

CRITICO!!!!!!!!!!!!!!!



Critico_2



侍

landau

1934→ Bragg Williams

1935→ Bethe

1937→ Landau propone un teoria unificada del comportamiento de sistemas en la vecindad del punto critico.

Esto es para sistemas que tienen la segunda derivada de la energia libre **divergente** (calor especifico y suceptibilidad)

Lo que hemos observado es que, $M = \sum s_i = NL$ vale 0 para $T > T_c$ y empieza a crecer para $T < T_c$

Introduce entonces el concepto de **parametro de orden m_0** que es 0 por encima de T_c y distinto de 0 por debajo, en suma es pequeño en la vecindad del punto critico.

Luego sugiere expandir la energia libre en terminos de m_0 ,
 en ausencia de H (en campo que rompe la simetria), el
 sistema debe ser simetrico y por lo tanto la expansion solo
 involucrara terminos pares. *

Sea $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ y estudiamos la region $|t| \ll 1$

Sea $\Psi(t, m_0, Y) = \Psi_0(t, Y) + r(t)m_0^2 + s(t)m_0^4 + \dots$

En principio $r(t) = \sum r_k t^k$; etc.

Solo tomamos terminos pares para que $\Psi(t, m_0, Y)$ sea una
 funcion par de m y por lo tanto invariante ante inversion de
 signo de los spines.

-
- Esta expansión es un tanto osada pues derivadas segundas en el punto critico dan funciones respuesta que probablemente diverjan. Landau supone que las divergencias se dan en derivadas superiores

Las soluciones de equilibrio corresponderán a

$$\frac{\partial \Psi(t, m_0)}{\partial m_0} = 0 \quad \frac{\partial^2 \Psi(t, m_0)}{\partial m_0^2} \geq 0$$

Desarrollamos y minimizamos respecto de m_0 a orden m_0^4

$$0 = r(t)m_0 + 4s(t)m_0^3 = m_0(r(t) + 4s(t)m_0^2)$$

Necesitamos que sea mínimo $\Rightarrow$ la derivada segunda deberá ser ≥ 0

$$0 \leq r(t) + 12s(t)m_0^2$$

Entonces, con $s(t) > 0$ garantizamos que, para m_0 grande, la energía libre crezca y entonces el sistema será estable.

>0

$$0 = m_0 \left[r(t) + 4s(t)m_0^2 \right]$$

Elegimos ahora $r(t) > 0$ para $T > T_c$ y $r(t) < 0$ para $T < T_c$.

De esta forma

- i) en $T > T_c$ el minimo estara en $m_0 = 0$
- ii) cuando $T < T_c$ **se ~~es~~ también solución $m_0 \neq 0$**

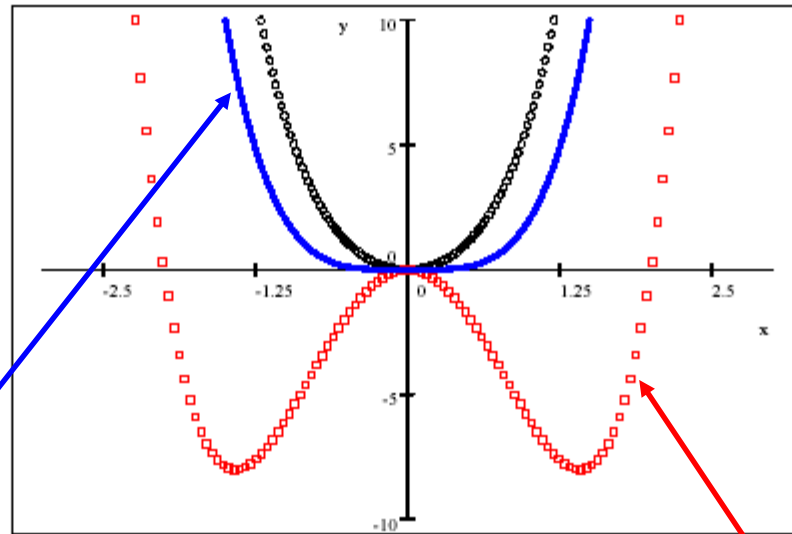
$\Psi(t, m_0, Y)$ debe ser continua $\Rightarrow r(t)$ debera ser 0 en $t = 0$

Elegimos entonces

$$r(t) = r_0 t$$

$$r_0 t = \alpha_2 t$$

De esta forma el potencial termodinámico tendrá la forma :



Con $r(t) > 0$ (circulos), $r(t) = 0$ (continua), $r(t) < 0$ (cuadrados)

Las soluciones son:

$$m_0 = 0 \quad \text{o} \quad m_0 = \pm \sqrt{\frac{-r(t)}{2s(t)}} = \pm \sqrt{\frac{\alpha_2(T_c - T)}{2s(t)}}$$

El potencial Termodinamico resultante:

$$\Psi(t, m_0, Y) = \Psi_0(t, Y) \text{ para } T > T_c$$

Para $T < T_c$

$$\Psi(t, m_0, Y) = \Psi_0(t, Y) + \alpha_2 t m_0^2 + s(t) m_0^4$$

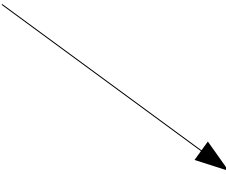
definicion de exponentes criticos

1) Cuando el sistema cruza el punto critico el parametro de orden empieza a crecer desde 0

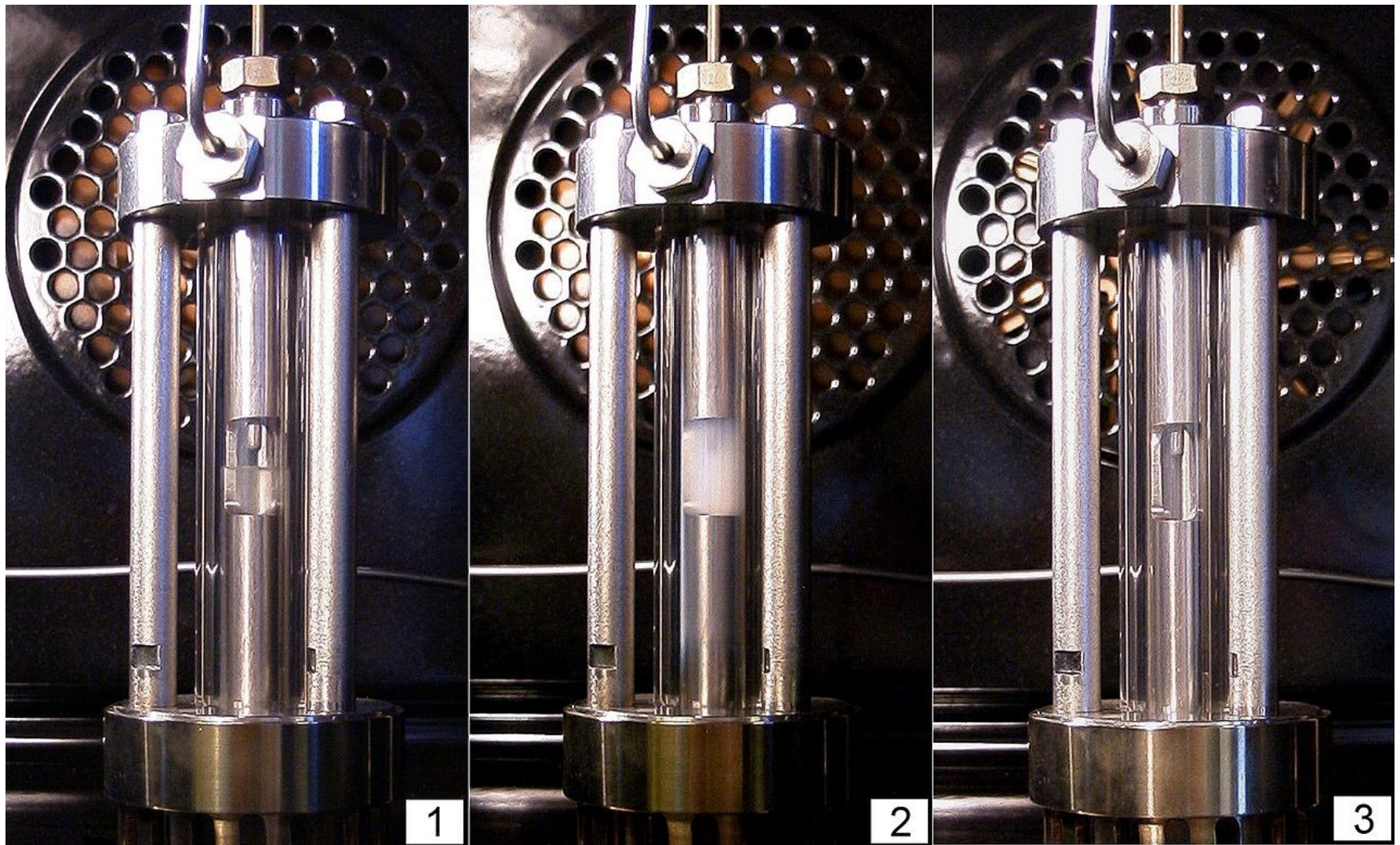
2) En la vecindad del punto critico el sistema sobrelleva procesos de "ajuste" a fin de adaptarse microscopicamente a esta nueva situacion.

