
Diagramas de Fase en la Red de Bethe

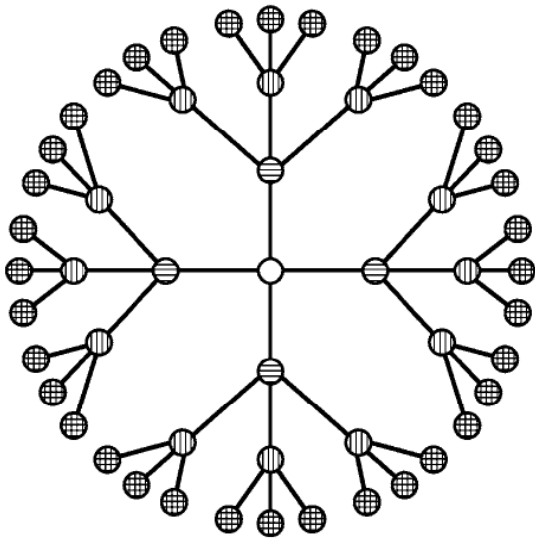
Pablo Serra y Jürgen F. Stilck

Seminario Interno GTMC - 26 de Octubre de 2009

el Arbol de Cayley

Características:

- Coordinación uniforme (excepto en la superficie)
- **NO** existen caminos cerrados.



arbol de Cayley

de coordinación $q = 4$

y $M = 3$ generaciones

para una red regular se cumple que para todo punto

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log(\# \text{ de sitios a una distancia } \leq n)}{\log(n)} = d$$

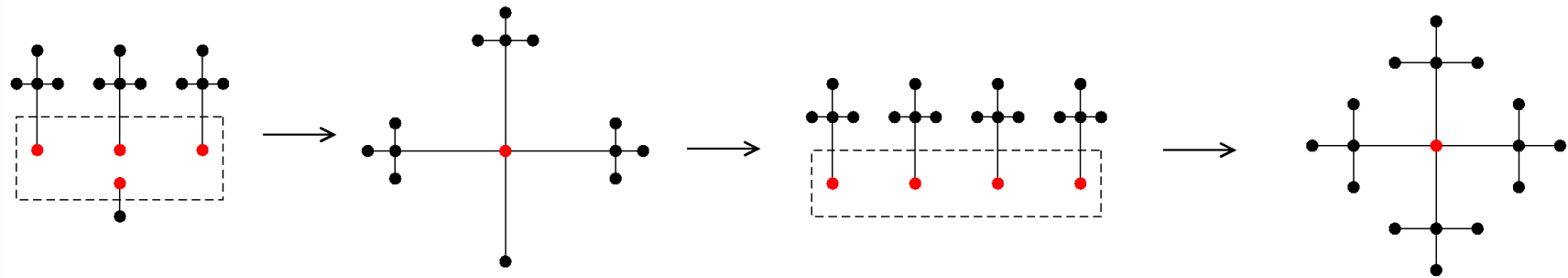
arbol de Cayley : $d = \infty \forall q > 2$

Característica “patológica”:

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\# \text{ de puntos en la superficie}}{\# \text{ total de puntos}} = \frac{q - 2}{q - 1}$$

Solución en la red de Bethe : promedios estadísticos en la zona central de un arbol de Cayley en el límite termodinámico.

Se construye recursivamente:



$(q - 1)$ sub-arboles de $(M - 1)$ generaciones \rightarrow
 subarbol de M generaciones $\rightarrow q$ sub-arboles de M
 generaciones \rightarrow arbol de Cayley de M generaciones

Modelo de Ising (Eggarter - 1974)

$$-\beta \mathcal{H} = K \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i$$

- Función partición $\mathcal{Z}(T, H = 0)$ analítica para $T > 0$:

$$m(T, 0) = \lim_{H \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \left. \frac{\partial \ln \mathcal{Z}(T, H)}{\partial H} \right|_{H=0} = 0$$

- Pero para la magnetización en el sitio central se cumple:

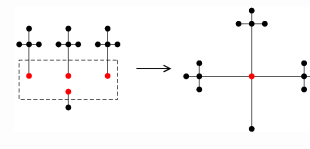
$$m_0(T, 0) \equiv \langle \sigma_0 \rangle \neq 0 \text{ si } T < T_c$$

