

**Problema 1: Modelo de Blume-Capel - Aproximación variacional**

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

$$H_0 = -\eta \sum_i s_i + D \sum_i s_i^2 \quad (2)$$

Desigualdad de Bogoliubov-Peierls:

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

Función de partición para el hamiltoniano de prueba:

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

donde

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

Energía libre:

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

Magnetización:

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

Segundo momento:

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

Valores medios de los hamiltonianos respecto del hamiltoniano de prueba:

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

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

Proponemos la función variacional

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

Derivamos con respecto a  $\eta$  e igualamos a cero para hallar el mínimo

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

donde usamos la igualdad 7.

La expresión anterior implica que la solución al problema variacional es

$$\eta = Jzm_0.\tag{11}$$

Reemplazando en 9, tenemos

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

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

$$\begin{aligned}\ln [1 + 2c \cosh(x)] &= \ln(2c + 1) + \frac{c}{2c + 1} x^2 + \\ &+ \frac{c(1 - 4c)}{12(2c + 1)^2} x^4 + \frac{c(64c^2 - 26c + 1)}{360(2c + 1)^3} x^6.\end{aligned}$$

Reemplazando en 12 y definiendo  $c = e^{-\beta D}$ ,

$$\begin{aligned}\Phi(\eta) &= -\frac{1}{\beta} \ln(2c + 1) + \left( \frac{1}{2Jz} - \beta \frac{c}{2c + 1} \right) \eta^2 + \\ &+ \beta^4 \frac{c(1 - 4c)}{12(2c + 1)^2} \eta^4 + \beta^6 \frac{c(64c^2 - 26c + 1)}{360(2c + 1)^3} \eta^6.\end{aligned}$$

El punto tricrítico se obtiene igualando a cero los coeficientes de  $\eta^2$  y  $\eta^4$ . A partir del término cuadrático se obtiene

$$\begin{aligned}\frac{1}{2Jz} &= \beta \frac{c}{2c + 1} \\ 2 + c^{-1} &= 2\beta Jz \\ \beta D &= \ln 2 + \ln(\beta Jz - 1)\end{aligned}$$

mientras que del término cuártico,

$$\begin{aligned}c &= \frac{1}{4} \\ \beta D &= 2 \ln 2\end{aligned}$$

Despejando,

$$D = \frac{2Jz}{3} \ln 2$$
$$\beta = \frac{3}{Jz}$$

Obs: El término de orden 6 no es positivo en todo el espacio de parámetros, pero sí lo es en el entorno del punto tricrítico, por lo que el desarrollo anterior es válido.

**Problema 2: Modelo de Blume-Capel - Versión Curie-Weiss**

$$H = -\frac{J}{2N} \sum_{i,j} s_i s_j + D \sum_i s_i^2 - B \sum_i s_i \quad (13)$$

Reescribimos el hamiltoniano como

$$H = -\frac{J}{2N} \left( \sum_i s_i \right)^2 + \frac{J}{2} + D \sum_i s_i^2 - B \sum_i s_i. \quad (14)$$

La función de partición es entonces

$$\mathcal{Z} = e^{-K_1/2} \sum_{\{s\}} \exp \left[ \frac{K_1}{2N} \left( \sum_i s_i \right)^2 - K_2 \sum_i s_i^2 + h \sum_i s_i \right], \quad (15)$$

donde  $K_1 = \beta J$ ,  $K_2 = \beta D$  y  $h = \beta B$ . Definimos

$$a = \sqrt{\frac{K_1}{N}} \sum_i s_i \quad (16)$$

y utilizamos la identidad gaussiana

$$e^{a^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2+ax} dx. \quad (17)$$

Obtenemos

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= e^{-K_1/2} \sum_{\{s\}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} \exp \left[ -K_2 \sum_i s_i^2 + \left( x \sqrt{\frac{K_1}{N}} + h \right) \sum_i s_i \right] dx \\ &= e^{-K_1/2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} \left[ 1 + 2e^{-K_2} \cosh \left( x \sqrt{\frac{K_1}{N}} + h \right) \right]^N dx \\ &= e^{-K_1/2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{x^2}{2} + N \ln \left[ 1 + 2e^{-K_2} \cosh \left( x \sqrt{\frac{K_1}{N}} + h \right) \right] \right\} dx. \end{aligned} \quad (18)$$

