

Primera clase de la guía 8: Teoría de Landau

1 Teoría de Landau

La teoría de Landau es un método aproximado para describir el comportamiento de cualquier sistema (ya sea una red de espines, un gas, etc) cerca de un punto crítico. Para introducir el método nos restringiremos primero a un sistema de espines, como el del modelo de Ising pero con un hamiltoniano cualquiera, y después discutiremos brevemente cómo se generaliza a otros sistemas.

Consideremos un sistema de N espines con hamiltoniano H a temperatura T . Dado un estado $\sigma_1, \dots, \sigma_N$ del sistema, al promedio

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (1)$$

lo llamaremos la magnetización del estado. Fíjense que m puede tomar $N + 1$ valores distintos, $m \in \{-1, -1 + 2/N, \dots, 1 - 2/N, 1\}$. Definimos la *energía libre de Landau* $f(T, m)$ por la ecuación

$$e^{-\beta N f(T, m)} \equiv \sum_{\sigma_i | m} e^{-\beta H(\sigma_1, \dots, \sigma_N)}, \quad (2)$$

donde la notación $\sigma_i | m$ indica que la suma es sobre todos los estados $\sigma_1, \dots, \sigma_N$ con magnetización m . Podemos escribir la función de partición canónica en términos de la energía libre de Landau,

$$Q(T) = \sum_{\sigma_i} e^{-\beta H(\sigma_1, \dots, \sigma_N)} = \sum_m \sum_{\sigma_i | m} e^{-\beta H(\sigma_1, \dots, \sigma_N)} = \sum_m e^{-\beta N f(T, m)}. \quad (3)$$

Como la última suma tiene $N + 1$ términos, sabemos que podemos aproximarla por su término más grande,

$$Q(T) \simeq e^{-\beta N f(T, \bar{m})} \implies F(T) \simeq N f(T, \bar{m}), \quad (4)$$

donde \bar{m} es el mínimo de f , y F denota la energía libre de Helmholtz. El error que cometemos al hacer esta aproximación es $\delta F = O(\log N)$, y por lo tanto muy pequeño comparado con F . Si repetimos el argumento agregando al hamiltoniano un término de campo magnético y derivamos respecto a este último, nos damos cuenta de que el mínimo \bar{m} es también el valor medio de la magnetización.

Veamos qué podemos decir acerca de f sin conocer el hamiltoniano del sistema. Supongamos que el hamiltoniano es invariante bajo la inversión de todos los espines, $H(-\sigma_1, \dots, -\sigma_N) = H(\sigma_1, \dots, \sigma_N)$, como ocurre en el modelo de Ising cuando no hay campo magnético. En ese caso, a partir de la definición (2) vemos que f tiene que ser una función par de m ,

$$f(T, -m) = f(T, m). \quad (5)$$

Supongamos también que, como ocurre en el modelo de Ising, el sistema experimenta una transición de fase de segundo orden a alguna temperatura crítica T_c , por arriba de la cual la magnetización media \bar{m} se anula y por debajo de la cual toma un valor no nulo. Cerca del punto crítico la magnetización media será pequeña, así que sólo será necesario conocer f para valores pequeños de m . Expandiendo en serie de Taylor hasta cuarto orden y teniendo en cuenta la paridad de f , ecuación (5), obtenemos

$$f(T, m) \simeq f_0(T) + a(T)m^2 + b(T)m^4 \quad (6)$$

donde f_0 , a y b son funciones desconocidas (su forma precisa dependerá del hamiltoniano). La primera de estas funciones se suele ignorar porque es irrelevante para determinar el mínimo \bar{m} , pero acá no lo vamos a hacer. Asumimos que $b > 0$, porque de lo contrario f no tendría un mínimo absoluto a este orden (se haría arbitrariamente negativa para m grande). En ese caso habría que agregar el término de orden siguiente. El mínimo \bar{m} satisface la ecuación

$$0 = \left. \frac{\partial f}{\partial m} \right|_{m=\bar{m}} = 2\bar{m}(a + 2b\bar{m}^2). \quad (7)$$