Donde T_c es la temperatura crítica de la aproximación de Bethe:

$$\beta_c J = K_c = \frac{1}{2} \ln \frac{q}{q-2}$$

La función partición

Dos funciones de particion parciales segun el sitio raiz tenga $\sigma_0 = \pm 1$:



$$\mathcal{Z}_{\pm}^{(M)} = e^{\pm K+h} \mathcal{Z}_{+}^{(M-1)} + e^{\mp K-h} \mathcal{Z}_{-}^{(M-1)}$$

$\mathcal{Z}_{\pm}^{(M)}$ no normalizadas, divergen para $M \rightarrow \infty$ pero

$$x_M \equiv \frac{\mathcal{Z}_{-}^{(M)}}{\mathcal{Z}_{+}^{(M)}} = e^{2h} \frac{P_0^{(M)}(-)}{P_0^{(M)}(+)} \rightarrow x^* \text{ para } M \rightarrow \infty$$

Modelo de Ising

donde x^* punto fijo **estable** de la relación de recurrencia para $x^{(M)}$:

$$x^{(M)} = \frac{e^{K-h} (x^{(M-1)})^{q-1} + e^{-K+h}}{e^{-K-h} (x^{(M-1)})^{q-1} + e^{K+h}}$$

y la magnetización en el sitio central es dada por

$$m \equiv \langle \sigma_0 \rangle = \frac{P_0(+)-P_0(-)}{P_0(+)+P_0(-)} = \frac{e^h - e^{-h} (x^*)^q}{e^h + e^{-h} (x^*)^q}$$

Modelo de Ising: puntos fijos

límite de estabilidad (lineal) del punto fijo :

$$\text{abs} \left(\left. \frac{\partial x'}{\partial x} \right|_{x^*} \right) = 1$$

es facil ver que a campo nulo:

- $x^* = 1 \Rightarrow m = 0$ es siempre punto fijo, pero solo es estable para

$$K < K_c = \frac{1}{2} \ln \frac{q}{q-2} = K_c^{\text{(Bethe)}}$$

- Para $K > K_c$ existen 2 puntos fijos estables $x^* < 1 \Rightarrow m > 0$ y $1/x^* \Rightarrow m < 0$

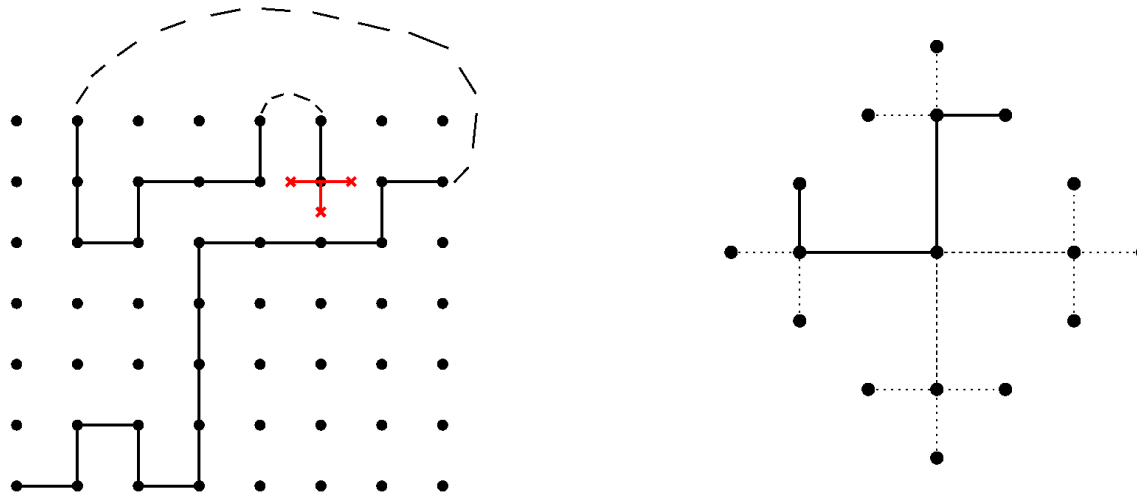
algunos problemas

para sistemas mas complicados, con puntos multicríticos, líneas de primer y segundo orden, etc....