Realizamos el cambio de variables  $\eta = x(K_1 N)^{-1/2}$  y obtenemos

$$\mathcal{Z} = e^{-K_1/2} \sqrt{\frac{KN}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{Ng(\eta)} d\eta, \quad (19)$$

donde

$$g(\eta) = \frac{K_1}{2} \eta^2 + \ln [1 + 2e^{-K_2} \cosh (K_1 \eta + h)]. \quad (20)$$

Usando el método de Laplace en el límite  $N \rightarrow \infty$  resulta

$$-\beta f = \max_{\eta} g(\eta). \quad (21)$$

Derivando e igualando a cero obtenemos la ecuación

$$\eta_0 = \frac{2e^{-K_2} \sinh(K_1 \eta_0 + h)}{1 + 2e^{-K_2} \cosh(K_1 \eta_0 + h)}. \quad (22)$$

La magnetización del sistema resulta

$$m = -\frac{\partial f}{\partial B} = \frac{\partial(-\beta f)}{\partial h} = \frac{2e^{-K_2} \sinh(K_1 \eta_0 + h)}{1 + 2e^{-K_2} \cosh(K_1 \eta_0 + h)} = \eta_0, \quad (23)$$

de donde se sigue que la magnetización satisface la relación

$$m = \frac{2e^{-K_2} \sinh(K_1 m + h)}{1 + 2e^{-K_2} \cosh(K_1 m + h)}. \quad (24)$$

### Problema 3: Teoría de Landau para puntos tricríticos

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

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}a_2(T, x)\eta^2 + \frac{1}{2}a_4(T, x)\eta^4 + \frac{1}{6}a_6(T, x)\eta^6 - B\eta, \quad (25)$$

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

$$a_2(T, x) = at + b\omega \quad (26)$$

$$a_4(T, x) = ct + d\omega, \quad (27)$$

donde los coeficientes  $a, b, c$  y  $d$  son positivos y donde  $t = (T - T_t)/T_t$  y  $\omega = (x - x_t)/x_t$ . Para obtener los exponentes para el punto tricrítico, nos aproximamos por la línea  $a_4 = 0$ . En ese caso,

$$\omega = -\frac{c}{d}t, \quad (28)$$

por lo que

$$a_2(t) = \left(a - \frac{c}{d}\right)t = At, \quad A = \left(a - \frac{c}{d}\right). \quad (29)$$

Luego, el potencial de Landau adquiere la forma

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}At\eta^2 + \frac{1}{6}a_6\eta^6 - B\eta, \quad (30)$$

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

$$At\eta + a_6\eta^5 = B. \quad (31)$$

Para  $B = 0$ , tenemos

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

de donde  $\beta_t = 1/4$ .

Derivando 31 respecto a  $B$ ,

$$At\chi + 5a_6\eta^4\chi = 1. \quad (32)$$

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

$$\chi = \frac{1}{At + 5a_6\eta^4} = \frac{1}{4A}(-t)^{-1}. \quad (33)$$

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

Por otro lado, evaluando 31 en  $t = 0$ , tenemos

$$\eta = \frac{1}{a_6}B^{1/5}, \quad (34)$$

por lo que  $\delta_t = 5$ .

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,

$$f(t) = -\frac{1}{2}A \left( \frac{A}{a_6} \right)^{1/2} t^{3/2} - \frac{1}{6}a_6 t^{3/2} \quad (35)$$

$$= -\frac{1}{6}a_6 \left[ 3 \left( \frac{A}{a_6} \right)^{3/2} + 1 \right] t^{3/2}. \quad (36)$$

El calor específico está dado por

$$C = -T \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = \frac{1}{8}a_6 \left[ 3 \left( \frac{A}{a_6} \right)^{3/2} + 1 \right] (-t)^{-1/2}, \quad (37)$$

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