Una solución de esta ecuación es $\bar{m} = 0$. En el caso $a > 0$, ésta es la única solución y es un mínimo, porque $f \rightarrow +\infty$ cuando $m \rightarrow \pm\infty$, así que

$$\bar{m} = 0 \quad \text{cuando } a > 0. \quad (8)$$

En el caso $a < 0$ la ecuación tiene dos soluciones más, $\bar{m} = \pm\sqrt{-a/2b}$, y éstos son los mínimos porque son los primeros extremos viniendo desde $\pm\infty$, donde f tiende a $+\infty$ (estamos ignorando la posibilidad de que sean puntos de inflexión); en este caso, la solución $\bar{m} = 0$ es un máximo. Así pues, tenemos

$$\bar{m} = \pm\sqrt{\frac{-a}{2b}} \quad \text{cuando } a < 0. \quad (9)$$

Ahora, sabemos que \bar{m} tiene que ser cero para $T > T_c$ y distinto de cero para $T < T_c$. Por lo tanto, de las ecuaciones (8) y (9) vemos que $a(T)$ es positivo para $T > T_c$ y negativo para $T < T_c$. Nótese que esto implica $a(T_c) = 0$ y $a'(T_c) > 0$. En la figura 1 se muestra el gráfico de f en función de m para dos temperaturas, una mayor y otra menor a la crítica.

Para temperaturas muy cercanas a la crítica, podemos escribir \bar{m} en función de T de manera más explícita. En efecto, las propiedades de a y b que acabamos de describir implican que, al orden más bajo alrededor de T_c ,

$$a(T) \simeq a_0(T - T_c) \quad b(T) \simeq b_0, \quad (10)$$

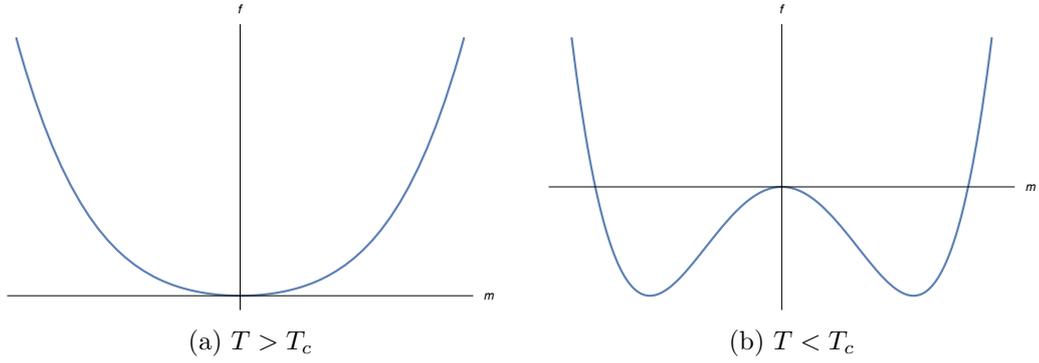


Figura 1: Energía libre de Landau en función de la magnetización.

donde a_0 y b_0 son constantes positivas. Reemplazando en (9) se obtiene

$$\bar{m} = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ \pm \sqrt{\frac{a_0}{2b_0}(T_c - T)} & T < T_c. \end{cases} \quad (11)$$

Nótese que \bar{m} es continua en $T = T_c$ pero su derivada no lo es, lo cual indica que efectivamente hay una transición de fase de segundo orden a esa temperatura. Ahora que ya sabemos el valor medio de la magnetización podemos obtener la energía libre de Helmholtz reemplazando en (4),

$$\frac{F(T)}{N} = \begin{cases} f_0(T) & T > T_c \\ f_0(T) - \frac{a_0^2}{4b_0}(T - T_c)^2 & T < T_c, \end{cases} \quad (12)$$

y a partir de este resultado podemos calcular varias cantidades de interés (y recordemos, ¡sin saber prácticamente nada acerca del hamiltoniano del sistema!).

