

Mecánica Estadística

Licenciatura de Física

Fenómenos Críticos (2)

- Ecuación de van der Waals: primera aproximación macroscópica a los cambios de fase
- Modelo de Ising de Campo Medio: primera aproximación microscópica
- Modelo de Ginzburg-Landau: primera aproximación mesoscópica

1. Ecuación de van der Waals: primera aproximación macroscópica

- Cualquier gas a temperaturas suficientemente altas (y/o densidades suficientemente bajas) se comporta como un gas ideal. Es razonable pensar que para temperaturas no tan altas (o densidades no tan bajas) el sistema comenzará a manifestar pequeñas desviaciones al comportamiento de gas ideal. **van der Waals** fue el primero que tuvo en cuenta dos efectos importantes responsables de las primeras correcciones al comportamiento de gas ideal:
 - **El tamaño finito de las partículas**
 - **La fuerza atractiva entre las partículas**
- **(1) Efectos del tamaño finito de las partículas:** La ecuación de estado de un gas ideal implica que, si incrementamos la presión a temperatura constante, el volumen del sistema disminuirá tanto como queramos lo que no es razonable. Así, por ejemplo, si suponemos que el sistema está compuesto de esferas rígidas, sabemos que existe un volumen mínimo del sistema V_{min} que corresponde al de máximo empaquetamiento. Para un sistema genérico podemos suponer la existencia de dicho volumen mínimo, proporcional al número de partículas:

$$V_{min} = Nb \quad (1)$$

donde $b > 0$ es un parámetro fenomenológico. La ecuación de estado del gas ideal corregida e incluyendo este efecto se escribe:

$$P(V - Nb) = Nk_B T \quad (2)$$

Ahora cuando P tiende a infinito a T constante $V \rightarrow Nb$.

- **(2) Efecto de la fuerza atractiva entre partículas:** La interacción entre partículas es, típicamente, fuertemente repulsiva cuando la separación entre ellas tiende a cero y tiene una zona atractiva que tiende a cero cuando la distancia mútua va a infinito. Las partículas de un sistema con esta clase de interacciones tenderán a agruparse más entre ellas y, por lo tanto, colisionarán menos con las paredes del recipiente. Por lo tanto, la presión ejercida sobre dichas paredes tiene que ser menor **que si no tenemos en cuenta la existencia de la interacción**. Esto es, la anterior ecuación la tenemos que corregir:

$$P = \frac{Nk_B T}{V - Nb} - a \left(\frac{N}{V} \right)^2 \quad (3)$$

La corrección es cuadrática en la densidad de partículas porque, para densidades muy bajas hemos de recuperar el comportamiento de gas ideal.

- Así pues la ecuación de estado de **van der Waals** se puede escribir:

$$\left(P + \frac{a}{v^2} \right) (v - b) = k_B T \quad (4)$$

donde a y b son dos parámetros fenomenológicos que dependen de la sustancia estudiada:

- **NOTAR:** La contrucción de la ecuación de van der Waals se ha realizado de forma argumentativa y macroscópica, siguiendo los razonamientos históricos que, en su momento, se introdujeron para intentar explicar los comportamientos gaseosos diferentes a los de gas ideal.

Fluid	a ($\text{l}^2 \text{atm mol}^{-2}$)	b (l mol^{-1})
Water, H_2O	5.464	0.0305
Sulphur dioxide, SO_2	6.714	0.0564
Ethylene, C_2H_4	4.471	0.0571
Acetylene, C_2H_2	4.390	0.0514
Carbon dioxide, CO_2	3.592	0.0427
Ethane, C_2H_6	5.489	0.0638
Xenon, Xe	4.194	0.0511
Methane, CH_4	2.253	0.0428
Nitrogen, N_2	1.390	0.0391
Argon, Ar	1.345	0.0322
Oxygen, O_2	1.370	0.0318
Carbon monoxide, CO	1.485	0.0399
Hydrogen, H_2	0.2444	0.0266
Helium, ^4He	0.03412	0.0237
van der Waals theory	—	—

