $D = 1$. Para ello, muestre la conveniencia en energía libre de introducir una pared de dominio a cualquier temperatura finita.

i Explique la teoría de Bethe. ¿Cuál es la condición de autoconsistencia?. ¿Da resultados correctos para $D = 1$? ¿Por qué? ¿Espera que eso se repita para $D = 2, 3$? ¿Para $D \to \infty$?

2 Problemas.

1. Utilizando el ensamble canónico, obtenga la ecuación de van de Waals a partir de un argumento similar al campo medio. En lugar de calcular y minimizar la energía libre de prueba utilizando una probabilidad $D = \prod_i D_i$, haremos un acercamiento similar a la teoría de Weiss o Hartree, acompañado de las siguientes suposiciones: i) imagine que las partículas de un sistema clásico no interactúan entre ellas, sino con un potencial efectivo dependiente de una sola coordenada $V_{ef}(\mathbf{r})$. ii) debido al carozo duro que existe en el potencial real $W(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$, $V_{ef}(\mathbf{r})$ toma valores sin cota dentro de un volumen $V_{ex} \propto N$ iii) debido a la parte atractiva del potencial $W(\mathbf{r_i} - \mathbf{r_j})$, $V_{ef}(\mathbf{r}) = u < 0$ (una constante)

en el resto del espacio. vi) La constante atractiva depende de la densidad de partículas: $u \propto N/V$. Qué exponentes críticos espera obtener, dentro de esta aproximación, para la el punto crítico de la transición líquido-gas?

2. Modelo de Ising 2D Ferromagnético.

   a) Resolver mediante el método variacional el modelo de Ising para un ferromagneto bidimensional. Determinar los exponentes críticos α, β, γ y δ. Estudiar el comportamiento de la entropía y del calor específico cerca de θ_C y a baja temperatura. Graficar.

   b) Utilizando el método de Bethe determinar la temperatura de transición θ_c^B en términso de la interacción J y el número de coordinación γ_v. Mostrar que en el límite $\gamma_v \to \infty$ $\theta_c^B \to \theta_c$.

   c) Notar que $\theta_c \to \infty$ cuando $\gamma_v \to \infty$. ¿ Qué suscede con la extensibidad del sistema? Relacionar este punto y el anterior con lo estudiado en el modelo completamente conectado.

3. Antiferromagnetismo en una red bipartita. Neél extendió la idea de campo molecular de Weiss al caso antiferromagnético. Supuso que, para una red bipartita, un dado spin de la subred A sentía un campo molecular debido sus primeros vecinos proporcional y opuesto a la magnetización de la otra subred, M_B (esto es, $B_A^{ef} = \mu_0(H - \lambda M_B/V)$).

   a) Resuelva como se hizo en la teoría para el caso ferromagnético, encontrando la temperatura de orden T_N y la ley de Curie-Weiss que describe la respuesta frente a un campo *uniforme* para un antiferro.

   b) Graficando la inversa de la susceptibilidad en función de T, explique como distinguiría experimentalmente entre un ferromagneto y un antiferro.

   c) Utilizando el desarrollo obtenido para cada M_i, calcule la dependencia del parámetro de orden antiferromagnético L como función de B. Muestre que, a diferencia de $M(B)$, se tratará de una función par, y explique sus consecuencias en cuanto a la respuesta esperada a campos bajos.

4. Antiferroagnetismo en sistemas frustrados. Los sistemas magnéticos en donde las interacciones entre los espines en una red son incompatibles con la geometría del cristal se los conoce como Sistemas Magnéticos Frustrados. Un triángiulo de tres espines de Ising que interactúan antiferromagnéticamente es el sistema más simple en donde se puede observar el fenómeno de frustración.

   (a) Discuta en caso de un triángulo de tres espines y muestre que el estado fundamental clásico no es único.

   (b) Si los espines son cuánticos. ¿ Cuál es el estado fundamental?

   (c) Para una red fcc de momentos magnéticos es imposible encontrar un arreglo antiferromagnético en donde todos los primeros vecinos de un dado sitio son antiparalelos a éste. Lo mejor (energéticamente hablando) es arreglar ocho espines antiparalelos y cuatro paralelos a cada sitio de la red. Desarrollar una teoría de campo medio para el caso en donde cada espín tiene z_a vecinos antiparalelos y z_p paralelos. Mostrar que el campo efectivo en la subred A es $\vec{B}_{eff}^A = \vec{B}_{loc} - \lambda_a \vec{M}_B - \lambda_p \vec{M}_A$ con una expresión similar para la subred B.

   (d) Mostrar que $\lambda_a/\lambda_p = z_a/z_p$ y que la susceptibilidad magnética de alta temperatura está dada por $\chi = C/(T + \theta)$, donde θ está relacionada con la temperatura de Néel T_N por

   $$\theta/T_N = (\lambda_a + \lambda_p)/(\lambda_a - \lambda_p) = (z_a + z_p)/(z_a - z_p)$$

   (e) En base a lo anterior: Cómo identificaría en el caso general la presencia de frustración geométrica mediante la medida experimental de la susceptibilidad?

   (f) Modelo de Hubbard. Anteriormente se ha discutido el ferromagnetismo en el contexto de espines aislados anclados en una red que pueden alinearse debido a las interacciones con cada uno de los otros. Sin embargo, en muchos materiales los momentos magnéticos no están fijos, sino que pueden moverse libremente por toda la red. Este fenómeno se conoce como *magnetismo itinerante* . En este tipo de sistemas, un ingrediente fundamental para comprender el magnetismo es la interacción Coulombiana entre los electrones. El modelo de Hubbard es un modelo mínimo que incluye todos estos ingredientes. Éste está dado por

   $$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma=\uparrow,\downarrow} \hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j,\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow}$$

donde $t, U > 0$, $\hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}^{\dagger}_{i,\sigma}$ son los operadores de aniquilación y destruccón de electrones en el sitio de i de la red, con espín $\sigma =\uparrow, \downarrow$, y $\hat{n}_{i,\sigma}$ son los operadores número.

i. Mediante de un dasacople en campo medio del término de interacción reescriba el Hamiltoniano de Hubbard en términos de la magnetización del sistema y del valor medio $\langle \hat{n}_{i,\sigma} \rangle$

ii. Utilice el criterio de Stoner para determinar bajo que condiciones los espines del sistema se pueden polarizar.