

## 6.4 Algunos métodos standard de GR en el espacio real

### 6.4.1 Decimación

La técnica de decimación es una de las mas utilizadas en la práctica, debido especialmente a su simplicidad, a pesar de que los resultados que se obtienen resultan cuantitativamente inadecuados en la mayoría de los casos de interés.

Comenzaremos por el caso unidimensional el cual, a pesar de su escaso interés teórico desde el punto de vista de los fenómenos críticos, resulta uno de los pocos casos en los cuales el RG puede calcularse de manera exacta (al menos para sistemas clásicos).

#### Decimación en $d = 1$

Consideremos el modelo de Ising ferromagnético, con interacción entre primeros vecinos. Como vimos en la sección (6.2), la regla de decimación puede ser interpretada como una traza parcial sobre un subconjunto de spines de la red (Ec.(6.17)). Denotaremos por  $\sigma_i$  los spines sobre los cuales tomaremos la traza parcial y por  $S_i$  a los restantes spines, donde  $i$  denota el bloque correspondiente en el caso  $b = 2$  (ver Fig.(6.6)). Podemos escribir el Hamiltoniano del sistema como:

$$\mathcal{H} = K \sum_i \sigma_i (S_i + S_{i+1}) + \frac{h}{2} \sum_i (S_i + S_{i+1}) + h \sum_i \sigma_i \quad (6.58)$$

y proponemos para el Hamiltoniano renormalizado  $\mathcal{H}'$  la forma:

$$\mathcal{H}' = K' \sum_i S_i S_{i+1} + \frac{h'}{2} \sum_i (S_i + S_{i+1}). \quad (6.59)$$

Asi, tenemos que

$$e^{\mathcal{H}'(s)+\mathcal{C}} = \prod_i \exp \left( K' S_i S_{i+1} + \frac{h'}{2} (S_i + S_{i+1}) + g \right) \quad (6.60)$$

y

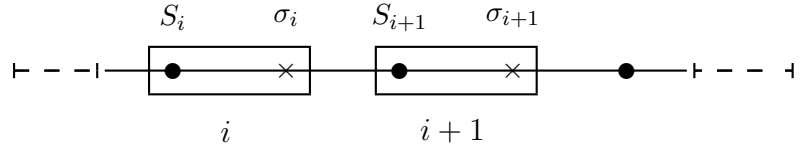


Figura 6.6: Decimación en  $d = 1$  para  $b = 2$ . La traza parcial elimina los sitios indicados por  $\times$ .

$$\sum_{\{\sigma\}} e^{\mathcal{H}(s,\sigma)} = \prod_i e^{\frac{h}{2}(S_i+S_{i+1})} \sum_{\sigma=\pm 1} e^{K\sigma(S_i+S_{i+1})+h\sigma}. \quad (6.61)$$

Reemplazando las ecuaciones (6.60) y (6.61) en (6.17) obtenemos:

$$\exp\left(K' S_i S_{i+1} + \frac{h'}{2}(S_i + S_{i+1}) + g\right) = e^{\frac{h}{2}(S_i+S_{i+1})} 2 \cosh[K(S_i + S_{i+1}) + h] \quad (6.62)$$

para todo bloque  $i$ . La Ec.(6.62) es idéntica para todo bloque  $i$ , y por lo tanto el procedimiento para obtener las ecuaciones de recurrencia equivale a decimar una cadena finita (“cluster”) de tres sitios en una de dos sitios, tal como se muestra en la Fig.(6.7), es decir:

$$\exp\left(K' S_1 S_2 + \frac{h'}{2}(S_1 + S_2) + g\right) = e^{\frac{h}{2}(S_1+S_2)} 2 \cosh[K(S_1 + S_2) + h]. \quad (6.63)$$

La Ec.(6.63) debe satisfacerse para toda configuración de los spines  $(S_1, S_2)$ , de donde se obtiene el conjunto de ecuaciones no-lineales acopladas:

$$e^{g+K'+h'} = 2 e^h \cosh[2K + h] \quad (6.64)$$

$$e^{g+K'-h'} = 2 e^{-h} \cosh[2K - h] \quad (6.65)$$

$$e^{g-K'} = 2 \cosh(h). \quad (6.66)$$

Obtenemos así un conjunto de 3 ecuaciones independientes con 3 incógnitas, con lo cual las ecuaciones de recurrencia pueden ser obtenidas de manera exacta, tal

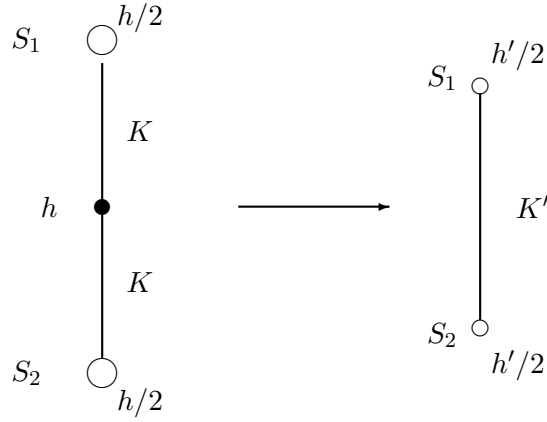


Figura 6.7: Decimación de un cluster unidimensional para  $b = 2$ .

como habíamos anticipado. En otras palabras, en  $d = 1$  no hay proliferación de interacciones.

De las Ecs. (6.64)-(6.66) vemos que las ecuaciones de recurrencia satisfacen las propiedades de paridad (6.52) y (6.53). Así,  $h = 0 \Rightarrow h' = 0$  y las Ecs.(6.64) y (6.65) resultan idénticas en este caso; de las Ecs.(6.64) y (6.66) obtenemos entonces:

$$K'(K) = \frac{1}{2} \ln [\cosh(2K)] \quad (6.67)$$

$$g = K'(K) + \ln(2) \quad (6.68)$$

El análisis de la ecuación de recurrencia (6.67) se simplifica mediante el cambio de variable:

$$t \equiv \tanh(K), \quad (6.69)$$

el cual mapea el intervalo  $K \in (0, \infty)$  en el intervalo  $t \in (0, 1)$ . La Ec.(6.67) se transforma entonces en:

$$t' = t^2, \quad (6.70)$$

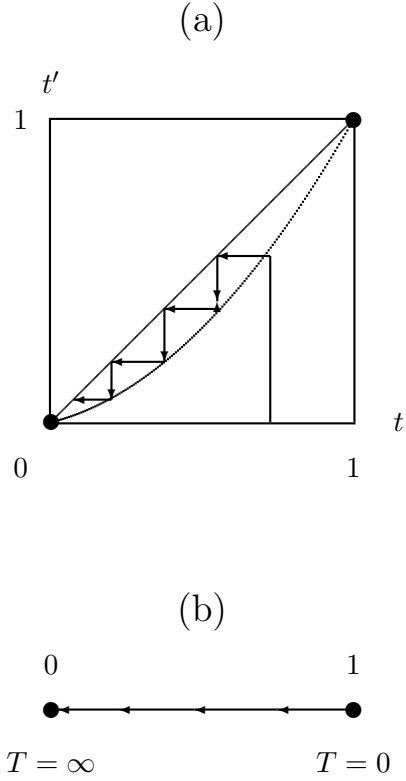


Figura 6.8: Flujo de RG en  $d = 1$ . (a) Diagrama “escalera” para la ecuación de recurrencia ( $b = 2$ ). (b) Diagrama de flujo en el espacio  $t \equiv \tanh(K)$ ; la inestabilidad del punto fijo en  $T = 0$  indica que  $\xi = \infty$ .

la cual presenta únicamente los puntos fijos triviales:  $t = 0$  ( $T = \infty$ ) y  $t = 1$  ( $T = 0$ ), de donde se concluye que el modelo no presenta transición de fase a temperatura finita, tal como se esperaba. El flujo de una ecuación de recurrencia unidimensional se simplifica mediante el análisis gráfico de los llamados “diagramas escalera”, tal como el que se muestra en la Fig.(6.8a) correspondiente a la Ec.(6.70); del diagrama de flujo correspondiente (Fig.(6.8b)) surge de manera inmediata que el punto fijo  $T = \infty$  es un atractor, en tanto que el punto fijo  $T = 0$  es inestable. El modelo unidimensional es, por lo tanto, paramagnético a cualquier temperatura finita y posee una transición de fase a temperatura cero ( $\xi = \infty$ ).

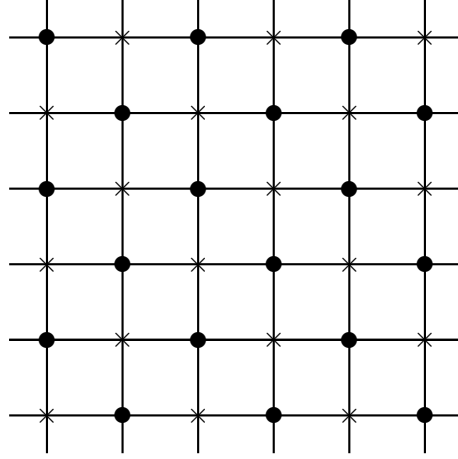


Figura 6.9: Decimación de la red cuadrada con  $b = \sqrt{2}$ .

#### Decimación en $d = 2$

La decimación en  $d = 1$ , para  $b = 2$ , resulta de dividir la cadena lineal en dos subredes idénticas interpenetradas (de parámetro de red 2, respecto de la cadena original) y llevar a cabo una traza parcial sobre los grados de libertad asociados a una de dichas subredes (ver Fig.(6.6)); la subred que “sobrevive” conforma la red renormalizada luego de reescalar las longitudes  $l \rightarrow l/2$ . En principio, el mismo procedimiento es aplicable a cualquier sistema definido sobre una red bipartita. La red cuadrada, por ejmplo, puede ser dividida en dos redes cuadradas con parámetro de red  $b = \sqrt{2}$ , tal como se muestra en la Fig.(6.9).