Esto se refleja en la aparicion de grandes fluctuaciones

3) Cuando uno se acerca al punto critico las funciones termodinamicas pueden tener distintos comportamientos (divergencias, anularse, etc.)



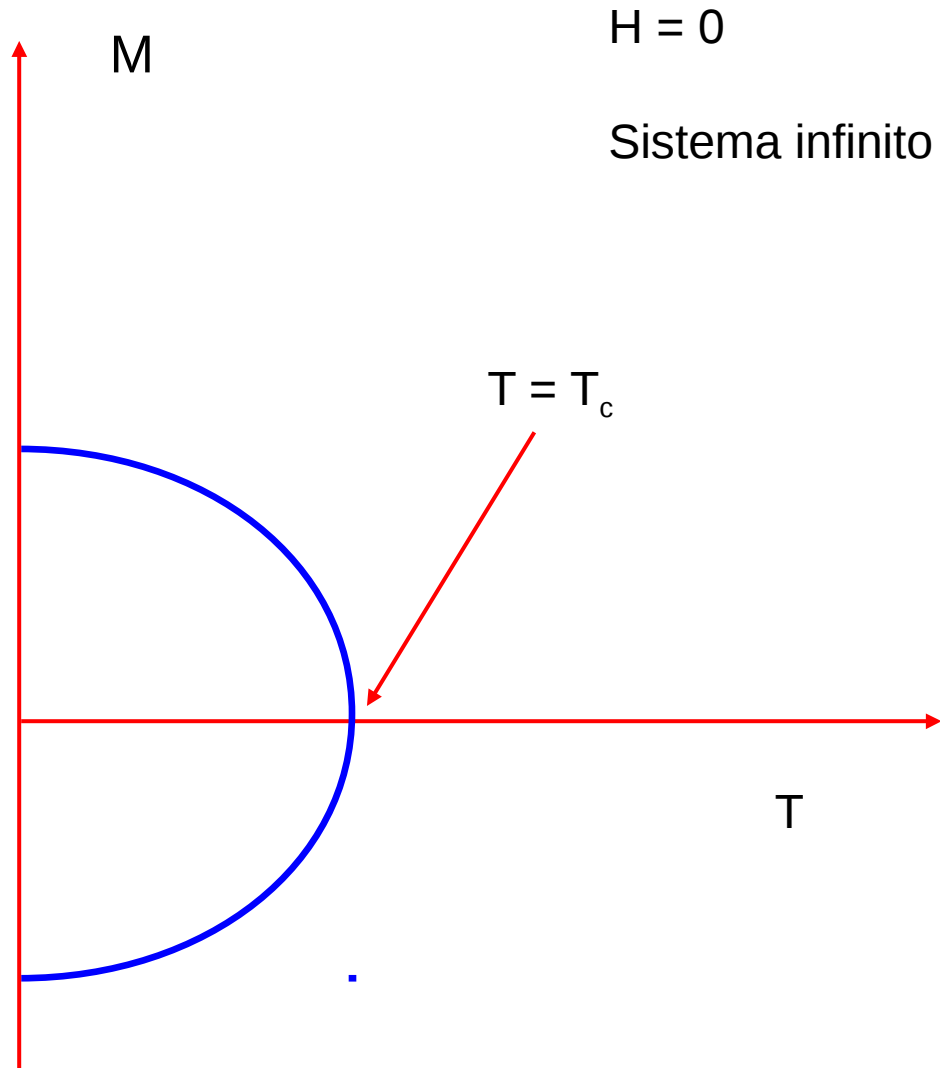




Left-to-right sequence of heating a mass of ethane in a constant volume. In the center panel, critical opalescence is seen.

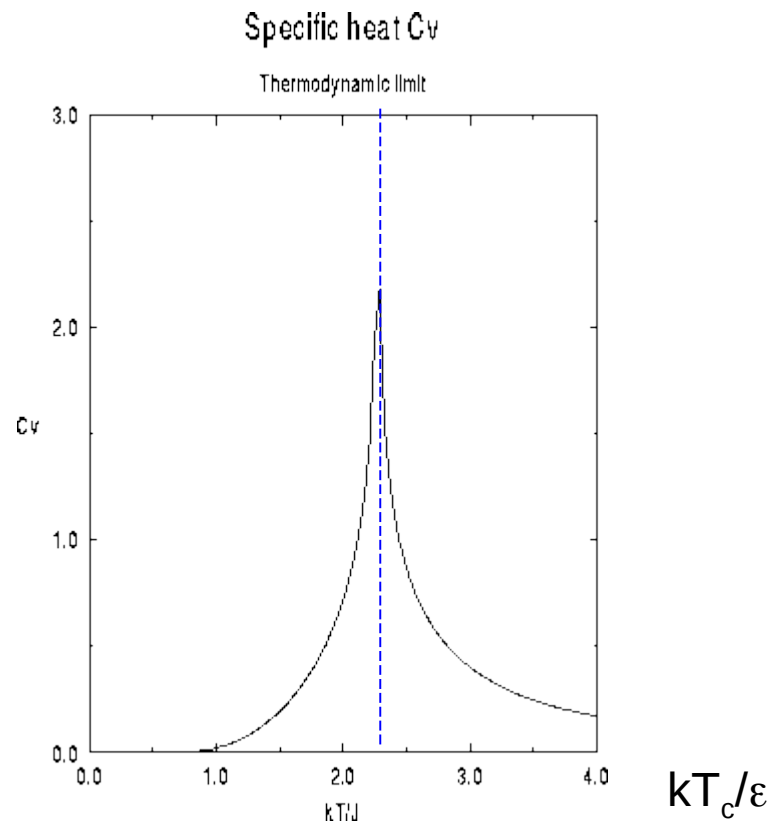
La Magnetización es

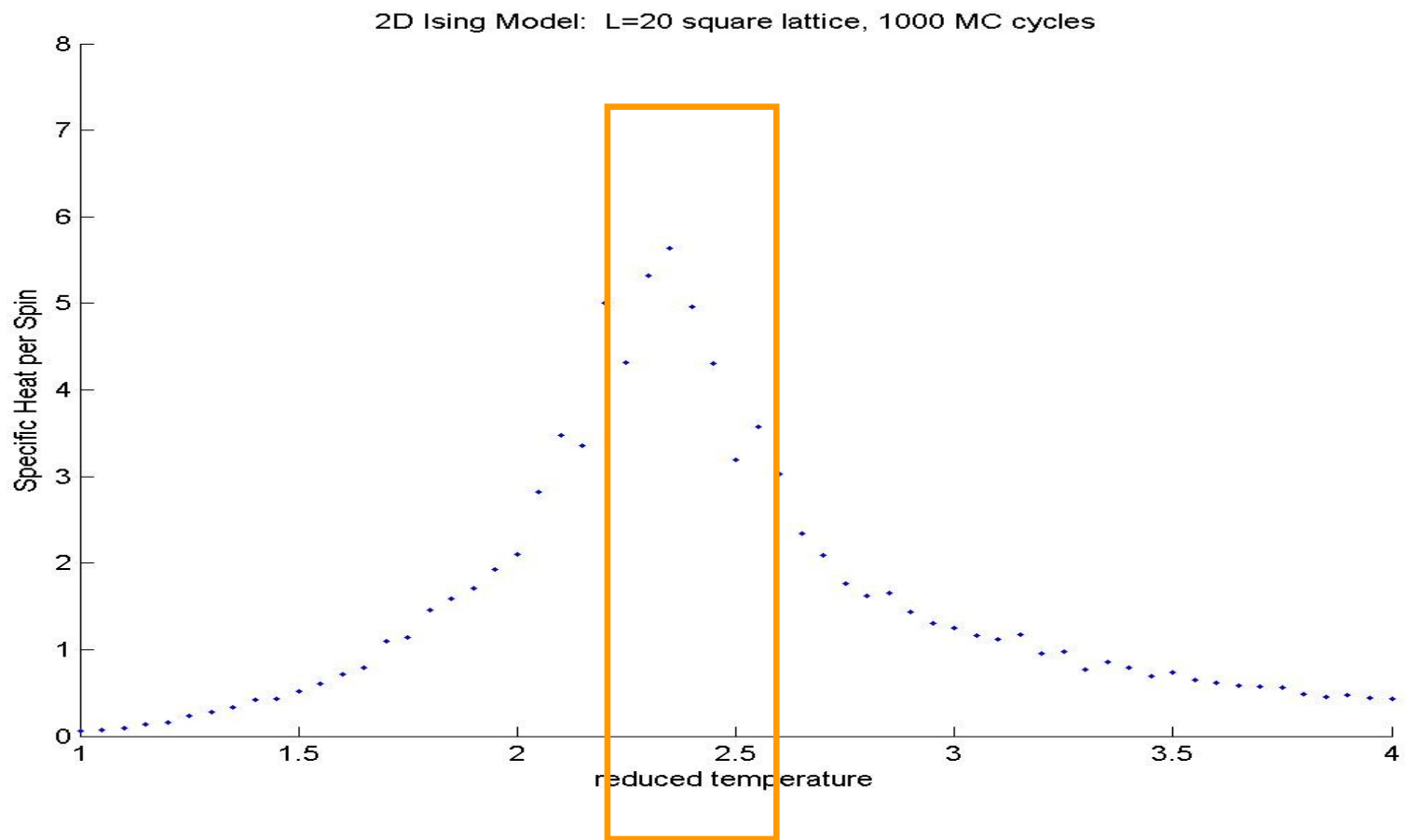
$$dG = -SdT - MdH$$
$$dH = TdS - MdH$$
$$M = -\left(\frac{\partial H}{\partial H}\right) = -\left(\frac{\partial G}{\partial H}\right)$$