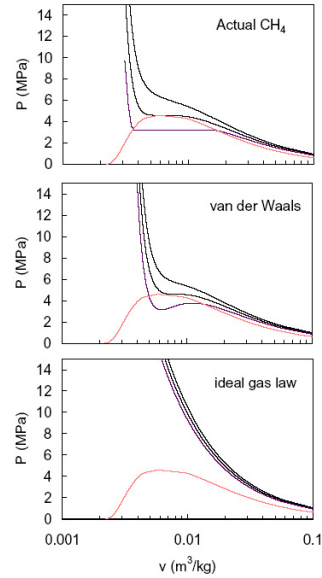


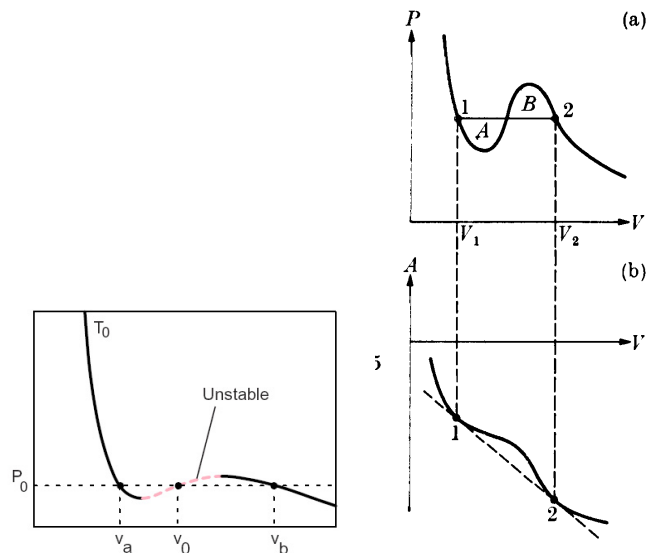
Figure 4.13: Isotherms for methane predicted by TPX, the van der Waals equation, and the ideal gas equation. The temperatures are 179.1, 190.5, and 202.0 K.

- **Isotermas de la ecuación de van der Waals:** La ecuación de estado de van der Waals tiene como límite la ecuación de estado de gas ideal cuando la temperatura es muy alta o la densidad muy baja. Sin embargo a bajas temperaturas sus isotermas presentan un comportamiento peculiar comparado al observado en los sistemas reales (ver figura).
- Notar que una condición de estabilidad termodinámica es que la compresibilidad isoterma es SIEMPRE positiva:

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P} \Big|_T > 0 \quad (5)$$

Observamos en la figura que una parte de la isoterma

predicha por la ecuación de estado de van der Waals implica que el sistema es **inestable**.



- La solución a este comportamiento patológico de una ecuación de estado que, por otra parte, ajustaba con precisión el comportamiento de muchos gases reales, la dió **Maxwell** en lo que se llama **la construcción de Maxwell**:
 - **Compresibilidad isoterma positiva implica que la energía libre de Helmholtz cumple:**

$$\left. \frac{\partial^2 F}{\partial V^2} \right|_T > 0 \quad (6)$$

- **Maxwell propone que se recobre la convexidad de la energía libre trazando una tangente que excluya los**

puntos de inestabilidad (y algunos más que se consideran metaestables).

– Esa construcción es equivalente a buscar una recta que divida el "loop" de la ecuación de van der Waals en dos trozos de igual área.

- **El punto crítico de la ecuación de van der Waals:** Observamos que existe una isoterma crítica para $T = T_c$ que separa los comportamientos regular y patológico ("loops"). Esto es, $P = P(V, T_c)$ tiene un punto de inflexión (punto crítico) que es solución de las ecuaciones:

$$\begin{aligned}
 P &= \frac{Nk_B T_c}{V - Nb} - a \left(\frac{N}{V} \right)^2 \\
 \left. \frac{\partial P}{\partial V} \right|_{V=V_c} &= 0 \\
 \left. \frac{\partial^2 P}{\partial V^2} \right|_{V=V_c} &= 0
 \end{aligned} \tag{7}$$

Esto es:

$$v_c = 3b, \quad k_B T_c = \frac{8a}{27b}, \quad P_c = \frac{a}{27b^2} \tag{8}$$

Observamos que se cumple $Z_c \equiv P_c v_c / K_B T_c = 3/8$

- Si definimos:

$$\bar{P} = \frac{P}{P_c}, \quad \bar{v} = \frac{v}{v_c}, \quad \bar{T} = \frac{T}{T_c} \tag{9}$$

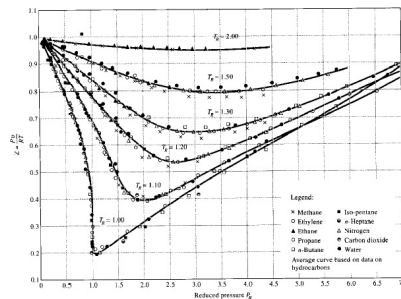
Podemos reescribir la ecuación de estado de la forma:

$$\left(\bar{P} + \frac{3}{\bar{v}^2} \right) (3\bar{v} - 1) = 8\bar{T} \tag{10}$$

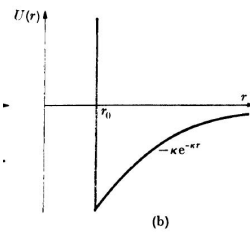
esto es, obtenemos una expresión **universal** independiente de los parámetros a y b . Es la llamada **Ley de los estados correspondientes**. Notar que

$$Z \equiv \frac{Pv}{k_B T} = \frac{3 \bar{P} \bar{v}}{8 \bar{T}} \quad (11)$$

- Esta propiedad de la ecuación de van der Waals cuando se expresa en coordenadas relativas al punto crítico resulta que es general de todas las sustancias pero solo **en las cercanías del punto crítico**.



