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

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

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:

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

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

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

Reescribimos el hamiltoniano como

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

La función de partición es entonces

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

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

$$a = \sqrt{\frac{K_1}{N}}\sum_i s_i \tag{16}$$

y utilizamos la identidad gaussiana

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

Obtenemos

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

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

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

donde

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

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

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

Derivando e igualando a cero obtenemos la ecuación

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

La magnetización del sistema resulta

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

de donde se sigue que la magnetización satisface la relación

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

Problema 3: Teoría de Landau para puntos tricríticos

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

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

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

$$a_2(T,x) = at + b\omega \tag{26}$$
$$a_4(T,x) = ct + d\omega, \tag{27}$$

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,

$$\omega = -\frac{c}{d}t, \tag{28}$$

por lo que

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

Luego, el potencial de Landau adquiere la forma

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

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

$$At\eta + a_6\eta^5 = B. \tag{31}$$

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 31 respecto a B,

$$At\chi + 5a_6\eta^4\chi = 1. \tag{32}$$

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

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

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

$$\eta = \frac{1}{a_6}B^{1/5}, \tag{34}$$

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,

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

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

El calor específico está dado por

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

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

Problema 3: Derivada funcional

Sea $f(\mathbf{r})$ una función. Podemos interpretar a $f(\mathbf{r_1})$ como una funcional $F[f]$ de la forma

$$F[f] := \int f(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r_1})d\mathbf{r} = f(\mathbf{r_1}). \tag{38}$$

Usando la definición de la derivada funcional,

$$\begin{aligned}
\frac{\delta f(\mathbf{r_1})}{\delta f(\mathbf{r_0})} &= \frac{\delta F}{\delta f(\mathbf{r_0})} \\
&= \lim_{\epsilon\to 0} \frac{\int \left[f(\mathbf{r}) + \epsilon\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r_0})\right]\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r_1})d\mathbf{r} - \int f(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r_1})d\mathbf{r}}{\epsilon} \\
&= \int \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r_0})\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r_1})d\mathbf{r} \\
&= \delta(\mathbf{r_1}-\mathbf{r_0}).
\end{aligned}$$

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

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