

M722

CA

UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS

OPTIMIZACION PARAMETRICA EN RENORMALIZACION
PERTURBATIVA DE SISTEMAS CLASICOS DE SPIN
TIPO ISING

MARIO MOLINA GALVEZ

Agosto 1986



OPTIMIZACION PARAMETRICA EN RENORMALIZACION
PERTURBATIVA DE SISTEMA CLASICOS DE SPIN
TIPO ISING

Tesis

entregada a la

Facultad de ciencias,

Universidad de Chile

en cumplimiento parcial de los requisitos

para optar al grado de

Magister en Ciencias Físicas

por

MARIO MOLINA GALVEZ



Profesor Patrocinante : Dr. Patricio Cordero S.

FACULTAD DE CIENCIAS
UNIVERSIDAD DE CHILE

INFORME DE APROBACION
TESIS DE MAGISTER

Se informa a la Escuela de Postgrado de la Facultad de Ciencias que la Tesis de Magister presentada por el candidato

MARIO MOLINA GALVEZ

Ha sido aprobada por la comisión informante de Tesis como requisito de tesis para el grado de Magister en Ciencias Físicas.

Patrocinante Tesis:

Dr. Patricio Cordero S.

P. Cordero

Comisión Informante de Tesis:

Dr. Rafael Benguria D.

R. Benguria

Dr. David Gottlieb B.

David Gottlieb

Dn. Jaime Rössler B.

M. Rössler



INDICE

	Fág.
INTRODUCCION	1
FENOMENOS CRITICOS EN FERROMAGNETISMO.....	8
TEORIA GENERAL DE RENORMALIZACION PARA SISTEMAS TIPO ISING.....	16
RENORMALIZACION EXACTA DE LA CADENA ISING UNIDIMENSIONAL.....	41
RENORMALIZACION ACUMULANTE PARA LA RED ISING TRIANGULAR.....	54
CONCLUSIONES	78
REFERENCIAS	81



" There is no a renormalization cookbook ".

(K. Wilson)



I. INTRODUCCION

El Grupo de Renormalización (G.R.) es un método para tratar con algunos de los problemas más difíciles de la Física. Entre estos problemas están la Teoría Cuántica Relativista, Fenómenos Críticos, el efecto Kondo y otros . Estos problemas están todos caracterizados por involucrar un gran número de grados de libertad de manera esencial. Ciertamente es que la gran mayoría de los sistemas físicos de interés involucran un gran número de grados de libertad . Así, en una muestra macroscópica de un gas, líquido ó cristal, están presentes más de 10^{23} átomos y cada coordenada de cada átomo es un grado de libertad. Sin embargo, bajo circunstancias normales no necesitamos trabajar con tantos grados de libertad. El carácter intensivo o extensivo de los observables permite reconstruir las propiedades de un sistema macroscópico dando solo una muestra microscópica. Así, un líquido de sólo 1000 átomos tiene probablemente, la misma energía por unidad de volumen y densidad que el mismo líquido (a la misma presión y

temperatura), con 10^{23} átomos.

Hasta dónde podemos reducir el tamaño de un sistema físico sin alterar cualitativamente sus propiedades? El tamaño mínimo que podemos alcanzar sin efectuar cambios significativos es la llamada "longitud de correlación". La longitud de correlación ξ depende del estado del sistema. Para un gas, ξ depende de la presión y temperatura. En condiciones normales ξ es de uno o dos espaciamentos atómicos. Cuando ξ es tan pequeño tenemos una variedad de métodos a nuestra disposición para calcular las propiedades del sistema : expansión virial, expansiones perturbativas, métodos Hartree-Fock, etc. Todos tienen en común el que las propiedades de todo el sistema pueden relacionarse con las propiedades de un pequeño grupo de átomos. Por supuesto, involucran también mayores simplificaciones, pues aún un cúmulo de sólo tres átomos tiene demasiados grados de libertad para ser soluble sin simplificaciones adicionales.

En circunstancias especiales, la longitud de correlación se hace mucho mayor que el espaciamento atómico. Ello ocurre por ejemplo, en los fenómenos críticos. Cerca del punto crítico que marca la aparición de una transición de fase, ξ es grande. En el punto crítico ξ es infinito. Ejemplo de lo anterior son las transiciones gas-líquido, transiciones ferromagnéticas, transiciones orden-desorden

en aleaciones, etc. Los métodos estándar útiles para describir comportamiento no crítico pierden validez en las cercanías del punto crítico. Nos enfrentamos al problema de tener que tratar con muchos grados de libertad dentro de la longitud de correlación.

Estudios de renormalización en Teoría

Cuántica de Campos y en Fenómenos Críticos, sugieren que el comportamiento de los sistemas con muchos grados de libertad dentro de una longitud de correlación es cualitativamente diferente de aquellos con sólo unos pocos grados de libertad dentro de la longitud de correlación. Corrientemente los sistemas de interés están definidos por medio de un hamiltoniano y normalmente esperaríamos que el comportamiento del sistema dependa principalmente del tipo de interacciones presentes y de la magnitud de las respectivas constantes de acoplamiento. Este es ciertamente el caso cuando ξ es pequeño. Sin embargo, en fenómenos críticos, donde muchos grados de libertad se están comportando cooperativamente, parece que el comportamiento del sistema viene determinado principalmente por el hecho de que existe comportamiento cooperativo y por la naturaleza de los grados de libertad en sí mismos. El hamiltoniano de interacción juega entonces un papel secundario. Así, en fenómenos críticos, se ha desarrollado la noción de "universalidad", es decir, que hay clases de hamiltonianos que muestran el mismo comportamiento crítico.

El Grupo de Renormalización en su moderna versión se inició en los 60's con un extraordinario artículo de Kadanoff^{'1'}. En él, Kadanoff hizo una discusión intuitiva acerca de cómo reducir los grados de libertad de un sistema próximo a su transición de fase. Su idea, para el caso de un ferromagneto, era que la gran longitud de correlación existente a esa temperatura hacía que si un spin cualquiera estaba en un cierto estado, entonces con gran probabilidad sus vecinos también estarían en el mismo estado. Esto hacía que tuviera sentido subdividir la red en bloques, reducir todos los grados de libertad dentro de cada bloque a un solo "spin de bloque" y obtener un nuevo hamiltoniano en que estos spines están interactuando entre sí. Kadanoff mostró que esta suposición implicaba un conjunto de "leyes de escalamiento" para los exponentes críticos, las cuales habían sido postulados antes por Widom y otros^{'2'} y que eran satisfechas en alto grado por los experimentos.

Las constantes de acoplamiento para la red de "bloques" resultan conectadas a las constantes de acoplamiento para la red de spines a través de ciertas ecuaciones, hoy llamadas "ecuaciones de renormalización". De su estudio detallado es posible, en principio, extraer los exponentes críticos del sistema.

En la práctica, sin embargo, este programa no

puede ser llevado a cabo de manera exacta ya que involucra un grado de dificultad comparable al de calcular la función partición. Por lo tanto son requeridos criterios de aproximación en los cuales uno trata de apegarse lo más posible a la imagen intuitiva de Kadanoff. Uno de estos enfoques más conocidos es una renormalización perturbativa. Allí, un papel importante lo juega cierta función denominada "función de peso" y que básicamente es la que proyecta configuraciones de spines dentro de un "bloque" a configuraciones de "sitio" en la red reescalada. Como veremos, esta función, salvo unas pocas restricciones de carácter general, es bastante libre. Dado que su elección afecta a las ecuaciones G.R. (dentro de la aproximación perturbativa), y de allí, a los exponentes críticos que se derivan de ellas, resulta importante disponer de criterios que permitan escoger esta función de peso de manera óptima orden a orden. Esto es lo que se discute en el presente trabajo, usando como modelo la red Ising triangular, la cual ha sido resuelta exactamente por Wannier, Houtappel y otros⁽²⁾, y por tanto resulta adecuada para comparar los resultados asociados a distintos criterios.

En el capítulo II se dá una breve descripción de fenómenos críticos en ferromagnetismo, se definen los exponentes críticos y se plantea el conjunto de

desigualdades rigurosas que éstos obedecen. Se discute a continuación la idea intuitiva de Kadanoff y cómo ésta conduce a las famosas "leyes de escalamiento" para los exponentes críticos.

El capítulo III contiene la teoría formal básica del grupo de renormalización para sistemas de spin tipo Ising, basada especialmente en los trabajos de Neimeijer y Van Leeuwen⁽⁴⁾. El capítulo termina con el desarrollo de la aproximación acumulante, que será el enfoque perturbativo a usar en los capítulos posteriores.

En el capítulo IV se describe la renormalización exacta de la cadena Ising unidimensional como ilustración de la teoría general. Como subproducto se calcula la termodinámica de la red, apelando a una expansión formal para la energía libre en términos de las ecuaciones G.R.

En el capítulo V se renormaliza la red Ising triangular usando la aproximación acumulante a primero y segundo orden. Se discuten criterios para la elección de algunos parámetros libres en la función de peso y los resultados a que ellos conducen para los exponentes críticos.

Por último, en el capítulo VI se resumen y discuten los resultados para la red triangular y se delinean futuros desarrollos a explorar.

II. FENOMENOS CRITICOS EN FERROMAGNETISMO

Exponentes Críticos

Un sistema ferromagnético posee la notable propiedad de exhibir magnetización espontánea bajo una cierta temperatura, llamada temperatura crítica. La fig.2.1 ilustra esquemáticamente la ecuación de estado $H=H(M)$, donde H es el campo magnético y M , la magnetización.