- La ecuación de estado de van der Waals se puede obtener a partir de un sistema de partículas unidimensional con una interacción del tipo: en el límite de $\kappa \rightarrow 0$ (Kac,



Uhlenbeck y Hemmer, *J. Math. Phys.* 4 216 (1963)). Además, se puede demostrar rigurosamente que la construcción de Maxwell es correcta para sistemas en d dimensiones interaccionando con potenciales tipo Kac (J.L. Lebowitz y O. Penrose, *Rigorous Treatment of the Van de Waals Maxwell Theory of the Liquid-Vapor Transition Journal of Mathematical Physics*, 7 98-113 (1966)).

2. Modelo de Ising de Campo Medio: primera aproximación microscópica

- Sea un conjunto de N partículas con espín $s_i = \pm 1$ que interaccionan entre si por medio del Hamiltoniano

$$H_N(\underline{s}) = -\frac{J}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N s_i s_j - \sum_{i=1}^N B_i s_i \quad (12)$$

donde $J > 0$ y B_i son campos magnéticos locales que actúan sobre los espines.

- Nos interesa conocer las propiedades termodinámicas del sistema. Para ello calculamos la función de partición:

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} e^{-\beta H_N(\underline{s})} \\ &= \sum_{\underline{s}} \exp \left[\frac{\beta J}{N} \left(\sum_{i=1}^N s_i \right)^2 + \beta \sum_{i=1}^N B_i s_i \right] \end{aligned} \quad (13)$$

- Utilizamos la igualdad

$$e^{\alpha^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathcal{R}} dy \exp \left[-\frac{y^2}{2} + \sqrt{2\alpha} y \right] \quad (14)$$

para convertir el término cuadrático en $\sum s_i$ en un término lineal. Sustituyendo obtenemos:

$$\begin{aligned} Z_N &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathcal{R}} dy e^{-y^2/2} \sum_{\underline{s}} \exp \left[\sum_{i=1}^N s_i \left(\beta B_i + \sqrt{\frac{2\beta J}{N}} y \right) \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathcal{R}} dy \exp \left[-\frac{y^2}{2} + \sum_{i=1}^N \ln \left(2 \cosh \left(\beta B_i + \sqrt{\frac{2\beta J}{N}} y \right) \right) \right] \end{aligned}$$

donde ya hemos realizado la suma explícita sobre todas las configuraciones de espines.

- Para realizar la integral hemos de darnos cuenta que realizando el cambio de variables $x = y/\sqrt{N}$ podemos escribirla:

$$Z_N = \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \int_{\mathcal{R}} dx e^{-NG(x)} \quad (15)$$

donde

$$G(x) = \frac{x^2}{2} - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \log \left[2 \cosh \left(\sqrt{2\beta J} x + \beta B_i \right) \right] \quad (16)$$

- Podemos extraer el comportamiento de la integral cuando $N \rightarrow \infty$. Para ello buscamos el valor de x^* que hace extremal a la función $G(x)$:

$$\left. \frac{dG(x)}{dx} \right|_{x=x^*} = 0 \quad (17)$$

y desarrollamos la función G alrededor de dicho valor:

$$Z_N = \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \int_{\mathcal{R}} dx \exp \left[-NG(x^*) - \frac{N}{2} \left. \frac{d^2G}{dx^2} \right|_{x=x^*} (x - x^*)^2 + NO(x - x^*)^3 \right]$$

Si realizamos el cambio de variable: $z = \sqrt{N}(x - x^*)$ obtenemos:

$$Z_N = (2\pi)^{-1/2} e^{-NG(x^*)} \int_{\mathcal{R}} dz \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2G}{dx^2} \Big|_{x=x^*} z^2 + O(N^{-1/2}) \right]$$

- De esta forma **la energía libre de Helmholtz** es:

$$\begin{aligned} f &= -\frac{k_B T}{N} \ln Z_N = k_B T G(x^*) \\ &= k_B T \left[\frac{x^{*2}}{2} - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \log \left[2 \cosh \left(\sqrt{2\beta J} x^* + \beta B_i \right) \right] \right] \end{aligned} \quad (18)$$

donde x^* es solución de la ecuación:

$$\frac{dG(x)}{dx} \Big|_{x=x^*} = x^* - \frac{\sqrt{2\beta J}}{N} \sum_{i=1}^N \tanh \left[\sqrt{2\beta J} x^* + \beta B_i \right] = 0 \quad (19)$$

- **Caso homogéneo ($B_i = B$):** En este caso la energía libre se escribe:

$$f = k_B T \left[\frac{x^{*2}}{2} - \log \left[2 \cosh \left(\sqrt{2\beta J} x^* + \beta B \right) \right] \right] \quad (20)$$

donde x^* es solución ahora de la ecuación:

$$\frac{x^*}{\sqrt{2\beta J}} = \tanh \left[\sqrt{2\beta J} x^* + \beta B \right] \quad (21)$$