Podemos entonces intentar repetir el procedimiento utilizado en  $d = 1$ , decimando los sitios indicados por  $\times$  en la Fig.(6.9) [3]. De la misma manera que en  $d = 1$ , la decimación de la red completa puede reducirse a decimar un cluster finito de tres sitios (ver Fig.(6.7)), la decimación de la red cuadrada completa con  $b = \sqrt{2}$  puede reducirse a la decimación del sitio central de un cluster “estrella” de 5 sitios como se muestra en la Fig.(6.10); este procedimiento se denomina transformación

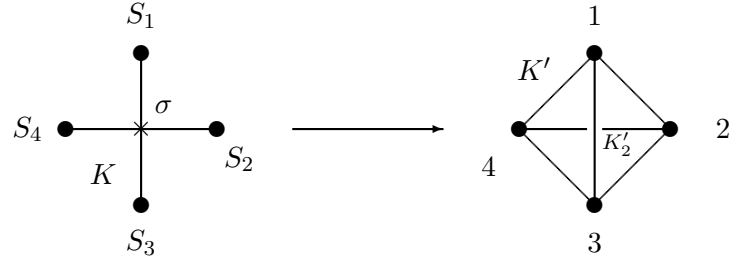


Figura 6.10: Transformación “cuadrado-estrella”. La decimación del sitio central  $\sigma$  genera interacciones entre segundos vecinos ( $K'_2$ ) e interacciones de 4 spines ( $u'$ ).

“cuadrado estrella”. No obstante, en este caso existe proliferación de interacciones, de manera que, partiendo de un Hamiltoniano con interacciones únicamente entre primeros vecinos, el Hamiltoniano efectivo de cuatro sitios  $\mathcal{H}'_c$  obtenido presenta también interacciones entre segundos vecinos y acoplamiento de cuatro spines:

$$\mathcal{H}'_c(s) = K' (S_1 S_2 + S_2 S_3 + S_3 S_4 + S_4 S_1) + K'_2 (S_1 S_3 + S_2 S_4) + u' S_1 S_2 S_3 S_4 \quad (6.71)$$

donde

$$K' = K'_2 = \frac{1}{8} \ln(\cosh(4K)) \quad (6.72)$$

$$u' = \frac{1}{8} (1 - \tanh^4(2K)) \quad (6.73)$$

Para la red completa, la interacción entre primeros vecinos  $K'$  es el doble del valor correspondiente al cluster finito (Ec.(6.72)) dado que cada bond es compartido por dos clusters primeros vecinos. Si intentáramos renormalizar nuevamente la red obtenida, nos encontraríamos con la dificultad de que las nuevas interacciones entre segundos vecinos y entre cuatro spines, no permiten la descomposición anterior de la red en cluster de 5 sitios no interactuantes. Así, deberíamos descomponer la red en clusters mayores, lo cual genera una nueva proliferación de interacciones a

terceros, cuartos vecinos, etc. Esta proliferación crecería *ad infinitum* en las sucesivas iteraciones. Se hace necesario entonces introducir alguna aproximación.

Una aproximación posible consiste en considerar  $K$  pequeño (válido a altas temperaturas) y desarrollar las Ecs.(6.72) y (6.73) hasta el menor orden en  $K$ . De esta manera, introduciendo el factor 2 antes mencionado, obtenemos:  $K' = 2 K^2$  y  $K'_2 = K^2$ , en tanto que  $u' \approx \mathcal{O}(K^4)$ , con lo cual podemos considerarlo cero. Si ahora introducimos un acoplamiento debil entre segundos vecinos  $K_2$  en la red original (dentro de la misma aproximación) podemos considerarlo una perturbación. Desarrollando nuevamente las ecuaciones se obtiene:

$$K' = 2 K^2 + K_2 \quad (6.74)$$

$$K'_2 = K^2. \quad (6.75)$$

Esta ecuaciones presentan como único punto fijo no-trivial:  $K^* = 1/3$  y  $K_2^* = 1/9$ . Los resultados numéricos para  $K_c$  (corte  $K_2 = 0$  de la linea crítica) y  $\nu$  pueden apreciarse en la tabla (6.1).

#### 6.4.2 Métodos variacionales

Como vimos en la sección 6.2, la Ec.(6.6) de GR mantiene la función partición del sistema invariante (la cte.  $\mathcal{C}$  puede absorberse en  $\mathcal{H}'$ ).

Vamos reemplazar en la Ec.(6.6):  $\mathcal{H}(s) \rightarrow \mathcal{H}(s) + \mathcal{V}(s)$ , donde  $\mathcal{V}(s)$  es un potencial que se elige de manera tal que simplifique los cálculos posteriores. Así tenemos que:

$$e^{\mathcal{H}'(s')} = \sum_{\{s\}} P(s', s) e^{\mathcal{H}(s) + \mathcal{V}(s)}, \quad (6.76)$$

y usando la normalización de  $P(s', s)$  obtenemos:

$$\sum_{\{s'\}} e^{\mathcal{H}'(s')} = \sum_{\{s\}} e^{\mathcal{H}(s) + \mathcal{V}(s)} \geq \sum_{\{s\}} e^{\mathcal{H}(s)} [1 + \mathcal{V}(s)] \quad (6.77)$$

donde hemos usado  $e^x \geq 1 + x$ ; finalmente la función partición satisface:

$$Z[\mathcal{H}'] = Z[\mathcal{H} + \mathcal{V}] \geq Z[\mathcal{H}] (1 + \langle \mathcal{V} \rangle_{\mathcal{H}}) \quad (6.78)$$

Si  $\mathcal{V}$  se elige tal que  $\langle \mathcal{V} \rangle_{\mathcal{H}} = 0$ , entonces

$$Z[\mathcal{H}'] \geq Z[\mathcal{H}],$$

y la energía libre  $F = -T \ln Z$  satisface:

$$F' \leq F, \quad (6.79)$$

es decir, la energía libre del sistema renormalizado nos da una cota inferior para la energía libre del sistema original. Los mismos argumentos pueden extenderse al caso de una secuencia de transformaciones  $\mathcal{H}^{(n)} \rightarrow \mathcal{H}^{(n+1)} = \mathcal{H}^{(n)} + \mathcal{V}^{(n)}$ , donde  $\mathcal{V}^{(n)}$  es elegido en cada paso de manera que  $\langle \mathcal{V}^{(n)} \rangle_{\mathcal{H}^{(n)}} = 0$  [8].

### Desplazamiento de ligaduras (“bond moving”)

Uno de los ejemplos mas conocidos de procedimientos variacionales es el llamado “bond moving”, el cual se ilustra en la Fig.(6.11) para el caso del modelo de Ising en la red cuadrada:  $\mathcal{H}(s) = K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j$ , donde:

$$\mathcal{V}(s) = K (S_3 S_4 - S_1 S_2). \quad (6.80)$$

Dada la invariancia traslacional de  $\mathcal{H}$ , resulta de inmediato que  $\langle \mathcal{V} \rangle_{\mathcal{H}} = 0$ . Este procedimiento puede repetirse para un número arbitrario de bonds.

Notemos que, si los spines estan completamente alineados, el desplazamiento de ligaduras no altera la energía de este estado. Asi, en sistemas ferromagnéticos, transformaciones de GR cuya *única aproximación* es el desplazamiento de ligaduras, darán la energía libre *exacta* en el límite  $T \rightarrow 0$ .

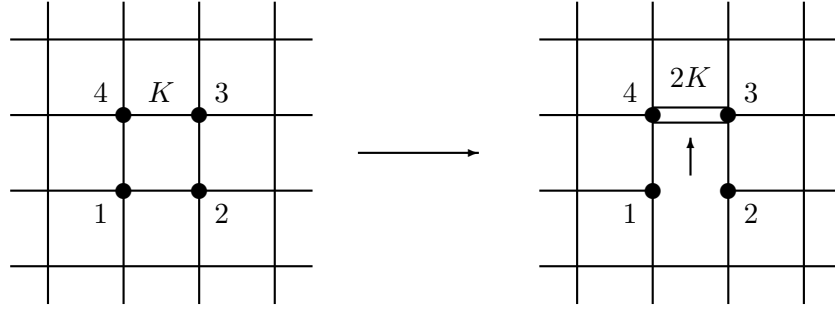


Figura 6.11: Desplazamiento de una ligadura en la red cuadrada.

### Aproximación de Migdal-Kadanoff

En base a la aproximación de desplazamiento de ligaduras, puede formularse un método de renormalización para redes hipercúbicas, que combina dicho procedimiento con el de decimación. La transformación de Migdal-Kadanoff puede resumirse en la aplicación sucesiva de la siguiente receta

1. Desplazamiento de ligaduras en direcciones ortogonales hasta obtener, en una dirección particular, un conjunto de cadenas lineales de  $b$  ligaduras, conectadas al resto de la red únicamente por sus extremos.
2. Decimación exacta de las cadenas resultantes.

