

3.5 Teoría de Landau

Analicemos las similitudes entre el comportamiento de los modelos de Van der Waals y de Curie-Weiss en el entorno del punto crítico. En dicha región, la ecuación de estado de Van der Waals puede desarrollarse en términos de variables reducidas como (ver problema 1, Guía 1)

$$\pi = 4t - 6t\omega - \frac{3}{2}\omega^3 + \mathcal{O}(\omega^4, t\omega^2) \quad (3.28)$$

donde $\pi \equiv (p - p_c)/p_c$, $\omega \equiv (v - v_c)/v_c$ y $t \equiv (T - T_c)/T_c$. La construcción de Maxwell nos dá que $\omega_g = -\omega_l \propto \sqrt{t}$ y $\pi = 4t$, de manera que el parámetro de orden $\eta = (\omega_g - \omega_l)/2 = \omega_g$ y su parámetro conjugado $B - B_c = \pi - 4t$. Así, el parámetro de orden es solución (en las cercanías del punto crítico) de la Ec.(3.28), la cual debe complementarse con la construcción de Maxwell. Notemos que definiendo una función

$$\Phi(P, T, \omega) = f_0(P, T) + A \left[(\pi - 4t)\omega + 3t\omega^2 + \frac{3}{8}\omega^4 \right] \quad (3.29)$$

donde $f_0(P, T)$ es una función analítica de P y T , A es alguna constante que fija las unidades correctas y el parámetro ω se deja variar de forma independiente, la Ec.(3.28) puede obtenerse *minimizando* la función Φ respecto de ω , para valores dados de P y T . De esta manera, el valor de equilibrio de ω queda determinado enteramente por el problema variacional, incluyendo la construcción de Maxwell.

Por otra parte, hemos visto que la solución del modelo de Curie-Weiss puede obtenerse minimizando una función del parámetro de orden (en este caso, la magnetización) de la forma

$$\Phi(B, T, \eta) = -\frac{1}{\beta} \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\beta}{\beta_c} \eta + \beta B \right) \right] + \frac{1}{2\beta_c} \eta^2$$

En las cercanías del punto crítico $T \approx T_c$, $B \ll 1$. El análisis de las soluciones de la ecuación de Curie-Weiss nos muestra que $\eta = m \sim B^{1/\delta}$ para $T \sim T_c$ con $\delta = 3$, de donde $B \sim \eta^3$. Desarrollando entonces la ecuación anterior en potencias de η hasta $\mathcal{O}(\eta^4)$ tenemos que

$$\Phi(B, T, \eta) = -\frac{1}{\beta} \ln 2 + \frac{1}{2\beta_c} \left(1 - \frac{\beta}{\beta_c}\right) \eta^2 + \frac{1}{4} \frac{\beta^3}{\beta_c^4} \eta^4 - \frac{\beta}{\beta_c} \eta B \quad (3.30)$$

La comparación entre las Ecs.(3.29) y (3.30) nos muestra que ambas presentan exactamente el mismo tipo de desarrollo asintótico en el entorno del punto crítico, lo cual determina que presenten los mismos exponentes críticos. Esta semejanza en la estructura del desarrollo asintótico de estas ecuaciones llevo a L. Landau a sugerir que el mismo tipo de consideraciones podrían aplicarse a *todo tipo* de transiciones de fase. La teoría resultante se conoce como *Teoría Fenomenológica de Landau*. Esta postula que, una vez identificado el parámetro de orden (concepto que fue introducido también por Landau) toda transición de fase puede ser descripta en base a un principio variacional asociado con una función del parámetro de orden y de los parámetros $\{K_i\}$ del sistema $\mathcal{L}(\eta, \{K_i\})$. Esta función se conoce como *funcional de Landau* y el estado de equilibrio del sistema viene dado por el mínimo absoluto de dicha funcional con respecto al parámetro de orden. La energía libre del sistema viene dada entonces por

$$f([K]) = \min_{\eta} \mathcal{L}(\eta, [K])$$

La funcional de Landau debe ser consistente con las simetrías del sistema y se *asume* que la misma es una *función analítica* de η y de $[K]$, con lo cual admite un desarrollo en serie de potencias de η ;

$$\mathcal{L}(\eta, [K]) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n([K]) \eta^n$$

La singularidad en la energía libre es por lo tanto un resultado solo del principio variacional y de las simetrías del sistema. En la fase desordenada el valor del parámetro de orden que minimiza \mathcal{L} tiene que ser $\eta = 0$, mientras que en la fase ordenada, cerca del punto crítico, η tiene que ser pequeño, pero no nulo. Así, para un sistema homogéneo, podemos truncar el desarrollo en serie en algún orden finito, suficientemente cerca del punto crítico. Para una transición de segundo orden, en base a los resultados vistos anteriormente, podemos suponer suficiente conservar

hasta el orden $\mathcal{O}(\eta^4)$ para que toda la física importante cerca de la criticalidad se manifieste. Bajo esta suposición, tenemos que el mínimo de η estará determinado por

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta} = a_1 + 2a_2\eta + 3a_3\eta^2 + 4a_4\eta^3 = 0 \quad (3.31)$$

Los coeficientes del desarrollo pueden determinarse parcialmente usando las simetrías del sistema. Si el campo conjugado al parámetro de orden es $B = 0$ (campo magnético o $\pi - 4t$ en el caso de Van der Waals), tenemos que $\eta = 0$ para $T > T_c$. Dado que los coeficientes se asumen funciones analíticas de todos sus parámetros tenemos que $a_1(T, B = 0) = 0$. Por otra parte, supongamos que el Hamiltoniano del sistema es tal que para $B = 0$ la distribución de probabilidad para η es par en un sistema finito (como ocurre en un ferromagneto). Esta simetría debe reflejarse en la funcional \mathcal{L} . Así, a campo nulo, todos los coeficientes de índice impar deben anularse $a_3 = a_5 = a_7 = \dots = 0$. Entonces, a campo nulo

$$\mathcal{L}(\eta, [K]) = a_0([K], T) + a_2([K], T)\eta^2 + a_4([K], T)\eta^4$$

Notemos que el requerimiento de analiticidad para \mathcal{L} no permite la presencia de términos del tipo $|\eta|$. Además el coeficiente a_4 tiene que ser positivo; de otra manera, \mathcal{L} podría ser minimizada haciendo $|\eta| \rightarrow \infty$, mientras que queremos que η pase de cero a un valor *finito* al atravesar el punto crítico.