En este caso podemos interpretar físicamente al parámetro x^* :

$$x^* = \sqrt{2\beta m} \quad , \quad m = \langle s_i \rangle \quad (22)$$

donde $\langle \dots \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{\underline{s}} e^{-\beta H(\underline{s})} \dots$ y podemos escribir la energía libre como:

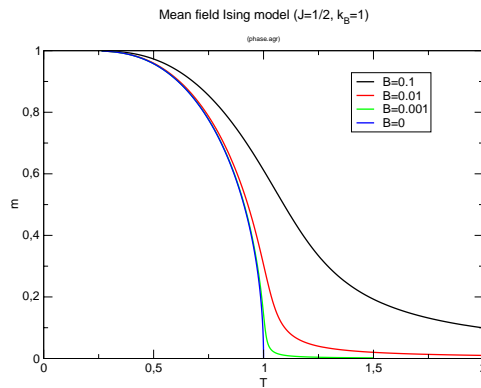
$$f = Jm^2 + k_B T \left[\frac{1}{2} \ln (1 - m^2) - \ln 2 \right] \quad (23)$$

donde m es la magnetización promedio que es solución de

$$m = \tanh [2J\beta m + \beta B] \quad (24)$$

- **Propiedades termodinámicas:**

- **Ecuación de estado:** $m = m(T, B)$ Observamos que el

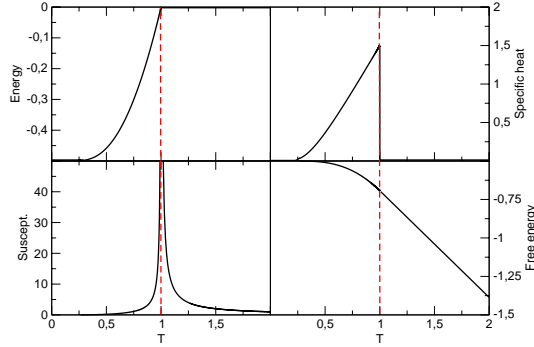


sistema presenta un cambio de fase de segundo orden para $B = 0$. Para $T > T_c = 2J/k_B$ $m = 0$ y para $T < T_c$ $m \neq 0$. En el punto crítico la magnetización es continua pero no derivable. Puesto que la energía libre de Helmholtz depende de m esta singularidad se reflejará en todas las magnitudes termodinámicas.

- **Punto crítico:** Para $B = 0$ sabemos que m es solución de la ecuación:

$$m = \tanh [2\beta J m] \quad (25)$$

cuando $T < T_c$ $m \neq 0$ pero en las cercanías de T_c $m \simeq 0$ así que podemos desarrollar esa expresión para m



pequeñas:

$$m = 2\beta Jm - \frac{1}{3} (2\beta Jm)^3 + O(m^5) \quad (26)$$

despejando m obtenemos:

$$m^2 = \frac{3}{(2\beta J)^3} (2\beta J - 1) + O(2\beta J - 1)^3 \quad (27)$$

luego si $2\beta J \geq 1$ las soluciones son:

$$m = \pm \frac{3^{1/2}}{(2\beta J)^{3/2}} (2\beta J - 1)^{1/2} \quad (28)$$

El punto crítico es el valor de T_c para el que la magnetización se hace cero:

$$2\beta_c J = 1 \quad \Rightarrow \quad T_c = \frac{2J}{k_B} \quad (29)$$

- **Exponentes críticos:** Desarrollando los observables termodinámicos alrededor de la Temperatura crítica obten-

emos sus comportamientos críticos:

$$m \simeq \pm A_0 \epsilon^{1/2} \Rightarrow \beta = 1/2$$

$$u \simeq A_1 \epsilon$$

$$c \simeq A_2 \Rightarrow \alpha = 0$$

$$\chi \simeq A_3 \epsilon^{-1} \Rightarrow \gamma = 1$$

$$m \simeq A_4 B^{1/3} \Rightarrow \delta = 3$$

donde $\epsilon = (T - T_c)/T_c$. Observar que se cumple la igualdad entre exponentes: $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ (igualdad de Rushbrooke) así como la igualdad de Griffiths: $\alpha + \beta(1 + \delta) = 2$.

- **Fluctuaciones:** Podemos calcular la probabilidad de encontrar un valor m de la magnetización:

$$P_N(m) = \sum_{\underline{s}} Z_N^{-1} e^{-\beta H(\underline{s})} \delta\left(m - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i\right) \quad (30)$$