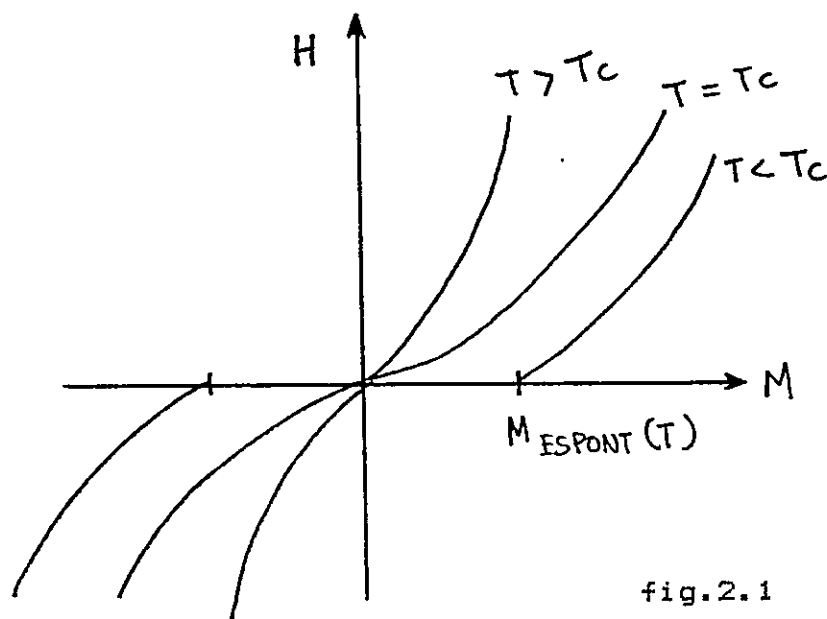


fig.2.1

Es natural preguntarse acerca del comportamiento de

ciertas cantidades termodinámicas, cerca del punto crítico. Cantidades tales como calor específico, susceptibilidad, magnetización y otras muestran experimentalmente un comportamiento tipo potencia con la temperatura, yendo ya sea a cero ó a infinito a medida que nos acercamos al punto crítico. En términos de la "temperatura reducida" τ , definida como:

$$\tau = (T - T_c) / T_c$$

1) Calor específico:

$$C_H \sim \tau^{-\alpha}, \quad T > T_c \quad (2.1)$$

$$C_H \sim (-\tau)^{-\alpha'}, \quad T < T_c$$

2) Magnetización:

$$M \sim (-\tau)^\beta, \quad H = 0 \quad (2.2)$$

3) Susceptibilidad:

$$\chi_T \sim \tau^{-\gamma}, \quad T > T_c \quad (2.3)$$

$$\chi_T \sim (-\tau)^{-\gamma'}, \quad T < T_c$$

4) Isoterma crítica:

$$H \sim M^\delta, \quad T = T_c \quad (2.4)$$

5) Longitud de correlación:

$$\xi \sim \tau^{-\nu}, \quad T > T_c$$

$$\xi \sim (-\tau)^{-\nu}, \quad T < T_c \quad (2.5)$$

6) Función de correlación par:

$$\Gamma(n) = |n|^{-(d+2+\eta)} \quad (2.6)$$

$$T = T_c, \quad H = 0, \quad M = 0$$

siendo d la dimensión del sistema. En este caso se supone

que la función de correlación de dos spines se comporta como \sim (potencia inversa de $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$) $\times \exp\{-|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/\xi\}$

y que define la longitud de correlación ξ .

Lejos de T_c , la función de correlación cae

exponencialmente con la distancia, pero a medida que nos

aproximamos a T_c , $\xi \rightarrow \infty$ y el decrecimiento es dominado

por la potencia inversa. Es esta potencia inversa la que

está conectada con el exponente crítico η .

Desigualdades rigurosas

Mediante argumentos termodinámicos Rushbrooke, Griffiths y otros⁽⁵⁾ establecieron un conjunto de desigualdades que debían ser satisfechas por los exponentes críticos:

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' \gg 2 \quad (2.7)$$

$$\alpha' + \beta(1+\delta) \gg 2 \quad (2.8)$$

$$\gamma' \gg \beta(\delta-1) \quad (2.9)$$

$$\gamma(\delta+1) \gg (2-\alpha)(\delta-1) \quad (2.10)$$

$$d \frac{(\delta-1)}{(\delta+1)} \gg 2-\eta \quad (2.11)$$

Experimentalmente, se descubrió que las desigualdades anteriores eran satisfechas como igualdades en la naturaleza. En 1965, Widom⁽²⁾ afirmó que este comportamiento podía ser explicado si se suponía que la energía libre obedecía determinada ecuación de escalamiento. Esta suposición era puramente matemática y no fue sino hasta la aparición del artículo de Kadanoff⁽¹⁾, que se apreció el mecanismo físico que había detrás.

Idea intuitiva de Kadanoff

Consideremos un sistema de spines Ising definidos sobre una red cuadrada, con espaciado elemental a . Cerca del punto crítico, la longitud de correlación es grande y por tanto, si un spin cualquiera se encuentra en cierto estado, sus vecinos próximos se hallarán en el mismo estado con bastante probabilidad. Si ahora formamos "bloques" en la red de tamaño $L a$ (ver fig.2.2), tiene sentido esperar que tales bloques se comporten como spines y por tanto, el proceso de subdivisión en bloques puede mirarse simplemente como un reescalamiento de la distancia de red.

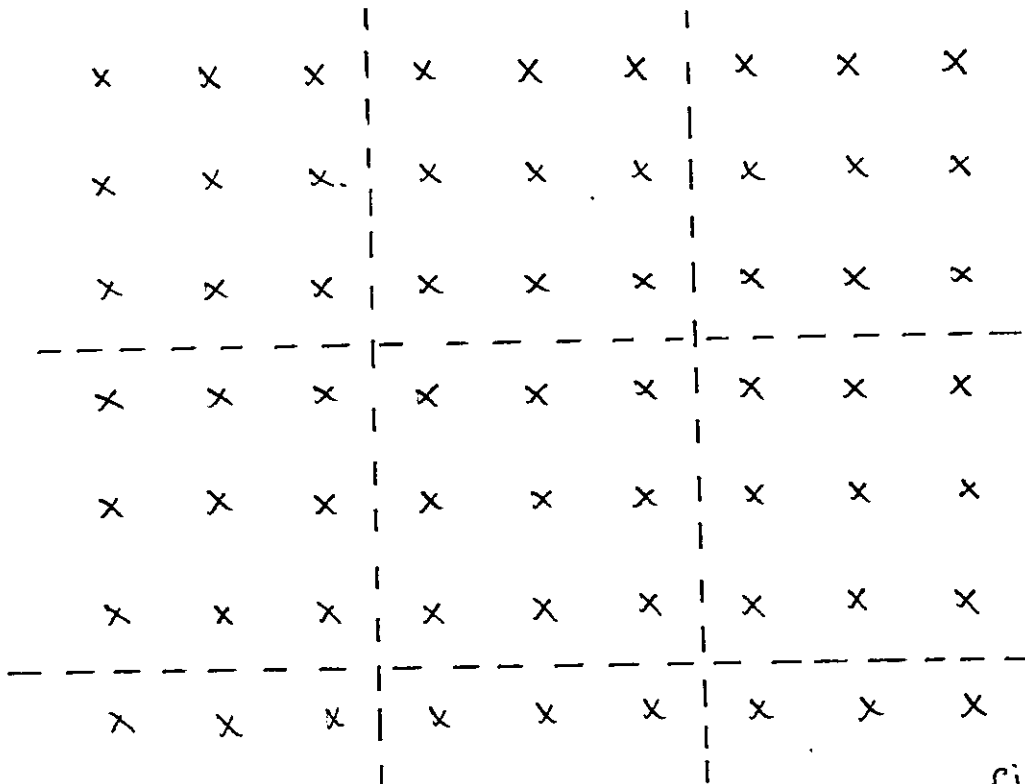


fig.2.2

Asociamos a cada bloque un "spin de bloque" del tipo

$$S_{\text{bloque}} = c S', \text{ con } S' = \pm 1 \quad (2.12)$$

Suponemos entonces que el hamiltoniano para la "red de bloques" es idéntico en forma al hamiltoniano original. Esto significa

$$Z(K, H) = Z(K', H') \quad (2.13)$$

$$\text{donde } K' = K'(K, H) \text{ y } H' = H'(K, H) \quad (2.14)$$

Si definimos la densidad de energía libre como:

$$f(K) = \lim_{N \rightarrow \infty} \ln(Z(K)) / N \quad (2.15)$$

entonces, de (2.13) se tiene

$$L^d f(K, H) = f(K', H') \quad (2.16)$$

Como estamos en las vecindades del punto crítico, expresamos (2.16) en términos de \mathcal{Z} . Así, (2.16) queda:

$$L^d f(\mathcal{Z}, H) = f(\mathcal{Z}', H') \quad (2.17)$$

Veamos ahora la forma cualitativa de K' y H' .

Forma de H' :

$$H \sum_i S_i = H \sum_{\text{bloque}} S_{\text{bloque}} \rightarrow H \sum c S' \equiv H' \sum S'$$

$$\therefore H' = cH \equiv L^x H \quad (2.18)$$

Forma de z' :

$$z' \text{ debe ser de la forma } z' = L^y z \quad (2.19)$$

con $y > 0$

pues al reescalar ξ decrece en factor $1/L$ lo cual implica que nos alejamos de la criticalidad, es decir, z' debe ser mayor que z .

Luego, reemplazando (2.18) y (2.19) en (2.17) queda:

$$L^d f(z, H) = f(L^y z, L^x H) \quad (2.20)$$

Que no es más que la relación de escalamiento propuesta por Widom. A partir de esta expresión y usando las definiciones para los exponentes críticos, es posible expresar estos en términos de x e y (El cálculo explícito se muestra en el capítulo III). De allí es directo ver que las desigualdades se satisfacen como igualdades.

III. TEORIA GENERAL DE RENORMALIZACION PARA SISTEMAS TIPO ISING

DEFINICIONES PREVIAS

Se considera una red con un spin $S_i = \pm 1$ en cada sitio. El índice i etiqueta los sitios de la red. En general, para una red d -dimensional, $i = (i_1, i_2, \dots, i_d)$. Sea a un subconjunto de sitios. Definimos S_a como :

$$S_a = \prod_{i \in a} S_i \quad (3.1)$$

El hamiltoniano más general que describe un sistema tipo Ising puede ser escrito como:

$$\mathcal{H} = \sum_a K_a S_a \quad (3.2)$$

donde el factor de Boltzmann $\beta = 1/k_B T$ ha sido absorbido en el hamiltoniano.