$a_0([K], T)$ es simplemente la energía libre en la fase de altas temperaturas, la cual puede asumirse una función suave de todos sus parámetros. Esta representa los grados de libertad que no se encuentran descritos por el parámetro de orden (por ejemplo, los grados de libertad asociados a la energía cinética de las partículas); dado que no interviene para nada en la descripción de las propiedades críticas, en general la vamos a considerar nula (también podemos redefinir $\mathcal{L} \rightarrow \mathcal{L} - a_0$).

Consideremos ahora a_4 . Dado que es analítica, podemos desarrollarla en serie de Taylor en trono de T_c :

$$a_4 = a_4^0 + (T - T_c)a_4^1 + \dots$$

En el régimen asintótico cerca del punto crítico es suficiente con conservar el término de orden cero a_4^0 y considerar a_4 como una constante positiva; la dependencia en la temperatura de los términos de orden superior solo darán una contribución de segundo orden a las propiedades críticas.

En forma semejante podemos desarrollar a_2 :

$$a_2 = a_2^0 + \frac{(T - T_c)}{T_c} a_2^1 + \mathcal{O}((T - T_c)^2)$$

Con las consideraciones anteriores tenemos que la Ec.(3.31) tiene la forma

$$2\eta(a_2(T) + 2a_4\eta^2) = 0$$

la cual tiene como soluciones

$$\eta = 0 \quad y \quad \sqrt{\frac{-a_2(T)}{2a_4}}$$

Ahora bien, para $a_4 > 0$, $\mathcal{L}(\eta)$ presenta dos posibles formas, de acuerdo al signo de $a_2(T)$, tal como se muestra en la Fig.3.9. Para $a_2(T) > 0$ $\mathcal{L}(\eta)$ presenta un mínimo absoluto en $\eta = 0$, consistente con un estado desordenado, mientras que para $a_2(T) < 0$ $\mathcal{L}(\eta)$ presenta dos mínimos simétricos en $\eta_0 = \pm\sqrt{-a_2(T)/2a_4}$ (ver Fig.3.9). Dado que para $T > T_c$, $\eta = 0$, tenemos que $a_2^0 = 0$ y $a_2^1 > 0$. Los términos superiores en el desarrollo de $a_2(T)$ dan una contribución de segundo orden al comportamiento crítico.

Consideremos ahora el caso $B \neq 0$. El coeficiente de menor orden en el desarrollo de \mathcal{L} puede escribirse como $a_1 = cB + \mathcal{O}(B^2)$. De la termodinámica sabemos que la contribución a la energía libre para campos pequeños es $-B\eta$ ($-Bm$ en el caso de sistemas magnéticos ó $-Pv$ en el caso de fluidos) de donde se asume que $c = -1$. Así, arribamos a la expresión general para la funcional de Landau, en el caso de transiciones de segundo orden y en la región crítica,

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}at\eta^2 + \frac{1}{4}b\eta^4 - B\eta \tag{3.32}$$

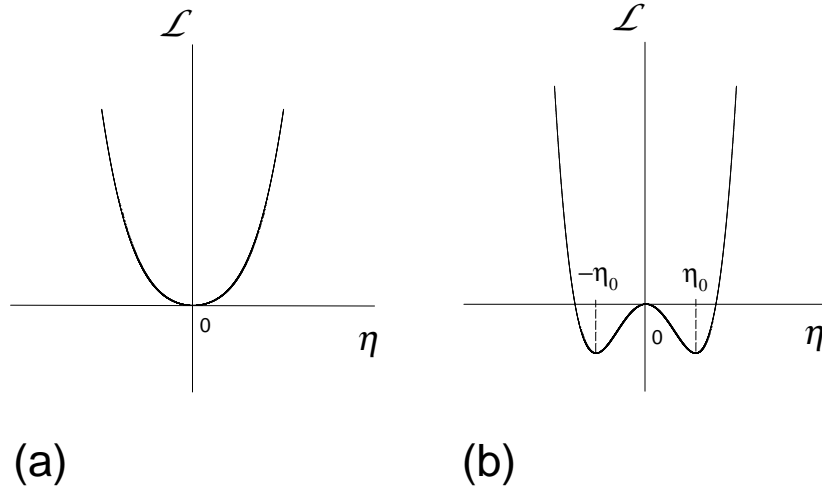


Figura 3.9: Funcional de Landau para $B = 0$. (a) $T > T_c$. (b) $T < T_c$.

donde $t \equiv (T - T_c)/T_c$ es la temperatura reducida y los coeficientes $a > 0$ y $b > 0$ son fenomenológicos y en principio pueden ser obtenidos de una teoría microscópica apropiada.

Tenemos entonces el siguiente comportamiento asintótico para el parámetro de orden en equilibrio

$$\eta_0 = \begin{cases} 0 & \text{para } t > 0 \\ \pm \sqrt{\frac{-at}{b}} & \text{para } t < 0 \end{cases} \quad (3.33)$$

de donde el exponente crítico $\beta = 1/2$. Notemos que la teoría de Landau tampoco nos da el valor de T_c ; este tiene que ser determinado a partir de una teoría microscópica. Para $B = 0$ y $t > 0$, $\mathcal{L} = 0$, ó bien $f(T) - a_0(T) = 0$. Para $t < 0$ tenemos

$$f = -\frac{1}{2} \frac{a^2 t^2}{b}$$

El calor específico puede ser calculado entonces como

$$C = -T \frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \sim \begin{cases} 0 & \text{para } T > T_c \\ \frac{a^2}{bT_c} & \text{para } T < T_c \end{cases}$$

Vemos que C presenta una discontinuidad en T_c y por lo tanto el exponente crítico $\alpha = 0_{dis}$.

Consideremos ahora el caso $B \neq 0$. Derivando la Ec.(3.41) obtenemos la ecuación de estado

$$at\eta + b\eta^3 = B \quad (3.34)$$

En la isoterma crítica $t = 0$ tenemos $B \propto \eta^3$ y por lo tanto $\delta = 3$. Derivando la ecuación anterior respecto de B obtenemos

$$\chi(B) = \frac{\partial \eta(B)}{\partial B} = \frac{1}{at + 3b\eta(B)^2}$$

donde $\eta(B)$ es solución de la Ec.(3.34). Para $B = 0$ y $t > 0$ tenemos que $\eta = 0$ y por lo tanto $\chi = (at)^{-1}$. Para $t < 0$, $\eta^2 = -at/b$ y $\chi = (-2at)^{-1}$.

Hasta ahora hemos asumido siempre que el exponente crítico asociado con cantidades divergentes es el mismo a ambos lados de la singularidad. De hecho es así, como veremos mas adelante. Sin embargo, este hecho es no trivial y por esto se suelen distinguir los exponentes γ y γ' a izquierda y derecha de la singularidad respectivamente ($t < 0$ y $t > 0$). Vemos aqui que la teoría de Landau predice correctamente que $\gamma = \gamma'$, y ademas $\gamma = 1$.

