

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 η e igualamos a cero para hallar el mínimo

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

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 η^2 y η^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 $\alpha_t = 1/2$.

(b) Aproximandonos al punto crítico por la línea de segundo orden tenemos que $a_4(T, x) = 0$. Luego, de 27, tenemos

$$t = -\frac{b}{a}\omega \quad \Rightarrow \quad \frac{dt}{d\omega} = -\frac{b}{a}. \quad (38)$$

Aproximandonos por la línea de primer orden, tenemos que $(-a_4)^2 = a_2a_6$. Derivando respecto a ω (considerando $a_6 = \text{cte} \neq 0$), tenemos

$$-6(ct + d\omega) \left(c \frac{dt}{d\omega} + d \right) = \left(a \frac{dt}{d\omega} + b \right) a_6. \quad (39)$$

Evaluando en $t = \omega = 0$, la ecuación anterior se cumple ssi $dt/d\omega = -b/a$. Luego, las pendientes de las curvas de primer y segundo orden en el plano $t-\omega$ y, por lo tanto en el plano $T-x$, son iguales.

Problema 4: Derivada funcional

Sea $f(\mathbf{r})$ una función. Podemos interpretar a $f(\mathbf{r}_1)$ como una funcional $F[f]$ de la forma

$$F[f] := \int f(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) d\mathbf{r} = f(\mathbf{r}_1). \quad (40)$$

Usando la definición de la derivada funcional,

$$\begin{aligned} \frac{\delta f(\mathbf{r}_1)}{\delta f(\mathbf{r}_0)} &= \frac{\delta F}{\delta f(\mathbf{r}_0)} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\int [f(\mathbf{r}) + \epsilon \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) d\mathbf{r} - \int f(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) d\mathbf{r}}{\epsilon} \\ &= \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) d\mathbf{r} \\ &= \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta \eta(\mathbf{r})} \int \frac{1}{2} (\nabla \eta(\mathbf{r}'))^2 d\mathbf{r}' &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\int \frac{1}{2} [\nabla (\eta(\mathbf{r}') + \epsilon \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'))]^2 d\mathbf{r}' - \int \frac{1}{2} (\nabla \eta(\mathbf{r}'))^2 d\mathbf{r}'}{\epsilon} \\ &= \int \nabla \eta(\mathbf{r}') \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\ &= - \int \nabla^2 \eta(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\ &= -\nabla^2 \eta(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

Sea $F[h] = \exp \left[\int h(\mathbf{r}') \eta(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right]$, entonces

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta h(\mathbf{r})} F[h] &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left\{ \exp \left[\int (h(\mathbf{r}') + \epsilon \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \eta(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right] - \right. \\ &\quad \left. - \exp \left[\int h(\mathbf{r}') \eta(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right] \right\} \\ &= F[h] \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left\{ \exp \left[\epsilon \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \eta(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right] - 1 \right\}. \end{aligned}$$

Desarrollando en potencias la exponencial dentro del límite,

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta h(\mathbf{r})} F[h] &= F[h] \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left\{ 1 + \epsilon \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \eta(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' - 1 \right\} \\ &= F[h] \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \eta(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\ &= \eta(\mathbf{r}) F[h] \end{aligned}$$

Problema 5: Funcional de Landau-Ginzburg

Usando la propiedad del problema anterior, tenemos que

$$\langle \eta(\mathbf{r}) \rangle \equiv \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}\eta \, \eta(\mathbf{r}') e^{-\beta L[\eta]} = \frac{1}{\beta} \frac{\delta \ln \mathcal{Z}}{\delta B(\mathbf{r})}. \quad (41)$$

Por otro lado

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &\equiv \frac{\delta \langle \eta(\mathbf{r}) \rangle}{\delta B(\mathbf{r}')} \\ &= \frac{1}{\beta} \frac{\delta}{\delta B(\mathbf{r}')} \left[\frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\delta \mathcal{Z}}{\delta B(\mathbf{r})} \right] \\ &= \frac{1}{\beta} \left[\frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\delta \delta \mathcal{Z}}{\delta B(\mathbf{r}) \delta B(\mathbf{r}')} - \frac{1}{\mathcal{Z}^2} \frac{\delta \mathcal{Z}}{\delta B(\mathbf{r})} \frac{\delta \mathcal{Z}}{\delta B(\mathbf{r}')} \right] \\ &= \beta \left[\langle \eta(\mathbf{r}) \eta(\mathbf{r}') \rangle - \langle \eta(\mathbf{r}) \rangle \langle \eta(\mathbf{r}') \rangle \right] \end{aligned}$$