Se elige el cero de energía como:

$$\sum_{\{s\}} \mathcal{H}(s) = 0 \quad (3.3)$$

donde $\sum_{\{S\}}$ siempre significará una suma sobre todas las configuraciones de los spines.

Se trabajará en la práctica con los llamados "hamiltonianos homogéneos", que tienen la siguiente propiedad: sea α la clase de todos los subconjuntos a de sitios que pueden ser identificados mediante una operación de simetría de la red; por ejemplo, α puede ser la clase "1 sitio" (en cuyo caso K será el campo magnético), " 2 sitios primeros vecinos ", etc. Supondremos por simplicidad que todos los K_a con $a \in \alpha$ tienen el mismo valor K_α :

$$\mathcal{H}(S) = \sum_a K_a S_a = \sum_\alpha K_\alpha \sum_{a \in \alpha} S_a \quad (3.4)$$

De manera más informal, se puede escribir (3.4) en la forma:

$$\mathcal{H}(S) = H \sum_i S_i + K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \dots \quad (3.5)$$

donde $\langle i,j \rangle$ representa 2 sitios primeros vecinos.

Como ya se dijo en el capítulo II, la idea de renormalización se basa en la disminución sistemática de los grados de libertad de la red original. Para esto se divide la red original de N sitios en N' celdas o bloques de spines preservando la simetría geométrica y de alguna manera se asigna un " spin de celda " que, al igual que el

spin de sitio, sólo puede tomar 2 valores. Así obtenemos una red reescalada o isomorfa a la red original .

Consideremos el conjunto de los N' "spines de celda" $S_{i'} = \pm 1$. El índice i' se refiere a la i' -ésima celda de la red reescalada. Todas las cantidades relacionadas al sistema de spines de celda serán etiquetadas con primas.

Sea $P(S', S)$ un factor de peso , que depende de las configuraciones de los spines de celda y de los spines de sitio, con las siguientes propiedades:

$$P(s', s) \geq 0 \quad \forall s', s \quad (3.6)$$

$$\sum_{\{s\}} P(s', s) = 1 \quad (3.7)$$

Llamando $Z(K)$ a la función partición de la red de sitios, podemos escribir:

$$Z(K) = \sum_{\{s\}} e^{\mathcal{H}(s)} = \sum_{\{s'\}} \sum_{\{s\}} P(s', s) e^{\mathcal{H}(s)} \quad (3.8)$$

El hamiltoniano para la red de celdas queda entonces definido por:

$$e^{G + \mathcal{H}(s')} = \sum_{\{s\}} P(s', s) e^{\mathcal{H}(s)} \quad (3.9)$$

La condición (3.7) es suficiente (pero no necesaria) para garantizar que el hamiltoniano de la red de celdas sea real. La cantidad G que aparece en (3.9) no depende de los spines y está relacionada con la contribución a la energía libre de todos aquellos grados de libertad que fueron cortados en el proceso de pasar de la red de sitios a la red de celdas. Lo más importante, sin embargo, es que la función $P(S',S)$ sea tal que haga que $\mathcal{H}'(S')$ sea idéntico en forma al hamiltoniano original $\mathcal{H}(S)$. Si lo anterior es logrado, se tiene:

$$Z(K) = e^G Z(K') \quad (3.10)$$

donde K' representa a los acoplamientos de la red reescalada.

Si definimos la densidad de energía libre como:

$$f(K) = (1/N) \ln Z(K) \quad (3.11)$$

entonces, llamado $G(K) = N'g(K)$, obtenemos la siguiente relación entre las densidades de energía libre para las redes original y reescalada:

$$f(k) = L^{-d} [g(k) + f(k')] \quad (3.12)$$

donde se ha usado $(N'/N) = L^{-d}$

L: escalamiento

d: dimensión red

La relación (3.9) se llama "transformación de renormalización". Las restricciones sobre $P(S',S)$ aún permiten una amplia variedad en su elección, conduciendo cada una de ellas a una diferente transformación de renormalización. A partir de (3.9) obtenemos :

$$K'_\alpha = F_\alpha(K) \quad (3.13)$$

Punto fijo : Un punto fijo de la ecuación anterior es un conjunto K_α^* tal que:

$$K_\alpha^* = F_\alpha(K^*) \quad (3.14)$$

existiendo en general más de un punto fijo, aunque no todos tienen significado físico para los fenómenos críticos.

Suponemos que los K'_α son funciones regulares de

los K_α cerca de los puntos fijos no triviales (si se quiere, esto es otra restricción sobre $P(S', S)$)

Así, en la vecindad de K^* , expandimos en Taylor hasta primer orden :

$$K'_\alpha - K_\alpha^* = \sum_{\beta} T_{\alpha\beta}^* (K_\beta - K_\beta^*) \quad (3.15)$$

donde
$$T_{\alpha\beta}^* = (\partial K'_\alpha / \partial K_\beta)_{K^*} \quad (3.16)$$

Con el fin de simplificar el desarrollo posterior, introducimos un tipo de coordenadas normales. Sea T^* con autovalores y autovectores izquierdos asociados λ_i y ϕ_α^i , respectivamente:

$$\sum_{\alpha} \phi_\alpha^i T_{\alpha\beta}^* = \lambda_i \phi_\beta^i \quad (3.17)$$

Definimos los "campos de escalamiento" μ_i como:

$$\mu_i = \sum_{\alpha} \phi_\alpha^i (K_\alpha - K_\alpha^*) \quad (3.18)$$

los cuales satisfacen:

$$\mu_i' = \lambda_i \mu_i \quad (3.19)$$

Se puede extender la definición de μ_i más allá del régimen lineal de manera que (3.19) siga siendo válida.

Si iteramos la relación (3.19) n veces, se tiene:

$$\mu_i^{(n)} = \lambda_i^n \mu_i \quad (3.20)$$

Definimos a continuación los llamados campos de escalamiento "relevantes", "irrelevantes" y "marginales" como:

$$\lambda_i = \begin{cases} > 1 & \mu_i \text{ relevante} \\ = 1 & \mu_i \text{ marginal} \\ < 1 & \mu_i \text{ irrelevante} \end{cases} \quad (3.21)$$

Termodinámica :

Iterando la ecuación (3.12) sobre sí misma y yendo al límite termodinámico ($N \rightarrow \infty$), obtenemos para $f(K)$:

$$f(K) = \sum_{J=0}^{\infty} \frac{g(K^{(J)})}{L^{(J+1)d}} \quad (3.12)_a$$

donde $K^{(J)}$ se obtiene de $K^{(J-1)}$ a partir de (3.13)

En términos de $f(K)$, la energía interna por sitio $u(K)$, y el calor específico por sitio, $c(K)$, vienen dados por:

$$u(K) = -J \frac{\partial f(K)}{\partial K} \quad (3.12)_b$$

y

$$c(K) = K_B K^2 \frac{\partial^2 f(K)}{\partial K^2} \quad (3.12)_c$$

TEORIA GENERAL

La ecuación de escalamiento para la densidad de energía libre:

$$f(k) = L^{-d} [g(k) + f(k')]]$$

se expresa en términos de los μ_i como :

$$f(\mu_1, \mu_2, \dots) = L^{-d} [g(\mu_1, \mu_2, \dots) + f(\lambda_1 \mu_1, \lambda_2 \mu_2, \dots)] \quad (3.22)$$

La suposición básica de la teoría es que los campos de escalamiento μ_i son funciones regulares de los parámetros de interacción K_α y que $g(\mu_1, \mu_2, \dots)$ es función regular de los campos de escalamiento μ_i . Es parte del problema escoger $F(S', S)$ de modo que lo anterior se satisfaga.

En términos de los campos μ_i el punto fijo se caracteriza por:

$$\mu_i = 0 \quad \forall i$$

Dominio de atracción : es el conjunto de puntos en el espacio de los K_α que son llevados o atraídos, vía las ecuaciones (3.13) del G.R. al punto fijo. Si n es el número de interacciones y m el de variables relevantes, el dominio de atracción forma una hipersuperficie de dimensión a lo

más n-m. Por ejemplo: si los únicos campos relevantes son μ_1 y μ_2 , el dominio de atracción queda definido poniendo $\mu_1=0$ y $\mu_2=0$.

Desdoblamiento de la matriz T^* :

Sea \mathcal{H} un hamiltoniano Ising de tipo general:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(K, H, I) \quad (3.23)$$

donde K simboliza a todos los acoplamientos pares, I a los acoplamientos impares y H al campo magnético.

En base a la simetría : $Z(K, -H, -I) = Z(K, H, I)$, se puede demostrar que las ecuaciones G.R. tienen la siguiente forma general:

$$K'_J = A_J(K, H^2, I^2) \quad (3.24)$$

$$H' = H B_J(K, H^2, I^2) \quad (3.25)$$

$$I'_J = (H + \sum_i I_i) C_J(K, H, I^2) \quad (3.26)$$

Cuando $H=0$, el punto fijo físicamente aceptable para describir comportamiento crítico en ferromagnetismo tiene la forma general:

$$(K^*, 0, I^*) \quad j=1 \dots n \quad (3.27)$$

En particular, cuando $I^* = 0$, el punto fijo yace en el subespacio par de interacciones y se dice que es un " punto fijo par " :

$$K_j^* = A_j (K^*)$$

Escribamos nuevamente la Transformación de Renormalización:

$$\mathcal{G} + \mathcal{H}'(s') = \sum_{\{s\}} P(s', s) \mathcal{G} \mathcal{H}(s) \quad (3.28)$$

con

$$\mathcal{H}(s) = \sum_{\alpha} K_{\alpha} \sum_{a \in \alpha} S_a \quad (3.29) a$$

y para el hamiltoniano reescalado:

$$\mathcal{H}'(s') = \sum_{\alpha} K'_{\alpha} \sum_{a \in \alpha} S'_a \quad (3.29) b$$

derivando (3.28) con respecto a K_β y usando (3.29)a,b ,
tenemos:

$$\left[\frac{\partial G}{\partial K_\beta} + \frac{\partial \mathcal{L}'}{\partial K_\beta} \right] e^{G + \mathcal{L}'} = \sum_{\{s\}} P(s'|s) e^{\mathcal{L}(s)} \left[\sum_{b \in \beta} S_b \right]$$

es decir,

$$\frac{\partial G}{\partial K_\beta} + \sum_{\alpha} \frac{\partial \mathcal{L}'}{\partial K'_\alpha} \left(\frac{\partial K'_\alpha}{\partial K_\beta} \right) = \frac{\sum P(s'|s) e^{\mathcal{L}(s)} \left[\sum S_b \right]}{\sum P(s'|s) e^{\mathcal{L}(s)}} \quad (3.30)$$

luego, si definimos

$$\langle \sum S_b \rangle_{s'} = \frac{\sum P(s'|s) e^{\mathcal{L}(s)} \left[\sum S_b \right]}{\sum P(s'|s) e^{\mathcal{L}(s)}} \quad (3.31)$$

podemos escribir (3.30) como:

$$\frac{\partial G}{\partial K_\beta} + \sum_{\alpha} \left[\sum_{a \in \alpha} S_a \right] T_{\alpha\beta}^* = \langle \sum_{b \in \beta} S_b \rangle_{s'} \quad (3.32)$$

Ahora si escogemos $P(S', S)$ de manera que cumpla:

$$P(-S', -S) = P(S', S) \quad (3.33)$$

y además pedimos que $\mathcal{L}(s)$ sea par entonces es fácil ver a

partir de (3.31) que $\langle A \rangle_{\beta}$ y $A(S)$ tienen la misma simetría.