Hasta aqui hemos considerado las teorías de campo medio solamente en sistemas con parámetro de orden escalar. Sin embargo, todo el análisis anterior puede generalizarse para un parámetro de orden vectorial de dimensión D . Puede verse entonces, que la funcional de Landau mas general compatible con las simetrías de un sistema homogéneo, isotrópico, con una transición de segundo orden, del tipo descrito por el modelo n – *vectorial*, tiene la forma

$$\mathcal{L} = at|\vec{\eta}|^2 + \frac{1}{2}b|\vec{\eta}|^4 - \vec{B} \cdot \vec{\eta} \quad (3.35)$$

y la condición extremal viene dada por

$$\nabla_{\eta} \mathcal{L} = 0$$

Los exponentes críticos en este caso son claramente los mismos que en el anterior. Esta universalidad de los exponentes críticos respecto de la dimensión del parámetro de orden es otra de las predicciones incorrectas de las teorías de campo medio.

3.5.1 Transiciones de primer orden y puntos tricríticos en la Teoría de Landau

En la descripción anterior hemos asumido que el coeficiente de orden cuarto en el desarrollo de \mathcal{L} es positivo. Es posible que este coeficiente sea negativo? Efectivamente, la adición de otros parámetros microscópicos en el Hamiltoniano (por ejemplo, el término cuadrático proporcional a D en el modelo BEG) pueden ocasionar este efecto. En este caso, las consideraciones de estabilidad nos dicen que el siguiente término en el desarrollo en serie de potencias tiene que ser positivo; dado que la funcional de Landau es par en η , el siguiente término es de orden sexto proporcional a a_6 . Llamemos de manera genérica x a los otros parámetros. Podemos entonces escribir:

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

donde $a_6(T, x) > 0 \forall T, x$. La condición extremal

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta} = a_2\eta + a_4\eta^3 + a_6\eta^5 = \eta(a_2 + a_4\eta^2 + a_6\eta^4) = 0$$

nos da como soluciones $\eta = 0$ ó

$$\eta_{\pm}^2 = \frac{1}{2a_6} \left[-a_4 \pm \sqrt{a_4^2 - 4a_2a_6} \right]$$

Para $a_4 > 0$ y $a_2 > 0$ solo tenemos una solución real $\eta = 0$, mientras que para $a_4 > 0$ y $a_2 < 0$, tenemos otras dos soluciones reales η_{\pm}^2 que son mínimos de \mathcal{L} , mientras que $\eta = 0$ se vuelve máximo, recuperando al caso anterior.

En el caso $a_4 < 0$ podemos tener cinco soluciones reales de la condición extremal para \mathcal{L} , cuando $a_2 > 0$; si $a_4 < 0$ y $a_2 < 0$, solo tenemos tres soluciones reales: $\eta = 0$, que tiene que ser un máximo por simetría y dos mínimos simétricos η_{\pm}^2 . Para $a_4 < 0$ y $a_2 > 0$ tendremos cinco soluciones reales si $a_4^2 - a_2 a_6 > 0$. Si analizamos la derivada segunda

$$\frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \eta^2} = a_2 + 3a_4 \eta^2 + 5a_6 \eta^4$$

$$\left. \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \eta^2} \right|_{\eta=0} = a_2$$

vemos que para $a_2 > 0$ la solución $\eta = 0$ es siempre un mínimo. Dado que \mathcal{L} es continua, por simetría las soluciones η_{\pm}^2 tienen que ser mínimos y las soluciones η_{\pm}^2 máximos, tal como se muestra en la Fig.3.10. Estos mínimos pueden ser locales (en cuyo caso $\eta = 0$ es absoluto, como se muestra en la Fig.3.10) o absolutos. Al variar los parámetros T y x podemos pasar de una a otra situación, lo cual corresponde a una transición de *primer orden*, ya que el parámetro de orden cambia de manera discontinua cuando las energías libres correspondientes a los estados $\eta = 0$ y $\eta_{\pm}^2 \neq 0$ se igualan. Ahora bien, debemos tener cuidado ya que el presente desarrollo solo vale para $|\eta| \ll 1$; para valores grandes del parámetro de orden aún podemos tener una transición de primer orden, pero en ese caso no podemos truncar el desarrollo en serie de potencias ya que $|\eta_{\pm}|$ puede no ser pequeño y debemos considerar la funcional de Landau completa. Las soluciones de equilibrio para el parámetro de orden tomarán valores pequeños cuando $|a_2| \ll 1$ y $|a_4| \ll 1$. En esta situación es posible que para una combinación particular de valores se cumpla que $a_2(T_t, x_t) = 0$ y $a_4(T_t, x_t) = 0$. Los valores (T_t, x_t) , soluciones de las ecuaciones anteriores, definen un *punto tricrítico* (PTC). Ahora bien, para $a_4 > 0$ la condición $a_2(T, x) = 0$ define una línea de puntos críticos ó *línea crítica o de segundo orden* $T_c = T_c(x)$. El punto tricrítico corresponde por lo tanto a el punto terminal de la línea crítica (Landau lo llamó “punto crítico de la línea de segundo orden”). En el entorno del PTC (donde vale el desarrollo hasta orden 6) para $a_4 < 0$ tendremos una *línea de primer orden* definida por la condición

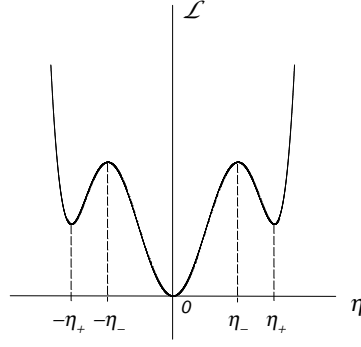


Figura 3.10: Funcional de Landau para $a_4 < 0$ y $a_2 > 0$.

$$\mathcal{L}(\eta_+) = \mathcal{L}(0) = 0$$

lo cual nos dá la ecuación

$$a_4(T, x) = -\sqrt{\frac{a_2(T, x)a_6(T, x)}{3}}$$

El diagrama de fases esquemático en el espacio (a_2, a_4) se muestra en la Fig.3.11; en la misma se muestran las diferentes formas que adopta la funcional de Landau en las diferentes regiones de este diagrama. Al pasar al espacio (T, x) este diagrama toma la forma que se muestra en la Fig.3.12. Es facil ver (queda como ejercicio para el lector) que las líneas de primer y segundo orden tienen siempre la misma pendiente en el punto tricrítico.