Como construir un diagrama de fase si no se cuenta con la energía libre?

veremos distintas maneras presentadas en la literatura, pero debemos usar un modelo que presente líneas continuas y de primer orden

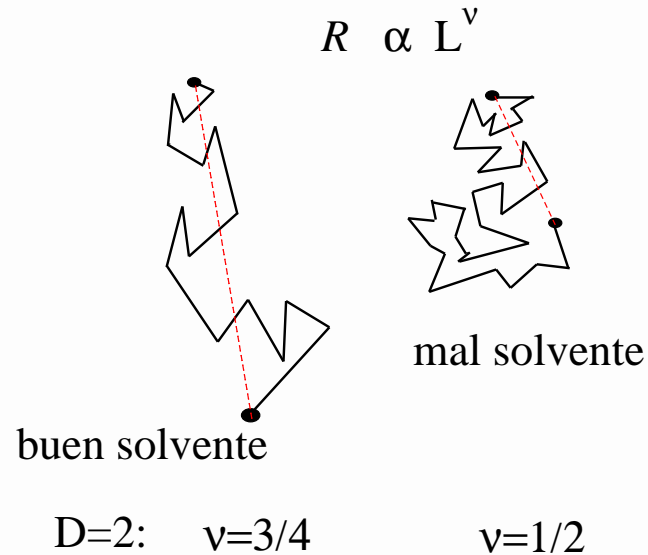
- modelos de polímeros definidos sobre redes (*lattice gas models*) : variaciones sobre caminatas auto-excluyentes (condición de volumen excluido) Memoria infinita!!!



Arbol de Cayley : NO hay caminos cerrados \Rightarrow es facil cumplir la condicion de volumen excluido!

Punto multicrítico: colapso de polímero lineales

Polímero en un solvente :

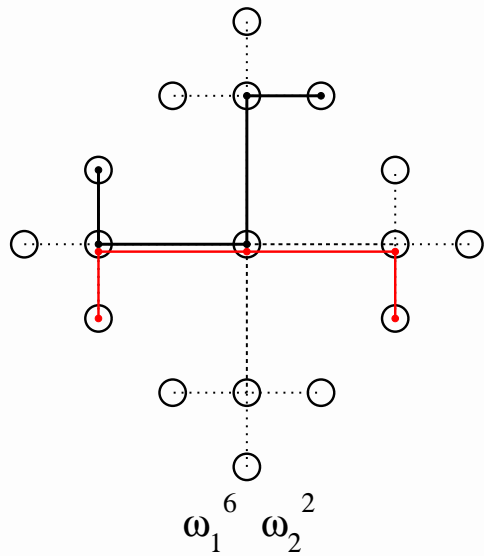


Umbral entre ambos regimenes : punto multicrítico Θ

Punto tricrítico: doble ocupación

Un modelo de Red para describir colapso (**hay muchos!**)
- el polímero puede pasar hasta 2 veces por el mismo sitio, pero **no** puede retroceder (Krawczyk et al - PRL 2006)