Se puede demostrar que:

$$P_N(m) = \exp[-N\beta(f(m) - f(m_{eq}))] \quad (31)$$

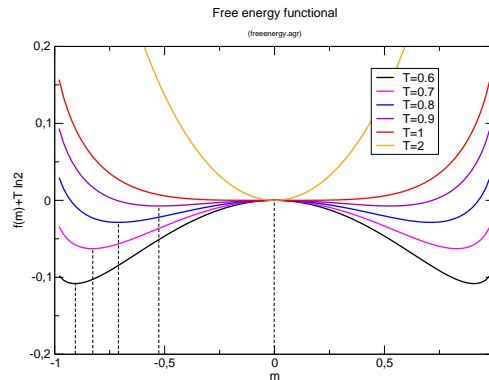
donde

$$f(m) = -Jm^2 + \frac{1}{2\beta} \left[(1-m) \ln \frac{(1-m)}{2} + (1+m) \ln \frac{1+m}{2} \right] \quad (32)$$

donde m_{eq} es el valor de equilibrio. Observamos que m_{eq} es solución de

$$\left. \frac{\partial f(m)}{\partial m} \right|_{m=m_{eq}} = 0 \quad (33)$$

Observar que la función $f(m)$ es analítica en m . Sin embargo **sus máximos** tienen un comportamiento no trivial con la temperatura.



Por último resaltar el concepto de **ruptura espontánea de la simetría** del sistema. Dado un sistema inicialmente con $m = 0$, si lo colocamos a temperaturas menores que la crítica, éste elegirá uno de los dos estados posibles de equilibrio y el sistema perderá (para esa realización) su simetría \pm . La elección de uno u otro máximo vendrá determinada por las fluctuaciones microscópicas del sistema y no se necesita de ningún agente externo para que ocurra el fenómeno.

3. Modelo de Ginzburg-Landau

- El modelo de Ising de campo medio introduce un concepto importante: se puede reducir (en ese caso) las probabilidades configuracionales microscópicas en **probabilidades**

configuracionales mesoscópicas cuya variable natural es un promedio de las variables microscópicas. Esto es, en ese caso pasamos de:

$$P(\underline{s}) = \frac{e^{-\beta H(\underline{s})}}{\sum_{\underline{s}} e^{-\beta H(\underline{s})}} \rightarrow P(m) = e^{-N[f(m)-f(m_{eq})]} \quad (34)$$

donde $m = N^{-1} \sum_{i=1}^N s_i$. Además, el promedio del observable m **caracteriza con precisión el cambio de fase**.

- Desde un punto de vista teórico vemos dos ventajas esenciales para trabajar con $P(m)$:
 - mientras que $H(\underline{s})$ no nos daba idea de la posible existencia de un cambio de fase, la forma de $f(m)$ **si que contiene información estructural sobre el mismo sin necesidad de obtener la energía libre de Hemholtz**.
 - $f(m)$ es una **función analítica** en m .
 - El número de grados de libertad del sistema descrito por $P(m)$ es mucho menor (pasamos de N a 1 en este caso).
- Resulta claro que el modelo de Ising de campo medio es un caso muy peculiar en el que es posible obtener $f(m)$ analíticamente. En general, para un modelo dado, los pasos a seguir serían:
 1. Determinar el/los parámetros de orden que caracterizan el cambio de fase del sistema, m_i y su dependencia de los grados de libertad microscópicos, \underline{s} :

$$m_i = m_i(\underline{s}) \quad i = 1, \dots, p \quad (35)$$

(típicamente $p \ll N$)

2. Obtener la descripción mesoscópica correspondiente:

$$P(\underline{\bar{m}}) = \sum_{\underline{s}} Z^{-1} e^{-\beta H(\underline{s})} \prod_{i=1}^p \delta(\bar{m}_i - m_i(\underline{s})) \quad (36)$$

- **Notar:** Dado un H , la obtención de $P(\underline{m})$, puede ser tan compleja como la de la función de partición, por lo que, en principio, no parece una ventaja realizar ese paso intermedio.
- **Ginzburg y Landau propusieron obviar la conexión precisa entre la descripción microscópica y la mesoscópica** y propusieron un método para construir funcionales $f(m)$ que describiesen el comportamiento de un sistema cerca de un cambio de fase de segundo orden. Las ideas generales de su método son:
 - **Existencia de los parámetros de orden, \underline{m} ,** cuyos valores promedio de equilibrio son idénticamente nulos en la fase de mayor simetría ($T > T_c$) y no nulos en la de menor simetría ($T < T_c$).
 - **Diferenciabilidad de las estructuras espaciales descritas por los parámetros de orden:** Los parámetros de orden pueden depender de la posición. Las configuraciones $m(\underline{r})$ relevantes estadísticamente son, en general, funciones continuas y diferenciables en \underline{r} .
 - **Existencia de un funcional $f[m]$** que es **analítico** alrededor de $m(\underline{r}) = 0$ y que contiene las simetrías globales básicas del sistema original.
 - **Localidad:** En general, la estructura dominante de f

cerca de un punto crítico es de la forma:

$$f[m] = \int_{\mathcal{R}^d} d\underline{r} g[m(\underline{x}), \nabla m(\underline{x}), \dots] \quad (37)$$

- Para el caso de sistemas magnéticos con simetría $s \rightarrow -s$ e interacciones de corto alcance (por ejemplo Ising) la teoría de Ginzburg-Landau propone:

– **Parámetro de orden:** la magnetización local

$$m(\underline{r}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\underline{x} \in \Lambda(\underline{r}, \Omega)} s_{\underline{x}} \quad (38)$$

donde $\Lambda(\underline{r}, \Omega)$ es una región centrada en \underline{r} que contiene Ω espines.