Los exponentes críticos α , β , γ y δ se definen a partir del comportamiento de la magnetización media, el calor específico y la susceptibilidad magnética cerca del punto crítico por las ecuaciones

$$\begin{aligned} \bar{m} &\sim (T_c - T)^\beta & (h = 0, T < T_c) \\ c_V &\sim |T - T_c|^{-\alpha} & (h = 0) \\ \chi &\sim |T - T_c|^{-\gamma} & (h = 0) \\ \bar{m} &\sim h^{1/\delta} & (T = T_c), \end{aligned} \quad (13)$$

donde h denota el campo magnético. Veamos cuánto valen estos exponentes. Primero, de la ecuación (11) vemos inmediatamente que $\beta = 1/2$. Por otra parte, de (12),

$$c_V = \frac{T}{N} \frac{dS}{dT} = -\frac{T}{N} \frac{d^2F}{dT^2} = \begin{cases} c_{V,0} & T > T_c \\ c_{V,0} + \frac{a_0^2}{2b_0} T & T < T_c, \end{cases} \quad (14)$$

donde $c_{V,0} = -Tf_0''(T)$. Como vemos, el calor específico no diverge ni tiende a cero cuando $T \rightarrow T_c$. El único valor del exponente α compatible con este comportamiento

es $\alpha = 0$. Para determinar los otros dos exponentes críticos tenemos que incluir un campo magnético h , es decir, tenemos que considerar el hamiltoniano

$$\tilde{H}(\sigma_1, \dots, \sigma_N) = H(\sigma_1, \dots, \sigma_N) - h \sum_{i=1}^N \sigma_i. \quad (15)$$

A partir de la definición (2), es inmediato ver que la energía libre de Landau correspondiente a este nuevo hamiltoniano es

$$\tilde{f}(T, h, m) = f(T, m) - hm = f_0(T) + a(T)m^2 + b(T)m^4 - hm. \quad (16)$$

El mínimo \bar{m} de esta nueva energía libre cumple

$$2a\bar{m} + 4b\bar{m}^3 = h. \quad (17)$$

Ésta es una ecuación cúbica difícil de resolver pero, por suerte, no hace falta resolverla para calcular los exponentes críticos que buscamos. En efecto, derivando esta ecuación respecto a h y evaluando en $h = 0$ obtenemos

$$2(a + 6b\bar{m}^2)\chi = 1, \quad (18)$$

donde \bar{m} está evaluado en $h = 0$ (y por lo tanto es la magnetización media en ausencia de campo magnético, que ya calculamos) y $\chi = \partial\bar{m}/\partial h|_{h=0}$ es la susceptibilidad. Usando las ecuaciones (10) y (11) vemos que

$$\chi = \frac{1}{2(a + 6b\bar{m}^2)} = \begin{cases} \frac{1}{2a_0(T-T_c)} & T > T_c \\ \frac{1}{4a_0(T_c-T)} & T < T_c, \end{cases} \quad (19)$$

con lo cual $\gamma = 1$. Finalmente, poniendo $T = T_c$ en la ecuación (17) obtenemos que, a esa temperatura,

$$\bar{m} = \left(\frac{h}{4b_0} \right)^{1/3} \quad (20)$$

y por lo tanto $\delta = 3$. Nótese que hemos podido determinar completamente los exponentes críticos aun sin saber el hamiltoniano del sistema. En otras palabras, ¡todos los sistemas de espines tienen los mismos exponentes críticos!

Bueno, hay que matizar esta última afirmación. Los resultados que hemos obtenido para los exponentes críticos son los mismos que obtuvimos para el modelo de Ising en la aproximación de campo medio (problema 6, guía 7). Pero ya sabemos que campo medio no da los exponentes críticos exactos, así que nuestros resultados no pueden ser más que una aproximación. ¿Dónde fallamos, dónde está exactamente la aproximación? La clave está en la ecuación (19), que muestra que la susceptibilidad diverge en el punto crítico. Tal como hemos definido la susceptibilidad, se trata de una magnitud intensiva y por lo tanto de orden N^0 . Si diverge, claramente no podemos despreciarla frente a magnitudes extensivas, de orden N . Pero eso es más o menos lo que hicimos al deducir la ecuación (4): tiramos términos de orden $\log N$ porque los consideramos despreciables frente a los términos de orden N . Queda claro que no estuvo del todo bien hacer eso. Por otra parte, recuerden que χ es proporcional a la