ω_n = peso de Boltzmann si el polímero paso n veces por un sitio



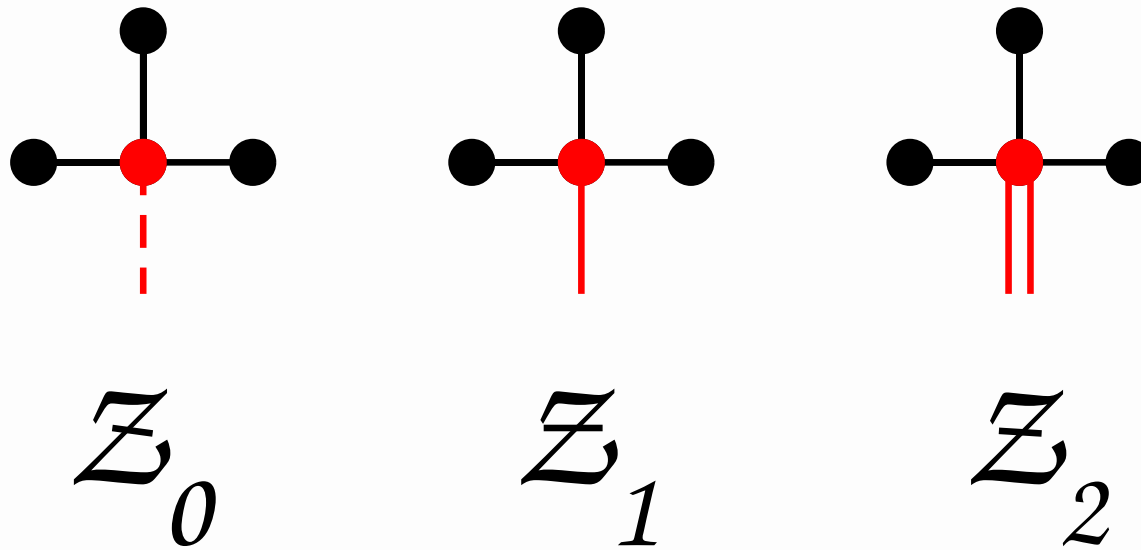
Función Gran Partición

$$\Gamma_N(\omega_1, \omega_2) = \sum \omega_1^{N_1} \omega_2^{N_2}$$

donde la suma es sobre todas las configuraciones con puntas libres solo en la superficie

Solución en la Red de Bethe (P.S. & J.F.Stilck - PRE 2007)

en este caso se necesitan 3 funciones de particion parciales:



idem Ising:

$$x_1 = \frac{Z_1}{Z_0} ; \quad x_2 = \frac{Z_2}{Z_0}$$

Ecuaciones de recurrencia (por si a alguien le interesan)

$$x'_1 = \left[(q-1)\omega_1 + 6\binom{q-1}{3}\omega_2 x_1^2 + 8\binom{q-1}{2}\omega_2 x_2 \right] \frac{x_1}{D}, \quad (1a)$$

$$x'_2 = 2 \left[\binom{q-1}{2} x_1^2 + (q-1)x_2 \right] \frac{\omega_2}{D}, \quad (1b)$$

donde

$$D = 1 + \binom{q-1}{2}\omega_1 x_1^2 + 6\binom{q-1}{4}\omega_2 x_1^4 + 12\binom{q-1}{3}\omega_2 x_1^2 x_2 + 4\binom{q-1}{2}\omega_2 x_2^2.$$

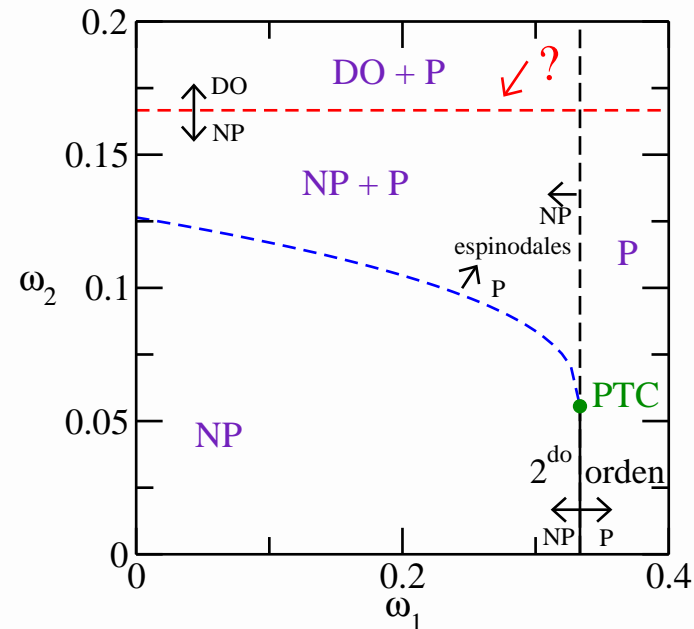
Debemos encontrar los puntos fijos de (1) y estudiar su estabilidad

Estudio de la estabilidad lineal de los puntos fijos

encontramos 3 puntos fijos asociados a :

