Problema 1: Modelo de Blume-Capel - Aproximación variacional

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + D \sum_i s_i^2 \tag{1}$$

$$H_0 = -\eta \sum_i s_i + D \sum_i s_i^2 \tag{2}$$

Desigualdad de Bogoliuvob-Peierls:

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

Función de partición para el hamiltoniano de prueba:

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}_0 &= \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta H_0} \\
&= \sum_{\{s_i\}} \exp \left[\beta \eta \sum_i s_i - \beta D \sum_i s_i^2 \right] \\
&= \sum_{\{s_i\}} \prod_i \exp \left[\beta \eta s_i - \beta D s_i^2 \right] \\
&= \prod_i \sum_{s_i = 0, \pm 1} \exp \left[\beta \eta s_i - \beta D s_i^2 \right] \\
&= \left[1 + e^{-\beta\eta - \beta D} + e^{\beta\eta - \beta D} \right]^N \\
&= \left[1 + 2 e^{-\beta D} \cosh(\beta\eta) \right]^N, \\
&= \mathcal{Z}_{01}^N,
\end{aligned} \tag{4}$$

donde

$$\mathcal{Z}_{01} = 1 + 2 e^{-\beta D} \cosh(\beta \eta). \tag{5}$$

Energía libre:

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

Magnetización:

$$
\begin{aligned}
m_0 &= \langle s_i \rangle_0 \\
&= \frac{1}{\mathcal{Z}_{01}} \sum_{s_i=0,\pm 1} s_i e^{\beta \eta s_i - \beta D s_i^2} \\
&= \frac{1}{\mathcal{Z}_{01}} \left[-e^{-\beta\eta - \beta D} + e^{\beta\eta - \beta D} \right] \\
&= \frac{2e^{-\beta\eta} \sinh(\beta\eta)}{1 + 2e^{-\beta\eta} \cosh(\beta\eta)} \qquad (7)
\end{aligned}
$$

Segundo momento:

$$
\begin{aligned}
\langle s_i^2 \rangle_0 &= \frac{1}{\mathcal{Z}_{01}} \sum_{s_i=0,\pm 1} s_i^2 e^{\beta \eta s_i - \beta D s_i^2} \\
&= \frac{1}{\mathcal{Z}_{01}} \left[e^{-\beta\eta - \beta D} + e^{\beta\eta - \beta D} \right] \\
&= \frac{2e^{-\beta\eta} \cosh(\beta\eta)}{1 + 2e^{-\beta\eta} \cosh(\beta\eta)} \qquad (8)
\end{aligned}
$$

Valores medios de los hamiltonianos respecto del hamiltoniano de prueba:

$$
\begin{aligned}
\langle H_0 \rangle_0 &= -\eta \sum_i \langle_0 s_i \rangle + D \sum_i \langle s_i^2 \rangle_0 \\
&= -\eta N m_0 + DN \langle s_i^2 \rangle_0
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle H \rangle_0 &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \langle s_i s_j \rangle_0 + D \sum_i \langle s_i^2 \rangle_0 \\
&= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \langle s_i \rangle_0 \langle s_j \rangle_0 + D \sum_i \langle s_i^2 \rangle_0 \\
&= -J \frac{Nz}{2} m_0^2 + DN \langle s_i^2 \rangle_0
\end{aligned}
$$

Proponemos la función variacional

$$
\begin{aligned}
\Phi(\eta) &= f_0 + \frac{1}{N} \langle H - H_0 \rangle_0 \\
&= -\frac{1}{\beta} \ln \left[1 + 2e^{-\beta D} \cosh(\beta\eta) \right] - J \frac{z}{2} m_0^2 + \eta m_0 \qquad (9)
\end{aligned}
$$

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

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} &= -\frac{2e^{-\beta\eta}\sinh(\beta\eta)}{1+2e^{-\beta\eta}\cosh(\beta\eta)} - Jzm_0\frac{\partial m_0}{\partial \eta} + m_0 + \eta\frac{\partial m_0}{\partial \eta} \\
&= (\eta - Jzm_0)\,\frac{\partial m_0}{\partial \eta}, \qquad (10)
\end{aligned}
$$

donde usamos la igualdad 7.