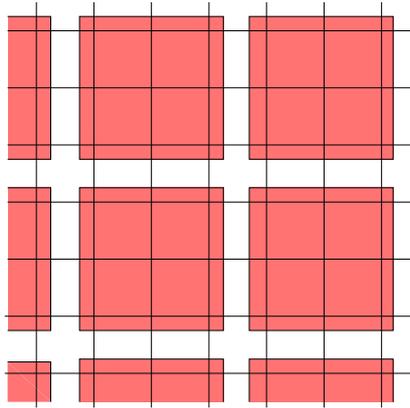


Figura 2: La red de espines dividida en bloques.

varianza de la magnetización. Su divergencia, pues, indica que las fluctuaciones son importantes, a diferencia de lo que suele ocurrir en sistemas termodinámicos.

Para terminar esta sección, veamos cómo la teoría de Landau se generaliza a otros sistemas que no son redes de espines. En general, para un sistema que experimenta una transición de fase de segundo orden, existe alguna magnitud (llamada *parámetro de orden*) que se anula a $T > T_c$ y es distinta de cero a $T < T_c$. En el caso de la red de espines, el parámetro de orden es la magnetización. En general, el parámetro de orden no tiene por qué ser un escalar como en este caso, podría ser por ejemplo un vector. La energía libre de Landau es entonces alguna función del parámetro de orden, cuya forma exacta puede ser muy difícil de calcular pero que se podrá expresar como la suma de los primeros términos de su serie de Taylor cerca del punto crítico. Las simetrías del sistema nos dicen qué términos se anulan en esa serie. Por ejemplo, en el caso de la red de espines, la simetría bajo la inversión de todos los espines implica que la serie de Taylor de f sólo contiene potencias pares. Y una vez tenemos la energía libre de Landau podemos hacer el mismo análisis que hicimos acá y obtener los exponentes críticos del sistema.

2 Teoría de Landau-Ginzburg

Por experiencia sabemos que en una transición de fase suelen aparecer inhomogeneidades. Por ejemplo, cuando un líquido hierve no se convierte en gas todo a la vez de manera homogénea sino que se forman burbujas. Otro ejemplo seguro que lo vieron en la práctica computacional: para redes grandes a temperaturas bajas, el sistema no siempre se estabiliza en una configuración homogénea, sino que a veces se forman dos o más dominios (agrupaciones de espines que apuntan para un mismo lado). La teoría de Landau-Ginzburg es un método para describir estas inhomogeneidades.

Consideremos de nuevo una red de espines, y dividámosla en bloques de volumen v , mucho más pequeño que el volumen total V de la red pero lo bastante grande para que cada bloque tenga muchos espines (ver figura 2). Si \mathbf{r} es el punto central de uno

de los bloques, definimos la magnetización local en \mathbf{r} como

$$m(\mathbf{r}) = \frac{1}{v} \sum_i \sigma_i, \quad (21)$$

donde la suma es sobre todos los espines del bloque centrado en \mathbf{r} . La magnetización local es pues una función definida en puntos discretos y que toma valores discretos. Sin embargo, dado que $v \ll V$ y que hay muchos espines por bloque, podemos pensarla como una función en \mathbb{R}^3 que toma valores reales. Definimos la *energía libre de Landau-Ginzburg* $F(T; m]$ por la ecuación

$$e^{-\beta F(T; m]} = \sum_{\sigma_i | m} e^{-\beta H(\sigma_1, \dots, \sigma_N)}, \quad (22)$$

donde la suma es sobre todos los estados que tienen magnetización local m . La notación $F(T; m]$ indica que F es una función ordinaria de la temperatura y un funcional (función de funciones) de la magnetización local. Claramente, la probabilidad de un valor de la magnetización local es

$$P[m] = \frac{e^{-\beta F(T; m]}}{Q} \quad (23)$$

Por lo tanto, la configuración más probable es el mínimo absoluto de F . Dado que F es un funcional, tiene muchísimos mínimos relativos, y es de esperar que algunos de ellos tengan una probabilidad apreciable aunque no sea la máxima.