<i>Onsager</i>	<i>Bethe – Peierls</i>	<i>Bragg – Williams</i>
kT_c/ϵ 2.27	2.88	4
div. logaritmica	pico	pico

Comportamiento en el
Punto critico





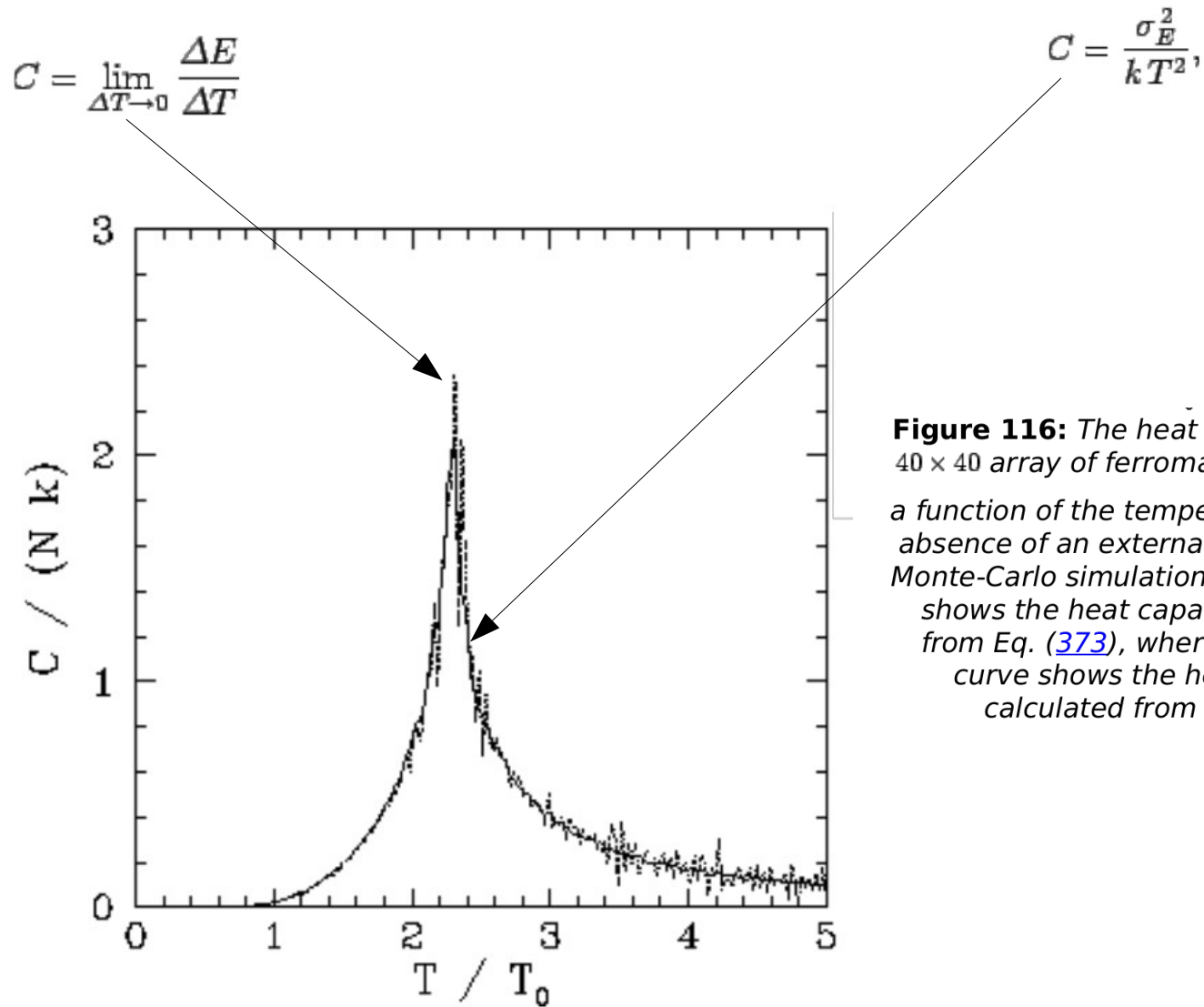


Figure 116: The heat capacity, C , of a 40×40 array of ferromagnetic atoms as a function of the temperature, T , in the absence of an external magnetic field. Monte-Carlo simulation. The solid curve shows the heat capacity calculated from Eq. (373), whereas the dotted curve shows the heat capacity calculated from Eq. (374).

El parametro para expandirlas es entonces

$$\epsilon = \frac{T - T_c}{T_c}$$

En la vecindad del punto critico las funciones termodinamicas se escriben de la siguiente forma

$$f(\epsilon) = A\epsilon^\lambda(1 + B\epsilon^y + \dots)$$

con $y > 0$

El exponente critico esta definido por

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\log f(\epsilon)}{\log \epsilon}$$

de este modo si

$\lambda < 0$	diverge
$\lambda > 0$	se va a 0
$\lambda = 0$	divergencia logaritmica? $f(\epsilon) = A + B\epsilon^{\frac{1}{2}}?$

	exp	def.	ϵ	H	M
Algunas definiciones	α'	$C_H \propto (-\epsilon)^{-\alpha'}$	< 0	0	0
	α	$C_H \propto \epsilon^{-\alpha}$	> 0	0	0
	β	$M \propto (-\epsilon)^{\beta}$	< 0	0	$\neq 0$
	γ'	$\chi_T \propto (-\epsilon)^{-\gamma'}$	< 0	0	$\neq 0$
	γ	$\chi_T \propto \epsilon^{-\gamma}$	> 0	0	
	δ	$H \propto M ^{\delta} sign(M)$	0	$\neq 0$	$\neq 0$
	ν'	$\xi \propto (-\epsilon)^{-\nu'}$	< 0	0	$\neq 0$
	η	$\Gamma(r) \propto r ^{-(d-2-\eta)}$	0	0	0

Exponentes criticos para Van der Waals

Cuales seran los exponentes criticos para la ecuacion de estado de VdW?