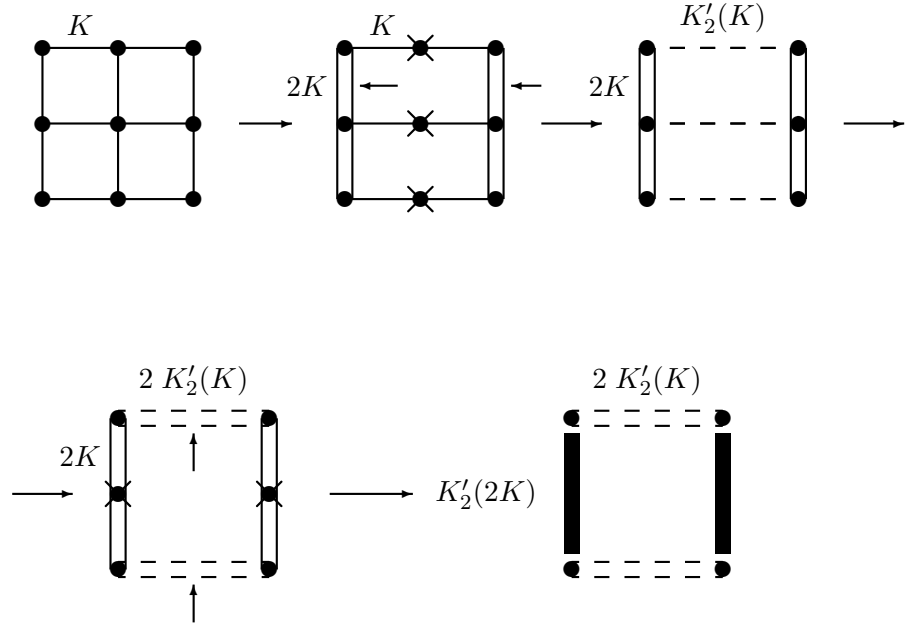
En la Fig.(6.12) se ejemplifica el procedimiento para el caso particular de la red cuadrada con  $b = 2$ ;  $K'_b(K)$  denota la ecuación de recurrencia que se obtiene de decimar un cluster unidimensional de longitud  $b$  (Ec.(6.67) para el caso  $b = 2$ ).

Notemos que, partiendo de un sistema isotrópico hemos arribado a un sistema anisotrópico con acoplamientos:

$$K'_x = 2 K'_2(K) \quad (6.81)$$

$$K'_y = K'_2(2 K). \quad (6.82)$$

Para una una transformación general en  $d = 2$  con factor de escala  $b$ , los acoplamientos resultan:


 Figura 6.12: Transformación de Migdal-Kadanoff en la red cuadrada, para  $b = 2$ .

$$K'_x = b K'_b(K) \quad (6.83)$$

$$K'_y = K'_b(b K). \quad (6.84)$$

Finalmente, el procedimiento puede generalizarse sin dificultad al caso de una red hipercúbica en  $d$  dimensiones. En este caso se obtiene un acoplamiento diferente para cada una de las direcciones coordenadas, esto es:

$$K'_\alpha = b^{d-\alpha} K'_b \left( b^{\alpha-1} K_\alpha \right) \quad \text{para } \alpha = 1, \dots, d. \quad (6.85)$$

La propuesta de Migdal consiste en tomar una sola de estas ecuaciones como la ecuación de recurrencia, es decir, forzar la isotropía en cada iteración. La elección usual es:

$$K' = b^{d-1} K'_b(K). \quad (6.86)$$

| Método                      | $K_c$  | $\nu$ |
|-----------------------------|--------|-------|
| Onsager                     | 0.4407 | 1     |
| decimación - $b = \sqrt{2}$ | 0.392  | 0.638 |
| M.K - $b = 2$               | 0.609  | 1.333 |

Tabla 6.1: Resultados comparativos de aproximaciones que utilizan decimación en la red cuadrada

La receta de GR basada en la ecuación (6.86) es lo que en general se conoce como **aproximación de Migdal-Kadanoff** (M.K).

Tomemos por ejemplo, el caso  $b = 2$ ,  $d = 2$ . De las ecuaciones (6.67), (6.69) y (6.86) se obtiene la ecuación de recurrencia:

$$t' = \frac{2 t^2}{1 + t^4}. \quad (6.87)$$

El flujo de la Ec.(6.87) puede analizarse en el diagrama escalera de la Fig.(6.13) (compare con la Fig.(6.8)). En este caso la Ec.(6.87) presenta un punto fijo no-trivial  $t_c = 0.5437$ . En la tabla (6.1) se muestran los valores de  $K_c$  y  $\nu$  obtenidos.

Finalmente, es importante mencionar que si bien en general esta técnica brinda resultados cuantitativamente incorrectos, posee la ventaja de su extremada simplicidad (el cálculo se reduce al de un problema unidimensional); de esta manera se pueden obtener rápidamente resultados cualitativos que sirvan como una primera aproximación.

### M.K. diferencial

El problema de la anisotropía generada por la transformación de Migdal-Kadanoff desaparece en el límite  $b \rightarrow 1$ , en el cual la transformación de GR se transforma en la identidad. Tomemos, por ejemplo, el caso  $d = 2$ . Las Ecs.(6.83)-(6.84), consideradas como ecuaciones de recurrencia independientes, presentan los puntos fijos

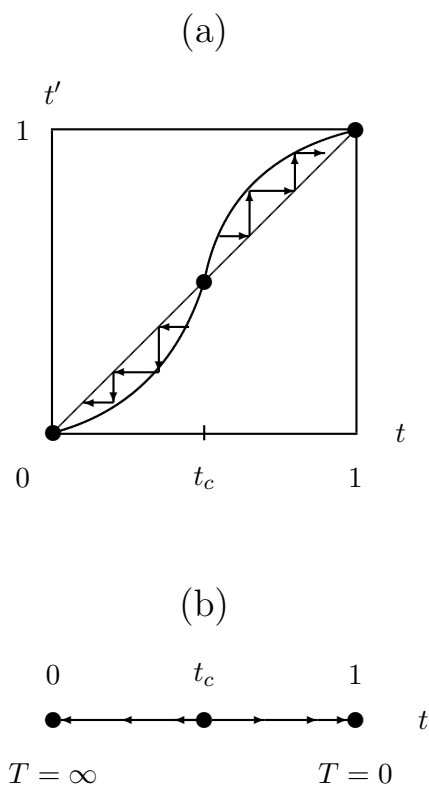


Figura 6.13: Flujo de RG en  $d = 2$  obtenido mediante la aproximación de M.K. (a) Diagrama “escalera” para la ecuación de recurrencia (6.87). (b) Diagrama de flujo en el espacio  $t \equiv \tanh(K)$ .

no-triviales  $K_x^*$  y  $K_y^*$  respectivamente, los cuales satisfacen la relación  $K_x^* = b K_y^*$ . En el límite  $b \rightarrow 1$  ambos puntos fijos convergen a un valor comun. Resulta entonces interesante analizar el comportamiento de transformaciones de M.K. infinitesimales en el entorno de  $b = 1$ , es decir, tomando  $b = 1 + \delta l$  podemos calcular el límite  $\delta l \rightarrow 0$  de una de las ecuaciones (6.83) o (6.84) (ambas dan el mismo resultado). Usando el resultado general

$$K_b'(K) = \operatorname{arctanh} [\tanh^b(K)] \quad (6.88)$$

se obtiene la siguiente transformación de GR diferencial:

$$\frac{dK}{dl} = K + \operatorname{senh}(K) \cosh(K) \ln [\tanh K]. \quad (6.89)$$

El procedimiento puede repetirse para dimensión general  $d$  a partir de las Ec.(6.86), obteniéndose:

$$\frac{dK}{dl} = (d-1) K + \operatorname{senh}(K) \cosh(K) \ln [\tanh K]. \quad (6.90)$$

La condición de punto fijo viene dada en este caso por:

$$\frac{dK}{dl} = 0$$

.

En  $d = 2$  esto lleva a la solución:

$$\operatorname{senh}(2K^*) = 1$$

la cual coincide con la solución exacta para la red cuadrada (Onsager). El resultado numérico para  $d = 3$  se compara en la tabla (6.2) con los obtenido via series de altas temperaturas, para diferentes estructuras cristalinas.

### 6.4.3 GR en redes jerárquicas

La aproximación de M.K (6.86) admite una interpretación alternativa. Tomemos por ejemplo el caso  $d = 2$ ,  $b = 2$ . De la misma manera que la ecuación de recurrencia

| Método           | $K_c$ |
|------------------|-------|
| M.K. diferencial | 0.14  |
| sc (series)      | 0.222 |
| bcc (series)     | 0.157 |
| fcc (series)     | 0.102 |

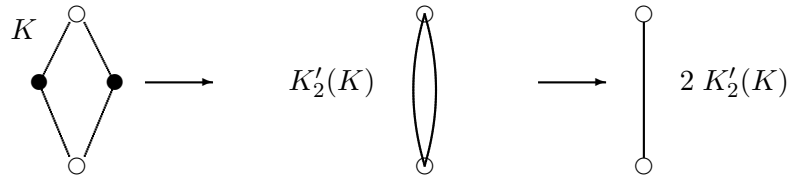
Tabla 6.2:  $K_c$  en  $d = 3$  para redes con simetría cúbica.

obtenida en la decimación del caso unidimensional  $K'_2(K)$  puede obtenerse directamente de la decimación del cluster finito de la Fig.(6.7), la ecuación  $K' = 2 K'_2(K)$  puede obtenerse de la decimación exacta del cluster finito tipo “diamante” mostrado en la Fig.(6.14a). Así mismo, la aplicación dos veces sucesivas de la aproximación de M.K equivale a la decimación de un cluster de 12 sitios, tal como se muestra en la Fig.(6.14b). Así, la iteración de la Ec.(6.86) es equivalente a una sucesión de decimaciones exactas en una *jerarquía* de clusters finitos. Si numeramos con  $n$  los clusters de dicha jerarquía, en el límite  $n \rightarrow \infty$  obtendremos una red infinita. La decimación en este tipo de redes resulta entonces **exacta**. Estas redes pertenecen a una clase de redes **fractales** que se denominan **redes jerárquicas**, las cuales han sido ampliamente utilizadas en el estudio de fenómenos críticos en sistemas clásicos [9, 10] y cuánticos [11]. Analizaremos algunas de sus propiedades generales antes de continuar con su aplicación en GR.