¿Qué podemos decir de la energía libre de Landau-Ginzburg sin conocer el hamiltoniano del sistema? Un razonamiento similar al que nos condujo a la ecuación (6) sugiere que, para temperaturas cercanas a la crítica, F debería tener la forma

$$F(T; m] = \int d^3r [a(T)m^2 + b(T)m^4 + c(T)(\nabla m)^2], \quad (24)$$

donde a , b y c no dependen de la posición. En principio también podría haber un término $F_0(T)$ independiente de m , pero no lo incluimos porque es irrelevante para lo que vamos a discutir. Esperamos que la configuración más probable sea homogénea, y por lo tanto asumimos $c > 0$ (de manera que si m varía con la posición la energía libre aumenta). También asumimos $b > 0$ para asegurarnos de que F tiene un mínimo absoluto. En estas condiciones, el mínimo absoluto de F es $m = 0$ para $a > 0$ y $m = \pm \sqrt{-a/2b}$ para $a < 0$, igual que en la sección anterior, y por lo tanto concluimos que $a(T)$ es positivo para $T > T_c$ y negativo para $T < T_c$. Busquemos ahora los extremos locales de F . Tenemos

$$\begin{aligned} 0 = \delta F &= \int d^3r [(2am + 4bm^3)\delta m + 2c\nabla m \cdot \nabla \delta m] \\ &= 2 \int d^3r (am + 2bm^3 - c\nabla^2 m) \delta m. \end{aligned} \quad (25)$$

En la última igualdad hemos usado que $\nabla \delta m \cdot \nabla m = \nabla \cdot (\delta m \nabla m) - \delta m \nabla^2 m$, y hemos asumido que δm se anula en el borde de la región de integración, con lo cual la integral de $\nabla \cdot (\delta m \nabla m)$ es cero (este procedimiento debería sonarles de mecánica

clásica). Como la ecuación de arriba debe cumplirse para cualquier δm , el término entre paréntesis en la segunda línea tiene que anularse, así que obtenemos

$$c\nabla^2 m = am + 2bm^3. \quad (26)$$

Ésta es la ecuación que deben cumplir los extremos locales de F , y tiene algunas soluciones interesantes como veremos a continuación.

Supongamos que la temperatura es inferior a la crítica, $a < 0$. En ese caso, como dijimos, F tiene dos mínimos absolutos, $m = \pm\sqrt{-a/2b}$. Busquemos una solución de (26) que sólo dependa de la coordenada x y que interpole entre estos dos mínimos. Si m sólo depende de x la ecuación (26) se reduce a

$$\frac{d^2 m}{dx^2} = \frac{a}{c}m + \frac{2b}{c}m^3. \quad (27)$$

Ésta es una ecuación no lineal, que en principio parece difícil de resolver. Sin embargo, fijémonos: si interpretamos m como la posición y x como el tiempo, (27) no es más que la ecuación de Newton en una dimensión para una partícula de masa 1 sometida a la fuerza $F(m) = (a/c)m + (2b/c)m^3$. Esta fuerza deriva del potencial

$$U(m) = -\frac{a}{2c}m^2 - \frac{b}{2c}m^4, \quad (28)$$

y por lo tanto la energía mecánica

$$E = \frac{1}{2} \left(\frac{dm}{dx} \right)^2 - \frac{a}{2c}m^2 - \frac{b}{2c}m^4 \quad (29)$$

es una constante. Podemos determinar el valor de E usando las condiciones de contorno. Queremos que m interpole entre los dos mínimos absolutos de la energía libre de Landau-Ginzburg, es decir, nuestras condiciones de contorno son $m(x) \rightarrow \pm\sqrt{-a/2b}$ para $x \rightarrow \pm\infty$. Como m toma un valor constante en estos límites su derivada tiene que anularse, así que

$$E = \frac{a}{2c} \frac{a}{2b} - \frac{b}{2c} \left(\frac{a}{2b} \right)^2 = \frac{a^2}{8bc} \quad (30)$$

Reemplazando este resultado en (29) obtenemos

$$\left(\frac{dm}{dx} \right)^2 = \frac{a^2}{4bc} + \frac{a}{c}m^2 + \frac{b}{c}m^4 = \frac{1}{bc} \left(\frac{a^2}{4} + abm^2 + b^2m^4 \right) = \frac{1}{bc} \left(\frac{a}{2} + bm^2 \right)^2 \quad (31)$$

o, en otras palabras,

$$\frac{dm}{dx} = \pm \frac{1}{\sqrt{bc}} \left(\frac{a}{2} + bm^2 \right). \quad (32)$$