En las cercanías del PTC podemos desarrollar

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

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

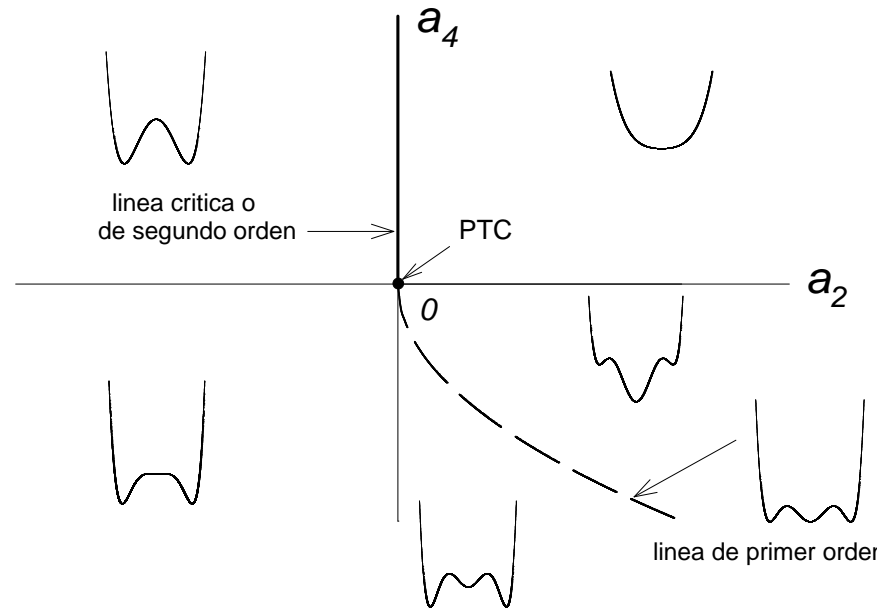


Figura 3.11: Diagrama de fases en el entorno de un punto tricrítico en el espacio (a_2, a_4) según la teoría de Landau. En cada región se muestran las formas características de la funcional de Landau.

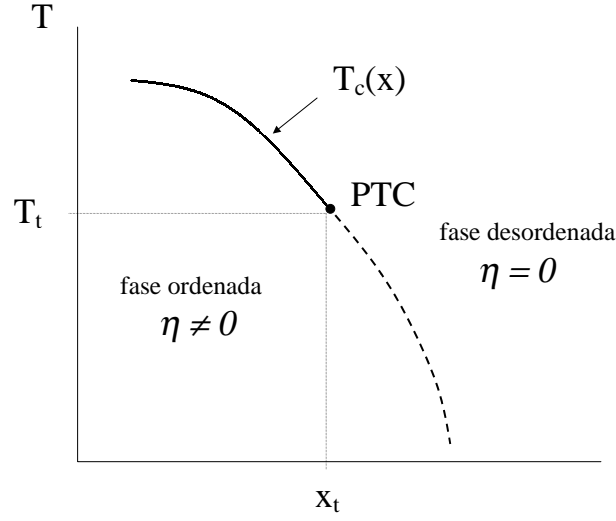


Figura 3.12: Diagrama de fases esquemático de un sistema con un punto tricrítico en el espacio (T, x) .

donde los coeficientes a, b, c, d son todos positivos y $t \equiv (T - T_t)/T_t$, $\omega \equiv (x - x_t)/x_t$. Podemos analizar el comportamiento asintótico de la magnetización en el entorno del PTC aproximándonos por la línea $a_4 = 0$, con lo cual $\omega = -(c/d)t$. Así

$$a_2 = (a - bc/d)t = a_0 t$$

A campo no nulo la funcional de Landau tiene entonces la forma

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}a_0 t \eta^2 + \frac{1}{6}a_6 \eta^6 - B\eta$$

donde a_6 se asume constante en el entorno del PTC. La ecuación de estado entonces es

$$a_0 t \eta + a_6 \eta^5 = B$$

Para $B = 0$ tenemos entonces

$$\eta = \begin{cases} 0 & \text{para } t > 0 \\ \pm \left(\frac{a_0}{a_6}\right)^{1/4} (-t)^{1/4} & \text{para } t < 0 \end{cases} \quad (3.36)$$

de donde $\beta_t = 1/4$. Mediante un análisis semejante puede verse que $\alpha_t = 1/2$, $\gamma_t = \gamma'_t = 1$ y $\delta_t = 5$. Nuevamente podemos verificar que los exponentes tricríticos clásicos satisfacen las igualdades de Rushbrooke y Griffiths.

Vamos a remarcar que en todo lo expuesto solo hemos considerado potencias pares en el desarrollo de \mathcal{L} . Esto se basa en la simetría del Hamiltoniano. Si esta simetría no está presente, debemos considerar también potencias impares. En particular, un término cúbico en el desarrollo de \mathcal{L} puede dar lugar también a una transición de primer orden.

Finalmente vamos a mencionar que la predicción de una transición de primer orden en una teoría de campo medio puede ser incorrecta. Las fluctuaciones que se desprecian en estas teorías pueden cambiar el orden de la transición. Un ejemplo de esto es el modelo de Potts de 3 estados, para el cual la teoría de campo medio predice una transición de primer orden, mientras que la solución exacta del modelo solo presenta transición de primer orden para $q \geq 4$. La recíproca también es cierta. En cierto tipo de transición superconductor-metal normal la teoría de campo medio predice una transición continua, mientras que la transición real es de primer orden.

3.6 La Teoría de Landau-Ginzburg

En todo lo expuesto hasta aquí acerca de las teorías de campo medio no hemos mencionado para nada los exponentes críticos ν y η . Esto se debe a que en las teorías de campo medio las fluctuaciones son despreciadas completamente. Esto se puede ver claramente a partir del principio variacional, en el cual toda la termodinámica se obtiene a partir de un Hamiltoniano de partículas independientes, con lo cual $\langle S_i S_j \rangle = \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle$ y la función de correlación conectada resulta idénticamente nula. No obstante, si pensamos las teorías de campo medio como una aproximación de modelos con interacciones de corto alcance, podemos considerar como son las fluc-

tuaciones en torno de esta solución aproximada. En términos de la Teoría de Landau, esto puede analizarse si permitimos un parámetro de orden *no homogéneo*, esto es, un parámetro de orden que varía en distintos punto del espacio $\eta = \eta(\vec{r})$. En un sistema uniforme η es constante en el equilibrio. Un parámetro de orden con variaciones espaciales puede obtenerse como resultado de la aplicación de un campo externo inhomogéneo $B(\vec{r})$. Para considerar un parámetro de orden inhomogéneo tenemos que generalizar la Teoría de Landau. Esto puede realizarse como sigue.