### Redes jerárquicas

Una red jerárquica se construye mediante un procedimiento recursivo. El primer paso consiste en definir un “cluster básico”, el cual debe poseer dos sitios externos llamados *terminales* o *raíces*, los cuales se conectan a los restantes sitios, llamados internos. La conexión entre clusters se realiza solamente a través de los terminales. En el siguiente paso se construye una jerarquía de redes finitas. Cada término

(a)



(b)

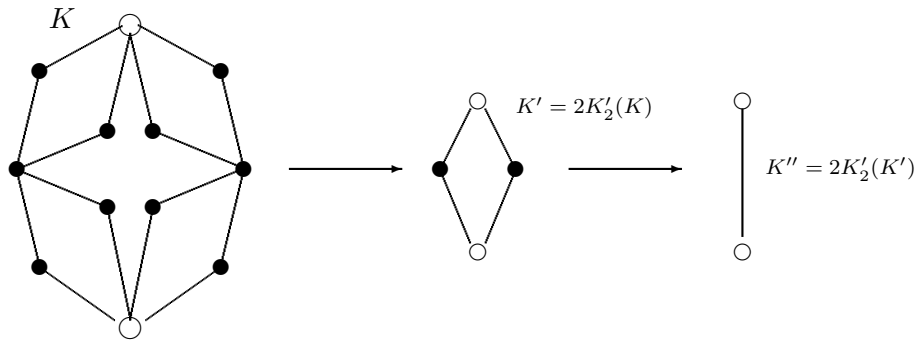


Figura 6.14: Interpretación de la aproximación de M.K. como decimación exacta de clusters; (a) una iteración; (b) dos iteraciones sucesivas.

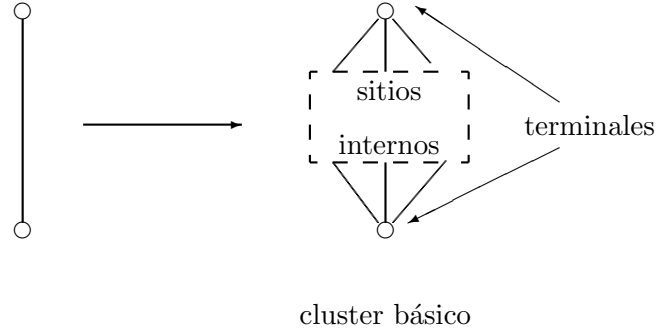


Figura 6.15: Construcción de una red jerárquica mediante un proceso recursivo.

(cluster) de la jerarquía se obtiene a partir del término anterior, reemplazando cada ligadura del mismo por un cluster básico, tal como se muestra esquemáticamente en la Fig.(6.15). El cluster básico constituye el primer término de la jerarquía. Si numeramos con  $n$  cada término de la jerarquía,  $n = 1$  corresponde al cluster básico y para  $n \rightarrow \infty$  obtenemos la red jerárquica.

Estas redes son por construcción *fractales*, es decir, autosemejantes o invariantes por escala<sup>1</sup>, ya que cualquier subred entre dos terminales es a su vez una red jerárquica idéntica a la red total.

El ejemplo mas simple de red jerárquica es la cadena infinita, la cual puede generarse a partir del cluster básico mostrado en la Fig.(6.7). Otro ejemplo simple sería la red generada por el cluster “diamante” que se muestra en la Fig.(6.14a).

Obviamente, una red jerárquica no posee invariancia de traslación. Por otra parte, a diferencia de las redes regulares, hay un crecimiento no uniforme del número de ligaduras (también en el número de sitios) con el factor de escala o dimensión lineal de la red. Pensemos por ejemplo, en una red hipercúbica  $d$ -dimensional como el límite  $L \rightarrow \infty$  de una jerarquía de hipercubos finitos de lado  $L$ . El número de sitios y de bonds crecen como  $L^d$  para  $L \rightarrow \infty$ . En el caso de una red fractal este

<sup>1</sup>Esta invariancia de escala es topológica, ya que lo que define la red jerárquica es la conectividad entre los sitios del cluster básico, independientemente de su disposición geométrica.

crecimiento tambien obedece una ley de potencia, solo que el exponente en este caso sera, en general, no-entero. Si llamamos de modo general  $L$  al factor de escala lineal de la red y  $N_b(L)$  al número de bonds correspondiente, se observa que

$$N_b(L) \propto L^{d_f}$$

para  $L \gg 1$ , donde la **dimensión fractal**  $d_f$  se define como:

$$d_f = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\ln N_b(L)}{\ln L}. \quad (6.91)$$

En una red jerárquica, se define la **distancia química**  $N_q^n$  del  $n$ -ésimo cluster de la jerarquía como el mínimo camino, en número de bonds, entre los terminales del cluster. Esta cantidad caracteriza el factor de escala lineal del cluster. Si llamamos  $N_b^n$  al número de bonds del  $n$ -ésimo término de la jerarquía, tendremos que

$$d_f = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln N_b^n}{\ln N_q^n}. \quad (6.92)$$

De la definición de red jerárquica vemos que  $N_b^n = (N_b^1)^n$ , y  $N_q^n = (N_q^1)^n$ , de donde:

$$d_f = \frac{\ln N_b^1}{\ln N_q^1}. \quad (6.93)$$

### Grupo de renormalización

La invariancia de escala de las redes jerárquicas las hace especialmente apropiadas para el grupo de renormalización. Dado que los clusters que componen la red se conectan entre si solo a traves de los terminales, si decimamos los sitios internos del cluster básico, no existe posibilidad alguna de que proliferen interacciones: las únicas interacciones efectivas posibles son aquellas que puedan existir entre los sitios primeros vecinos que constituyen el “cluster” de dos sitios resultante; las ecuaciones de recurrencia asi obtenidas seran **exactas** para la red completa<sup>2</sup>.

---

<sup>2</sup>Esto es válido solo para sistemas de spines *clásicos*; en sistemas cuánticos la no-conmutatividad de los operadores asociados con los diferentes clusters no permite la factorización  $\exp(\mathcal{H}) = \prod_i \exp(\mathcal{H}_i)$ , donde  $\mathcal{H}_i$  es el Hamiltoniano del cluster  $i$ . Asi, si bien la decimación puede ser il-

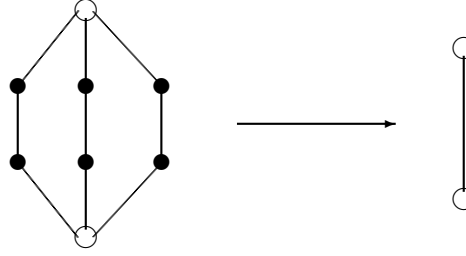


Figura 6.16: Cluster básico de la red jerárquica generada en la aproximación de M.K. con  $b = 3$  y  $d = 2$ .

Como vimos en la subsección anterior, la aproximación de M.K resulta equivalente a la decimación exacta de un tipo particular de redes jerárquicas. De la Ec.(6.86) vemos que el cluster básico correspondiente a dichas redes se compone de  $b^{d-1}$  cadenas de  $b$  bonds en paralelo; en la Fig.(6.16) se muestra un ejemplo para  $b = 3$  y  $d = 2$ . Tenemos entonces que  $N_q^1 = b$  y  $N_b^1 = b^d$ , de donde  $d_f = d$ . Este es un hecho no trivial, ya que  $d_f$  es una magnitud importante a la hora de analizar el comportamiento crítico de una red jerárquica mediante el procedimiento de GR. El bloque de Kadanoff en este caso es precisamente el cluster básico. Si  $b$  es el factor de escala del GR, el número de sitios en el bloque satisface entonces  $N_b \propto b^{d_f}$ . Repitiendo el desarrollo de la sección 6.2 vemos que debe reemplazarse en este caso  $d \rightarrow d_f$  en la ecuación para las energías libres (6.12). Esta misma modificación se aplica por lo tanto a la relación de homogeneidad (6.47) de la cual se derivan las leyes de escala.

Mas allá de su utilidad para aproximar el comportamiento crítico de redes regulares (invariantes por traslación), el estudio de redes fractales presenta un interés intrínseco, ya que el disponer de soluciones exactas del GR resulta útil para estudiar propiedades de la teoría. Desde este punto de vista no necesitamos restringirnos a

---

evada a cabo de manera exacta en un cluster finito, esta constituye una aproximación para la red completa.

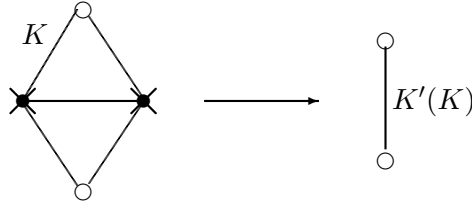


Figura 6.17: Decimación en la red jerárquica generada por el cluster “puente de Wheastone”.

las redes generadas por el procedimiento de M.K. y resulta interesante extender el estudio a redes fractales mas complejas. Un ejemplo interesante lo constituye la red jerárquica generada por el cluster “puente de Wheastone” que se muestra en la Fig.(6.17), para la cual, de acuerdo con la Ec.(6.93),  $d_f = \ln 5 / \ln 2 \approx 2.32$ . La ecuación de recurrencia  $K'(K)$  que resulta de decimar el cluster de la Fig.(6.17) para el modelo de Ising primeros vecinos a campo nulo presenta como punto fijo no trivial el valor de  $K_c$  exacto (Onsager) para la red cuadrada.

#### 6.4.4 Método de Niemeijer-van Leeuwen

El uso de la regla de la mayoría en modelos de spines produce, en general, proliferación de interacciones, lo cual hace necesario introducir aproximaciones, a fin de obtener ecuaciones de recurrencia cerradas que permitan el tratamiento analítico. El método de Niemeijer y van Leeuwen [6] consiste en efectuar un desarrollo en cumulantes de la Ec.(6.6) que permita truncar de manera sistemática las ecuaciones de recurrencia en sucesivos ordenes de proliferación.