- Fase no polimerizada (NP) : $(x_1, x_2)^* = 0$ (densidad de polímeros nula).
- Fase polimerizada “usual” (P) : $(x_1, x_2)^* \neq 0$ (se reduce al SAW para $\omega_2 = 0$)
- Fase de doble ocupación (DO) : $x_1 = 0 ; x_2 \neq 0$

Diagrama de estabilidad para q=4



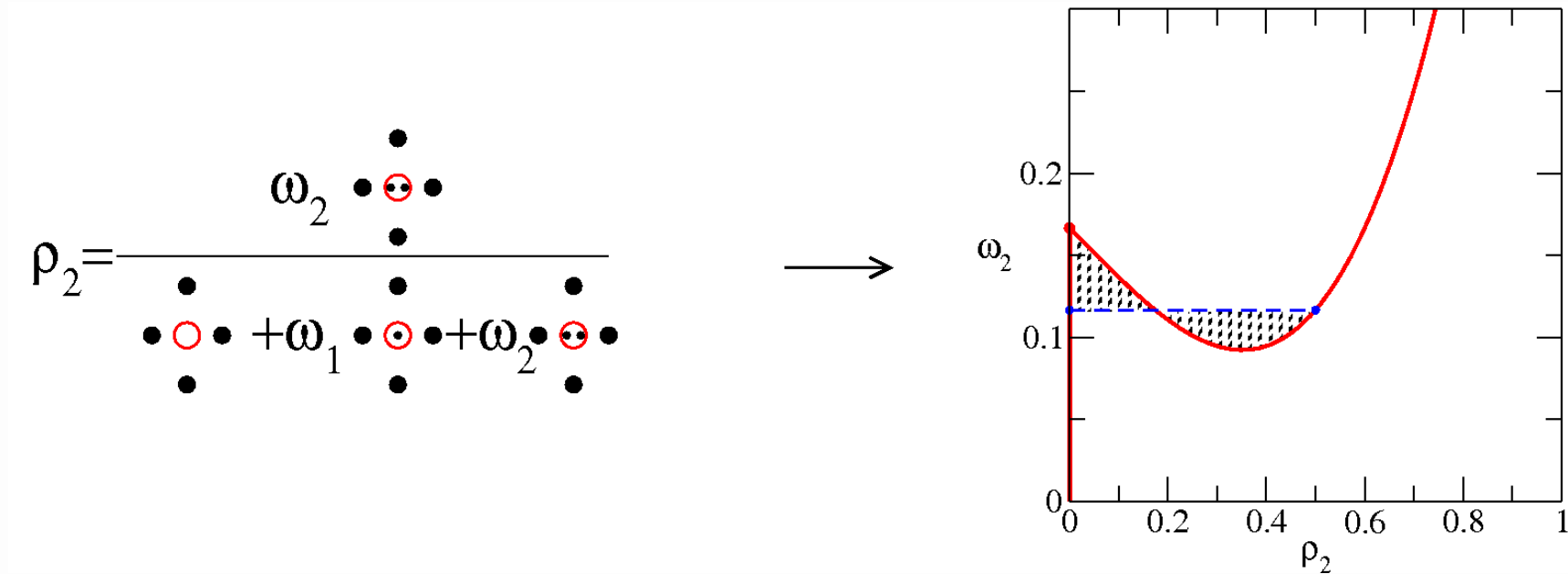
PTC = punto tricrítico :

$$\omega_1^{(TC)} = \frac{1}{q-1} = \frac{1}{3} ; \omega_2^{(TC)} = \frac{1}{2(q-1)^2} = \frac{1}{18}$$

Lineas de primer orden? Existe la fase DO?