Ahora bien, interesa evaluar los elementos de matriz $T_{\alpha\beta}$ en el punto fijo, pues como veremos en la siguiente sección, estarán íntimamente ligados a los exponentes críticos del sistema. Luego, hay que evaluar (3.32) en el punto fijo. Pero si el punto fijo físicamente interesante es par, el hamiltoniano allí será par y por tanto $A(S)$ y $\langle A(S) \rangle_{\beta}$ poseerán la misma paridad. Luego cuando β sea par el miembro derecho de (3.32) será par, lo cual implica que en el lado izquierdo solo sobreviven α pares; si β es impar sólo sobreviven α impares.

Luego nuestra matriz T^* se ha desdoblado en 2 bloques: par-par e impar-impar respectivamente:

$$T^* = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial K'}{\partial K} \right)_* & 0 \\ 0 & \left(\frac{\partial I'}{\partial I} \right)_* \end{pmatrix} \quad (3.34)$$

Luego, para obtener los autovalores de T^* basta diagonalizar cada bloque por separado.

AUTOVALORES Y EXPONENTES CRITICOS

Consideremos un sistema Ising con acoplamiento par K y un campo magnético H .

Tenemos entonces 2 campos de escalamiento μ_1 y μ_2 .

Se tiene:

$$\mu_1 = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^1 (K_{\alpha} - K_{\alpha}^*) = \phi_K^1 (K - K^*) + \phi_H^1 (H - H^*) \quad (3.35)$$

$$\mu_2 = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^2 (K_{\alpha} - K_{\alpha}^*) = \phi_K^2 (K - K^*) + \phi_H^2 (H - H^*) \quad (3.36)$$

Como $H^* = 0$, el punto fijo del sistema yace en el subespacio par, es decir T^* es diagonal:

$$T^* = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial K'}{\partial K}\right)_{*} & 0 \\ 0 & \left(\frac{\partial H'}{\partial H}\right)_{*} \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

con autovalores $\lambda_1 = (\partial K' / \partial K)_{*}$ (3.38)

y $\lambda_2 = (\partial H' / \partial H)_{*}$ (3.39)

Ahora, llamando (ϕ_K^1, ϕ_H^1) al autovector izquierdo de T^* con autovalor λ_1 y (ϕ_K^2, ϕ_H^2) al autovector izquierdo de T^* con autovalor λ_2 , es fácil comprobar que :

$$\Phi'_H = 0 = \Phi^2_K$$

y por tanto :
$$\mu_1 = \Phi^{\dagger}_K (K - K^*) \propto Z \quad (3.40)$$

$$\mu_2 = \Phi^2_H H \propto H \quad (3.41)$$

donde Z está definido como : $Z = (T - T_c) / T_c$

Por otro lado, volviendo a (3.22), vemos que la parte singular de la energía libre debe satisfacer (recordemos que $g(K, H)$ es regular por hipótesis):

$$f_S(\lambda_1 \mu_1, \lambda_2 \mu_2) = L^d f_S(\mu_1, \mu_2) \quad (3.42)$$

Luego si definimos $\lambda_1 = L^{\gamma_T}$ y $\lambda_2 = L^{\gamma_H}$ y

hacemos uso de (3.40) y (3.41) en la ecuación (3.42),

ésta última puede reescribirse como:

$$f_S(L^{\gamma_T} Z, L^{\gamma_H} H) = L^d f(z, H) \quad (3.43)$$

Esta última ecuación es sumamente importante pues nos permitirá establecer la conexión entre los exponentes críticos del sistema (observables físicos) y los autovalores de la matriz de derivadas T^* .

Calor específico : $C_H \propto (\partial^2 f / \partial Z^2)$

$$L^{2\gamma_T} C_H(L^{\gamma_T} z, 0) = L^d C_H(z, 0) \quad (3.44)$$

como (3.43) es válida para cualquier L tomamos, en particular, $L = (z)^{-1/\gamma_T}$

$$\Rightarrow C_H \sim z^{-\left(2 - \frac{d}{\gamma_T}\right)} \quad (3.45)$$

Experimentalmente C_H se comporta como $z^{-\alpha}$

Luego, de (3.45) se tiene que:

$$\alpha = 2 - \frac{d}{\gamma_T} \quad (3.46)$$

Susceptibilidad: $\chi_T \propto -\left(\partial^2 f / \partial H^2\right)_T, H=0$

$$L^{2\gamma_H} \chi_T(L^{\gamma_T} z, 0) = L^d \chi_T(z, 0) \quad (3.47)$$

tomamos $L = (z)^{-1/\gamma_T}$

$$\Rightarrow \chi_T \sim z^{-\left(\frac{2\gamma_H - d}{\gamma_T}\right)} \quad (3.48)$$

Experimentalmente χ_T se comporta como $z^{-\gamma}$

Luego, de (3.48) tenemos

$$\gamma = (2\nu_H - d) / \nu_T \quad (3.49)$$

Parámetro de orden : $m \sim (-\partial f / \partial H)_T$, $H=0$

$$L^{\nu_H} m(L^{\nu_T} z, L^{\nu_H} H) = L^d m(z, H) \quad (3.50)$$

tomamos $L = (z)^{-1/\nu_T}$

$$\Rightarrow m \sim z^{(d - \nu_H) / \nu_T} \quad (3.51)$$

Experimentalmente m se comporta como z^β

Luego, de (3.51) se tiene que

$$\beta = (d - \nu_H) / \nu_T \quad (3.52)$$

Isoterma crítica : $H_c \sim m^\delta$, $z=0$

tomamos $z=0$ en (3.50) y escogemos $L = (H_c)^{-1/\nu_H}$

$$\Rightarrow m \sim H_c^{(d - \nu_H) / \nu_H} \quad (3.53)$$

Experimentalmente H_c se define como: m^δ

Luego, de (3.53) se tiene

$$\delta = \frac{\nu_H}{d - \nu_H} \quad (3.54)$$

Longitud de correlación : $\xi \propto z^{-\nu}$
 de la ecuación de escalamiento para ξ :

$$\xi(z') = (1/L) \xi(z)$$

se tiene

$$(1/L) = \xi(z') / \xi(z) = (z'/z)^{-\nu} = (\partial k' / \partial k)^{-\nu} = [L^{\eta_T}]^{-\nu}$$

es decir,
$$\nu = \frac{1}{\eta_T} \quad (3.55)$$

Como ya se ha discutido, en las proximidades del punto crítico, la longitud de correlación es grande, haciéndose infinita en el punto crítico. Esto implica que debe ser positivo, es decir $\eta_T > 1$. Luego, desde el punto de vista físico sólo interesan los campos relevantes (puntos fijos inestables).

DETERMINACION DE LA TEMPERATURA CRITICA

Habíamos definido el " dominio de atracción " o " superficie crítica " como el conjunto de todos aquellos puntos en el espacio de parámetros que son atraídos vía las ecuaciones G.R. al punto fijo. Si nuestro hamiltoniano depende de n campos de escalamiento, de los cuales hay m relevantes, entonces este dominio de atracción es una hipersuperficie de $n-m$ dimensiones (suponiendo que no hay campos marginales). Restringiéndonos al subespacio de interacciones pares y suponiendo que sólo hay un autovalor relevante λ_T con campo de escalamiento μ_T , la ecuación para la superficie crítica tiene la forma general:

$$\mu_T(K_1, K_2, \dots) = 0 \quad (3.56)$$

La intersección de esta hipersuperficie con el eje "Ising puro" K (primeros vecinos), se halla haciendo:

$$\mu_T(K_c, 0, 0, \dots) = 0 \quad (3.57)$$

Aproximando la superficie por un hiperplano cerca del punto fijo, queda:

$$K_c = \sum_{\alpha} K_{\alpha}^* (\phi_{\alpha}^T / \phi_{mm}^T) \quad (3.58)$$

En rigor K_c es sólo la intersección del plano tangente a la superficie crítica en el punto fijo, con el eje K . Si la superficie no es muy curvada es una aproximación aceptable. La fig. 3.1 ilustra esta situación. Un cálculo más preciso es conservar hasta el segundo término en (3.56), es decir, aproximar la superficie crítica por un paraboloides. Sin embargo esto no es necesario en la práctica, pues como veremos, frecuentemente, el punto fijo se encuentra bastante cercano al eje K .