#### Desarrollo en cumulantes

Consideremos el modelo de Ising ferromagnético en la red triangular y una transformación de GR con bloques de Kadanoff triangulares, con factor de escala  $b = \sqrt{3}$  como se muestra en las Figs.(6.1b) y (6.2). La regla de la mayoría (6.14) en este

caso viene descripta por una función de peso:

$$P(s', s) = \prod_I P_I(s', s) \quad (6.94)$$

donde

$$P_I(s', s) = \frac{1}{2} \left[ 1 + S'_I \operatorname{sgn}(S_1^I + S_2^I + S_3^I) \right]$$

Comencemos por descomponer

$$\mathcal{H}(s) = \mathcal{H}_0(s) + \mathcal{V}(s) \quad (6.95)$$

donde

$$\mathcal{H}_0(s) = \sum_I \mathcal{H}_0^I(s) \quad (6.96)$$

$\mathcal{H}_0^I(s)$  incluye únicamente las interacciones *internas* entre spines del bloque  $I$  que presentan la simetría  $S_i \rightarrow -S_i$ ; los restantes términos se incluyen en  $\mathcal{V}(s)$ . Para el caso de

$$\mathcal{H}(s) = K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + h \sum_i S_i \quad (6.97)$$

tenemos

$$\mathcal{H}_0^I(s) = K \sum_{\langle i,j \rangle \in I} S_i S_j \quad (6.98)$$

y

$$\mathcal{V}(s) = K \sum_{\langle I,J \rangle} \sum_{\langle i,j \rangle; i \in I; j \in J} S_i S_j + h \sum_I \sum_{i \in I} S_i \quad (6.99)$$

Definimos entonces el promedio de una cantidad  $X(s', s)$  como

$$\langle X \rangle_0(s') = \frac{1}{Z_0} \sum_{\{s\}} P(s', s) e^{\mathcal{H}_0(s)} X(s', s) \quad (6.100)$$

donde

$$Z_0 = \sum_{\{s\}} P(s', s) e^{\mathcal{H}_0(s)} = \prod_I Z_0^I \quad (6.101)$$

$$Z_0^I = \sum_{\{s \in I\}} P_I(s', s) e^{\mathcal{H}_0^I(s)}. \quad (6.102)$$

$Z_0^I$  no depende de  $S'_I$ , ya que el cambio  $S'_I \rightarrow -S'_I$  no altera los factores de Boltzmann en la Ec.(6.102). Tenemos entonces que

$$Z_0 = \left( Z_0^I \right)^{N'},$$

ya que  $Z_0^I$  es independiente de  $I$ ;  $N'$  es el número de bloques. Para el Hamiltoniano de Ising (6.97) se obtiene inmediatamente:

$$Z_0^I = e^{3K} + 3 e^{-K} \quad (6.103)$$

Reemplazando en la Ec.(6.6) obtenemos entonces

$$e^{\mathcal{C} + \mathcal{H}'(s')} = \sum_{\{s\}} P(s', s) e^{\mathcal{H}_0(s)} e^{\mathcal{V}(s)} \quad (6.104)$$

$$= Z_0 \left\langle e^{\mathcal{V}(s)} \right\rangle_0 (s'), \quad (6.105)$$

de donde

$$\mathcal{C} + \mathcal{H}'(s') = \ln Z_0 + \ln \left\langle e^{\mathcal{V}(s)} \right\rangle_0 (s'). \quad (6.106)$$

Usando el desarrollo en cumulantes

$$\left\langle e^{\mathcal{V}(s)} \right\rangle_0 = \exp \left( \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} C_n \right), \quad (6.107)$$

donde

$$C_1 = \left\langle \mathcal{V}(s) \right\rangle_0, \quad (6.108)$$

$$C_2 = \left\langle \mathcal{V}^2(s) \right\rangle_0 - \left\langle \mathcal{V}(s) \right\rangle_0^2, \quad (6.109)$$

etc, obtenemos el desarrollo:

$$\mathcal{C} + \mathcal{H}'(s') = \ln Z_0 + \langle \mathcal{V}(s) \rangle_0 + \frac{1}{2} \left[ \langle \mathcal{V}^2(s) \rangle_0 - \langle \mathcal{V}(s) \rangle_0^2 \right] + \dots \quad (6.110)$$

La aproximación de orden  $n$  consiste entonces en truncar el desarrollo (6.110), conservando hasta el  $n$ -ésimo cumulante.

### Aproximación de primer orden

En primer orden tenemos:

$$\mathcal{C} + \mathcal{H}'(s') = \ln Z_0 + \langle \mathcal{V}(s) \rangle_0 \quad (6.111)$$

Para el caso del modelo de Ising (6.97) tenemos

$$\langle \mathcal{V}(s) \rangle_0 = K \sum_{\langle I, J \rangle} \langle V_{IJ} \rangle_0 + 3h \sum_I \langle S_i^I \rangle_0, \quad (6.112)$$

ya que, dada la simetría de  $H_0^I$ ,  $\langle S_i^I \rangle_0$  resulta independiente del sitio  $i \in I$ ;  $V_{IJ}$  denota:

$$V_{IJ} = \sum_{\langle i, j \rangle; i \in I; j \in J} S_i S_j. \quad (6.113)$$

Tomemos dos bloques primeros vecinos tal como los que se muestran en la Fig.(6.18). Esta estructura es general: entre dos bloques primeros vecinos hay siempre un lado opuesto a un vertice. Así:

$$V_{IJ} = S_1^J (S_2^I + S_3^I). \quad (6.114)$$

Dado que la distribución de probabilidad  $P(s', s) e^{\mathcal{H}_0}$ , factoriza en distribuciones de bloques independientes, tendremos que

$$\langle V_{IJ} \rangle_0 = 2 \langle S_i^I \rangle_0 \langle S_j^J \rangle_0, \quad (6.115)$$

donde  $i \in I$ ,  $j \in J$  son sitios arbitrarios de los bloques  $I, J$ . Tenemos entonces:

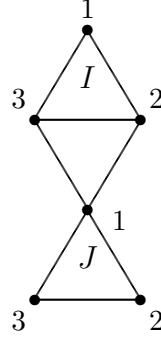


Figura 6.18:

$$\langle \mathcal{V}(s) \rangle_0 = 2K \sum_{\langle I, J \rangle} \langle S_i^I \rangle_0 \langle S_j^J \rangle_0 + 3h \sum_I \langle S_i^I \rangle_0. \quad (6.116)$$

De las Ecs.(6.94), (6.96) y (6.100) obtenemos:

$$\langle S_i^I \rangle_0 = \frac{1}{Z_0^I} \sum_{\{s\}} P_I(S'_I, s) e^{\mathcal{H}_0^I(s)} S_i^I. \quad (6.117)$$

Se verifica facilmente que:

$$\langle S_i^I \rangle_0 = a(K) S'_I \quad (6.118)$$

donde

$$a(K) = \frac{e^{3K} + e^{-K}}{e^{3K} + 3e^{-K}} \quad (6.119)$$

Reemplazando las Ecs.(6.116) y (6.118) en la Ec.(6.111) obtenemos:

$$\mathcal{H}'(s') = \langle \mathcal{V}(s) \rangle_0 \quad (6.120)$$

$$= 2K a^2(K) \sum_{\langle I, J \rangle} S'_I S'_J + 3h a(K) \sum_I S'_I \quad (6.121)$$

Dado que el Hamiltoniano (6.121) tiene la misma forma que el Hamiltoniano original (6.97), vemos que el considerar interacciones solo hasta primeros vecinos

|                       | $K_c$ | $y_T$ | $y_B$ |
|-----------------------|-------|-------|-------|
| exacto                | 0.275 | 1     | 1.875 |
| 1 <sup>er</sup> orden | 0.336 | 0.894 | 2.022 |
| 2 <sup>do</sup> orden | 0.251 | 1.053 | 1.847 |

Tabla 6.3: Resultados comparativos obtenidos con la aproximación de Niemeijer-van Leeuwen en la red triangular.

resulta consistente con la aproximación de primer orden. En este orden de aproximación, obtenemos las siguientes ecuaciones de recurrencia:

$$K' = 2K a^2(K) \quad (6.122)$$

$$h' = 3h a(K). \quad (6.123)$$

### Comentarios

- Podemos verificar facilmente que las Ecs. de recurrencia (6.122) y (6.123) satisfacen las propiedades de paridad (6.52) y (6.53) analizadas en la subsección 6.3.3.
- **Puntos fijos triviales:** *i)*  $K = h = 0$ , correspondiente a  $T = \infty$ ; *ii)*  $K = \infty, h = 0$ , estado fundamental con degeneración de inversión; *iii)*  $K = \infty, h = \infty (-\infty)$ , estado fundamental magnetizado “up” (“down”).
- **Subespacio invariante**  $h = 0$ : en este caso se obtiene

$$K' = 2K a^2(K)$$

el cual presenta el punto fijo no trivial  $a(K_c) = 1/\sqrt{2} \Rightarrow K_c = \frac{1}{4} \ln(1 + 2\sqrt{2})$ .

Los resultados finales se comparan en la tabla (6.3) con los resultados exactos y los obtenidos mediante el segundo orden en el desarrollo en cumulantes (6.110).

## 6.5 GR y transiciones de fase de primer orden

A pesar de que el RG fue diseñado específicamente para el tratamiento de transiciones de fase de segundo orden, esto es, transiciones con longitud de correlación divergente, hemos visto como el flujo global de GR se encuentra relacionado con el diagrama de fases completo del sistema en consideración. De esta manera esperaríamos que todo tipo de transición de fase, aún aquellas no críticas, se manifesten en el flujo de GR. Veremos en esta sección como al menos cierto tipo de transiciones de primer orden pueden ser caracterizadas dentro del esquema de GR. Nos referiremos concretamente a la línea de transiciones de primer orden que ocurre para un ferromagneto para campo nulo  $h = 0$  y  $T < T_c$ .