Pensemos por simplicidad en un sistema de spines. Hemos visto ya que en el entorno del punto crítico la longitud de correlación ξ crece. De esta manera, esperamos que en parches de tamaño del orden de ξ los spines apunten mayoritariamente en la misma dirección, con lo cual dentro de dichas regiones la magnetización será aproximadamente constante. Esto sugiere que, si dividimos el sistema en bloques de dimensión lineal $\Lambda^{-1} \sim \xi(T)$ tendremos una magnetización bastante bien definida $m_\Lambda(\vec{r})$ en cada bloque centrado en \vec{r} y podremos asignar un valor a la funcional de Landau en dicho bloque. La magnetización local se define entonces como

$$m_\Lambda(\vec{r}) = \frac{1}{N_\Lambda} \sum_{i \in \vec{r}} S_i$$

donde $N_\Lambda = \Lambda^{-d}/a^d$ es el número de spines en el bloque (a es el parámetro de red). Dado que cerca del punto crítico $\xi \gg a$, si elegimos $\Lambda^{-1} < \xi$, tendremos que $a \ll \Lambda^{-1}$; así, habrá un número grande spines en cada bloque ($\mathcal{O}(\Lambda^{-d}/a^d)$). Dividir el sistema en bloques de esta forma se suele denominar “*coarse graining*” (aproximación de “grano grueso”). Por construcción, el parámetro de orden local obtenido de esta manera no va a presentar fluctuaciones grandes en la escala del espaciado de red a y va a variar suavemente en el espacio para escalas mucho mayores que Λ^{-1} , sin componentes de Fourier mayores que Λ . Por supuesto que esta aproximación solo tendrá sentido si los resultados obtenidos no dependen de la elección de Λ , al menos dentro de cierto rango de escalas. En la práctica se asume que esto es así, y la consistencia de la aproximación se verifica a posteriori de acuerdo a las predicciones que se derivan de la misma. En lo que sigue vamos entonces a omitir el subíndice

Λ .

Como debemos construir entonces la funcional de Landau en esta aproximación?

Una posibilidad sería

$$L = \sum_{\vec{r}} \mathcal{L}(m(\vec{r}))$$

donde $\mathcal{L}(\eta)$ es la funcional de un sistema homogéneo. No obstante, rápidamente nos damos cuenta de que esta elección es incorrecta, ya que la minimización de L se obtiene minimizando la funcional en cada bloque de manera independiente; de esta manera, podemos obtener bloques adyacentes con magnetizaciones opuestas. Pero es obviamente desfavorable energéticamente tener grandes diferencias entre los valores de la magnetización en bloques adyacentes: las paredes de dominio siempre aumentan la energía. Necesitamos entonces agregar un término que penalize (esto es, aumente el valor de L) en dichas situaciones. La expresión analítica mas simple de este tipo es

$$\sum_{\vec{r}} \sum_{\vec{\delta}} \frac{c}{2} \left(\frac{m(\vec{r}) - m(\vec{r} + \vec{\delta})}{\Lambda^{-1}} \right)^2$$

donde $\vec{\delta}$ es un vector de magnitud Λ^{-1} que apunta de \vec{r} al centro de un bloque adyacente. La constante $c > 0$ es en principio dependiente de la temperatura. Dado que asumimos que $m(\vec{r})$ varía suavemente en el espacio (a escalas mucho mayores que Λ^{-1}) podemos tomar una aproximación continua (siempre cerca del punto crítico)

$$L = \int_{\Omega} d\vec{r} \left[\frac{1}{2} a t m(\vec{r})^2 + \frac{1}{4} b m(\vec{r})^4 - B(\vec{r}) m(\vec{r}) + \frac{c}{2} (\nabla m(\vec{r}))^2 \right] \quad (3.37)$$

donde $a, b > 0$ y t es la temperatura reducida. Esta expresión es ahora una auténtica *funcional* del parámetro de orden $m(\vec{r})$. Una funcional F es una relación que asigna un número a una función $f(\vec{x})$ definida en un cierto dominio y la designaremos genéricamente como $F[f(\vec{x})]$. La funcional anterior $L[\eta(\vec{r})]$, para un parámetro de orden genérico $\eta(\vec{r})$ se conoce como *Funcional de Landau-Ginzburg* ó *Hamiltoniano efectivo de Landau-Ginzburg*, por motivos que quedarán claros en breve.

La aplicación de la Teoría de Landau requiere entonces encontrar la función completa $\eta(\vec{r})$ que minimiza la funcional de Landau, esto es, encontrar la función particular $\eta(\vec{r})$ tal que, ante variaciones pequeñas $\eta(\vec{r}) \rightarrow \eta(\vec{r}) + \delta\eta(\vec{r})$, la variación

$$\delta L = L[\eta(\vec{r}) + \delta\eta(\vec{r})] - L[\eta(\vec{r})] = 0.$$

Para esto necesitamos entonces introducir el concepto de *derivada funcional*. Tomemos por simplicidad una funcional $F[f(x)]$ de una función de una variable. Estamos interesados en ver que le sucede a F si producimos un cambio pequeño a $f(x)$ en el entorno de un punto determinado x_0 . Sea $\Delta(\omega, x)$ una familia paramétrica de funciones de x que satisfacen

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Delta(\omega, x) dx = 1 \quad y \quad \lim_{\omega \rightarrow 0} \Delta(\omega, x) = 0 \quad \forall x \neq 0$$

En otras palabras, para $\omega \rightarrow 0$ las funciones $\Delta(\omega, x)$ tienden a una delta de Dirac $\delta(x)$. La **derivada funcional** de $F[f]$ puede ser definida entonces como

$$\frac{\delta F[f(x)]}{\delta f(x_0)} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[f(x) + \epsilon \Delta(\omega, x - x_0)] - F[f(x)]}{\epsilon}$$

Notemos que la derivada funcional de $F[f]$ se define con respecto a f evaluada en un punto particular x_0 . El lado derecho de la definición nos mide el ritmo de cambio de F cuando f sufre variaciones en torno de x_0 , para luego tomar el límite de este cambio cuando la perturbación en f se torna completamente localizada e infinitesimal. La derivada funcional es una funcional de f y una función de x_0 . En la práctica podemos simplificar la expresión anterior tomando a priori el límite $\omega \rightarrow 0$ y usar directamente la delta de Dirac:

$$\frac{\delta F[f(x)]}{\delta f(x_0)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[f(x) + \epsilon \delta(x - x_0)] - F[f(x)]}{\epsilon} \quad (3.38)$$

