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:

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

donde

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

Energía libre:

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

Magnetización:

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

Segundo momento:

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

Valores medios de los hamiltonianos respecto del hamiltoniano de prueba:

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

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

Proponemos la función variacional

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

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

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

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

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

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

$$
H = -\frac{J}{2N}\sum_{i,j} s_i s_j + D\sum_i s_i^2 - B\sum_i s_i \tag{14}
$$

Reescribimos el hamiltoniano como

$$
H = -\frac{J}{2N}\left(\sum_i s_i\right)^2 + \frac{J}{2} + D\sum_i s_i^2 - B\sum_i s_i. \tag{15}
$$

La función de partición es entonces

$$
\mathcal{Z} = e^{-K_1/2}\sum_{\{s\}}\exp\left[\frac{K_1}{2N}\left(\sum_i s_i\right)^2 - K_2\sum_i s_i^2 + h\sum_i s_i\right], \tag{16}
$$

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

$$
a = \sqrt{\frac{K_1}{N}}\sum_i s_i \tag{17}
$$

y utilizamos la identidad gaussiana

$$
e^{a^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2+ax}\,dx. \tag{18}
$$

Obtenemos

$$
\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= e^{-K_1/2} \sum_{\{s\}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} \exp\left[-K_2 \sum_i s_i^2 + \left(x\sqrt{\frac{K_1}{N}} + h \right) \sum_i s_i \right] dx \\
&= e^{-K_1/2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} \left[1 + 2e^{-K_2} \cosh\left(x\sqrt{\frac{K_1}{N}} + h \right) \right]^N dx \\
&= e^{-K_1/2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{ -\frac{x^2}{2} + N \ln\left[1 + 2e^{-K_2} \cosh\left(x\sqrt{\frac{K_1}{N}} + h \right) \right] \right\} dx.
\end{aligned}
\tag{19}
$$

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

$$
\mathcal{Z} = e^{-K_1/2} \sqrt{\frac{KN}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{Ng(\eta)} d\eta, \tag{20}
$$

donde

$$
g(\eta) = \frac{K_1}{2}\eta^2 + \ln\left[1 + 2e^{-K_2} \cosh\left(K_1\eta + h \right) \right]. \tag{21}
$$

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

$$
-\beta f = \max_{\eta} g(\eta). \tag{22}
$$

Derivando e igualando a cero obtenemos la ecuación

$$
\eta_0 = \frac{2e^{-K_2} \sinh\left(K_1\eta_0 + h \right)}{1 + 2e^{-K_2} \cosh\left(K_1\eta_0 + h \right)}. \tag{23}
$$

La magnetización del sistema resulta

$$
m = -\frac{\partial f}{\partial B} = \frac{\partial(-\beta f)}{\partial h} = \frac{2e^{-K_2} \sinh\left(K_1\eta_0 + h \right)}{1 + 2e^{-K_2} \cosh\left(K_1\eta_0 + h \right)} = \eta_0, \tag{24}
$$

de donde se sigue que la magnetización satisface la relación

$$
m = \frac{2e^{-K_2} \sinh\left(K_1 m + h \right)}{1 + 2e^{-K_2} \cosh\left(K_1 m + h \right)}. \tag{25}
$$

Problema 3: Teoría de Landau para puntos tricríticos

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

$$
\mathcal{L} = \frac{1}{2} a_2(T,x)\eta^2 + \frac{1}{2} a_4(T,x)\eta^4 + \frac{1}{6} a_6(T,x)\eta^6 - B\eta, \tag{26}
$$

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

$$a_2(T,x) = at + b\omega \tag{27}$$

$$a_4(T,x) = ct + d\omega, \tag{28}$$

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,

$$\omega = -\frac{c}{d}t, \tag{29}$$

por lo que

$$a_2(t) = \left(a - \frac{c}{d}\right)t = At, \quad A = \left(a - \frac{c}{d}\right). \tag{30}$$

Luego, el potencial de Landau adquiere la forma

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}At\eta^2 + \frac{1}{6}a_6\eta^6 - B\eta, \tag{31}$$

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

$$At\eta + a_6\eta^5 = B. \tag{32}$$

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 32 respecto a B,

$$At\chi + 5a_6\eta^4\chi = 1. \tag{33}$$

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

$$\chi = \frac{1}{At + 5a_6\eta^4} = \frac{1}{4A}(-t)^{-1}. \tag{34}$$

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 32 en $t = 0$, tenemos

$$\eta = \frac{1}{a_6} B^{1/5}, \tag{35}$$

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,

$$f(t) = -\frac{1}{2} A \left(\frac{A}{a_6} \right)^{1/2} t^{3/2} - \frac{1}{6} a_6 t^{3/2} \tag{36}$$

$$= -\frac{1}{6} a_6 \left[3 \left(\frac{A}{a_6} \right)^{3/2} + 1 \right] t^{3/2}. \tag{37}$$

El calor específico está dado por

$$C = -T \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = \frac{1}{8} a_6 \left[3 \left(\frac{A}{a_6} \right)^{3/2} + 1 \right] (-t)^{-1/2}, \tag{38}$$

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