



Extensiones del método variacional de clústeres: sistemas cuánticos y dinámica de espines

ENTIDADES EJECUTORAS PRINCIPALES: Facultad de Física, Universidad de La Habana

AUTORES: Eduardo Javier Domínguez Vázquez¹, Roberto Mulet Genicio¹, Alejandro Lage Castellanos¹

Colaboradores: Federico Ricci-Tersenghi², David Machado Pérez³, Gino Del Ferraro⁴

Filiación: ¹Departamento de Física Teórica de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana. ²Universidad La Sapienza, Roma. Dr. Erik Aurell. KTH, Suecia. ³Facultad de Física, La Habana, Cuba. ⁴City College, New York, USA.

RESUMEN

Se estudian las posibilidades del método variacional de clústeres (CVM) como herramienta para la obtención de aproximaciones en problemas donde el hamiltoniano es esencialmente cuántico y en el estudio de la cinética de sistemas de variables discretas con interacción. Con este objetivo se exploran los casos más sencillos de las aproximaciones de tipo CVM a la energía libre, especialmente la aproximación de Bethe y Kikuchi (para una red bidimensional). Se estableció la metodología para la obtención de operadores estadísticos locales, las implicaciones algorítmicas y numéricas y su relación con los resultados previamente conocidos para sistemas clásicos. Se describen las transiciones de fase a través de los observables locales. En el análisis de la dinámica se consigue demostrar que las aproximaciones utilizadas en la literatura precedente para el estudio del estado estacionario de la dinámica en tiempo discreto son útiles y extensibles al caso en cuestión. Para sustentar esta afirmación se comparan con las simulaciones estocásticas de Monte Carlo correspondientes. Para la dinámica en tiempo continuo se desarrolló la teoría exacta para sistemas definidos en redes sin lazos. Fue posible también obtener, a partir de estos resultados generales, aproximaciones numéricas en la forma de una ecuación maestra aproximada para las distribuciones locales instantáneas.

Palabras clave

método variacional de clústeres; sistemas cuánticos; dinámica de espines

En el contexto de la física estadística podría decirse que una parte considerable del esfuerzo teórico está orientada a la mejora sobre las aproximaciones de campo medio. Estas son un buen punto de partida, pero típicamente valoran de manera incorrecta algunas cuestiones esenciales como el papel de las correlaciones, la dimensionalidad del sistema o el desorden en las interac-

ciones. En ciertos casos, el formalismo del llamado método variacional de clústeres (CVM) constituye una alternativa promisoría para paliar estas dificultades. La razón es que permite definir una familia o jerarquía de aproximaciones que tendencialmente describirían toda la física del problema, a un costo, claro está, siempre creciente cuanto más

preciso se quiera ser. Más allá del estado de equilibrio, algunas de las ideas del CVM pueden extrapolarse también al estudio de la cinética, donde puede aportar de manera natural información sobre la evolución del sistema, valiosa a nivel microscópico.

El CVM ha encontrado aplicación en casos más interesantes, además de los sistemas cristalinos ordenados. El desorden en las interacciones entre partículas, presente en sistemas como el modelo clásico de Edwards-Anderson o el modelo de Ising con campo aleatorio (RFIM), es un asunto complicado de tratar usando métodos convencionales del estado sólido. Como característica distintiva del método se puede señalar que permite expresar las distribuciones locales de probabilidad de las diferentes regiones en que puede dividirse un sistema como función de ciertos campos efectivos que emanan de la interacción con regiones vecinas. La naturaleza y la forma funcional específica de estos campos dependen de la elección de las regiones o clústeres utilizada.

En la figura 1 se ilustran las regiones utilizadas en el estudio de la red bidimensional. En el caso de la aproximación de Bethe se toman regiones de una y dos variables, mientras que en la aproximación de Kikuchi se incluyen, además, las plaquetas de cuatro espines en una celda elemental de la red.

Los diagramas de fase en el plano h - T (figura 2) obtenidos mediante la aproximación de pares y plaquetas para el ferromagnético cuántico con campo transversal describen bien cualitativa y cuantitativamente el comportamiento de este sistema, como muestra la comparación con los valores de campo y temperaturas críticas obtenidos mediante el método de Monte Carlo.

Una parte importante del proyecto es el análisis de los sistemas desordenados. La primera fase incluyó el estudio de la variante clásica del modelo de Ising con campo aleatorio

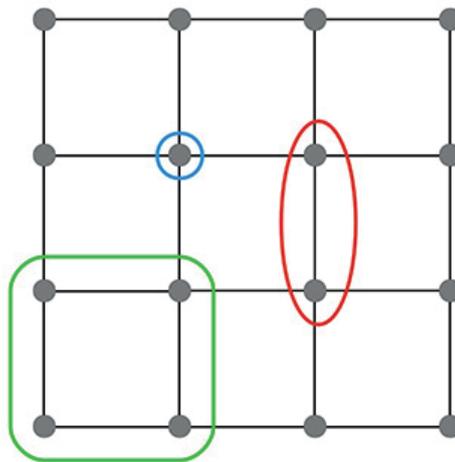


Fig. 1. Regiones en el método variacional de clústeres.