Solo en las raras (en física) situaciones en las cuales el significado de $F[f(x) + \epsilon \delta(x - x_0)]$ no es inmediato se necesita utilizar el procedimiento de límite completo. Podemos ahora escribir una expresión para el cambio en F resultante de un cambio

arbitrario (pero pequeño) en $f(x)$, el cual ya no es localizado. Si $f(x)$ cambia a $f(x) + \delta f(x)$ entonces el cambio en F es

$$\delta F = \int dx_0 \frac{\delta F[f(x)]}{\delta f(x_0)} \delta f(x_0) + \mathcal{O}((\delta f)^2) \quad (3.39)$$

Tomemos por ejemplo

$$F[f(x)] = \int_a^b g(f(x)) dx$$

donde $g(x)$ es una función suave determinada fija. De la definición anterior

$$\begin{aligned} \frac{\delta F[f(x)]}{\delta f(x_0)} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\int_a^b g(f(x) + \epsilon \delta(x - x_0)) dx - \int_a^b g(f(x)) dx}{\epsilon} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\int_a^b [g(f(x)) + g'(f(x)) \epsilon \delta(x - x_0) + \mathcal{O}(\epsilon^2)] dx - \int_a^b g(f(x)) dx}{\epsilon} \\ &= g'(f(x_0)) \end{aligned}$$

Analicemos ahora un cambio $f(x) \rightarrow f(x) + \delta f(x)$, con $|\delta f(x)| \ll 1 \forall x$:

$$\begin{aligned} \delta F &= F[f(x) + \delta f(x)] - F[f(x)] \\ &= \int_a^b [g(f(x)) + g'(f(x)) \delta f(x) + \mathcal{O}((\delta f(x))^2)] dx - \int_a^b g(f(x)) dx \\ &= \int_a^b g'(f(x)) \delta f(x) dx + \mathcal{O}((\delta f(x))^2) = \int_a^b \frac{\delta F[f]}{\delta f(x)} \delta f(x) dx + \mathcal{O}((\delta f)^2) \end{aligned}$$

Al igual que la derivada funcional, una función $f(x_1)$ puede ser considerada una funcional de f y una función del punto particular x_1 en la cual esta evaluada. De la definición tenemos que

$$\frac{\delta f(x_1)}{\delta f(x_0)} = \delta(x_0 - x_1)$$

Supongamos ahora que F es una funcional de una función $g(y)$, la cual es a su vez una funcional de una función f . Supongamos que $f(x)$ cambia a $f(x) + \delta f(x)$, donde $\delta f(x)$ es pequeño. Esto va a producir un cambio de $g(y)$ a $g(y) + \delta g(y)$ y de F a $F + \delta F$. De la Ec.(3.39) tenemos que

$$\delta F[g] = \int dy \frac{\delta F[g]}{\delta g(y)} \delta g(y)$$

$$\delta g(y) = \int dz \frac{\delta g(y)}{\delta f(z)} \delta f(z)$$

Combinando estas dos ecuaciones e invirtiendo el orden de integración tenemos

$$\delta F = \int dz \left[\int dy \frac{\delta F[g]}{\delta g(y)} \frac{\delta g(y)}{\delta f(z)} \right] \delta f(z)$$

de donde obtenemos la *regla de la cadena* para la diferenciación funcional:

$$\frac{\delta F}{\delta f(z)} = \int dy \frac{\delta F}{\delta g(y)} \frac{\delta g(y)}{\delta f(z)}$$

Para una funcional de una función vectorial $\eta(\vec{r})$ el lector puede verificar los siguientes resultados

$$\frac{\delta}{\delta \eta(\vec{r})} \int d\vec{r}' \frac{1}{2} (\nabla \eta(\vec{r}'))^2 = -\nabla^2 \eta(\vec{r})$$

$$\frac{\delta}{\delta h(\vec{r})} \exp \left(\int d\vec{r}' h(\vec{r}') \eta(\vec{r}') \right) = \eta(\vec{r}) \exp \left(\int d\vec{r}' h(\vec{r}') \eta(\vec{r}') \right)$$

Retomemos ahora nuestro problema variacional. El parámetro de orden $\eta(\vec{r})$ que minimiza la funcional de Landau Ginzburg se obtiene de la condición

$$\frac{\delta L[\eta]}{\delta \eta(\vec{r})} = 0$$

Usando los resultados anteriores esto nos lleva a la ecuación diferencial

$$-c\nabla^2 \eta(\vec{r}) + a\eta(\vec{r}) + b\eta(\vec{r})^3 - B(\vec{r}) = 0 \quad (3.40)$$

Para un sistema uniforme tendremos que $\eta = cte$ y recuperamos el resultado de la teoría de Landau. En presencia de un campo no uniforme la solución de equilibrio según la Teoría de Landau vendrá dada por la solución de la ecuación anterior.

Ahora bien, la funcional de Landau-Ginzburg admite una interpretación bastante interesante si analizamos con un poco mas de detalle el proceso de coarse graining. Pensemos nuevamente en el sistema de spines y sea $H(\{S_i\})$ el Hamiltoniano correspondiente. La función partición puede escribirse como

$$Z = \text{Tr}_{\{S_i\}} e^{-\beta H(\{S_i\})} = \text{Tr}_{\eta(\vec{r})} \text{Tr}'_{\{S_i\}} e^{-\beta H(\{S_i\})}$$

La traza $\text{Tr}'_{\{S_i\}}$ indica una traza parcial sobre todas las configuraciones de spines *compatibles* con un dado valor dado del parámetro de orden $\eta(\vec{r})$, mientras que la traza $\text{Tr}_{\eta(\vec{r})}$ indica una suma sobre todas las diferentes configuraciones del parámetro de orden. La cantidad

$$\text{Tr}'_{\{S_i\}} e^{-\beta H(\{S_i\})}$$

resulta entonces una funcional de $\eta(\vec{r})$ que puede expresarse como

$$\text{Tr}'_{\{S_i\}} e^{-\beta H(\{S_i\})} = e^{-\beta F[\eta(\vec{r})]}$$

y por lo tanto

$$Z = \text{Tr}_{\eta(\vec{r})} e^{-\beta F[\eta(\vec{r})]}$$

En la aproximación continua que estamos considerando, donde $\eta(\vec{r})$ se asume una función de variación suave, la suma anterior suele expresarse a veces como