Ésta es una ecuación diferencial de primer orden que sí sabemos resolver. Poniendo lo que tiene m de un lado y lo que tiene x del otro la podemos reescribir como

$$\frac{dm}{\frac{a}{2} + bm^2} = \pm \frac{dx}{\sqrt{bc}}, \quad (33)$$

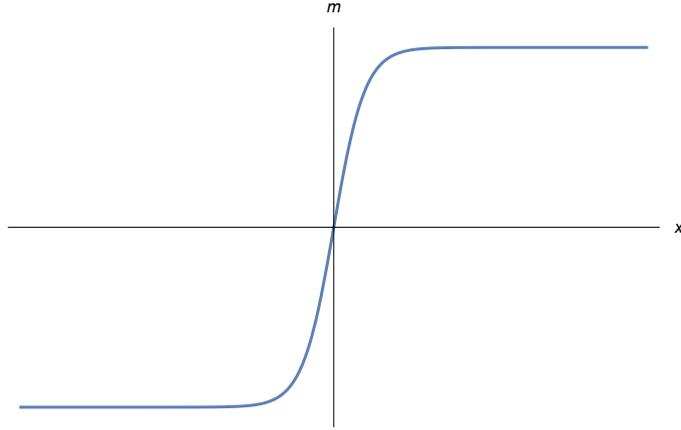


Figura 3: Una configuración de la magnetización local que extremiza la energía libre de Landau-Ginzburg.

e integrando a ambos lados y recordando que $a < 0$ obtenemos

$$-\sqrt{\frac{2}{-ab}} \tanh^{-1} \left(\sqrt{\frac{2b}{-a}} m \right) = \pm \frac{x - x_0}{\sqrt{bc}}, \quad (34)$$

donde x_0 es una constante de integración. De esta ecuación despejamos m fácilmente,

$$m(x) = \mp \sqrt{\frac{-a}{2b}} \tanh \left[\sqrt{\frac{-a}{2c}} (x - x_0) \right], \quad (35)$$

donde hemos usado que la tangente hiperbólica es una función impar. Imponiendo de nuevo las condiciones de contorno vemos que, de los dos signos posibles, tenemos que quedarnos con el signo +, así que

$$m(x) = \sqrt{\frac{-a}{2b}} \tanh \left[\sqrt{\frac{-a}{2c}} (x - x_0) \right]. \quad (36)$$

Ésta es la solución que buscábamos, y está representada en la figura 3 para $x_0 = 0$. La solución describe una configuración que presenta dos dominios: a la izquierda de x_0 , la mayoría de los espines se orientan hacia abajo, y a la derecha de x_0 se orientan hacia arriba. La región entre los dos dominios se llama *pared de dominio*. Obviamente, la energía libre de Landau-Ginzburg de esta configuración es mayor que la de la solución homogénea $m = \pm \sqrt{-a/2b}$ (que es el mínimo absoluto de F), pero la diferencia de energías libres ΔF es proporcional al área A de la pared. Por otra parte, la energía libre F_{\min} de la configuración homogénea es claramente proporcional al volumen V del sistema, y por lo tanto

$$\frac{\Delta F}{F_{\min}} \propto \frac{A}{V}, \quad (37)$$

que tiende a cero en el límite termodinámico. Así pues, si bien esta configuración tiene más energía libre que la homogénea, la diferencia de energías libre se hace despreciable en el límite termodinámico, y por lo tanto ambas configuraciones son prácticamente

igual de probables. Eso explica por qué, cuando hicieron la práctica computacional, encontraron configuraciones de este tipo a temperaturas bajas y para redes grandes.

Un último comentario: la teoría de Landau-Ginzburg puede usarse para calcular la función de correlación, aunque las técnicas que hacen falta para eso quedan algo más allá del alcance de esta materia. Cuando uno calcula la función de correlación por medio de la teoría de Landau-Ginzburg se da cuenta de que la longitud de correlación diverge en el punto crítico, lo cual es el punto de partida del análisis basado en el grupo de renormalización.