– **Funcional energía libre:**

$$\begin{aligned} H[m] &= \Omega \int_{\mathcal{R}^d} d\underline{r} \left[\frac{1}{2} (\nabla m)^2 + \frac{t}{2} m^2 + \frac{\lambda}{4!} m^4 + J(\underline{r}) m \right] \\ &\equiv \Omega \hat{H}[m] \end{aligned}$$

donde $\lambda > 0$ y $J(\underline{r})$ es un campo magnético externo.

– **La función de partición:**

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}m \exp \left\{ -\Omega \hat{H}[m] \right\} \quad (39)$$

donde se entiende que la suma es sobre todas las funciones diferenciables m en \mathcal{R}^d . El cálculo de \mathcal{Z} es altamente no trivial sin embargo podemos estudiar el **límite semi-clásico** *i.e.* cuando $\Omega \rightarrow \infty$.

- **Límite semi-clásico:** El argumento de la integral es dominado por los valores de m que maximalizan \hat{H} , m_c . Esto

es, son aquellos solución:

$$0 = \left. \frac{\delta \hat{H}(\phi)}{\delta m(\underline{r})} \right|_{m=m_c} = -\Delta m_c + t m_c + \frac{\lambda}{6} m_c^3 + J(\underline{r}) \quad (40)$$

de esta forma el funcional se puede desarrollar como:

$$\hat{H}[m] = \hat{H}[m_c] + \hat{H}_1[\underline{\eta}] + \hat{H}_2[\underline{\eta}] + O(\eta^3) \quad (41)$$

donde $\eta(\underline{r}) = m(\underline{r}) - m_c(\underline{r})$,

$$\hat{H}_1[\underline{\eta}] = \int_{\mathcal{R}^d} d\underline{r} \eta(\underline{r}) J(\underline{r}) \quad (42)$$

$$\hat{H}_2[\underline{\eta}] = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{R}^d} d\underline{r} d\underline{r}' K(\underline{r}, \underline{r}') \eta(\underline{r}) \eta(\underline{r}') + \quad (43)$$

y

$$K(\underline{r}, \underline{r}') = \left. \frac{\delta^2 \hat{H}[m]}{\delta m(\underline{r}) \delta m(\underline{r}')} \right|_{m=m_c} = \left[-\Delta_{\underline{r}} + t + \frac{\lambda}{2} m_c^2 \right] \delta(\underline{r} - \underline{r}') \quad (44)$$

NOTA: Diremos que el desarrollo de Taylor es estable (al menos hasta orden η^3) si todos los valores propios del operador K son positivos para un valor dado de m_c .

- La función de partición se aproxima (en el caso de un desarrollo de Taylor estable) por

$$\mathcal{Z} = cte \exp[-\Omega \hat{H}[m_c]] \quad (45)$$

- **Soluciones clásicas (para $J = 0$):** Existen tres soluciones:

$$\begin{aligned} (a) : m_c(\underline{r}) &= 0 \\ (b) : &= \pm [-6t/\lambda]^{1/2} \\ (c) : &= [-6t/\lambda]^{1/2} \tanh \left[(-t/2)^{1/2} x_i \right] \end{aligned} \quad (46)$$

donde $\underline{r} = (x_i)_{i=1}^d$.

- Para las soluciones homogéneas (a) y (b) las funciones propias y los valores propios de K son:

$$v_{\underline{p}}(\underline{r}) = e^{i\underline{p}\cdot\underline{r}} \quad , \quad \lambda_{\underline{p}} = \underline{p}^2 + t + \frac{\lambda}{2}m_c^2 \quad (47)$$

y \hat{H}_2 puede ser escrito en esos casos como:

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{R}^d} d\underline{p} \lambda_{\underline{p}} \hat{\eta}(\underline{p}) \hat{\eta}(-\underline{p}) \quad (48)$$

donde $\hat{\eta}$ es la transformada de Fourier de η .

- **Estabilidad de las soluciones homogéneas:** (a) es estable cuando $t > 0$ y la solución (b) lo es cuando $t < 0$.
- **Estabilidad de la solución inhomogénea:**

El espectro de K para la solución (c) tiene una estructura más compleja. En este caso K se puede escribir como

$$K(\underline{r}, \underline{r}') = -\delta(z - z') \Delta_{\underline{x}} \delta(\underline{x} - \underline{x}') + \delta(\underline{x} - \underline{x}') G(z, z') \quad (49)$$

donde

$$G(z, z') = \left[-\frac{d^2}{dz^2} + t + \frac{\lambda}{2}m_c^2(z) \right] \delta(z - z') \quad (50)$$