$$Z = \int \mathcal{D}\eta(\vec{r}) e^{-\beta F[\eta(\vec{r})]}$$

donde la notación $\int \mathcal{D}\eta(\vec{r})$ indica una *integral funcional*, la cual conceptualmente significa una suma sobre todas las posibles funciones de variación suave $\eta(\vec{r})$. La evaluación de una integral de este tipo requiere de una serie de técnicas matemáticas propias. Sin embargo, a los fines del presente curso nos basta con esta definición conceptual y no vamos a entrar en los detalles de ese tipo de cálculo. Notemos que $e^{-\beta F[\eta(\vec{r})]}$ resulta entonces proporcional a la probabilidad de encontrar una configuración $\eta(\vec{r})$, con lo cual $F[\eta(\vec{r})]$ admite la interpretación de un *Hamiltoniano*

efectivo, al nivel de la aproximación semi-macroscópica coarse-grained. La traza parcial utilizada para su cálculo, por otra parte, involucra en cada bloque la suma sobre *un número finito* de grados de libertad. Podemos entonces asumir $F[\eta(\vec{r})]$ como una función *analítica* tanto de $\eta(\vec{r})$ como de los parámetros microscópicos del sistema, admitiendo por lo tanto un desarrollo en serie de potencias del parámetro $\eta(\vec{r})$ y de sus derivadas espaciales. En el entorno del punto crítico serán por lo tanto aplicables *exactamente las mismas consideraciones* utilizadas para derivar la funcional de Landau-Ginzburg, de donde $F[\eta(\vec{r})] = L[\eta(\vec{r})]$. Así, tenemos que

$$e^{-\beta N f[K]} = Z = \int \mathcal{D}\eta(\vec{r}) e^{-\beta L[\eta(\vec{r})]}$$

Es importante notar que, aún en ausencia de campo externo (esto es, para un sistema homogéneo) el resultado anterior *no es* el mismo que el de la teoría de Landau. La funcional de Landau-Ginzburg nos da un modelo fenomenológico, continuo, en el cual sí están presentes las fluctuaciones. La Teoría de Landau surge de despreciar las fluctuaciones en torno del valor del parámetro de orden η_0 que minimiza el Hamiltoniano efectivo $L[\eta(\vec{r})]$, esto es, de asumir que la única contribución importante a la función partición es

$$e^{-\beta N f[K]} = Z \sim e^{-\beta L[\eta_0]} = e^{-\beta N \mathcal{L}(\eta_0)}$$

donde $\eta_0(\vec{r})$ es solución de la Ec.(3.40).

En presencia de un campo externo inhomogéneo $B(\vec{r})$ la energía libre y todos los valores medios derivados serán funcionales del campo $B(\vec{r})$. Utilizando los resultados presentados anteriormente para derivadas funcionales es fácil ver que

$$\langle \eta(\vec{r}) \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\eta \, \eta(\vec{r}) e^{-\beta L[\eta]} = \frac{1}{\beta} \frac{\delta \ln Z}{\delta B(\vec{r})} \quad (3.41)$$

Podemos definir además la *susceptibilidad generalizada*

$$\chi(\vec{r}, \vec{r}') \equiv \left. \frac{\delta \langle \eta(\vec{r}) \rangle}{\delta B(\vec{r}')} \right|_{B(\vec{r})=0}$$

que nos mide la respuesta del parámetro de orden en \vec{r} a un campo débil $B(\vec{r})$, ya que

$$\delta \langle \eta(\vec{r}) \rangle = \int d\vec{r}' \chi(\vec{r}, \vec{r}') B(\vec{r}')$$

Es facil ver (queda como ejercicio para el lector) que

$$\chi(\vec{r}, \vec{r}') = \beta [\langle \eta(\vec{r}) \eta(\vec{r}') \rangle - \langle \eta(\vec{r}) \rangle \langle \eta(\vec{r}') \rangle] = \beta C_c^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}') \quad (3.42)$$

donde para un sistema con invariancia traslacional $\chi(\vec{r}, \vec{r}') = \chi(\vec{r} - \vec{r}')$ y $C_c^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}') = C_c^{(2)}(\vec{r} - \vec{r}')$. Es facil verificar que la susceptibilidad isotérmica, con respecto a un campo uniforme B , satisface

$$\chi_T = \frac{\partial \langle \eta \rangle}{\partial B} = \int \chi(\vec{r}) d\vec{r} = \beta \int C_c^{(2)}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3.43)$$

donde

$$\langle \eta \rangle = \frac{1}{V} \int_{\Omega} \langle \eta(\vec{r}) \rangle d\vec{r}$$

y V es el volumen de la muestra.

Podemos ahora analizar las correlaciones entre fluctuaciones en torno de la solución de la Teoría de Landau. En esta aproximación tenemos de la Ec.(3.41) que $\langle \eta(\vec{r}) \rangle = \eta_0(\vec{r})$, donde $\eta_0(\vec{r})$ es solución de la Ec.(3.40). Derivando la Ec.(3.40) con respecto a $B(\vec{r}')$ tenemos que

$$\left(-c\nabla^2 + at + 3b\eta_0(\vec{r})^2 \right) \frac{\delta \eta_0(\vec{r})}{\delta B(\vec{r}')} - \delta(\vec{r} - \vec{r}') = 0$$

o bien, a campo nulo

$$\beta \left(-c\nabla^2 + at + 3b\eta_0^2 \right) C_c^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

Asumiendo la invariancia traslacional podemos escribir la ecuación anterior como

$$\left(-\nabla^2 + \xi^{-2} \right) C_c^{(2)}(\vec{r}) = \frac{k_B T}{c} \delta(\vec{r})$$

donde

$$\xi \equiv \left(\frac{at + 3b\eta_0^2}{c} \right)^{-1/2} = \begin{cases} \left(\frac{c}{at} \right)^{1/2} & \text{para } T > T_c \\ \left(\frac{c}{-2at} \right)^{1/2} & \text{para } T < T_c \end{cases} \quad (3.44)$$

donde hemos usado la Ec.(3.33). Haciendo el cambio de variables $\vec{\rho} = \vec{r}/\xi$ tenemos que

$$\left(-\nabla_{\vec{\rho}}^2 + 1 \right) C(\vec{\rho}) = g\delta(\vec{\rho})$$

donde $C(\vec{\rho}) = C_c^{(2)}(\vec{\xi}\rho)$ y

$$g = \frac{k_B T \xi^{2-d}}{c}$$

Dado que $\delta(\vec{\rho})$ tiene simetría esférica, podemos escribir el Laplaciano en coordenadas polares en d dimensiones:

$$\left[-\frac{1}{\rho^{d-1}} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho^{d-1} \frac{\partial}{\partial \rho} + 1 \right] C(\rho) = g\delta(\rho) \quad (3.45)$$