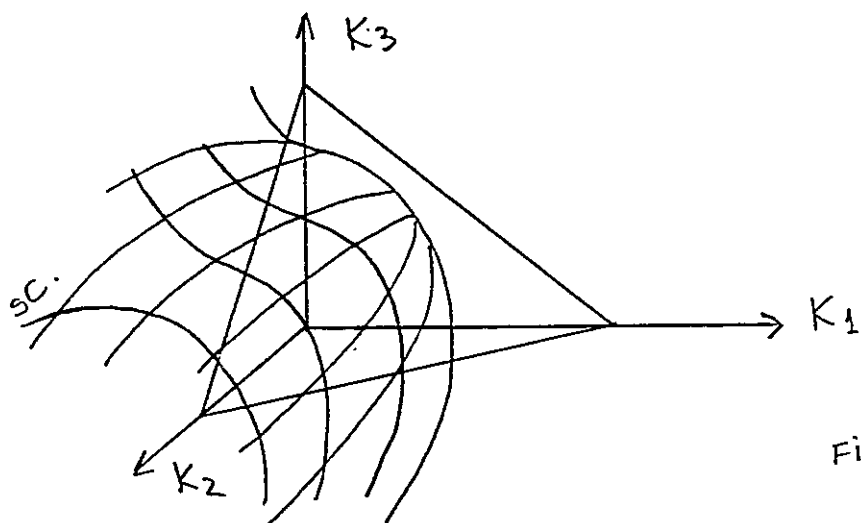


Fig. 3.1

APROXIMACION ACUMULANTE

Recordemos la transformación de renormalización:

$$e^{G+\mathcal{H}'(S')} = \sum_{\{S\}} P(S',S) e^{\mathcal{H}(S)} \quad (3.59)$$

donde, en general, $\mathcal{H}(S)$ es más complicado que, por ejemplo, un hamiltoniano tipo "Ising puro". Mas aún, la suma sobre S en (3.59) está constreñida por el factor de peso $P(S',S)$, de modo que su evaluación exacta se hace un problema tan complicado como el cálculo de la función de partición misma, y por tanto es, excepto para unos pocos casos, difícilmente factible. Además, no es el espíritu de la teoría de renormalización hacer contribuciones al número de casos exactamente solubles; sino más bien proveer para casos realistas de un algoritmo computacional eficaz para extraer los exponentes críticos del sistema.

Lo anterior ha llevado al diseño de varios esquemas de aproximación. Entre estos, se cuentan la renormalización acumulante, aproximación de "racimos", renormalización con redes finitas, renormalización Montecarlo y otras. En esta sección discutiremos la aproximación acumulante, la cual aplicaremos en el capítulo V para tratar la red triangular bidimensional.

La idea de la aproximación acumulante es separar en una parte "no perturbada" \mathcal{H}_0 , que sea "manejable" y una "perturbación" V que es "pequeña" en relación a \mathcal{H}_0 :

$$\mathcal{Z}(s) = \mathcal{Z}_0(s) + V(s) \quad (3.60)$$

Definimos el promedio $\langle \rangle_0$ como:

$$\langle A \rangle_0 = \frac{\sum_{\{s\}} P(s'_1|s) A(s) e^{\mathcal{Z}(s)}}{\sum_{\{s\}} P(s'_1|s) e^{\mathcal{Z}(s)}} \quad (3.61)$$

Sustituyendo (3.60) en (3.59) y usando (3.61), podemos expresar la transformación de renormalización como:

$$e^{G + \mathcal{Z}'(s')} = \langle e^V \rangle_0 \sum_{\{s\}} P(s'_1|s) e^{\mathcal{Z}_0(s)} \quad (3.62)$$

Expandiendo $\langle e^V \rangle_0$ en acumulantes:

$$\langle e^V \rangle_0 = \exp \left\{ \langle V \rangle_0 + \frac{1}{2!} \langle (V - \langle V \rangle_0)^2 \rangle_0 + \dots \right\} \quad (3.63)$$

y definiendo:

$$e^{G_0 + \mathcal{Z}'_0(s')} = \sum_{\{s\}} P(s'_1|s) e^{\mathcal{Z}_0(s)} \quad (3.64)$$

y sustituyendo (3.63) y (3.64) en (3.62) podemos despejar como:

$$G + \mathcal{L}'(s') = G_0 + \mathcal{L}'_0(s') + \langle V \rangle_0 + \frac{1}{2!} [\langle V^2 \rangle_0 - \langle V \rangle_0^2] + \dots \quad (3.65)$$

El asunto ahora es escoger \mathcal{L}'_0 y V . Lo más directo es reunir en \mathcal{L}'_0 a todas las interacciones intraceldas y en V a todas las interacciones interceldas.

Así:

$$\mathcal{L}'_0(s) = \sum_{i'} h_{0i'}(s_{i'}^1) \quad (3.66)$$

Por simplicidad escogemos $P(s', s)$ como un producto de funciones de peso "de celda":

$$P(s', s) = \prod_{i'} \chi(s_{i'}^1 | (s_{i'}^l)) \quad (3.67)$$

Si además ponemos:

$$G_0 + \mathcal{L}'_0(s') = \sum_{i'} (g_{0i'} + h_{0i'}(s_{i'}^1)) \quad (3.68)$$

entonces (3.64) queda como :

$$e^{g_{0i'} + h_{0i'}(s_{i'}^1)} = \sum_{\{s_{i'}^l\}} \chi(s_{i'}^1 | (s_{i'}^l)) e^{h_{0i'}(s_{i'}^l)} \quad (3.69)$$

donde $\{s_{i'}^l\}$ se refiere las configuraciones de los spines que pertenecen a la celda i' . El índice l etiqueta la

posición de un spin dentro de la celda.

Primer orden :

Se conserva hasta el término $\langle V \rangle_0$ en (3.65).

Una forma típica para $V(S)$ en redes Ising es:

$$V(S) = K \sum_{a,b,i,j} S_i^a S_j^b \quad (3.70)$$

donde a, b : índices de sitio dentro de una celda

i, j : índices de celdas

Entonces

$$\langle V \rangle_0 = K \sum_{a,b,i,j} \sum_{\{S\}} P(\{S\}) S_i^a S_j^b e^{\mathcal{H}} / \sum_{\{S\}} P(\{S\}) e^{\mathcal{H}} \quad (3.71)$$

usando (3.66), (3.67) y (3.68) es directo ver que $\langle V(S) \rangle$ asume la forma:

$$\langle V \rangle_0 = K \sum_{a,b,i,j} \langle S_i^a \rangle_0 \langle S_j^b \rangle_0 \quad (3.72)$$

Segundo orden :

Ahora conservamos hasta los términos cuadráticos en (3.65). Tomando el mismo $V(S)$ que antes, tenemos:

$$\langle V^2 \rangle_0 = K^2 \sum_{a,b,i,j} \sum_{c,d,k,l} \langle S_i^a S_j^b S_k^c S_l^d \rangle_0 \quad (3.73)$$

y

$$\langle V \rangle_0^2 = K^2 \sum_{a,b,i,j} \sum_{c,d,k,l} \langle S_i^a \times S_j^b \times S_k^c \times S_l^d \rangle_0 \quad (3.74)$$

y por tanto, $\frac{1}{2} [\langle V^2 \rangle_0 - \langle V \rangle_0^2] =$

$$= \frac{K^2}{2} \sum_{\substack{a,b, \\ i,j}} \sum_{\substack{c,d \\ k,l}} \left\{ \langle S_i^a S_j^b S_k^c S_l^d \rangle - \langle S_i^a \times S_j^b \times S_k^c \times S_l^d \rangle \right\} \quad (3.75)$$

Si todos los índices de celda son distintos, (3.75) es idénticamente nulo. Sólo contribuyen los casos en que hay dos o más índices de celda iguales. Como S_i^a y S_j^b son spines primeros vecinos, i' y j' son celdas vecinas, y análogamente k' y l' . Luego, para que haya contribuciones no nulas de (3.75), i', j', k' y l' deben formar una cadena conectada con al menos una celda en común. Esto último impide la proliferación de interacciones de muy largo alcance.

IV. RENORMALIZACION EXACTA DE LA CADENA ISING UNIDIMENSIONAL

Consideremos una cadena lineal de N spines, separados por un espaciado a



fig.4.1

Designamos por S_i al spin en el sitio i -ésimo. S_i puede tomar sólo 2 valores: +1 (up) y -1 (down). El sistema se supone inmerso en un campo magnético externo uniforme h . Suponiendo que cada spin interactúa sólo con su vecino más próximo con acoplamiento j , el hamiltoniano del sistema es:

$$\mathcal{H} = \frac{J}{k_B T} \sum_i S_i S_{i+1} + \frac{g \mu_0 h}{k_B T} \sum_i S_i \quad (4.1)$$

o, llamando $K=J/k_B T$ y $H=g \mu_0 h/k_B T$

$$\mathcal{H} = K \sum_i S_i S_{i+1} + H \sum_i S_i \quad (4.2)$$

La función de partición canónica es:

$$Z = \sum_{\{s\}} e^{\mathcal{L}(s)} \quad (4.3)$$

donde $\{s\}$ significa todas las posibles configuraciones de spin del sistema.

Es relativamente sencillo calcular (4.3) en forma cerrada, obteniéndose en el límite termodinámico ($N \rightarrow \infty$):

$$Z = \left[e^{K} \cosh(H) + \left(e^{2K} \sinh^2(H) + e^{-2K} \right)^{1/2} \right]^N \quad (4.4)$$

Lamentablemente este modelo es físicamente irrelevante para describir ferromagnetismo, pues no exhibe magnetización espontánea. en otras palabras,

$$\lim_{H \rightarrow 0} \frac{K_B T}{N} \mu_0 \frac{\partial}{\partial H} (\ln Z) = 0 \quad (4.5)$$

A pesar de lo anterior, este modelo resulta útil para familiarizarse con las técnicas del Grupo de Renormalización, pues su simplicidad permite que sea renormalizado de manera exacta. Una de las renormalizaciones más conocidas consiste en sumar explícitamente sobre las configuraciones de spin en los sitios pares (o impares) de la cadena, resultando una cadena similar a la original pero

con doble espaciado elemental. Este procedimiento es llamado "decimación" ⁽⁴⁾. Nos interesa en este trabajo poner énfasis en la renormalización mediante "bloques". En la sección que sigue renormalizaremos la red Ising utilizando bloques de 2 spines. Se mencionarán los resultados para un procedimiento similar utilizando celdas de 3 spines y como subproducto de las ecuaciones de renormalización calcularemos la energía libre, energía interna y calor específico de la red.