Recordemos que esta EOS se escribe como

$$P = \frac{nRT}{(V - nb)} - \frac{an^2}{V^2}$$

Sea ahora

$$\tilde{P} = P/P_c \quad \tilde{V} = V/V_c \quad \tilde{T} = T/T_c$$

Reescribimos entonces VdW

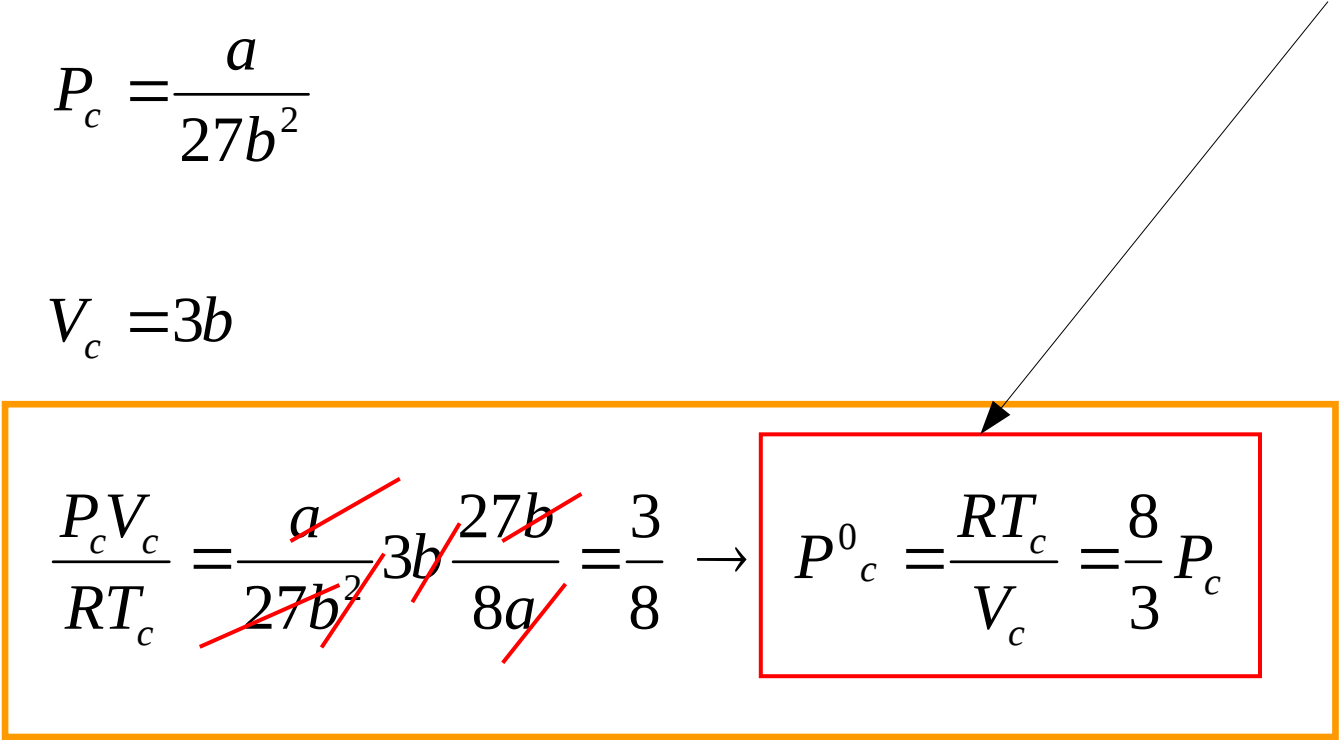
usando $\longrightarrow$

Recordemos que

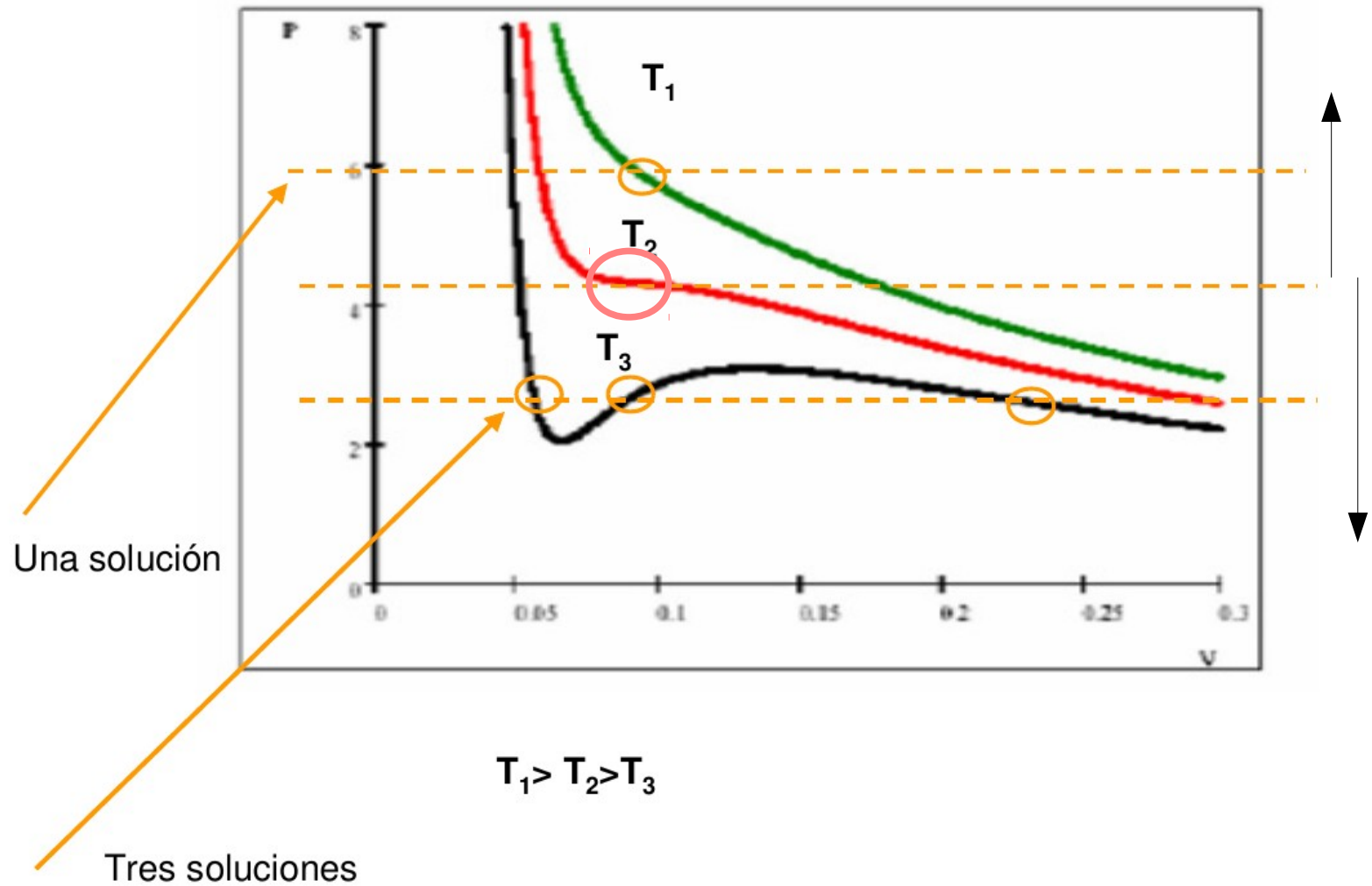
$$RT_c = \frac{8a}{27b}$$

$$P_c = \frac{a}{27b^2}$$

$$V_c = 3b$$


$$\frac{P_c V_c}{RT_c} = \frac{\cancel{a}}{27\cancel{b}^2} \frac{3\cancel{b}}{8\cancel{a}} = \frac{3}{8} \rightarrow P^0_c = \frac{RT_c}{V_c} = \frac{8}{3} P_c$$

Que viene de 



Se observa que se pasa de tener 3 soluciones para T baja,
única solución para T alta.

El punto de transición entre estos dos comportamientos es para:

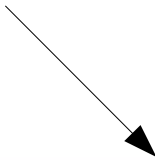
$$\left. \frac{\partial P}{\partial V} \right|_{T=T_c} = 0$$

$$\left. \frac{\partial^2 P}{\partial V^2} \right|_{T=T_c} = 0$$

Entonces recordando

Para la primera derivada

$$P = \frac{nRT}{(V - nb)} - a\frac{n^2}{V^2}$$


$$P = \frac{RT_c}{v - b} - \frac{a}{v^2} \Rightarrow \boxed{\frac{2}{v^3}a = \frac{RT_c}{(v - b)^2}}$$

de donde

$$\boxed{T_c = \left\{ \frac{2}{R} \frac{a}{v^3} (-b + v)^2 \right\}}$$

Para la segunda derivada tenemos

$$-\frac{6}{v^4}a + 2\frac{RT_c}{(v-b)^3} = 0$$

De donde obtenemos para T_c

$$T_c = \left\{ \frac{3}{R} \frac{a}{v^4} (-b + v)^3 \right\} = \left\{ \frac{2}{R} \frac{a}{v^3} (-b + v)^2 \left(\frac{3}{2} \frac{(-b + v)}{v} \right) \right\}$$

Comparando

$$T_c = \left\{ \frac{2}{R} \frac{a}{v^3} (-b + v)^2 \left(\frac{3}{2} \frac{(-b + v)}{v} \right) \right\}$$

$$T_c = \left\{ \frac{2}{R} \frac{a}{v^3} (-b + v)^2 \right\}$$

$$\frac{3}{2} \frac{(-b + v)}{v} = 1 \Rightarrow$$

$$v_c = 3b$$

Reemplazando

$$T_c = \left\{ \frac{2}{R} \frac{a}{v^3} (-b + v)^2 \right\} \quad \text{Con} \quad v_c = 3b$$

$$T_c = \left\{ \frac{2}{R} \frac{a}{(3b)^3} (-b + 3b)^2 \right\} = \boxed{\frac{8}{27R} \frac{a}{b}}$$

Ahora calculamos P_c

$$P = \frac{RT_c}{(v-b)} - \frac{a}{v^2}$$

$$P_c = \frac{R \left(\frac{8}{27R} \frac{a}{b} \right)}{((3b) - b)} - a \frac{1}{(3b)^2} = \boxed{\frac{1}{27} \frac{a}{b^2}}$$

Luego Van der Waals se puede escribir

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

donde $\bar{T} = \frac{T}{T_c}$, etc.

$$P = \frac{RT}{(V-b)} - \frac{a}{V^2} \longrightarrow P \left[\frac{P_c}{P_c} \right] = \frac{RT}{(V-b)} \left[\frac{T_c}{T_c} \right] - \frac{a}{V^2}$$

$$\tilde{P} \frac{P_c}{T_c} = \frac{R\tilde{T}}{(V-b)} - \frac{a}{V^2 T_c}$$

$$RT_c = \frac{8a}{27b}$$

$$P_c = \frac{a}{27b^2}$$

$$V_c = 3b$$

$$\frac{RT_c}{V_c} = \frac{8}{3} P_c$$

$$\tilde{P} \frac{P_c}{RT_c} = \frac{\tilde{T}}{(V-b)} - \frac{1}{V^2} \frac{a}{RT_c} = \frac{\tilde{T}}{(V-b)} - \frac{V_c}{V^2} \frac{9}{8}$$

$$\tilde{P} \left(\frac{V_c}{RT_c} \right) P_c = \frac{\tilde{T}}{(\tilde{V} - \frac{1}{3})} - \frac{1}{\tilde{V}^2} \frac{9}{8}$$

$$\tilde{P} \frac{3}{8} = \frac{\tilde{T}}{(\tilde{V} - \frac{1}{3})} - \frac{1}{\tilde{V}^2} \frac{9}{8} \Rightarrow \tilde{P} = \frac{8\tilde{T}}{(3\tilde{V} - 1)} - \frac{3}{\tilde{V}^2} \Rightarrow$$

$$\left[\tilde{P} + \frac{3}{\tilde{V}^2} \right] (3\tilde{V} - 1) = 8\tilde{T}$$

$$\left[\tilde{P} + \frac{3}{\tilde{V}^2} \right] (3\tilde{V} - 1) = 8\tilde{T}$$