La Ec.(3.45) es una ecuación diferencial lineal, la cual puede ser resuelta en términos de las funciones de Bessel esféricas modificadas de tercer tipo $K_n(\rho)$:

$$C(\rho) = \frac{k_B T}{c} \xi^{2-d} (2\pi)^{-d/2} \rho^{-(d-2)/2} K_{(d-2)/2}(\rho) \quad \text{para } d \geq 2 \quad (3.46)$$

Las funciones de Bessel K_n tiene los siguientes comportamientos asintóticos

$$K_n(\rho) \sim \left(\frac{\pi}{2\rho} \right)^{1/2} e^{-\rho} \quad \text{para } \rho \rightarrow \infty$$

$$K_n(\rho) \sim \frac{\Gamma(n)}{2} \left(\frac{\rho}{2} \right)^{-n} \quad \text{para } \rho \rightarrow 0$$

$$K_0(\rho) \sim -\ln \rho \quad \text{para } \rho \rightarrow 0$$

Para $T \neq T_c$, de la Ec.(3.44) tenemos que ξ es finita y $\xi \rightarrow \infty$ para $T \rightarrow T_c$. Para $T \neq T_c$ y $r \gg \xi$ ($\rho \gg 1$) tenemos que

$$C_c^{(2)}(r) \propto \frac{e^{-r/\xi}}{r^{(d-2)/2}} \xi^{-(d-3)/2}$$

de donde efectivamente ξ es la longitud de correlación. De la Ec.(3.44) vemos entonces que $\nu = 1/2$. Para $T \rightarrow T_c$ la longitud de correlación diverge y debemos entonces considerar el comportamiento asintótico de las funciones de Bessel para $\rho \rightarrow 0$. Reemplazando en las expresiones anteriores tenemos entonces que

$$C_c^{(2)}(r) \propto \frac{1}{r^{d-2}}$$

de donde el exponente crítico de correlación resulta $\eta = 0$. Esto completa el conjunto de los exponentes críticos en las teorías de campo medio.

Finalmente, podemos usar los resultados anteriores para estudiar la consistencia de las teorías de campo medio. Dado que estas se basan en despreciar las fluctuaciones del parámetro de orden, tenemos que estimar estas fluctuaciones, para lo cual podemos utilizar la función de correlación:

$$C_c^{(2)}(r) = \beta \langle (\eta(\vec{r}) - \langle \eta(\vec{r}) \rangle) (\eta(0) - \langle \eta(0) \rangle) \rangle.$$

Podemos entonces analizar la importancia relativa de estas fluctuaciones estudiando la cantidad

$$E = \frac{\left| \int_{V'} C_c^{(2)}(r) d\vec{r} \right|}{\int_{V'} \eta(\vec{r})^2 d\vec{r}}$$

donde V' es una región de dimensión lineal de orden ξ ($V' = \xi^d$), ya que sabemos que para regiones de mayor tamaño las fluctuaciones se descorrelacionan. Si $E \ll 1$ la teoría de campo medio es una aproximación razonable y es auto-consistente, ya que para hacer este cálculo estamos suponiendo que las fluctuaciones son despreciables frente al campo medio y el resultado de este cálculo no viola la premisa. Por otra parte, si $E > 1$ la teoría se vuelve inconsistente, ya que la predicción viola la premisa bajo la cual fué obtenida. Esto se conoce como *criterio de Ginzburg*. Para $T < T_c$, escribiendo $\xi(T) = \xi(1)|t|^{-1/2}$ ($\xi(1)$ nos dá una estimación de la longitud de correlación lejos de T_c), el denominador es simplemente

$$\frac{a\xi^d|t|}{b} = \frac{a}{b}\xi(1)^d|t|^{1-d/2}$$

Para el numerador podemos usar la Ec.(3.43)

$$\int_{V'} C_c^{(2)}(r) d\vec{r} \approx k_B T \chi_T \sim \frac{k_B T_c}{2a|t|}$$

ya que la función de correlación decae a cero rápidamente para distancias mayores que ξ . De esta manera

$$E = \frac{bk_B T_c}{2a^2 \xi(1)^d} \frac{1}{|t|^{2-d/2}} = \frac{k_B}{2\Delta C \xi(1)^d} \frac{1}{|t|^{(4-d)/2}}$$

donde ΔC es la discontinuidad en el calor específico en la transición. La condición de consistencia $E \ll 1$ requiere entonces que

$$|t|^{(4-d)/2} \gg \frac{k_B}{2\Delta C \xi(1)^d} \equiv t_{LG}^{(4-d)/2}$$

donde t_{LG} es la temperatura reducida que marca el comienzo de la **región crítica**. Para $|t| < t_{LG}$ las fluctuaciones dominan la termodinámica y las predicciones de la teoría de Landau son incorrectas. Lo mas notable de este resultado es su dependencia con la dimensión espacial d . Para $d > 4$ el criterio de Ginzburg **siempre** se satisface para $|t| \rightarrow 0$. Para $d < 4$ la teoría falla cuando nos aproximamos del punto crítico. El caso marginal $d = 4$ requiere de un análisis mas detallado. Puede verse, sin embargo, que la teoría de Landau adquiere correcciones *logarítmicas*. Por ejemplo, la susceptibilidad para $d = 4$ se comporta como

$$\chi_T \sim \frac{1}{t} |\ln t|^{1/3}$$

A todos los efectos prácticos, se considera $d = 4$ la dimensión crítica superior para sistemas con las simetrías aquí consideradas, esto es, con un desarrollo en potencias pares de la funcional de Landau hasta orden cuatro (por ejemplo, el modelo de Ising). Para sistemas con otras simetrías, con exponentes de campo medio γ , β y ν podemos generalizar el análisis anterior como

$$\int_{V'} C_c^{(2)}(r) d\vec{r} \approx k_B T \chi_T \sim |t|^{-\gamma}$$

$$\int_{V'} \eta_0(\vec{r})^2 d\vec{r} \sim \xi^d t^{2\beta} \sim |t|^{2\beta-\nu d}$$

Suprimiendo los factores de orden uno, el criterio de Ginzburg nos dá:

$$|t|^{-\gamma} \ll |t|^{2\beta-\nu d} \quad \text{para } t \rightarrow 0$$

Para que esto se cumpla es necesario que

$$d > \frac{2\beta + \gamma}{\nu} \equiv d_c$$

Por ejemplo, para un punto tricrítico puede verse que $\nu = 1/2$ y vimos que $\beta = 1/4$, $\gamma = 1$, con lo cual la dimensión crítica superior resulta $d_c = 3$.