Si realizamos el cambio de variables

$$\begin{aligned} v_{\underline{q},p} &= e^{i\underline{q}\underline{x}} \tilde{v}_p(z) \\ \bar{\lambda}_{\underline{q},p} &= \underline{q}^2 + \tilde{\lambda}_p \end{aligned}$$

observamos que el problema de valores propios de K queda reducido a encontrar los valores propios de G :

$$\int_{\mathcal{R}} dz' G(z, z') \tilde{v}_p(z') = \tilde{\lambda}_p \tilde{v}_p(z) \quad (51)$$

que, se puede demostrar que son:

$$\begin{aligned}\tilde{\lambda}_1^{(D)} &= -3t/2 & \tilde{v}_1^{(D)} &= \sinh(u)/\cosh^2(u) \\ \tilde{\lambda}_2^{(D)} &= 0 & \tilde{v}_2^{(D)} &= 1/\cosh^2(u) \\ \tilde{\lambda}_p^{(C)} &= -\frac{t}{2}(p^2 + 4) & \tilde{v}_p^{(C)} &= e^{ipu} [3 \tanh^2 u - p^2 - 1 - 3ip \tanh u]\end{aligned}$$

con $u = (-t/2)^{1/2}z$.

De forma natural podemos descomponer los campos de la forma:

$$\eta(\underline{x}, z) = \sum_{A=D,C} \sum_{p \in \mathcal{D}(A)} \mu_p^{(A)}(\underline{x}) \tilde{v}_p^{(A)}(z) \quad (52)$$

donde $A = D$ es el espectro puntual con $\mathcal{D}(D) = \{1, 2\}$, $A = C$ es el espectro continuo con $\mathcal{D}(C) = \{\mathcal{R}\}$, $\mu_p^{(C)} = \mu_{-p}^{(C)*}$ y

$$\begin{aligned}\hat{H}_2(\underline{\mu}) &= \frac{1}{2} \sum_{A=D,C} \sum_{p \in \mathcal{D}(A)} \|\tilde{v}_p^{(A)}\|^2 \int_{\mathcal{R}^d} d\underline{x} \left[\left(\nabla_{\underline{x}} \mu_p^{(A)}(\underline{x}) \right) \left(\nabla_{\underline{x}} \mu_p^{(A)*}(\underline{x}) \right) \right. \\ &\quad \left. + \tilde{\lambda}_p^{(A)} \mu_p^{(A)}(\underline{x}) \mu_p^{(A)*}(\underline{x}) \right] \quad (53)\end{aligned}$$

- **NOTAR:** A diferencia de las soluciones homogéneas (a) y (b), ahora tenemos **un vector propio con valor propio cero**:

$$v_{0,2}^{(D)}(\underline{x}, z) = 1/\cosh^2 u \quad (54)$$

En este caso el operador K es **marginalmente estable** y no está bien definido el desarrollo semiclásico. Para resolverlo hay que introducir un cambio de variables (variables colectivas) que permita realizar una resumación parcial para así eliminar esa singularidad.

- La existencia de esta singularidad está relacionada con la ruptura de una simetría continua del sistema que implica la aparición de un **modo (partícula) de Goldstone** sin masa que en nuestro caso está representado por el campo escalar $\mu_2^{(D)}(\underline{x})$.

- **Propiedades de escala para las soluciones homogéneas:**

En general las soluciones clásicas homogéneas en presencia de un campo externo J son solución de la ecuación:

$$\frac{\lambda}{6}m_c^3 + tm_c = -J \quad (55)$$

Esta ecuación la podemos reescribir:

$$\frac{\lambda}{6}\phi^3 + s\phi = 1 \quad (56)$$

donde $\phi = -m_c/J^{1/3}$ y $s = t/J^{2/3}$. Esto es, la solución ϕ es función de s y λ , por lo tanto:

$$m_c = -J^{1/3}\phi\left(\frac{t}{J^{2/3}}, \lambda\right) \quad (57)$$

se dice que ϕ es una función de escala. Notar que:

$$\begin{aligned} s = 0 & \quad : \quad \phi(0, \lambda) = \left(\frac{6}{\lambda}\right)^{1/3} \\ s \rightarrow \infty & \quad : \quad \phi(s, \lambda) \simeq \frac{1}{s} \\ s \rightarrow -\infty & \quad : \quad \phi(s, \lambda) \simeq |s|^{1/2} \end{aligned}$$

- **NOTAR: ¿Que ocurre si incluimos las correcciones al comportamiento clásico? ¿son relevantes?**
- **Correlaciones:**

- Para estudiar las correlaciones de la solución clásica, estudiamos la respuesta del sistema a la acción de un campo magnético externo $J(\underline{x})$. Suponiendo que la respuesta a esa acción es lineal si $J \simeq 0$, la magnetización se comporta:

$$\langle m(\underline{x}) \rangle_J = \langle m \rangle_{J=0} + \int_{R^d} d\underline{x}' \chi(\underline{x} - \underline{x}') J(\underline{x}') + O(J^2) \quad (58)$$