Usamos estas transformaciones

$$p = \tilde{P} - 1 = \frac{(P - P_c)}{P_c} \quad \Rightarrow \quad \tilde{P} = (1 + p)$$

$$v = \tilde{V} - 1 = \frac{(V - V_c)}{V_c}$$

$$\epsilon = \tilde{T} - 1 = \frac{(T - T_c)}{T_c}$$

en terminos de las cuales VdW puede ser reescrito como:

$$\left(1 + p + \frac{3}{(1 + v)^2} \right) (3(1 + v) - 1) = 8(1 + \epsilon)$$

$$\left(1 + p + \frac{3}{(1+v)^2}\right)(3(1+v) - 1) = 8(1+\epsilon)$$

De donde, multiplicando a ambos lados por $(1+v)^2$

$$[(1+v)^2 + p(1+v)^2 + 3][2+3v] = 8(1+\epsilon)(1+v)^2$$

Que toma la forma

$$2p(1 + 7v/2 + 4v^2 + 3v^3/2) = -3v^3 + 8\epsilon(1 + 2v + v^2)$$

A partir de esta expresion calculamos algunos de los exponentes criticos de VdW

1) El coeficiente δ asociado a la isoterma critica viene dado por

$$\frac{P-P_c}{P_c^0} \propto \left| \frac{\rho-\rho_c}{\rho_c} \right|^\delta \text{sign}(\rho - \rho_c) = \mathbb{C} \left| \frac{\rho-\rho_c}{\rho_c} \right|^\delta \text{sign}(\rho - \rho_c)$$

En $T = T_c$ (o sea en $\epsilon = 0$)

$$2p(1 + 7v/2 + 4v^2 + 3v^3/2) = -3v^3 + 8\epsilon(1 + 2v + v^2)$$

A partir de la ecuacion de VdW con $\epsilon = 0$ obtenemos

$$\begin{aligned} p &= -\frac{3}{2}v^3(1 + 7v/2 + 4v^2 + 3v^3/2)^{-1} \\ &= -\frac{3}{2}v^3(1 - 7v/2 + \dots) \end{aligned}$$

$$[v=(v-v_c)/v_c]$$

De donde

$$\delta = 3$$

(se va a 0)

Ademas

$$\frac{P - P_c}{P_c^0} = \frac{P_c}{P_c^0} \frac{P - P_c}{P_c} = \frac{3}{8} \left[-\frac{3}{2}v^3 \right] = \frac{-9}{16}v^3$$

donde se usa que $\frac{P_c V_c}{RT_c} = \frac{3}{8}$, a partir de las expresiones

para VdW en el punto critico.

$$P_c V_c / T_c R = (a / 27b^2)(3b)(27b / 8a) = 3/8$$

Luego

$$\mathbb{C} = \frac{9}{16}$$

2) Estudiamos ahora γ asociado a K_T .

Esto es, el comportamiento de K_T cuando $T \rightarrow T_c^+$ a lo largo de la isocora crítica ($v = 0$)

$$(-VK_T)^{-1} = \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T = \frac{P_c}{V_c} \left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_T$$

ahora usamos que

$$2p(1 + 7v/2 + 4v^2 + 3v^3/2) = -3v^3 + 8\epsilon(1 + 2v + v^2)$$

De donde

$$p = \frac{-3v^3}{2(1 + 7v/2 + 4v^2 + 3v^3/2)} + 4\epsilon \frac{(1 + 2v + v^2)}{(1 + 7v/2 + 4v^2 + 3v^3/2)}$$

Desarrollando en serie

$$p = -\frac{3}{2}v^3(1 - 7v/2\ldots) + 4\epsilon(1 + 2v + v^2)(1 - 7v/2\ldots)$$

Entonces

$$p = -\frac{3}{2}v^3(1 - 7v/2 + \dots) + \frac{8}{2}\epsilon(1 + 2v + v^2)(1 - 7v/2 + \dots)$$

Entonces (términos dominantes con v tendiendo a 0)

$$\frac{\partial p}{\partial v} = \frac{8}{2}\epsilon \left[\frac{\partial}{\partial v} (1 + 2v - \frac{7}{2}v + \dots) \right]_{v=0}$$

$$\frac{\partial p}{\partial v} = \frac{8}{2}\epsilon(2 - 7/2) = -6\epsilon$$

Luego

$$\left(-\frac{1}{VK_T} \right)^{-1} = \frac{P_c}{V_c} \left(\frac{\partial p}{\partial v} \right) = \frac{P_c}{V_c} (-6\epsilon)$$

$$\frac{RT_c}{V_c} = \frac{8}{3} P_c$$

$$\frac{P_c V_c}{T_c R} = (a/27b^2)(3b)(27b/8a) = \frac{3}{8}$$

De donde

$$\frac{K_T}{K_T^0} = \frac{8}{3} \left(\frac{1}{6\epsilon} \right) = \frac{4}{9} \frac{1}{\epsilon}$$

$$\left[1/K_T^0 = P_C^0 = \frac{8}{3} P_C \right]$$

(usando nuevamente la relacion entre P_c etc. para VdW)

Como habiamos propuesto

$$\frac{K_T}{K_T^0} = \mathbb{R} \epsilon^{-\gamma} (1 + \dots) ; T > T_c$$

Entonces

$$\gamma = 1$$

3) Del mismo modo se demuestra que para:

$$\frac{[\rho_l(T) - \rho_g(T)]}{2\rho_c} = \mathbb{Q} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^\beta [1 + \dots]$$

$$\beta = \frac{1}{2} \quad \mathbb{Q} = 2$$

Algunos exponentes criticos

	β	γ	δ
<i>fluidos</i>			
<i>CO₂</i>	0.34	1.35	4.2
<i>Xe</i>	0.35	1.3	4.4
<i>Mag</i>			
<i>Ni</i>	0.42	1.35	4.22
<i>VdW</i>	0.5	1	3

Exponentes críticos según la teoría de Landau

Para un sistema magnético

$$dU = T dS + H dM$$

$$dG = -S dT - M dH$$

$$dA = -S dT + H dM$$

los reemplazos son :

$$V \rightarrow -M$$

$$P \rightarrow H$$

Por ejemplo:
La magnetización

$$dU = T dS + H dM$$

$$dG = -S dT - M dH$$

$$dA = -S dT + H dM$$

$$t = \frac{T - T_c}{T_c}$$

$$H(M, T) = \left(\frac{\partial A}{\partial M} \right)_T = 2 \alpha_2 t m_0 + 4 \alpha_4 m_0^3$$

Con $H = 0$ y m_0 pequeño $\neq 0$

$$m_0 = M = \left[\frac{\alpha_2}{2 \alpha_4} \right]^{1/2} (t)^{1/2}$$

Entonces

$$\beta = 1/2$$

Exponentes de Susceptibilidad

(≡compresibilidades)

$$\chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_T \Rightarrow (\chi_T)^{-1} = \left(\frac{\partial H}{\partial M} \right)_T = \left(\frac{\partial^2 A}{\partial M^2} \right)_T$$

$$\begin{aligned} dU &= T dS + H dM \\ dG &= -S dT - M dH \\ dA &= -S dT + H dM \end{aligned}$$

Entonces

$$(\chi_T^{-1}) = \left(\frac{\partial^2 A}{\partial M^2} \right) = 2\alpha_2 t + 12\alpha_4 m_0^2 = 2\alpha_2 t + 12\alpha_4 M^2$$

Si $T > T_c$ deberá ser $M=0$ si $H=0$,

Por lo tanto :

$$(\chi_T^{-1}) = 2\alpha_2 (T - T_c)$$

Como resultado $\gamma = 1$

Para el caso en que $T < T_c$, la magnetización debe ser > 0

Pero sabemos que

$$m_0 = M = \left[\frac{\alpha_2}{2\alpha_4} \right]^{1/2} (T_c - T)^{1/2}$$

Reemplazamos en la expresión para $(\chi_T)^{-1} = \left(\frac{\partial^2 A}{\partial M^2} \right)_T$

$$(\chi_{T^{-1}}) = 2\alpha_2 t + 12\alpha_4 M^2 = 2\alpha_2 (T - T_c) + 12\alpha_4 \left[\frac{\alpha_2}{2\alpha_4} \right] (T_c - T)$$

$$(\chi_T^{-1}) = 4\alpha_2 (T_c - T)$$

De donde el exponente critico es al igual que antes

$$\gamma' = 1$$

Y por lo tanto $\gamma' = \gamma$

Exponentes críticos según la teoría de Landau

$$\beta = \frac{1}{2}$$

$$\gamma = \gamma' = 1$$

$$\delta = 3$$

$$\alpha = \alpha' = 0$$

Comparar con VdW !!!!!