La expresión anterior implica que la solución al problema variacional es

$$
\eta = Jzm_0. \qquad (11)
$$

Reemplazando en 9, tenemos

$$
\Phi(\eta) = -\frac{1}{\beta}\ln\left[1+2e^{-\beta D}\cosh(\beta\eta)\right] + \frac{1}{2Jz}\eta^2 \qquad (12)
$$

Realizamos un desarrollo de Taylor de orden 4 de la expresión anterior, teniendo en cuenta la siguiente relación:

$$
\ln\left[1+c\cosh(x)\right] = \ln(c+1) + \frac{c}{2c+1}x^2 + \frac{c(1-2c)}{24(c+1)^2}x^4 \qquad (13)
$$

Problema 3: Teoría de Landau para puntos tricríticos

Consideremos un potencial de Landau genérico para un sistema con simetría de paridad

$$
\mathcal{L} = \frac{1}{2}a_2(T,x)\eta^2 + \frac{1}{2}a_4(T,x)\eta^4 + \frac{1}{6}a_6(T,x)\eta^6 - B\eta, \qquad (14)
$$

donde T es la temperatura, B el campo magnético, y x el resto de los parámetros del sistema. Por simplicidad, consideramos x unidimensional. Suponemos que $a_6(T,x) > 0$, $\forall T, x$, lo cual justifica haber truncado el potencial a ese orden.

El punto tricrítico está dado por la condición $a_2 = a_4 = 0$. En un entorno de este punto, podemos escribir

$$
\begin{aligned}
a_2(t,\omega) &= at + b\omega \qquad (15)\\
a_4(t,\omega) &= ct + d\omega, \qquad (16)
\end{aligned}
$$

donde los coeficientes a, b, c y d son positivos. Para obtener los exponentes para el punto tricrítico, nos aproximamos por la línea $a_4 = 0$. En ese caso,

$$
\omega = -\frac{c}{d}t, \qquad (17)
$$

por lo que

$$
a_2(t) = \left(a - \frac{c}{d}\right)t = At, \quad A = \left(a - \frac{c}{d}\right). \qquad (18)
$$

Luego, el potencial de Landau adquiere la forma

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}At\eta^2 + \frac{1}{6}a_6\eta^6 - B\eta, \tag{19}$$

donde suponemos a_6 constante en el entorno del PTC. La ecuación de estado correspondiente es

$$At\eta + a_6\eta^5 = B. \tag{20}$$

Para $B = 0$, tenemos

$$\eta = \begin{cases} 0 & \text{si } t > 0 \\ \left(\dfrac{A}{a_6}\right)^{1/4} (-t)^{1/4} & \text{si } t < 0, \end{cases}$$

de donde $\beta_t = 1/4$.

Derivando 20 respecto a B,

$$At\chi + 5a_6\eta^4\chi = 1. \tag{21}$$

Para $t > 0$, tenemos $\eta = 0$, por lo que $\chi = A^{-1}t^{-1}$. Por otro lado, para $t < 0$,

$$\chi = \frac{1}{At + 5a_6\eta^4} = \frac{1}{4A}(-t)^{-1}. \tag{22}$$

Se deduce de aquí que el exponente de la susceptibilidad es el mismo independientemente de la fase de la cual nos acercamos, con valor $\gamma = 1$.

Por otro lado, evaluando 20 en $t = 0$, tenemos

$$\eta = \frac{1}{a_6}B^{1/5}, \tag{23}$$

por lo que $\delta = 5$.

Por último, recordemos que la energía libre f es igual al mínimo del potencial $\mathcal{L}$. En la fase desordenada, $f = 0$, mientras que en la fase ordenada, tenemos, a campo nulo,

$$\begin{align} f(t) &= -\frac{1}{2}A\left(\frac{A}{a_6}\right)^{1/2} t^{3/2} - \frac{1}{6}a_6 t^{3/2} \tag{24} \\ &= -\frac{1}{6}a_6\left[3\left(\frac{A}{a_6}\right)^{3/2} + 1\right] t^{3/2}. \tag{25} \end{align}$$

El calor específico está dado por

$$C = -T\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = \frac{1}{8}a_6\left[3\left(\frac{A}{a_6}\right)^{3/2} + 1\right](-t)^{-1/2}, \tag{26}$$

por lo que $\alpha = 1/2$.