(A) RENORMALIZACION CON CELDAS DE 2 SPINES

Dividimos la red original en celdas, conteniendo cada una a 2 spines, como lo muestra la fig.4.2.

Reetiquetamos los sitios de la red original con dos índices: un índice de celda (primado) y un índice de sitio dentro de la celda (1 ó 2).

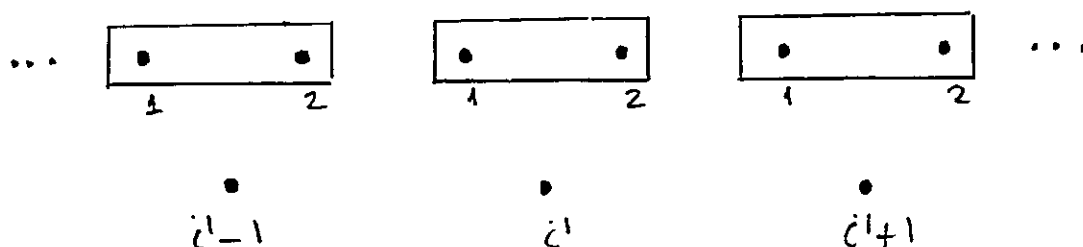


fig.4.2

La idea es pasar de esta "red de celdas" a una nueva red de sitios, idéntica a la original pero con espaciado elemental doble.

Conviene reescribir el hamiltoniano original (4.2)

como:

$$\mathcal{H} = K \sum_i S_i S_{i+1} + \frac{H}{2} \sum_i (S_i + S_{i+1}) \quad (4.6)$$

introduciendo las nuevas "etiquetas", (4.6) queda como :

$$\mathcal{H} = K \sum_i \tilde{S}_i (S_{i+1}^1 + S_{i+1}^2) + \frac{H}{2} \sum_i (S_i^1 + S_i^2 + S_{i+1}^1 + S_{i+1}^2) \quad (4.7)$$

La transformación de renormalización está definida por :

$$e^{G + \mathcal{H}'(s')} = \sum_{\{s\}} P(s'|s) e^{\mathcal{H}(s)} \quad (4.8)$$

donde $P(s',s)$ es la función de peso ya introducida en el capítulo III y $\mathcal{H}'(s')$ es el hamiltoniano para la nueva red, el cual queremos que sea idéntico en forma a $\mathcal{H}(s)$.

Tomamos para $P(s',s)$:

$$P(s'|s) = \prod_{i'} \chi(s'_i | s_i^1, s_i^2) \quad (4.9)$$

es decir, se ha separado $P(s',s)$ como un producto de funciones de peso, cada una de las cuales depende solo de los spines de una celda.

La condición :
$$\sum_{\{s'\}} P(s'|s) = 1$$

implica :
$$\sum_{s'_i = \pm 1} \chi(s'_i | s_i^1, s_i^2) = 1 \quad (4.10)$$

por lo tanto $\chi(s'_i | s_i^1, s_i^2)$ tiene la forma general:

$$\chi(s'_i | s_i^1, s_i^2) = \frac{1}{2} [1 + s'_i f(s_i^1, s_i^2)] \quad (4.11)$$

donde f es una función arbitraria de 2 spines.

Cómo escoger f ? En el capítulo III vimos que

si $P(s',s)$ satisface: $P(-s',-s) = p(s',s)$ entonces el subespacio par del hamiltoniano es preservado por la transformación de renormalización. Es decir, si

$$\mathcal{H}(-s) = \mathcal{H}(s)$$

también

$$\mathcal{H}'(-s') = \mathcal{H}'(s')$$

Lo anterior indica que conviene tomar f como una función impar de dos spines. Si tratamos a ambos spines en el mismo pie, la forma más general de tal función es :

$$f(S_u^1, S_u^2) = \alpha (S_u^1 + S_u^2) \quad (4.12)$$

donde α es una constante arbitraria.

Así, la función de peso general para la celda i' se escribe como:

$$\chi(S_{i'}^1 | S_{i'}^1, S_{i'}^2) = \frac{1}{2} [1 + \alpha S_{i'}^1 (S_{i'}^1 + S_{i'}^2)] \quad (4.13)$$

En realidad existe otra restricción que no ha sido mencionada: la función de peso $P(s',s)$ debe ser tal que el miembro derecho de la transformación de renormalización (4.8) sea siempre positivo. Esto es obvio pues nuestro hamiltoniano es real. Esta restricción es muy sutil y no es trivial expresarla en términos de α , nuestro parámetro libre. Si escogemos $|\alpha| < 1/2$ entonces

el miembro derecho de (4.8) será siempre positivo, pero esto es una condición suficiente pero no necesaria.

Volveremos sobre este punto más adelante cuando planteemos la renormalización de la red triangular.

Con todo lo anterior la T. de R. (4.8) queda:

$$e^{6 + \alpha'(s')} = \prod_i \left\{ \sum_{S_i^1} \chi(S_i^1) e^{[K S_i^2 (S_i^1 + S_{i+1}^1) + \frac{H}{2} (S_{i+1}^1 + S_{i+1}^2 + S_{i+1}^1 + S_{i+1}^2)]} \right\} \quad (4.14)$$

Ahora, dada una configuración $\{s'\}$ en la red reescalada, i.e., dado el S^i para cada celda i , contribuirán a esta las 4 configuraciones de los S_{i+1}^1 ($l=1,2$):

$$S_{i+1}^1 = S_{i+1}^2 = S_{i+1}^1 \rightarrow \chi = \frac{1}{2} (1 + 2\alpha)$$

$$-S_{i+1}^1 = S_{i+1}^2 = S_{i+1}^1 \rightarrow \chi = 1/2$$

$$S_{i+1}^1 = -S_{i+1}^2 = S_{i+1}^1 \rightarrow \chi = 1/2$$

$$-S_{i+1}^1 = -S_{i+1}^2 = S_{i+1}^1 \rightarrow \chi = \frac{1}{2} (1 - 2\alpha)$$

y (4.14) queda como:

$$\prod_i \left\{ \frac{1}{2} (1 + 2\alpha) e^{[K(1 + S_{i+1}^1 S_{i+1}^1) + H(S_{i+1}^1 + S_{i+1}^1)]} - K(1 + S_{i+1}^1 S_{i+1}^1) + \frac{1}{2} e^{[K(1 + S_{i+1}^1 S_{i+1}^1) - H(S_{i+1}^1 + S_{i+1}^1)]} + \frac{1}{2} e^{-K(1 + S_{i+1}^1 S_{i+1}^1)} + \frac{1}{2} (1 - 2\alpha) e^{[K(1 + S_{i+1}^1 S_{i+1}^1) - H(S_{i+1}^1 + S_{i+1}^1)]} \right\} \quad (4.15)$$

queremos expresar (4.15) como :

$$\prod_i e^{g + K' s_i^1 s_{i+1}^1 + \frac{H'}{2} (s_i^1 + s_{i+1}^1)} \quad (4.16)$$

Iguando (4.15) y (4.16) para las 4 posibles configuraciones de spin en los "sitios" i' e $i'+1$, obtenemos el sig.

conjunto de 3 ecuaciones para K' , H' y g :

$$\frac{1}{2}(1+2\alpha)e^{2(K+H)} + e^{-2K} + \frac{1}{2}(1-2\alpha)e^{2(K-H)} = e^{g+K'+H'} \quad (4.17)$$

$$\frac{1}{2}(1+2\alpha)e^{2(K-H)} + e^{-2K} + \frac{1}{2}(1-2\alpha)e^{2(K+H)} = e^{g+K'-H'}$$

con soluciones:

$$K' = (1/4) \text{LOG} (A(K,H)A(K,-H) / 4) \quad (4.18)$$

$$H' = (1/2) \text{LOG} (A(K,H) / A(K,-H)) \quad (4.19)$$

$$g = (1/4) \text{LOG} (4A(K,H)A(K,-H)) \quad (4.20)$$

$$\text{donde } A(K,H) = \frac{1}{2}(1+2\alpha)e^{2(K+H)} + e^{-2K} + \frac{1}{2}(1-2\alpha)e^{2(K-H)} \quad (4.21)$$

(4.18), (4.19) y (4.20) son las ecuaciones de Grupo de

Renormalización.

Para un sistema tipo Ising ferromagnético ($K > 0$), se ha demostrado que el comportamiento crítico, si existe, sólo es posible en ausencia de campo magnético externo⁷. Poniendo $H=0$ en (4.18), (4.19) y (4.20) las ecuaciones G.R. quedan como:

$$K' = (1/2) \text{LOG} (\cosh(2K)) \quad (4.22)$$

$$H' = 0 \quad (4.23)$$

$$g = (1/2) \text{LOG} (4 \cosh(2K)) \quad (4.24)$$

Nótese que el parámetro α ha desaparecido de las ecuaciones G.R.

Los únicos puntos fijos de (4.22) son $K^* = 0$ y $k^* = \infty$

$$\text{con} \quad (dK'/dK)_0 = 0$$

$$\text{y} \quad (dK'/dK)_\infty = 1$$

es decir, no hay autovalores relevantes y, por tanto, el sistema no exhibe comportamiento crítico. Esto está en perfecto acuerdo con la solución exacta.