SCALING

a) Funciones homogeneas

$F(\lambda x)$ es homogenea si para todo $\lambda \Rightarrow$

$$F(\lambda x) = g(\lambda)F(x)$$

[un ejemplo es la parabola,
 $f(x) = Bx^2 \Rightarrow f(\lambda x) = B\lambda^2 x^2 = \lambda^2 f(x) \Rightarrow g(\lambda) = \lambda^2$]

La funcion $g(\lambda)$ sera de la forma λ^p , y p se llama *grado de la homogeneidad*

La forma de $g(\lambda)$ se debe a que:

$$F(\lambda \mu x) = g(\lambda \mu)F(x) = g(\lambda)F(\mu x) = g(\lambda)g(\mu)F(x) \Rightarrow$$

$$g(\lambda\mu) = g(\lambda)g(\mu)$$

Entonces

$$\frac{\partial}{\partial \mu} g(\lambda\mu) = \lambda g'(\lambda\mu) = g(\lambda)g'(\mu)$$

Si $\mu = 1$ y $g'(\mu) = p$

$$\lambda g'(\lambda) = pg(\lambda)$$

si $g(\lambda) = \lambda^p \Rightarrow g'(\lambda) = p\lambda^{(p-1)} = p\lambda^p/\lambda$ etc.

$$g(\lambda) = \lambda^p$$

Entonces

$$F(\lambda x) = \lambda^p F(x)$$

Para dos variables

$$f(\lambda^p x, \lambda^q y) = \lambda f(x, y)$$

si ahora defino $\lambda = y^{\frac{-1}{q}}$

$$y^{\frac{1}{q}} f(y^{\frac{-p}{q}} x, 1) = f(x, y)$$

De donde la funcion homogenea de dos variables depende de (x, y) via $y^{\frac{-p}{q}} x$

Funciones homogeneas y transformadas de Legendre

Sea una funcion homogenea generalizada

$$f(\lambda^p x, \lambda^q y) = \lambda f(x, y)$$

Sea la transformada de Legendre de $f(x,y)$ respecto de x

$$g\{u(x,y),y\} = f(x,y) - xu(x,y)$$

con $u(x,y) = (\partial f / \partial x)_y$, de donde (derivando)

$$u(\lambda^p x, \lambda^q y) = \lambda^{1-p} u(x,y)$$

Podemos escribir entonces

$$\left\{ \begin{array}{l} x \rightarrow \lambda^p x \\ y \rightarrow \lambda^q y \end{array} \right.$$

$$g\{u(\lambda^p x, \lambda^q y), \lambda^q y\} = f(\lambda^p x, \lambda^q y) - \lambda^p x u(\lambda^p x, \lambda^q y)$$

o tambien

$$f(\lambda^p x, \lambda^q y) = g\{u(\lambda^p x, \lambda^q y), \lambda^q y\} + (\lambda^p x) u(\lambda^p x, \lambda^q y)$$

Usando las relaciones previas

$$\begin{aligned}g\{\lambda^{1-p}u(x,y), \lambda^q y\} &= \lambda f(x,y) - (\lambda^p x) \lambda^{1-p} u(x,y) \\&= \lambda(f(x,y) - xu(x,y)) \\&= \lambda g(x,y)\end{aligned}$$


o sea que $g(u,y)$ es una funcion homogenea generalizada con parametros de escala $(1-p)$ y q

$$g[u(\lambda^p x, \lambda^q y), \lambda^q y] = f(\lambda^p x, \lambda^q y) - \lambda^p u(\lambda^p x, \lambda^q y)$$

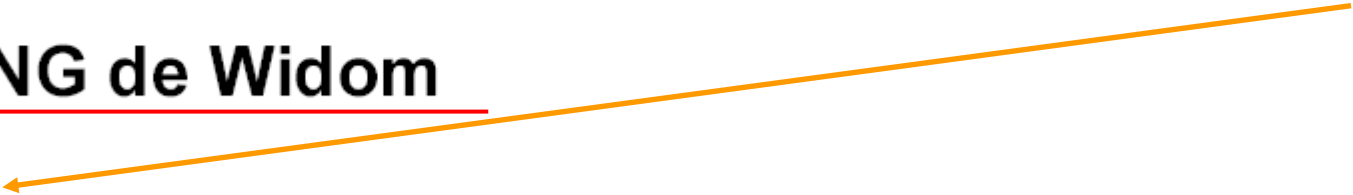
$$u(\lambda^p x, \lambda^q y) = \lambda^{1-p} u(x, y)$$

$$f(\lambda^p x, \lambda^q y) = \lambda f(x, y)$$

$$g[u(\lambda^p x, \lambda^q y), \lambda^q y] = g[\lambda^{1-p} u(x, y), \lambda^q y] = \lambda f(x, y) - \lambda^{p+1-p} x u(x, y)$$

$$g[u(\lambda^p x, \lambda^q y), \lambda^q y] = \lambda [f(x, y) - x u(x, y)] = \lambda g(x, y)$$

SCALING de Widom



La hipótesis de escaleo estatico establece que el potencial de Gibbs es una funcion homogenea generalizada y por lo tanto tambien lo seran los otros potenciales termodinamicos

Hipótesis

$$dU = T dS + H dM$$

$$dG = -S dT - M dH$$

$$dA = -S dT + H dM$$

Sea un sistema magnetico con campo externo presente

1) Sea el campo exterior B

2) Sea la energia libre g

3) Sea $\epsilon = \left(\frac{T-T_c}{T_c} \right)$

4) Sea $g(T, B) = g_r(T, B) + g_s(\epsilon, B)$

Donde $g_s(\epsilon, B)$ es la parte singular, que asumimos es de la forma

$$g_s(\lambda^p \epsilon, \lambda^q B) = \lambda g_s(\epsilon, B)$$

i) La magnetizacion $M(\epsilon, B = 0) \sim (-\epsilon)^\beta$

$$dU = T dS + H dM$$

$$dG = -S dT - M dH$$

$$dA = -S dT + H dM$$

Como suponemos que es homogenea $\Rightarrow$ y la magnetizacion esta asociada a la derivada respecto de B

$$\lambda^q M(\lambda^p \epsilon, \lambda^q B) = \lambda M(\epsilon, B)$$

Sea ahora $\lambda = (-\epsilon)^{-1/p} \Rightarrow$

$$(-\epsilon)^{-q/p} M(-1, (-\epsilon)^{-q/p} B) = (-\epsilon)^{-1/p} M(\epsilon, B)$$

Si ahora $B = 0$

$$(-\epsilon)^{(1-q)/p} M(-1, 0) = M(\epsilon, 0)$$

de donde $\beta = \frac{1-q}{p}$

ii) Del mismo modo para la susceptibilidad magnetica

$$\chi = -\left(\frac{\partial^2}{\partial B^2} g\right)$$

$$dU = T dS + B dM$$

$$dG = -S dT - M dB$$

$$dA = -S dT + B dM$$

Que debe comportarse como $(-\epsilon)^{-\gamma}$

Si diferenciamos $\lambda^q M(\lambda^p \epsilon, \lambda^q B) = \lambda M(\epsilon, B)$ con respecto de B

$$\lambda^{2q} \chi(\lambda^p \epsilon, \lambda^q B) = \lambda \chi(\epsilon, B)$$

Sea entonces $B = 0$ y se escribe $\lambda = (\epsilon)^{-1/p} \Rightarrow$

$$(\epsilon)^{(1-2q)/p} \chi(1, 0) = \chi(\epsilon, 0)$$

$$\gamma = (1 - 2q) / p$$

Del mismo modo se obtiene $\gamma = \gamma'$

iii) El calor específico

$$C_B = -T \left(\frac{\partial^2 g}{\partial T^2} \right)_B \sim (\epsilon)^{-\alpha}$$
$$g_s(\lambda^p \epsilon, \lambda^q B) = \lambda g_s(\epsilon, B)$$

$$\text{con } \epsilon = \left(\frac{T - T_c}{T_c} \right)$$

$$\lambda^{2p} C_B(\lambda^p \epsilon, \lambda^q B) = \lambda C_B(\epsilon, B)$$

$$\text{con } B = 0 \text{ y } \lambda = \epsilon^{-1/p}$$

$$(\epsilon^{-1/p})^{2p} C_B(1, 0) = \epsilon^{-1/p} C_B(\epsilon, 0)$$

$$(\epsilon^{(1-2p)/p})C_B(1,0) = C_B(\epsilon,0)$$

de donde $\alpha = 2 \cdot \left[1 / p \right]$

y así siguiendo, luego **todos los exponentes críticos están dados conociendo p y q .**

De este modo la hipótesis de escala no determina los valores de los exponentes críticos sino que todos se expresan en términos de p y q . Pero conocidos dos exponentes críticos quedan determinados y por lo tanto ...