(RFIM). A este estudio se asocia uno de los artículos que forman parte de la propuesta. En esta referencia se estudian los efectos de tamaño de sistema, temperatura, intensidad del campo externo y otros sobre el comportamiento del modelo. Las simulaciones numéricas incluyen el cálculo basado en el algoritmo Belief Propagation (BP), dinámica de poblaciones y la estabilidad de la solución paramagnética de acuerdo con el cálculo de réplicas-CVM. En la figura 3 (A y B) se muestra una parte de estos resultados.

El CVM extendido a la dinámica constituye una ampliación importante de su campo de aplicabilidad. Tanto para el caso en que la variable temporal sea considerada como un parámetro discreto, como para el caso continuo se obtienen muy buenos resultados en comparación con la simulación directa de la dinámica mediante la generación de cadenas de Markov con la misma ley de evolución temporal. En ambas dinámicas se tiene que el correspondiente formalismo es más preciso si la red de interacciones subyacente tiene una estructura de tipo

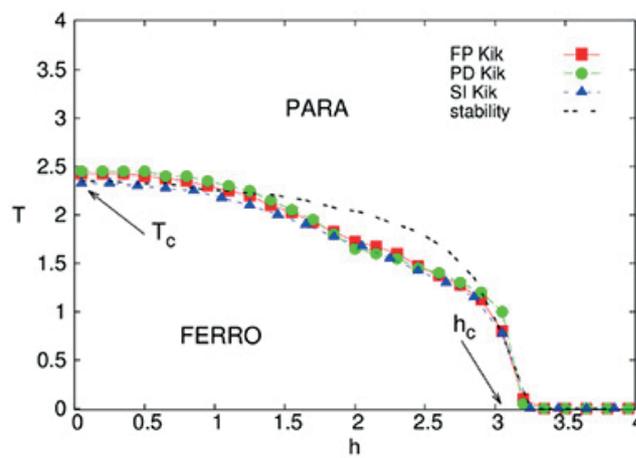
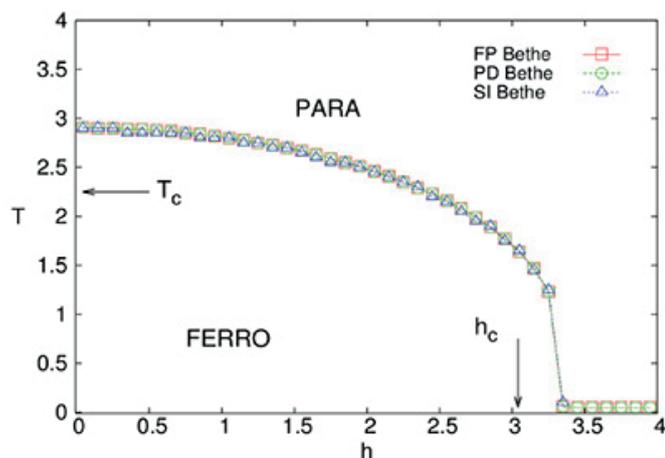


Fig. 2. A). Diagrama de fases para el modelo ferromagnético cuántico con campo transversal en la aproximación de Bethe. Con flechas aparecen señalados los valores críticos exactos. **B)** Diagrama de fases para el modelo ferromagnético cuántico con campo transversal en la aproximación de Kikuchi. Las predicciones de los valores críticos mejoran con respecto a la aproximación de Bethe.

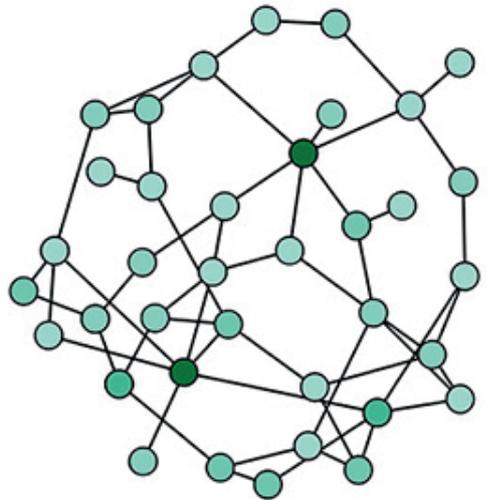
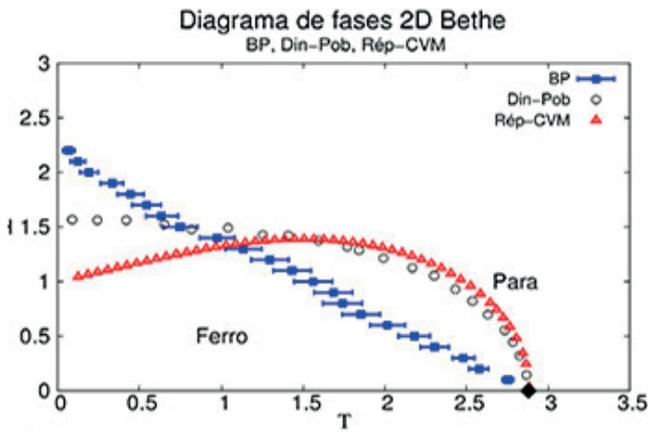


Fig. 4. Grafo aleatorio de Erdos-Renyi.