(B) RENORMALIZACION CON BLOQUE DE 3 SPINES

Se divide la red original en celdas conteniendo cada una a 3 spines:

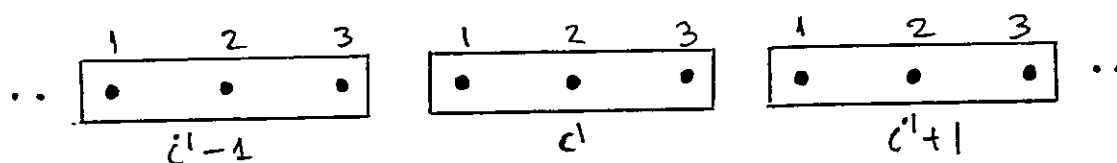


fig.4.3

Tal como antes, introducimos índices de celda e índices de sitio dentro de la celda. Así, un spin S_i se expresará como $S_i^{l'}$, con $l=1,2,3$

La idea es pasar a una nueva red de "sitios" $S_i^{l'}$:



fig.4.4

Tomamos para $P(s',s)$ un producto de funciones de peso para cada celda:

$$P(s',s) = \prod_{i'} X(S_i^{l'} | (S^{l'i'}))$$

y resta decidir qué función de peso X usar. Por lo ya discutido en (a), es claro que la forma general para X es :

$$X = (1/2) \{ 1 + S_i^{l'} f(S^{l'i'}, S^{2i'}, S^{3i'}) \}$$

donde f es la función impar más general para 3 spines, y tiene la forma:

$$f(S_i^1, S_i^2, S_i^3) = \alpha (S_i^1 + S_i^2 + S_i^3) + \beta S_i^1 S_i^2 S_i^3 \quad (4.25)$$

donde α y β son constantes arbitrarias.

En particular cuando $\alpha = 0.5$ y $\beta = -0.5$, obtenemos para X la conocida "regla de la mayoría", en la cual X vale +1 si la mayoría de los spines de la celda apunta en la dirección de S^i y vale 0 en caso contrario.

El resto del procedimiento para hallar las ecuaciones G.R. es similar al mostrado en (A), sólo que hay que sumar sobre 8 configuraciones por celda. Además conviene escribir el hamiltoniano original como :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(S) = & K \sum_{i1} S_{i1}^2 (S_{i1}^1 + S_{i1}^3) + S_{i1}^3 S_{i1+1}^1 + \\ & + \frac{H}{2} \sum_{i1} (S_{i1}^1 + S_{i1}^2 + S_{i1}^3 + S_{i1+1}^1 + S_{i1+1}^2 + S_{i1+1}^3) \end{aligned} \quad (4.26)$$

Las ecuaciones G.R. resultan :

$$K' = \frac{1}{4} \ln \left[\frac{C(K, H) C(K, -H)}{(3e^K + e^{-3K})^2} \right] \quad (4.27)$$

$$H' = \frac{1}{2} \ln [C(K, H) / C(K, -H)] \quad (4.28)$$

$$g = \frac{1}{4} \ln [C(K, H) C(K, -H) (3e^K + e^{-3K})^2] \quad (4.29)$$

$$\text{con } C(K, H) = \frac{1}{2} (1 + 3\alpha + \beta) e^{3(K+H)} + \frac{3}{2} (1 + \alpha - \beta) e^{-K+H} + \\ + \frac{1}{2} (1 - 3\alpha - \beta) e^{3(K-H)} + \frac{3}{2} (1 - \alpha + \beta) e^{-K-H} \quad (4.30)$$

Para $H=0$, que es el caso que nos interesa, las ecuaciones G.R. quedarían:

$$K' = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{e^{3K} + 3e^{-K}}{3e^K + e^{-3K}} \right] \quad (4.31)$$

$$H' = 0 \quad (4.32)$$

$$g = \frac{1}{2} \ln [(e^{3K} + 3e^{-K})(3e^K + e^{-3K})] \quad (4.33)$$

Y los únicos puntos fijos son $K^* = 0$ y $K^* = \infty$, y ninguno es relevante. Nótese que han desaparecido los parámetros α y β . Es decir, cualquier elección conduce a las mismas ecuaciones G.R.

CALCULO DE LA TERMODINAMICA DE LA RED ISING 1-DIM EN BASE A LAS ECUACIONES G.R.

A partir de la expresión general

$$f(K) = \sum_{J=0}^{\infty} L^{-(J+1)d} g(K^{(J)}) \quad (4.34)$$

podemos calcular calor específico y energía interna por

sitio sin necesidad de recurrir a la forma explícita de la función de partición: basta con haber renormalizado la red. La energía interna por sitio $u(K)$ y el calor específico $c(K)$ vienen dados por:

$$u(K) = -Jdf(K)/dK \quad \text{y} \quad c(K) = k_B K^2 (d^2f(K)/dK^2) \quad (4.35)$$

Ilustraremos lo anterior empleando las ecuaciones G.R. obtenidas en (A) para celdas con 2 spines. En tal caso se tiene:

$$d=1, \quad L=2$$

$$K^{(j)} = (1/2) \text{LOG}(\cosh(2K^{(j-1)}))$$

$$g(K^{(j)}) = (1/2) \log(4 \cosh(2K^{(j)}))$$

La fig.4.5. muestra los resultados obtenidos. El acuerdo numérico con la solución exacta es notable. De hecho, las curvas obtenidas tomando 10 términos en la serie (4.34), son prácticamente indistinguibles de las exactas (error $\sim 10^{-2}\%$).

A partir de (4.34) pareciera que tomando celdas más grandes (es decir, aumentando L), se puede acelerar la convergencia de la serie para $f(K)$. Los resultados numéricos obtenidos usando las ecuaciones G.R. para celdas con 3 spines y tomando 10 términos en la serie, apoyan esta idea pues el porcentaje de error disminuye aproximadamente en dos órdenes de magnitud.

$f(K), u(K), c(K)$

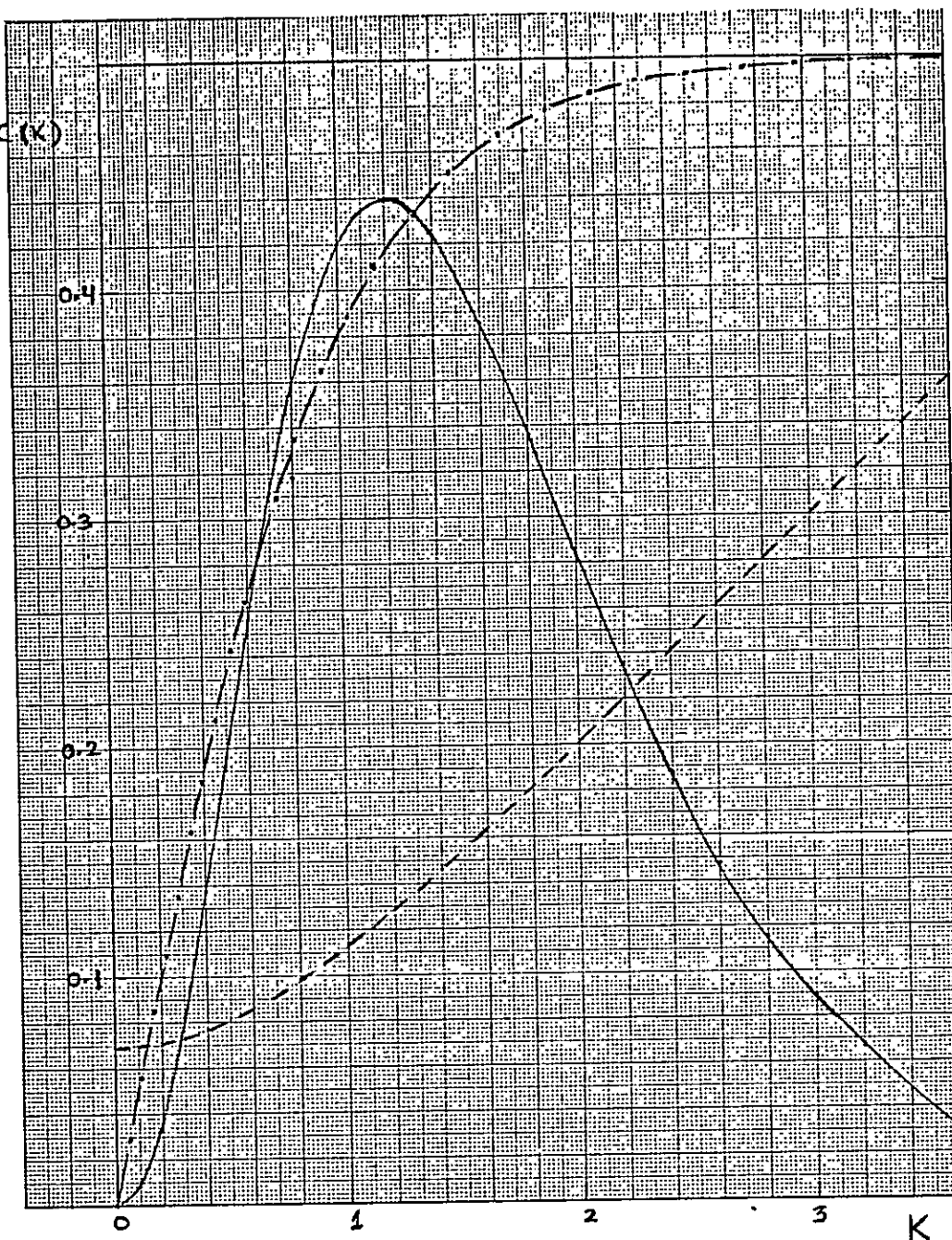


Fig.4.5 energía libre (curva de trazos), energía interna (curva de puntos y trazos), y calor específico (curva llena) para la cadena Ising unidimensional como función del parámetro $K = J/K_B T$. Las curvas resultan indistinguibles de la solución exacta.

V. RENORMALIZACION ACUMULANTE PARA LA RED ISING TRIANGULAR

El caso de la cadena lineal Ising constituye uno de los pocos casos en que es posible hacer una renormalización exacta, es decir, pasar del hamiltoniano original a otro idéntico en forma, al efectuar la transformación de renormalización. En la práctica, para sistemas más complejos, resulta necesario hacer un enfoque aproximado. La aproximación acumulante, discutida en el capítulo III, es uno de los métodos más usados y es el que utilizaremos aquí. La idea es hacer una renormalización lo más general posible y ajustar los parámetros que queden libres mediante algún criterio físico.

La fig. (5.1) muestra la red triangular y al sistemas de ejes coordenados que usaremos para etiquetar los spines.