Supongamos entonces un ferromagneto en una red  $d$ -dimensional cuyas ecuaciones de recurrencia tengan la forma

$$\begin{aligned} K' &= K'(K, h) \\ h' &= h'(K, h). \end{aligned}$$

(la introducción de interacciones ferromagnéticas de orden superior no alteran los resultados subsiguientes). La línea de primer orden en el espacio  $(K, h)$  constituye la cuenca de atracción del punto fijo  $(K, h) = (\infty, 0)$ , el cual caracteriza la fase ferromagnética con simetría de inversión a campo nulo. La característica sobresaliente de esta transición es la discontinuidad en el parámetro de orden provocada por la presencia de magnetización espontánea

$$m_{\pm}(K) \equiv \lim_{h \rightarrow 0^{\pm}} \frac{\partial f(K, h)}{\partial h} \quad (6.124)$$

al atravesar dicha línea a temperatura constante  $T < T_c$ . Consideremos entonces el comportamiento de la discontinuidad en la magnetización

$$\Delta m(K) \equiv \frac{m_+(K) - m_-(K)}{2} \quad (6.125)$$

bajo la transformación de GR a lo largo de la línea  $h = 0$  para  $K > K_c$ , para la cual sabemos que  $\Delta m(K) \neq 0$ . Derivando la expresión (6.12) para la energía libre obtenemos:

$$\frac{\partial f(K, h)}{\partial h} = \frac{\partial g(K, h)}{\partial h} + b^{-d} \frac{\partial f(K', h')}{\partial h} \quad (6.126)$$

$$\frac{\partial f(K', h')}{\partial h} = \frac{\partial f(K', h')}{\partial K'} \frac{\partial K'}{\partial h} + \frac{\partial f(K', h')}{\partial h'} \frac{\partial h'}{\partial h}. \quad (6.127)$$

Tanto  $g$  como  $K'$  y  $h'$  se asumen funciones analíticas de  $K$  y  $h$ . De las propiedades de paridad (6.52) y (6.53) tenemos que

$$\left. \frac{\partial K'}{\partial h} \right|_{h=0^\pm} = 0$$

$$\left. \frac{\partial h'}{\partial h} \right|_{h=0^+} = \left. \frac{\partial h'}{\partial h} \right|_{h=0^-} \neq 0$$

y

$$\left. \frac{\partial g}{\partial h} \right|_{h=0^+} = \left. \frac{\partial g}{\partial h} \right|_{h=0^-} = 0.$$

Así, reemplazando las expresiones (6.126) y (6.127) en la definición (6.124) e introduciendo la definición

$$R(K) \equiv b^{-d} \left. \frac{\partial h'}{\partial h} \right|_{h=0} \quad (6.128)$$

obtenemos

$$m_\pm(K) = R(K) m_\pm(K') \quad (6.129)$$

de donde

$$\Delta m(K) = R(K) \Delta m(K'). \quad (6.130)$$

Iterando  $n$  veces a partir de un valor inicial  $K^{(0)}$  obtenemos

$$\Delta m(K^{(0)}) = \prod_{i=0}^{n-1} R(K^{(i)}) \Delta m(K^{(n)}). \quad (6.131)$$

Para  $n \rightarrow \infty$  tenemos que  $K^{(n)} \rightarrow \infty \forall K^{(0)} > K_c$ . Además  $\Delta m(\infty) = 1$ , es decir,  $\lim_{n \rightarrow \infty} \Delta m(K^{(n)}) = 1$ , con lo cual

$$\Delta m(K^{(0)}) = \prod_{i=0}^{\infty} R(K^{(i)})$$

Dado que  $\Delta m(K^{(0)})$  es finita para todo  $K^{(0)} > K_c$  y dado que  $R(K)$  es una función continua (en base a la condiciones de regularidad asumidas para  $h'$ ) concluimos que  $R(\infty) = 1$ . Por otra parte sabemos que para todo punto fijo en la recta  $h = 0$  uno de los campos de escala es precisamente  $h$ . De esta manera usando la Eq.(6.128) tenemos que

$$\left. \frac{\partial h'}{\partial h} \right|_{h=0, K=\infty} = b^d = b^{y_B^\infty}$$

de donde

$$y_B^\infty = d \quad (6.132)$$

La ecuación (6.132) se conoce como *criterio de Nienhuis y Nauenberg* [12] para caracterización de puntos fijos de primer orden, en el sentido de transiciones no críticas con parámetro de orden discontinuo. Notemos que para puntos fijos críticos tenemos que  $y_B < d$ .

Es importante destacar que este criterio fue derivado para puntos fijos asociados con la simetría de inversión del campo magnético, siendo verificado en diversos modelos con esta propiedad. No obstante para transiciones de fase de primer orden sin esta simetría existen contraejemplos que muestran que el criterio no tiene validez general. Uno de estos contraejemplos es el modelo de Potts de  $q$  estados ferromagnético con interacciones de largo alcance, el cual presenta una transición de fase de primer orden para  $q \geq 3$  en ausencia de campo magnético externo. Una

adaptación del método de Niemeijer y van Leeuwen a este tipo de modelos que describe correctamente la transición de fase de segundo orden para  $q = 2$  [16] predice para  $q \geq 3$  una transición de fase de primer que no satisface el criterio (6.132) [15].

## 6.6 Crossover

Se denominan mediante este término un conjunto de fenómenos relacionados con la incapacidad del sistema, bajo ciertas condiciones, en alcanzar efectivamente el régimen asintótico en el cual valen las leyes de escala (homogeneidad de las funciones termodinámicas). Estos fenómenos pueden obedecer a diversas causas, algunas de las mas importantes siendo descriptas a continuación.

### 6.6.1 Crossover por campos externos residuales pequeños

En el entorno de un punto crítico sabemos que las diferentes funciones termodinámicas obedecen formas de escala derivadas de la homogeneidad generalizada de las mismas. En el caso en que estas funciones dependen de varios parámetros externos relevantes, tales como  $t$  y  $h$ , las mismas pueden presentar diferentes formas asintóticas dependiendo de la forma en que estas sean variadas para alcanzar el punto crítico. Consideremos por ejemplo la forma de escala para la energía libre de un ferromagneto en presencia de un campo externo

$$f(t, h) = |t|^{2-\alpha} G_{\pm} \left( \frac{h}{|t|^{\Delta}} \right) \quad (6.133)$$

donde  $\Delta = \beta\delta$ , de la cual derivamos la forma asintótica para el calor específico a campo nulo

$$c(t) \propto \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \sim |t|^{-\alpha} G_{\pm}(0) \quad (6.134)$$

Ahora bien, en experimentos reales existe siempre un campo magnético externo residual  $h_0$ , debido a diversos factores tales como el campo magnético terrestre, campos locales originados en posibles impurezas magnéticas, etc. De manera que

nos interesa estudiar el comportamiento asintótico de  $c$  para  $t \rightarrow 0$  en presencia de un campo magnético externo pequeño pero no nulo. Para temperaturas tales que  $h_0/|t|^\Delta \ll 1$  observaremos el comportamiento (6.134). No obstante, al disminuir aun mas la temperatura al punto de que  $h_0/|t|^\Delta \gg 1$  el comportamiento observado dependera del comportamiento asintótico de  $G_\pm(x)$  para  $x \rightarrow \infty$ . De (6.133) tenemos que para  $|t| \ll 1$

$$m(t, h) = -\frac{1}{T} \frac{\partial f}{\partial h} \sim |t|^{2-\alpha-\Delta} G'_\pm \left( \frac{h}{|t|^\Delta} \right). \quad (6.135)$$

Usando la ley de escala  $2 - \alpha = \beta(\delta + 1) = \Delta + \beta$  y los resultados de la sección 5.9 concluimos que  $G'_\pm(z) = F_\pm(z) \sim z^{1/\delta}$  para  $z \rightarrow \infty$  y por lo tanto

$$G_\pm(z) \sim z^{1+1/\delta},$$

lo cual implica que para  $t \rightarrow 0$  con  $h_0/|t|^\Delta \gg 1$  tendremos que

$$c(t, h_0) \sim |t|^{-\bar{\alpha}} h_0^{1+1/\delta}$$

.

donde  $\bar{\alpha} = 2$ . La pregunta relevante desde el punto de vista experimental es, dados los valores  $h$  y  $t$ , en que régimen asintótico se encuentra el sistema,  $x \rightarrow \infty$  ó  $x \rightarrow 0$ ? Hemos visto que la respuesta depende de la relación  $h_0/|t|^\Delta$ . La observación importante es que depende de cuan cerca el sistema este de la criticalidad. Por ejemplo, si el sistema es enfriado en presencia de  $h_0$ , en el régimen crítico, pero no demasiado cerca de  $t = 0$ ,  $h_0/|t|^\Delta \ll 1$  y uno observará el límite  $x \rightarrow 0$  de la función de escala; este es el comportamiento que uno esperaría si el campo magnético fuera *exactamente* cero. Sorprendentemente, si nos aproximamos demasiado a la criticalidad ( $t = 0$ ) entraremos en el régimen asintótico  $x \rightarrow \infty$ . Hemos visto que este es un límite completamente equivocado si en lo que estamos interesados es en determinar las propiedades críticas a campo cero. Esta situación se ilustra esquemáticamente en la figura 6.6.1.

Es necesario remarcar que la región de *cambio de comportamiento* ó *crossover*, definida aproximadamente por la relación  $h_0/|t_0|^\Delta \sim 1$ , es absolutamente difusa, ya

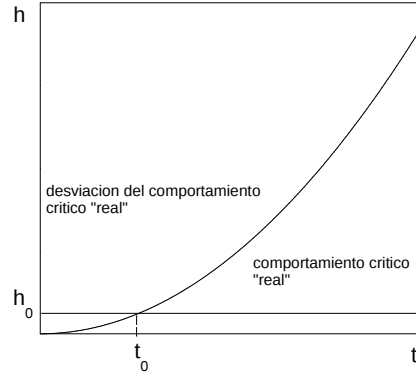


Figura 6.19: Crossover por campo externo residual  $h_0$ ; la temperatura reducida de crossover  $t_0$  se define por la relación  $h_0/|t_0|^\Delta \sim 1$

que depende de la forma exacta de  $F_\pm$ . En la figura 6.6.1 ilustramos esquemáticamente la forma cualitativa esperada del crossover en un gráfico log-log del calor específico.