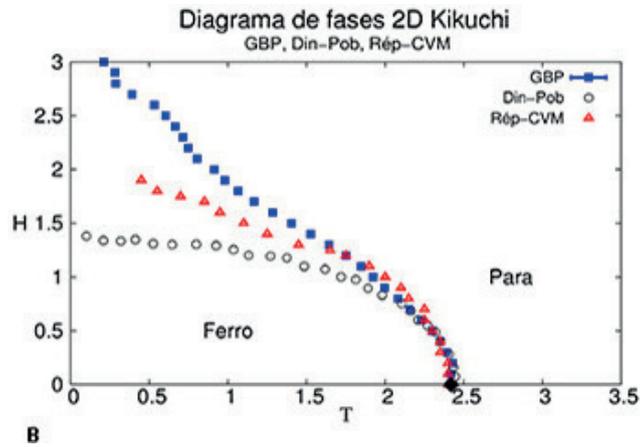


Fig. 3. **A)** Como se observa, BP difiere de las dos predicciones del caso promedio. Debido a la aparición de los dominios, la temperatura tiene que disminuir más para conseguir que el sistema se magnetice completamente. **B)** La aproximación de plaquetas en muestras particulares coincide muy bien para pequeño valor de campo con el cálculo de las propiedades medias mediante dinámica de poblaciones y la teoría de las réplicas.

árbol; esto es, que los lazos son de larga longitud o no aparecen. Un ejemplo de tal red se muestra en la figura 4, que representa un grafo de Erdos-Renyi, donde la conectividad media es finita y la probabilidad de existencia de un enlace cualquiera entre dos variables tomadas al azar es siempre la misma.

En la figura 5 (A y B) se muestra la dependencia temporal de la magnetización global para los dos tipos de dinámica estudiada. El caso discreto tiene un rendimiento ligeramente superior, pero es importante señalar que esta dinámica es siempre más artificial con respecto a su contraparte continua.

AUTOR PARA LA CORRESPONDENCIA

Eduardo Javier Domínguez Vázquez. Facultad de Física de la Universidad de La Habana. Colina Universitaria 10400. La Habana, Cuba. Correo electrónico: eduardo@fisica.uh.cu

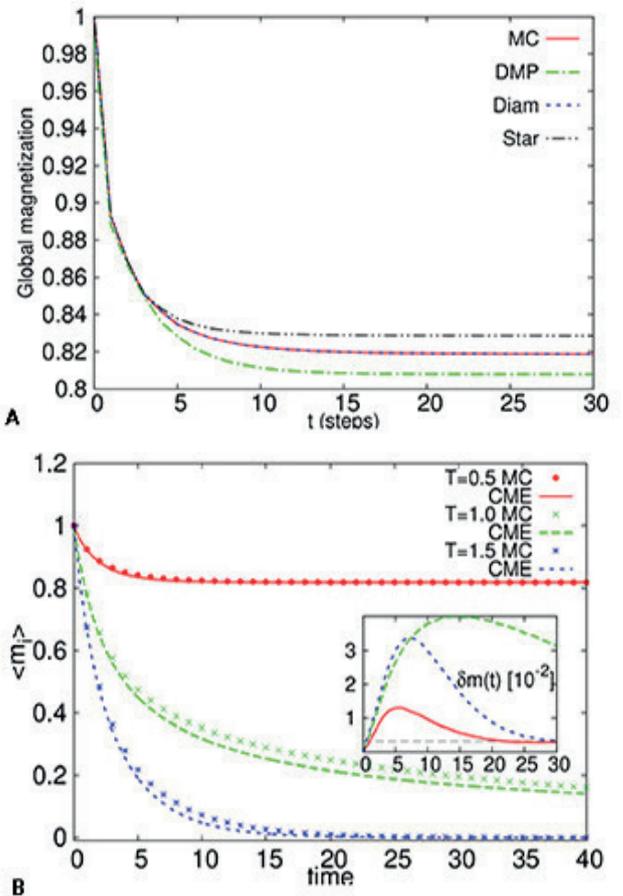


Fig. 5. **A)** Resultados para la magnetización global y local en una red con interacciones simétricas a temperatura $T = 0,5$, por debajo de la transición ferromagnética a $T_c = 0,962$. Las diferentes líneas hacen referencia a diferentes métodos. MC corresponde a simulaciones de Monte Carlo promediadas en 10^6 corridas. **B)** Evolución temporal de la magnetización media para un sistema que parte de una configuración lejos del equilibrio. Se muestran distintos valores de temperatura, de acuerdo con la fase final deseada. El gráfico insertado muestra los errores medios.