Funciones de Correlacion

Funcion de correlacion de 2 puntos

$$g^{(2)}(\mathbf{i}, \mathbf{j}) = \langle \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j \rangle$$

donde $\mathbf{i}, \mathbf{j}$ son las posiciones de los spines i, j

Si el sistema es isotropico $g^{(2)}(\mathbf{i}, \mathbf{j}) = g^{(2)}(|\mathbf{i} - \mathbf{j}|)$

En general se puede definir para sistemas isotropicos

$$g^{(2)}(\mathbf{r}) = \langle \Phi_i \cdot \Phi_j \rangle$$

Donde para el caso de Ising $\Phi_i = s_i$ y para un fluido seria la densidad, etc.

Se define tambien

$$g_c^{(2)}(\mathbf{r}) = \langle \Phi(0) \cdot \Phi(r) \rangle - |\langle \Phi \rangle|^2$$

Para $T > T_c$, vale $|\langle \Phi \rangle| = 0 \Rightarrow g_c^{(2)}(\mathbf{r}) \equiv g^{(2)}(\mathbf{r})$

Para $T < T_c$, será $|\langle \Phi \rangle| \neq 0 \Rightarrow g_c^{(2)}(\mathbf{r}) \neq g^{(2)}(\mathbf{r})$ como se remueve el "ordenamiento" se "rescatan" las fluctuaciones.

A partir de experimentos de scattering se obtiene que para r grande comparado con la "distancia intermolecular y

$$T = T_c$$

$$g_c^{(2)}(\mathbf{r}) \sim \frac{1}{r^{(d-2+\eta)}}$$

con $0 \leq \eta \leq 0.1$

Lejos de T_c es una funcion complicada

Para $\epsilon = |T - T_c|/T_c \ll 1$ y r grande

$$g_c^{(2)}(\mathbf{r}) \sim \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right)$$

Donde ξ es la **distancia de correlacion**

Esto significa que la magnitud relevante fluctua en bloques de todos los tamaños hasta ξ y fluctuaciones mas grandes son muy raras

Experimentalmente se verifica que

$$\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}$$

con $(|T - T_c|/T_c \ll 1)$

En suma:

Por encima o debajo de T_c correlaciones de largo rango son exponencialmente improbables

En T_c , son potenciales.

Construcción de Kadanoff

Sea un sistema de Ising con un Hamiltoniano
(en unidades de kT)

$$\beta \mathbf{H} = -J \sum_{\{ij\}} s_i s_j - h \sum_{i=1} s_i$$

Kadanoff considera la siguiente situación:

1) Sea a la "distancia" entre dos spines vecinos (constante de la red).

Definimos celdas de tamaño La con $L \gg 1$.

2) El número de celdas es $n = \frac{N}{L^d}$

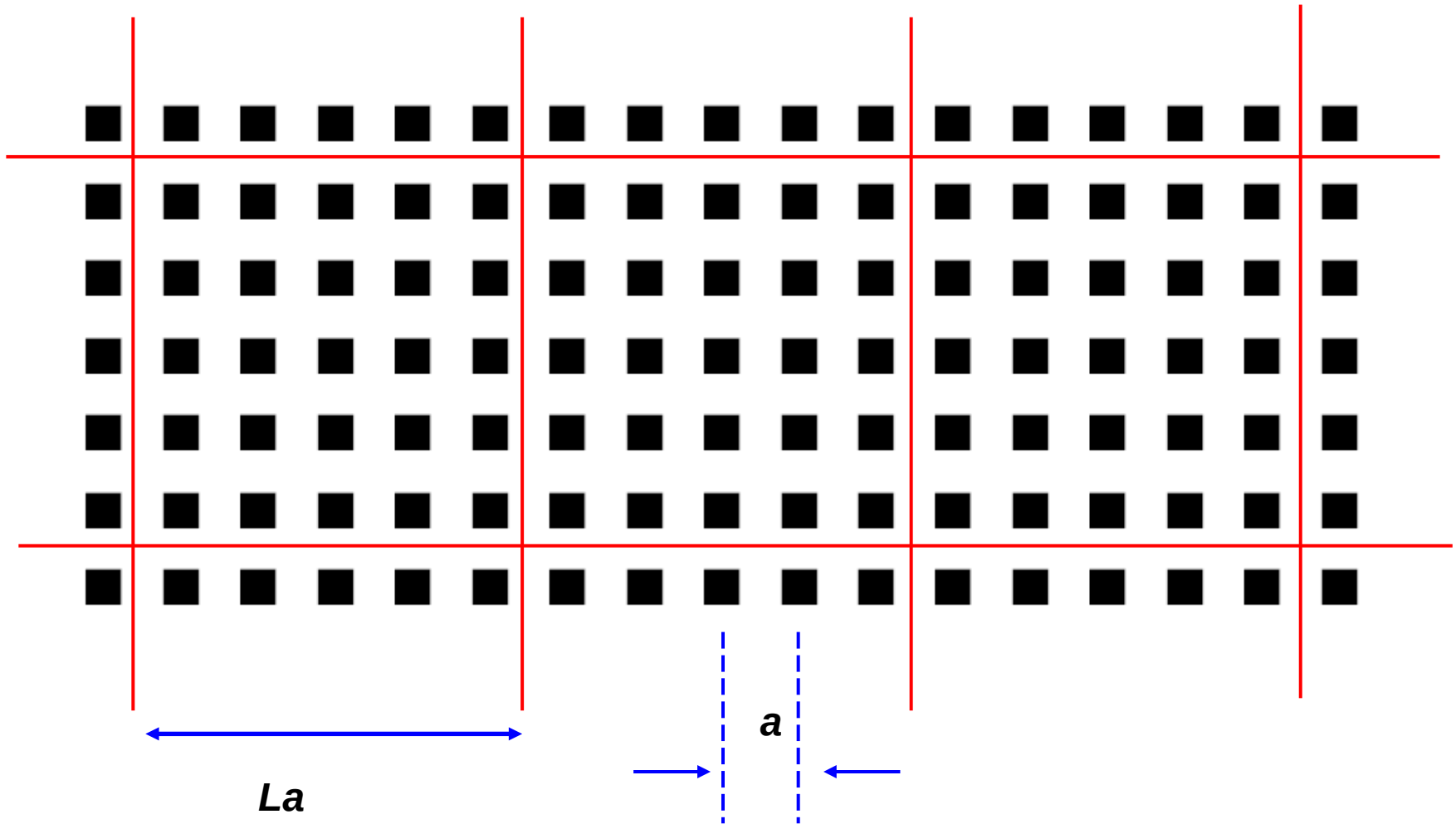
3) Sea $|T - T_c|/T_c \ll 1$ y por lo tanto $\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}$ como $\nu \sim \frac{2}{3} \Rightarrow \xi$ es muy grande $\gg La$

Cada celda contiene L^d spines (d es la dimension)

Como $1 \ll L \ll \xi/a$ en un cluster de spines correlacionadas habrá muchas celdas.

ESTRUCTURA DE CELDAS

Con $L=5$



- Rotulamos las celdas con $\alpha = 1, 2, 3, \dots$
- A cada celda α le asociamos un momento magnetico $\tilde{S}_\alpha$
- Suponemos ahora que $\tilde{S}_\alpha$ se comporta como un spin s_i i.e. estara $\uparrow$ o $\downarrow$. Como las celdas estarán muy correlacionadas los spines individuales estaran "apuntando basicamente en la misma dirección"

De esta forma podemos pensar en reformular nuestro problema en termino de las celdas (y sus spines efectivos).

Al ser "equivalentes" es de esperar que el hamiltoniano del sistema resultante sea de la misma forma (pero con coeficientes diferentes)

Entonces, si tenemos dos sistemas con hamiltonianos de la misma forma, esperamos que las funciones termodinamicas de ambos sistemas sean similares (a menos de diferencias en parametros).

Esperamos que los dos Hamiltonianos (nodos y celdas) sean de igual “forma”

Debemos entonces ver cuales son los valores apropiados de ε y J para cada caso.

En vez de tratar con J , trabajamos con ε (ya que T_c depende de J)

Proponemos entonces para la energia libre de Gibbs

$$\overline{G}(\tilde{\epsilon}, \tilde{h}) = L^d \overline{G}(\epsilon, h)$$

donde $\overline{G}(\tilde{\epsilon}, \tilde{h}) \rightarrow$ es el Gibbs **por celda**

donde $\overline{G}(\epsilon, h) \rightarrow$ es el Gibbs **por spin**

Relacionamos ahora $(\tilde{\epsilon}, \tilde{h})$ con (ϵ, h)

Es de esperar que

$$\tilde{h} = H(L)h$$

donde $H(L)$ es una constante de proporcionalidad dependiente de L

Del mismo modo

$$\tilde{\epsilon} = T(L)\epsilon$$

Kadanoff propone

$$H(L) = L^x \quad T(L) = L^y$$

con x, y números arbitrarios.

(con esto tomamos en cuenta que no todos esten alineados, etc.)