### 6.6.2 Crossover producido por anisotropía en las interacciones

Hemos visto que el comportamiento crítico está gobernado por puntos fijos no triviales en el espacio de todas las interacciones *consistentes con las simetrías del problema*. En la práctica la identificación de las simetrías del problema constituye una *idealización* y frecuentemente existen interacciones relativamente pequeñas que rompen dichas simetrías, las cuales son despreciadas en la formulación del problema. Estas interacciones, no obstante, pueden generar campos de escala relevantes, los cuales tornan inestable el subespacio invariante bajo GR asociado al modelo simétrico, dando lugar a fenómenos de crossover, semejantes al producido por la presencia de campos residuales pequeños visto en la subsección anterior. Un ejemplo típico es el de los *ferromagnetos isotrópicos*, los cuales son habitualmente modelados mediante el Hamiltoniano de *Heisenberg*:

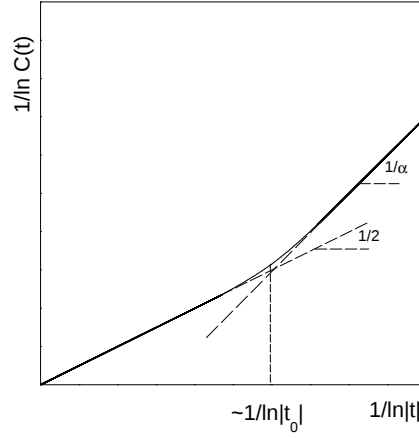


Figura 6.20: Comportamiento esquemático del calor específico  $C(t)$  en la región de crossover por campo externo residual  $h_0$ .

$$\mathcal{H} = K \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (6.136)$$

Este modelo es invariante por el grupo continuo de rotaciones en el espacio de los spines y define su propia clase de universalidad. No obstante, en sistemas reales a menudo existen campos cristalinos producidos, por ejemplo, por acoplamientos spin-órbita, los cuales pueden introducir anisotropía, destruyendo por lo tanto la invariancia rotacional. Dos manifestaciones comunes de este efecto son la *anisotropía inducida por iones simples*, la cual introduce una perturbación al Hamiltoniano de Heisenberg de la forma

$$\mathcal{H} = K \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + g \sum_i (S_i^z)^2 \quad (6.137)$$

y la *anisotropía en las interacciones de intercambio*, la cual corresponde al caso en que las interacciones de intercambio presentan diferentes intensidades de acuerdo con la orientación del spin; una manifestación frecuente es el la de *acoplamiento*

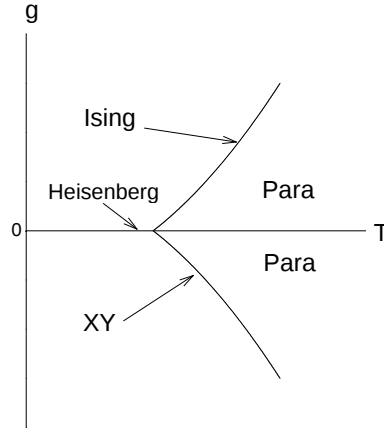


Figura 6.21: Diagrama de fases esquemático para el modelo de Heisenberg anisotrópico.

*anisotrópico uniaxial*, la cual se modela mediante el Hamiltoniano de Heisenberg *anisotrópico*:

$$\mathcal{H} = K_z \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z + K_{xy} \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y), \quad (6.138)$$

el cual puede ser descrito también como una perturbación del Hamiltoniano (6.136) de la forma

$$\mathcal{H} = K \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + g \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z \quad (6.139)$$

donde  $K \equiv K_z$  y  $g \equiv K_z - K_{xy}$ . Es posible ver que ambos tipos de perturbación tienen cualitativamente el mismo efecto sobre las propiedades críticas.

Analiseemos la forma cualitativa esperada del diagrama de fases de estos modelos en el espacio  $(T, g)$  para  $d \geq 3$ . A altas temperaturas el sistema será paramagnético para cualquier valor de  $g$ . A bajas temperaturas el sistema podrá presentar diferentes fases ordenadas dependiendo del valor de  $g$ . Para  $g > 0$  ( $K_z > K_{xy}$ ) y  $g \gg 1$

esperamos un ordenamiento preferencial de los spines en la dirección  $z$ , esto es,  $\langle S_i^z \rangle \approx \pm 1$  y  $\langle \vec{S}_i^{xy} \rangle \approx 0$ ; en otras palabras, un comportamiento tipo Ising. Para  $g < 0$  ( $K_z < K_{xy}$ ) y  $|g| \gg 1$ , esperamos un ordenamiento preferencial de los spines en el plano  $x-y$ , es  $\langle S_i^z \rangle \approx 0$  y  $\langle |\vec{S}_i^{xy}| \rangle \approx 1$ , que corresponde a un comportamiento tipo modelo X-Y (ver figura 6.6.2). En consecuencia, para  $|g| \gg 1$  la transición de fase al disminuir  $T$  estará en la clase de universalidad ya sea del modelo de Ising ó del modelo XY, dependiendo del signo de  $g$ . Para  $g = 0$  la transición estará en la clase de universalidad del modelo de Heisenberg, pero para cualquier valor finito de  $g$ , por pequeño que sea, el flujo de RG sera arrastrado hacia alguno de los atractores con  $g \neq 0$ , Ising ó XY. Esto implica que el punto fijo no trivial Heisenberg será completamente inestable en el espacio de parámetros  $(K_z, K_{xy})$  (ó equivalentemente  $(K, g)$ ) y el diagrama de flujo tendra la topología esquemática de la figura 6.6.2. Podemos concluir por lo tanto que el término de ruptura de simetría  $g$  tiene que ser un campo de escala *relevante*. Valores pequeños de  $g$  crecieran al renormalizar alejando el flujo en el entorno del punto fijo no trivial Heisenberg (H en la figura 6.6.2)) hacia alguno de los otros puntos no triviales (I ó XY en la figura 6.6.2), dependiendo del signo de  $g$ . Puntos fijos de alta simetría son en general (aunque no siempre) inestables con respecto a puntos fijos de menor simetría.

Podemos describir el crossover en el entorno del punto crítico Heisenberg en términos de dos campos de escala relevantes  $t$  y  $g$ , utilizando la forma de escala del GR para la energía libre:

$$f(t, g) = b^{-d} f\left(t b^{y_t^H}, g b^{y_g}\right) \quad (6.140)$$

$$= |t|^{2-\alpha_H} G_{\pm} \left( \frac{g}{|t|^{\phi}} \right) \quad (6.141)$$

donde  $\alpha_H$  es el exponente del calor específico obtenido a partir de las relaciones de escala en el punto fijo Heisenberg para  $g = 0$ ;  $\phi = y_g/y_t^H$  es el *exponente de crossover*, el cual sera positivo, ya que  $y_g > 0$  (campo de escala relevante). Para temperaturas tales que  $g/|t|^{\phi} \ll 1$  observaremos el comportamiento asintótico es-

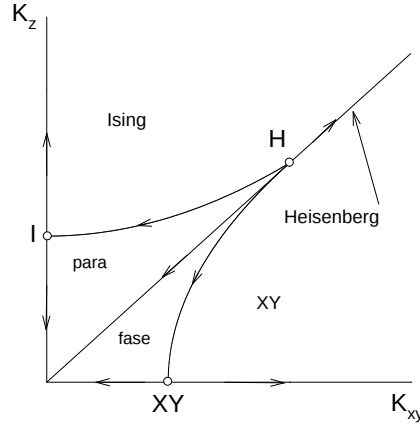


Figura 6.22: Diagrama de flujo de GR esquemático para el modelo de Heisenberg anisotrópico.

perado para el modelo isotrópico  $f \sim |t|^{2-\alpha_H}$ , pero suficientemente cerca de la criticalidad ( $g/|t|^\phi \gg 1$ ) el comportamiento se desviará del anterior. De hecho en este último caso la ley de escala (6.140) dejará de ser válida, ya que el flujo de renormalización será arrastrado por la influencia del campo  $g$  hacia otro punto fijo no trivial (I ó XY) en el cual el comportamiento asintótico estará determinado por otros exponentes críticos. El exponente  $\phi$  nos sirve en este caso para determinar la región de crossover.

## 6.7 Leyes de escala con el tamaño finito (“finite size scaling”)

Como vimos en la sección 5.4, la variación con el tamaño del sistema de diversas cantidades en el entorno de un punto crítico puede ser explicada fenomenológicamente asumiendo homogeneidad de la energía libre con dicho tamaño. Vamos a ver a continuación como esta suposición puede justificarse dentro del marco conceptual del

GR.