Cálculo de líneas de 1^{er} orden

a) Construcción de Maxwell : Asumiendo la existencia de una energía libre, como ω_i son fugacidades $\Rightarrow \int \ln \omega_i d\rho_i$ tendrá la forma característica :



$$\rho_2 = \frac{\omega_2 \left[6 \binom{q}{4} \omega_2 x_1^4 + 12 \binom{q}{3} x_1^2 x_2 + 4 \binom{q}{2} x_2^2 \right]}{\mathcal{Y}}$$

$$\mathcal{Y} \equiv \frac{\mathcal{Z}}{g_0^q} = 1 + \omega_1 \binom{q}{2} x_1^2 + \omega_2 \left[6 \binom{q}{4} \omega_2 x_1^4 + 12 \binom{q}{3} x_1^2 x_2 + 4 \binom{q}{2} x_2^2 \right]$$

Cálculo de líneas de 1^{er} orden

b) Método Iterativo : En diversos trabajos usan el hecho que las fases estan relacionadas con puntos fijos estables, entonces partiendo de condiciones iniciales “físicas” se llega a la fase termodinámica correspondiente :

En nuestro caso: dados (ω_1, ω_2) se iteran las ecuaciones $x_i^{(M+1)}(x_1^{(M)}, x_2^{(M)}) \rightarrow (x_1, x_2)^*$, entonces segun el punto fijo sea NP, P o DO será la fase del sistema.

Coincide este método con la construcción de Maxwell? :
NO; hay cambios cualitativos!!

comparación de ambos métodos

Diagrama de Estabilidad

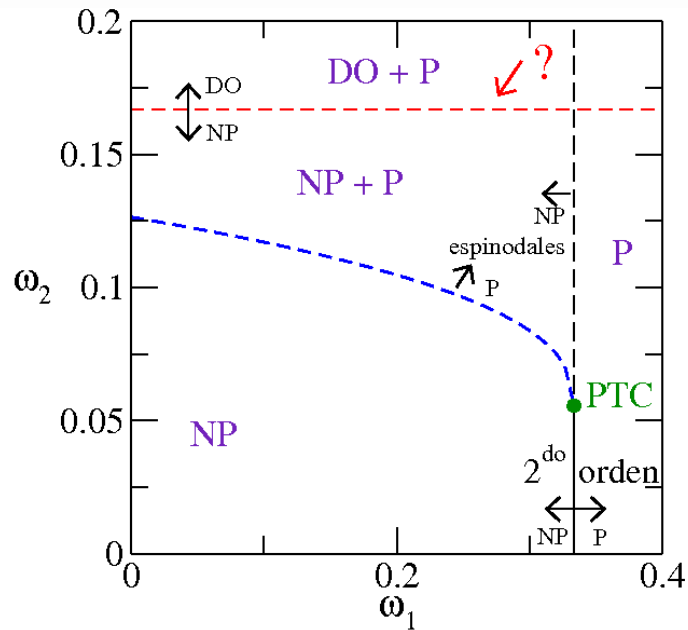
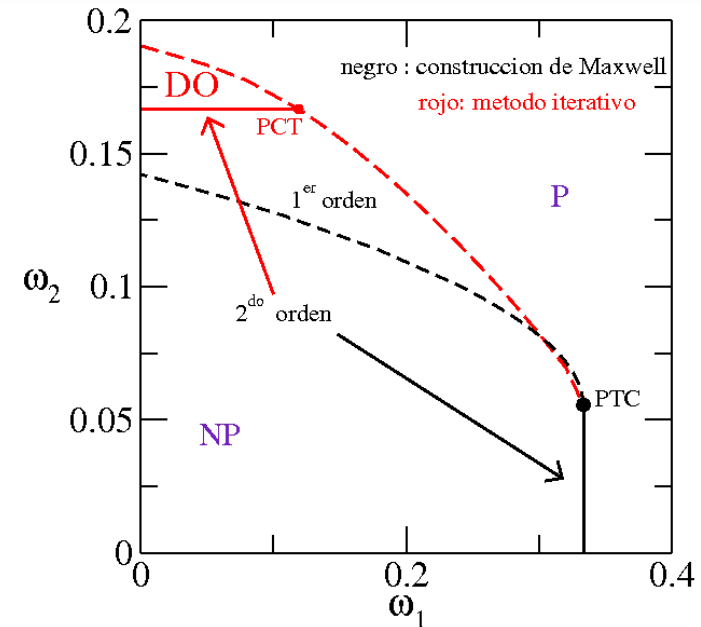


Diagrama de Fases



La energía libre en la red de Bethe

(Gujrati, PRL 1995 - Oliveira, Stilck y PS - PRE 2009)