Esto es

$$\chi(\underline{x}) = \left. \frac{\partial m(\underline{x}; J)}{\partial J(0)} \right|_{J=0} = \langle m(\underline{0})m(\underline{x}) \rangle_{J=0} - \langle m(\underline{0}) \rangle_{J=0} \quad (59)$$

Ejercicio: Demostrar la anterior igualdad

Esto es, conociendo χ conocemos la función de correlación de la magnetización. En la aproximación semiclassical:

$$\langle m(\underline{x}) \rangle_J \simeq m_{cl}(\underline{x}; J) \quad (60)$$

donde m_{cl} es solución de la ecuación:

$$-\Delta m_{cl} + t m_{cl} + \frac{\lambda}{6} m_{cl}^3 + J(\underline{x}) = 0 \quad (61)$$

Para calcular χ es suficiente tomar $J(\underline{x}) = J\delta(\underline{x})$. En este caso

$$m_{cl}(\underline{x}; J) = m_{cl}(\underline{x}; 0) + \chi(\underline{x})J + O(J^2) \quad (62)$$

Sustituyendo esta expresión en la ecuación anterior y quedándonos con los órdenes lineales en J , obtenemos una ecuación cerrada para χ :

$$[-\Delta + \tilde{t}] \chi(\underline{x}) = -\delta(\underline{x}) \quad (63)$$

donde $\tilde{t} = t + \frac{\lambda}{2} m_{cl}(\underline{x}; 0)^2$. Esto es, $\tilde{t} = 2|t|$ si $t < 0$ y $\tilde{t} = t$ si $t > 0$.

Para resolver la ecuación diferencial es conveniente expresar χ en función de su transformada de Fourier

$$\chi(\underline{x}) = \int_{R^d} \frac{d\underline{k}}{(2\pi)^d} e^{i\underline{k}\cdot\underline{x}} \hat{\chi}(\underline{k}) \quad (64)$$

De esta forma, la solución es:

$$\hat{\chi}(\underline{k}) = -\frac{1}{\underline{k}^2 + \tilde{t}} \quad (65)$$

y por lo tanto

$$\begin{aligned} \chi(\underline{x}) &= -\frac{1}{4\pi^{d/2}} \Gamma(d/2 - 1) \frac{1}{|\underline{x}|^{d-2}} \quad \text{si } \tilde{t} = 0 \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \left(\frac{\sqrt{\tilde{t}}}{|\underline{x}|} \right)^{d/2-1} K_{d/2-1}(\sqrt{\tilde{t}}|\underline{x}|) \quad \text{si } \tilde{t} \neq 0 \end{aligned}$$

donde K es la función de Bessel de segundo orden.

Ejercicio: hallar las anteriores expresiones

Se observa que $\xi = 1/\sqrt{\tilde{t}}$ es la escala natural de las correlaciones que diverge en el punto crítico. Si el exponente crítico asociado se define como

$$\xi = \tilde{t}^{-\nu} \quad (66)$$

tenemos que, en nuestro caso, $\nu = 1/2$

Ejercicio: Demostrar que la susceptibilidad no es más que $\hat{\chi}(0)$ y que su exponente crítico es $\gamma = 1$.

- **Dimensión anómala:**

Supongamos que $|t| = 0$. Entonces:

$$m_{cl}(\underline{x}; J) = J\chi(\underline{x}) = \frac{C}{|\underline{x}|^{d-2+\eta}} \quad (67)$$

η se denomina **Dimensión anómala**. En nuestro caso $\eta = 0$ pero en otros modelos no es así. Si calculamos la magnetización total en una esfera de radio R centrada en el origen obtenemos:

$$M = C' \int_0^R dr r^{d-1} m_{cl}(\underline{x}; J) = C'' R^{2-\eta} \quad (68)$$

Así, la dimensión de Hausdorff que define una densidad de magnetización en el punto crítico es:

$$d_H = 2 - \eta \quad (69)$$

En nuestro caso $\eta = 0$ por lo que las agrupaciones de espines en el punto crítico son bidimensionales.

- **Criterio de Ginzburg:** La aproximación clásica es buena en tanto en cuanto las fluctuaciones del parámetro de orden son pequeñas comparadas con su valor, esto es:

$$\chi(\xi) = \langle (m(0) - m)(m(\xi) - m) \rangle \ll m^2 \quad (70)$$

Ginzburg supone que las fluctuaciones relevantes son las que tienen lugar en la escala de la longitud de correlación del problema, ξ .

En nuestro caso:

$$\chi(\xi) = C|t|^{d/2-1} \quad m = C'|t|^{1/2} \quad (71)$$

Así el criterio de Ginzburg es,

$$C|t|^{d/2-2} \ll 1 \quad (72)$$

Luego si $d > d_c = 4$ la aproximación clásica da el comportamiento crítico correcto. d_c se llama **dimensión crítica** y

nos indica que las fluctuaciones de la solución clásica son **relevantes** y deben de ser tenidas en cuenta por debajo de d_c .