Consideremos un sistema finito de tamaño lineal  $L$ , tal que el volumen  $V \propto L^d$ . Bajo renormalización la parte singular de la energía libre por unidad de volumen escala como

$$f_s(\vec{K}, L) = b^{-d} f_s(\vec{K}', L/b).$$

Supongamos ahora que tomamos  $L$  suficientemente grande como para que, en las cercanías del punto crítico,  $f_s$  dependa de los parámetros termodinámicos a través de  $l$  campos de escala relevantes del sistema infinito y definamos  $u_L \equiv L^{-1}$ . Tendremos entonces la relación

$$f_s(u_1, u_2, \dots, u_l, u_L) = b^{-d} f_s(b^{y_1} u_1, b^{y_2} u_2, \dots, b^{y_l} u_l, b u_L).$$

Dado que el punto fijo crítico ocurre para  $\vec{K} = \vec{K}^*$  ( $u_1 = u_2 = \dots = 0$ ) y  $u_L = 0$ , y dado que la transformación de GR nos contrae siempre el tamaño del sistema, excepto para un sistema estrictamente infinito  $u_L = 0$ , vemos que  $u_L$  actúa como un nuevo campo de escala *relevante*, con exponente  $y_L = 1$ . Para sistemas grandes  $L \gg 1$  este campo genera efectos de crossover, semejantes a los vistos en la sección anterior. Tomemos como ejemplo un ferromagneto a campo nulo, para el cual

$$f_s(t, u_L) = b^{-d} f_s(b^{y_t} t, b u_L) \quad (6.142)$$

$$= |t|^{2-\alpha} G_{\pm} \left( \frac{u_L}{|t|^{1/y_t}} \right) \quad (6.143)$$

usando que  $y_t = 1/\nu$  y que  $\xi_{\infty}(t) \sim |t|^{-\nu}$  tenemos que

$$f_s(t, L^{-1}) = |t|^{2-\alpha} G_{\pm} \left[ (L |t|^{\nu})^{-1} \right] \quad (6.144)$$

$$= |t|^{2-\alpha} G_{\pm} \left( \frac{\xi_{\infty}(t)}{L} \right). \quad (6.145)$$

Para  $t \neq 0$   $f_s$  es analítica en el límite  $L \rightarrow \infty$  y por lo tanto  $G_{\pm}(0) = cte$ . Así, el límite  $x \rightarrow 0$  de  $G_{\pm}(x)$  corresponde al comportamiento crítico “correcto”. Esto

determina una región de crossover  $L|t|^\nu \sim 1$ , tal que para  $(L|t|^\nu)^{-1} \gg 1$ , la forma asintótica de  $F_\pm(x)$  para  $x \rightarrow \infty$  generará un apartamiento del comportamiento correspondiente al sistema infinito. Esto puede interpretarse facilmente a partir de la expresión (6.145). Para  $(L|t|^\nu)^{-1} \ll 1$  tenemos que  $\xi_\infty(t) \ll L$  y los efectos de borde derivados del tamaño finito no seran perceptibles, de manera que  $\xi_L(t) \sim \xi_\infty(t)$ . Para  $(L|t|^\nu)^{-1} \gg 1$  tendremos que  $\xi_L(t) < L \ll \xi_\infty(t)$ , de manera que observaremos un pico finito en las funciones respuesta con un máximo para  $L|t|^\nu \sim 1$  en lugar de una singularidad.

Estas propiedades de escala pueden utilizarse en la práctica para estimar numéricamente el comportamiento del sistema infinito. Consideremos por ejemplo la longitud de correlación, la cual para un sistema finito puede ser calculada por ejemplo mediante la técnica de matriz de transferencia (cociente de los dos mayores autovalores para un sistema semi-infinito de ancho  $L$ ):

$$\xi(t, L^{-1}) = b\xi(t b^{y_t}, bL^{-1}) \quad (6.146)$$

$$= t^{-\nu} F_\xi(L^{-1} t^{-\nu}) \quad (6.147)$$

$$= L\bar{F}(Lt^\nu) \quad (6.148)$$

$$= L\bar{F}\left(\frac{L}{\xi_\infty(t)}\right) \quad (6.149)$$

donde  $\bar{F}(x) \equiv x^{-1} F_\xi(x^{-1})$ . Analisemos el comportamiento asintótico de  $\bar{F}$ . Para  $0 < t \ll 1$  y  $L \rightarrow \infty$  tenemos que  $\xi(t, L) \rightarrow \xi_\infty(t)$ , de donde  $\bar{F}(x) \sim x^{-1}$  para  $x \rightarrow \infty$ . Para  $L$  finito tenemos que  $\xi(t, L^{-1})$  es analítica  $\forall t$  y por lo tanto  $\bar{F}(0) = cte$ , lo cual implica que  $\xi(0, L^{-1}) \sim L$ . Para  $L$  finito podemos desarrollar  $\bar{F}(x)$  en torno de  $x = 0$  obteniendo

$$\frac{\xi(t, L^{-1})}{L} = A + BtL^{1/\nu} + \mathcal{O}(t^2). \quad (6.150)$$

Asi, si graficamos  $\xi/L$  en función de la temperatura para distintos tamaños todas las curvas se cortarán en un mismo punto correspondiente a  $T = T_c$  como se muestra esquemáticamente en la figura 6.7, lo que permite estimar la temperatura crítica.

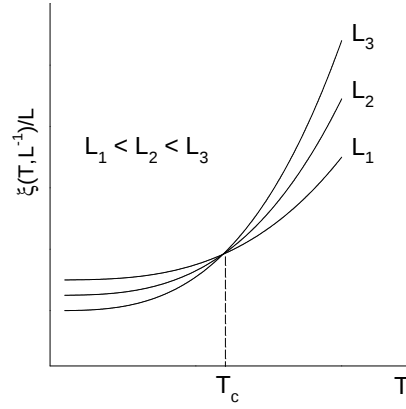


Figura 6.23: Determinación numérica de  $T_c$  usando propiedades de escala de  $\xi$  con el tamaño  $L$ .

Podemos también estimar el exponente  $\nu$  derivando con respecto a  $t$  la expresión (6.150)

$$\frac{\partial(\xi(t, L^{-1})/L)}{\partial t} \sim BL^{1/\nu}$$

para  $t \rightarrow 0$  y tomando el logaritmo

$$\ln \frac{\partial(\xi(t, L^{-1})/L)}{\partial t} \sim \ln B + \frac{1}{\nu} \ln L$$

.

En otras técnicas numéricas como Monte Carlo la longitud de correlación resulta difícil de calcular. En principio es posible emplear la misma metodología anterior utilizando otras funciones termodinámicas, tales como la susceptibilidad, la cual como vimos en la sección 5.4 presenta la forma de escala

$$\chi(L, t) = L^{\gamma/\nu} F' \left( \frac{L}{\xi_\infty(t)} \right)$$

El problema que se presenta para estimar  $T_c$  a partir de la expresión anterior es que deberíamos conocer  $\gamma$  y  $\nu$  *a priori*. Esto puede evitarse utilizando otras cantidades

faciles de calcular en una simulación. Sea  $M \equiv \frac{1}{N} \sum_i S_i$ . A partir de la hipótesis de escala con el tamaño finito es posible mostrar que [17]:

$$\langle M^4 \rangle_L \sim L^{-4\beta/\nu} F_4 \left( \frac{L}{\xi_\infty(t)} \right)$$

$$\langle M^2 \rangle_L \sim L^{-2\beta/\nu} F_2 \left( \frac{L}{\xi_\infty(t)} \right).$$

Definiendo entonces<sup>3</sup>

$$U_L \equiv \frac{\langle M^4 \rangle_L}{\langle M^2 \rangle_L^2} \sim \frac{F_4 \left( \frac{L}{\xi_\infty(t)} \right)}{\left[ F_2 \left( \frac{L}{\xi_\infty(t)} \right) \right]^2}$$

vemos que  $U_L$  resultará independiente de  $L$  cuando  $t = 0$ .

## 6.8 Correcciones a las leyes de escala

En la práctica, resulta sumamente difícil acceder al régimen crítico asintótico  $t \rightarrow 0$ . Por otra parte la influencia de los campos irrelevantes en las funciones termodinámicas solo puede despreciarse asintóticamente para  $t \rightarrow 0$ . En el caso en que  $|t| \ll 1$ , con  $t$  finito, los campos de escala irrelevantes introduzcan correcciones a las leyes de escala.

Tomemos como ejemplo un ferromagneto con campo externo y llamemos  $u_3$  al campo de escala irrelevante cuyo índice de autovalor  $y_3$  tenga menor valor absoluto entre todos los correspondientes a los campos irrelevantes. Desarrollando los campos relevantes en series de potencias en  $t$  y  $h$  tenemos que

$$f_s(t, h) \sim b^{-d} f_s \left( t b^{y_t}, h b^{y_h}, u_3 b^{-|y_3|} \right) \quad (6.151)$$

$$\sim |t|^{2-\alpha} G_\pm \left( \frac{h}{|t|^\Delta}, u_3 |t|^{|y_3|/y_t} \right). \quad (6.152)$$

Derivando respecto del campo magnético obtenemos

---

<sup>3</sup>Esta cantidad, a veces con una definición levemente diferente, suele denominarse *cumulante de Binder*

$$\chi(t, h) \sim |t|^{-\gamma} F_{\pm}^{\chi} \left( \frac{h}{|t|^{\Delta}}, u_3 |t|^{|y_3|/y_t} \right)$$

$$\chi(t, 0) \sim |t|^{-\gamma} F_{\pm}^{\chi} \left( 0, u_3 |t|^{|y_3|/y_t} \right).$$

Dado que esperamos que  $F_{\pm}^{\chi}$  sea analítica en los campos de escala irrelevantes, podemos desarrollar  $F_{\pm}^{\chi}(0, x)$  para valores pequeños de  $x$ , obteniendo:

$$\chi(t, 0) \sim |t|^{-\gamma} \left( A_{\pm} + B_{\pm} u_3 |t|^{|y_3|/y_t} \right).$$

donde las variables  $A$  y  $B$  son constantes no universales. Como esperado, el comportamiento dominante cuando  $t \rightarrow 0$  es  $|t|^{-\gamma}$ , pero existe una primera corrección de orden  $|t|^{|y_3|/y_t}$ . Notemos que para  $|y_3|/y_t > 1$  este término decrece rápidamente cuando  $t \rightarrow 0$ , mientras que para  $|y_3|/y_t < 1$  el mismo decrece lentamente (de hecho esta contribución es singular en este caso, ya que la derivada primera es divergente) y la corrección puede ser no despreciable para valores pequeños pero finitos de  $t$ .