Asumimos que la energía libre por sitio es la misma para todos los sitios de una misma generación del árbol de Cayley, llamando ϕ_0 a la de superficie para arboles de M y $M + 1$ generaciones tenemos

$$\Phi_M = q(q-1)^{M-1}\phi_0 + q(q-1)^{M-2}\phi_1 + \dots + q\phi_{M-1} + \phi_M,$$

$$\Phi_{M+1} = q(q-1)^M\phi_0 + q(q-1)^{M-1}\phi_1 + \dots + q\phi_M + \phi_{M+1},$$

$$\Phi_{M+1} - (q-1)\Phi_M = \phi_M + \phi_{M+1} \xrightarrow{M \rightarrow \infty} 2\phi_B$$

La energía libre en la red de Bethe

$$\phi_B = \frac{1}{2} \lim_{M \rightarrow \infty} \Phi_{M+1} - (q-1)\Phi_M = -\frac{1}{2} \lim_{M \rightarrow \infty} \ln \left(\frac{\mathcal{Z}_{M+1}}{\mathcal{Z}_M^{q-1}} \right)$$

pero

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \left(\frac{\mathcal{Z}_{M+1}}{\mathcal{Z}_M^{q-1}} \right) = \frac{D^q}{\mathcal{Y}^{q-2}}$$

obtenemos:

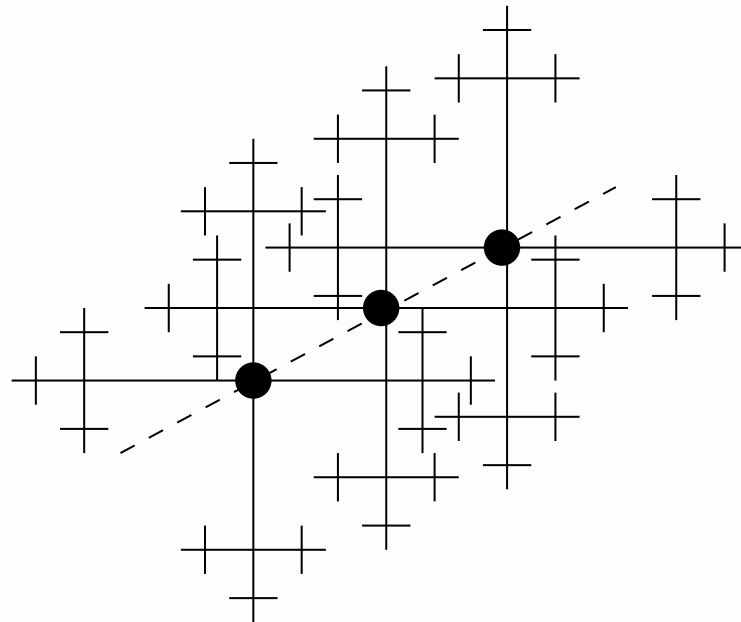
$$\phi_b = -\frac{1}{2} [q \ln D - (q-2) \ln \mathcal{Y}]$$

que es una función conocida de \vec{x}^*

Aplicaciones: modelos anisotrópicos

Como definir una dirección privilegiada en la red de Bethe?

Modelo simplificado: Ya que calculamos magnitudes físicas en el sitio central, definimos una dirección privilegiada uniendo L arboles de Cayley solo en los sitios centrales



Ejemplo Ising ferromagnético “usual” intra-arbol :

$$\mathcal{H} = \sum_i^L \mathcal{H}_0^{(i)} + \mathcal{H}_1$$

donde

$$\mathcal{H}_0 = K \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i$$

$$\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_1(\sigma_1^0, \dots, \sigma_L^0)$$

Sin entrar en detalles, llegamos a una energía libre efectiva de un sistema unidimensional en presencia de un campo aleatorio:

$$\phi_B = -\ln \left(\sum_{\{\sigma_k^0\}} e^{H_1(\{\sigma_k^0\}) + \sum_{k=1}^L h_k^{eff} \sigma_k^0} \right) - \frac{q}{2} \ln \left(\prod_{k=1}^L \frac{[e^{K+h} + e^{-(K+h)} x_k^{q-1}] x_k}{[e^h + e^{-h} x_k^q]} \right)$$

donde $h_k^{eff} = h - q \ln(x_k)/2$; x_k ; $k = 1, \dots, L$ puede tomar los valores