De esta forma

$$\overline{G}(L^y \epsilon, L^x h) = L^d \overline{G}(\epsilon, h)$$

y esto es una función homogenea generalizada!!!!!!

De donde

$$\overline{G}(L^{y/d} \epsilon, L^{x/d} h) = L \overline{G}(\epsilon, h)$$

Pero esta es la hipotesis de escaleo estatica con

$$p = \frac{y}{d} \quad q = \frac{x}{d}$$

Kadanoff y la función de correlación

Sea Modelo de nodos

$$g^{(2)}(r, \epsilon) \equiv \langle (s_i - \langle s \rangle)(s_j - \langle s \rangle) \rangle = \langle s_i s_j - s_i \langle s \rangle - s_j \langle s \rangle + \langle s \rangle^2 \rangle \\ = \langle s_i s_j - \langle s \rangle^2 \rangle$$

Modelo de celdas

Sea $g^{(2)}(\tilde{r}, \tilde{\epsilon}) \equiv \langle (\tilde{s}_\alpha - \langle \tilde{s} \rangle)(\tilde{s}_\beta - \langle \tilde{s} \rangle) \rangle$
con $\tilde{r} = r/L$

Sea

$$L^{-d} \sum_{i \in \alpha} s_i = \mathcal{L} \tilde{s}_\alpha$$

Que define al parametro como no todos los spines estan perfectamente alineados

Con $\tilde{s}_\alpha = \pm 1$

$$\begin{aligned} g^{(2)}(\tilde{r}, \tilde{\epsilon}) &= \frac{1}{L^{2d} \mathcal{L}^2} \sum_{i \in \alpha} \sum_{j \in \beta} [\langle s_i s_j \rangle - \langle s \rangle^2] \\ &= \frac{1}{L^{2d} \mathcal{L}^2} L^{2d} [\langle s_i s_j \rangle - \langle s \rangle^2] \end{aligned}$$

Luego

$$g^{(2)}(r, \epsilon) = \mathcal{L}^2 g^{(2)}(\tilde{r}, \tilde{\epsilon})$$

Nos fijamos ahora en el acoplamiento

Para las celdas (hamiltoniano según el modelo de celdas)

$$\beta \hat{H}_{cell} = -\tilde{h} \sum_{\alpha=1}^n \tilde{s}_{\alpha}$$

Para los nodos
(hamiltoniano según el modelo de nodos)

$$\beta \hat{H}_{nodo} = -h \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i \in \alpha} s_i$$

Suma sobre celdas

Suma en c/celda

$$= -h \sum_{\alpha=1}^n \tilde{s}_{\alpha} L^d \mathcal{L} \quad (\text{según se vio})$$

Entonces

$$\tilde{h} = L^d \mathcal{L} h$$

Proponemos ahora que $\mathcal{L}$ solo depende de L de la forma L^z como

$$\tilde{h} = H(L)h \quad H(L) = L^x \quad \mathcal{L} = L^z$$

Entonces

$$z = x - d$$

de donde recordando que

$$g^{(2)}(r, \epsilon) = \mathcal{L}^2 g^{(2)}(\tilde{r}, \tilde{\epsilon})$$

y

$$\tilde{\epsilon} = L^y \epsilon \quad \text{y} \quad \tilde{r} = r/L$$

$$g^{(2)}(r, \epsilon) = L^{2(x-d)} g^{(2)}(\tilde{r}, \tilde{\epsilon}) = L^{2(x-d)} g^{(2)}(L^{-1}r, L^y \epsilon)$$

Suponiendo que esto es valido $\forall L$ obtenemos otra función homogenea.

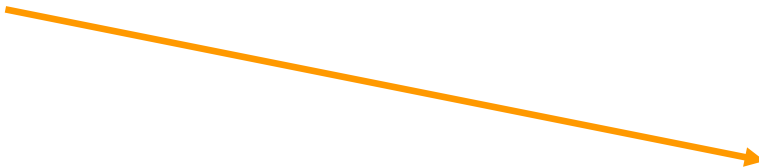
Si tomamos $L = (\frac{1}{\epsilon})^{1/y}$, entonces

$$g^{(2)}(r, \epsilon) = \epsilon^{2(-x+d)/y} g^{(2)}(r\epsilon^{1/y}, 1) = \epsilon^{2(-x+d)/y} f(r\epsilon^{1/y})$$

Si tomamos $L = (\frac{1}{r})$, entonces

$$g^{(2)}(r, \epsilon) = \epsilon^{2(x-d)} f(\epsilon r^y)$$

Pero entonces como $\xi \sim \epsilon^{-\nu}$ y $g^{(2)}(r, \epsilon = 0) \sim r^{-(d-2-\eta)}$ se obtiene



$$-(d - 2 - \eta) = 2(x - d)$$

$$v = 1/y$$

Usando este tipo de argumentos se obtiene

$$dv = 2 - \alpha$$

("desigualdad" de Josephson)

$$d - 2 - \eta = \frac{2\beta}{v}$$

("desigualdad de Fisher")

ademas

$$(2 - \eta)v = \gamma$$

Que son desigualdades transformadas en igualdades!

c) Relacion entre fluctuaciones y susceptibilities

$$\hat{\mathbf{m}}(r) = \mu \sum s_i \delta(q_i - r)$$

La magnetizacion será

$$\hat{M} = \int dr \hat{\mathbf{m}}(r)$$

En presencia de un campo exterior que llamamos $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ (por H)

$$H = H_0 - \int dr \hat{\mathbf{m}}(r) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r})$$

La magnetizacion media es

$$\langle M \rangle = \frac{\text{Tr}[\exp(-\beta H) \hat{M}]}{\text{Tr}[\exp(-\beta H)]}$$

Entonces la susceptibilidad sera

$$\begin{aligned} \chi_{\alpha\alpha'} &= \left(\frac{\partial \langle M_\alpha \rangle}{\partial B_{\alpha'}} \right) = \beta \left(\langle \hat{M}_\alpha \hat{M}_{\alpha'} \rangle - \langle M_\alpha \rangle \langle M_{\alpha'} \rangle \right) = \\ &= \beta \left\langle \left(\hat{M}_\alpha - \langle M_\alpha \rangle \right) \left(\hat{M}_{\alpha'} - \langle M_{\alpha'} \rangle \right) \right\rangle \end{aligned}$$

Sea $\delta \mathbf{m}_\alpha(\mathbf{r})$ la fluctuacion de densidad de magnetizacion

$$\chi_{\alpha\alpha'} = \beta \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \langle \delta \mathbf{m}_\alpha(\mathbf{r}_1) \delta \mathbf{m}_{\alpha'}(\mathbf{r}_2) \rangle$$

$$C_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \delta \mathbf{m}_\alpha(\mathbf{r}_1) \delta \mathbf{m}_{\alpha'}(\mathbf{r}_2) \rangle$$

Introduciendo coordenadas relativas

$$C_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r}) = \langle \delta \mathbf{m}_\alpha(\mathbf{r}) \delta \mathbf{m}_{\alpha'}(\mathbf{0}) \rangle$$

luego

$$\chi_{\alpha\alpha'} = \beta V \int d\mathbf{r} C_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r})$$

Introduciendo la transformada de Fourier (se llama el factor de estructura)

$$\begin{aligned} G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}) &= \int_V d\mathbf{r} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) C_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{V} \int_V d\mathbf{r}_1 \int_V d\mathbf{r}_2 \exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)) \langle \delta \mathbf{m}_\alpha(\mathbf{r}_1) \delta \mathbf{m}_{\alpha'}(\mathbf{r}_2) \rangle \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{V} \langle \delta \mathbf{m}_\alpha(\mathbf{k}) \delta \mathbf{m}_{\alpha'}(-\mathbf{k}) \rangle$$

Comparando $G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k})$ con $\chi_{\alpha\alpha'} \Rightarrow$

$$\chi_{\alpha\alpha'} = \beta V G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k} = \mathbf{0})$$

O sea que la susceptibilidad estatica esta asociada con las fluctuaciones de densidad de longitud de onda muy larga
 Pero en el punto critico la susceptibilidad diverge luego las correlaciones se hacen de rango muuuuuuy largo

Statistical Mechanics of phase transitions
J.M.Yeomans

The Theory of Critical Phenomena
J.J.Binney, N.J. Dowrick, A.J.Fisher, M.E.J.Newman

Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena
H. Eugene Stanley

Critical Phenomena in Natural Sciences
D. Sornette

Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group
N. Goldenfeld

Entonces, si tenemos dos sistemas con hamiltonianos de la misma forma, esperamos que las funciones termodinamicas de ambos sistemas sean similares (a menos de diferencias en parametros).

Proponemos entonces para la energia libre de Gibbs

$$\overline{G}(\tilde{\epsilon}, \tilde{h}) = L^d \overline{G}(\epsilon, h)$$

donde $\overline{G}(\tilde{\epsilon}, \tilde{h}) \rightarrow$ es el Gibbs **por celda**

donde $\overline{G}(\epsilon, h) \rightarrow$ es el Gibbs **por spin**

Relacionamos ahora $(\tilde{\epsilon}, \tilde{h})$ con (ϵ, h)