$x^* = 1$ si $K < K_c$ (trivial)

x_1^* o x_2^* si $K > K_c$ (los dos puntos fijos de Ising en el árbol de Cayley)

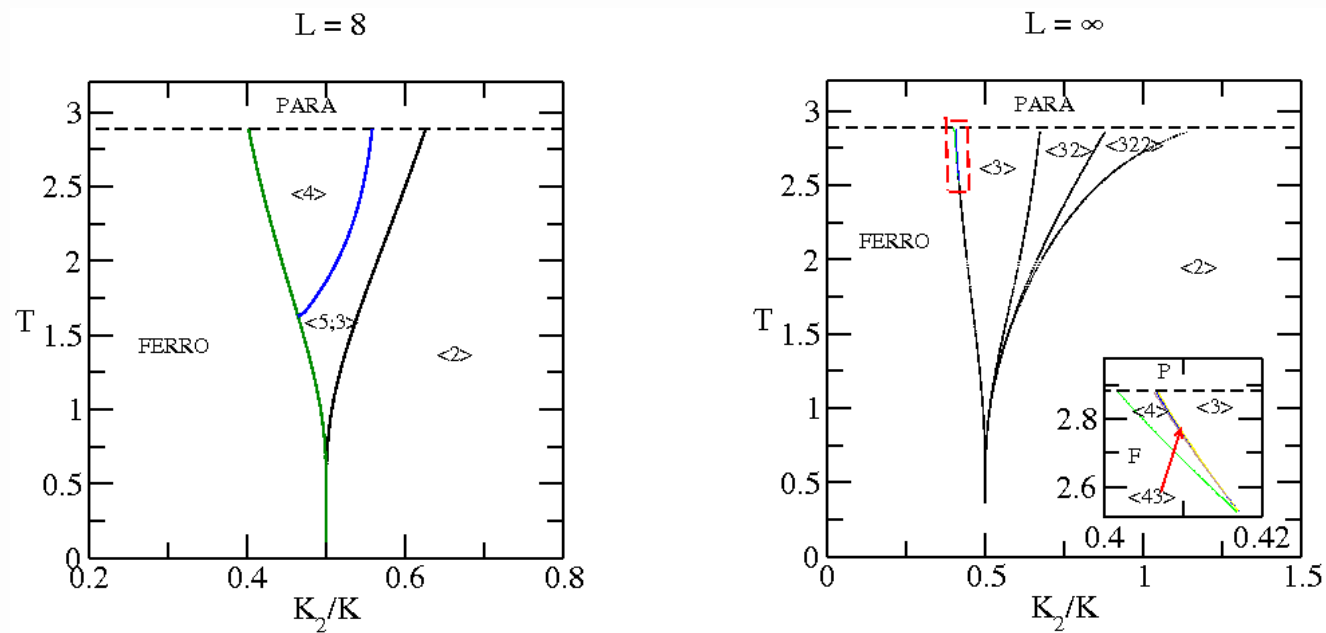
en particular, a campo nulo $x_1^* = 1/x_2^* = x^*$:

$$\phi_{eff}(h = 0) = -\ln \left(\sum_{\{\sigma_k^0\}} e^{H_1(\{\sigma_k^0\}) + \sum_{k=1}^L h_k^{eff} \sigma_k^0} \right)$$

donde $h_k^{eff} = \pm q \ln(x^*)/2$.

Ejemplo: el modelo ANNNI :

$$\mathcal{H}_1 = K \sum_i \sigma_i^0 \sigma_{i+1}^0 - K_2 \sum_i \sigma_i^0 \sigma_{i+2}^0$$



Conclusiones y Perspectivas

- Mostramos que el método iterativo NO da el resultado correcto para líneas de primer orden.
- Dimos una expresión explícita de la energía libre de un sistema en la red de Bethe.
- Definimos sistemas anisotrópicos en la red de Bethe.
- resolver nuevos sistemas anisotrópicos
- aproximación de red de Bethe para sistemas de n capas (bicapas: Albayrak y Yilmaz - JPC 2007).