Partimos asumiendo sólo interacciones a primeros vecinos y con un campo externo. Así, el hamiltoniano del sistema es:

$$\mathcal{H} = K \sum_{i,j} S_{ij} (S_{i+1,j} + S_{i,j+1} + S_{i,j-1}) + H \sum_{i,j} S_{ij} \quad (5.1)$$

donde hemos definido $K = J / K_B T$ y $H = g \mu_B B / K_B T$

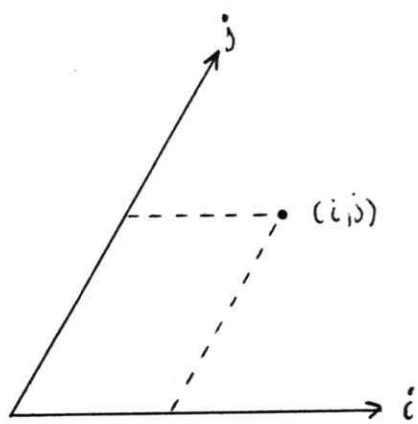
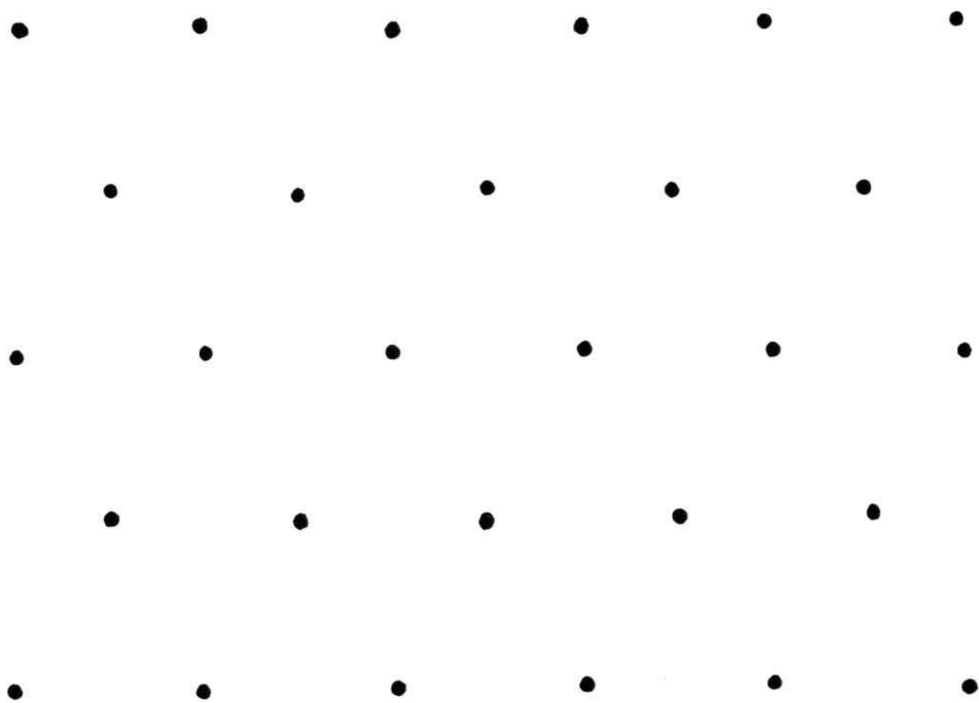


fig. 5.1

El próximo paso es subdividir la red en celdas, preservando la simetría original. Lo más sencillo es tomar celdas triangulares, cada una conteniendo a tres spines, como lo muestra la figura (5.2). Ahora los índices i y j sirven para localizar el centro de una celda. Necesitamos entonces un índice extra para localizar un spin dentro de una celda. Introducimos con este objeto al índice l , con $l=1,2,3$. De esta manera un spin S_{ij} puede ser reescrito como S^{l}_{ij} .

A continuación ponemos $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V$, tomando en \mathcal{H}_0 la suma de todas las interacciones intraceldas y en V a todas las interacciones interceldas. Así:

$$\mathcal{H}_0 = K \sum_{ij} (S_{ij}^1 S_{ij}^2 + S_{ij}^2 S_{ij}^3 + S_{ij}^3 S_{ij}^1) + H \sum_{ij} (S_{ij}^1 + S_{ij}^2 + S_{ij}^3) \quad (5.2)$$

$$V = K \sum_{ij} \left\{ S_{ij}^1 (S_{i,j+1}^3 + S_{i+1,j}^3) + S_{ij}^2 (S_{i+1,j-1}^1 + S_{i,j-1}^1) + \right. \\ \left. + S_{ij}^3 (S_{i-1,j+1}^3 + S_{i-1,j}^2) \right\} \quad (5.3)$$

La función de peso:

Como ya se discutió en el capítulo III, conviene tomar $P(S', S)$ como un producto de funciones de peso "de celda":

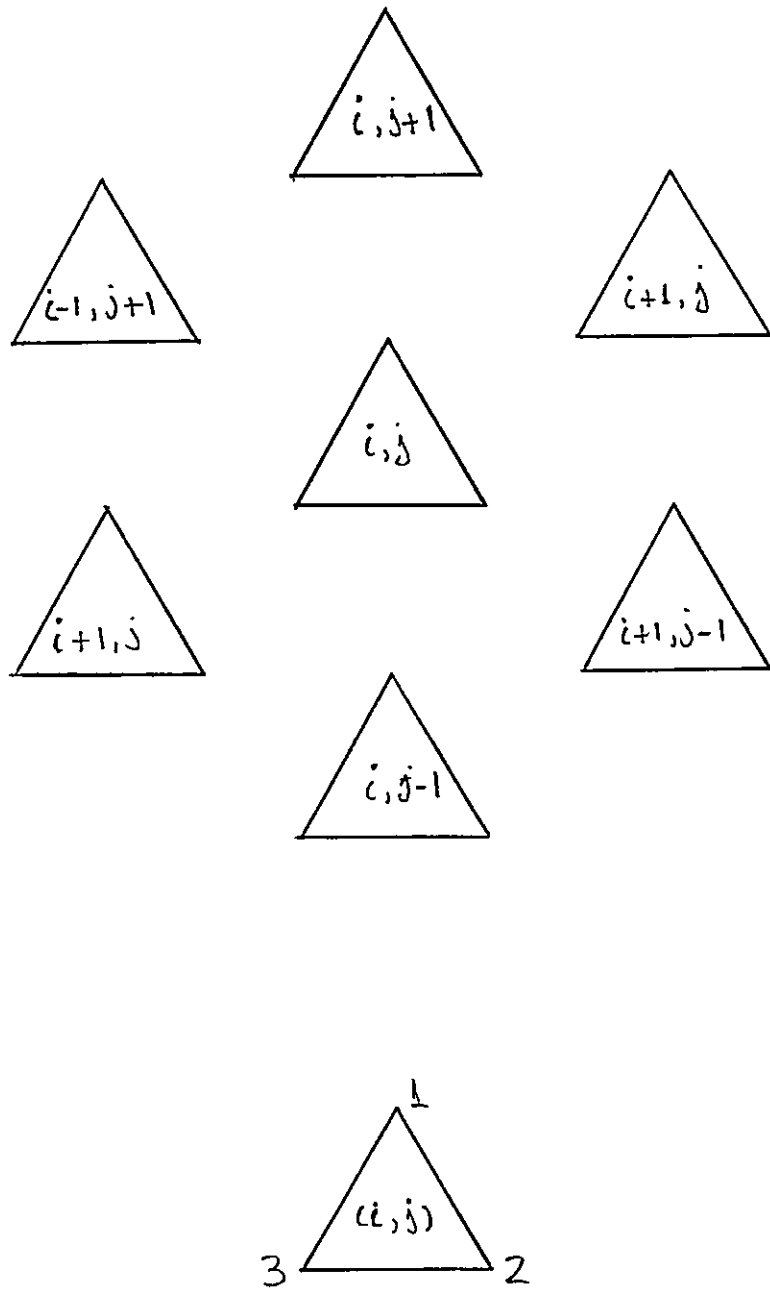


fig. 5.2

$$P(s',s) = \prod_{ij} \chi(s'_{ij} | s_{ij}^1, s_{ij}^2, s_{ij}^3) \quad (5.4)$$

además conviene exigir que $P(S',S)$ posea la simetría :

$$P(-S',-S) = P(S',S) \quad (5.5)$$

y, por supuesto $P(S',S)$ debe cumplir :

$$\sum_{\{s'\}} P(s',s) = 1 \quad (5.6)$$

Con todo lo anterior, la forma general para $P(S',S)$

es :

$$P(s',s) = \prod_{ij} \frac{1}{2} \left\{ 1 + s'_{ij} f(s_{ij}^1, s_{ij}^2, s_{ij}^3) \right\} \quad (5.7)$$

donde $f(s_{ij}^1, s_{ij}^2, s_{ij}^3)$ es una función impar de $s_{ij}^1, s_{ij}^2, s_{ij}^3$.

Tratando a todos los spines de la celda en el mismo pie, la expresión más general para f es :

$$f(s_{ij}^1, s_{ij}^2, s_{ij}^3) = \alpha (s_{ij}^1 + s_{ij}^2 + s_{ij}^3) + \beta s_{ij}^1 s_{ij}^2 s_{ij}^3 \quad (5.8)$$

Nótese que la función de peso así obtenida es la misma que la usada en el caso de la cadena Ising con celdas de tres spines.

Por motivos de posteriores simplificaciones, conviene expresar $P(S',S)$ en términos de los parámetros γ y ϵ , definidos como :

$$\gamma = 3\alpha + \beta \quad ; \quad \epsilon = \alpha - \beta \quad (5.9)$$

Así, la función de peso más general para la celda triangular queda como :

$$P = \prod_{i,j} \frac{1}{2} \left\{ 1 + S_{ij}^1 \left[\left(\frac{\gamma + \epsilon}{4} \right) (S_{ij}^1 + S_{ij}^2 + S_{ij}^3) + \left(\frac{\gamma - 3\epsilon}{4} \right) S_{ij}^1 S_{ij}^2 S_{ij}^3 \right] \right\} \quad (5.10)$$

donde S_{ij}^1 ($= \pm 1$) es el spin asociado a la celda (i,j) .

Estamos ya en condiciones de comenzar el cálculo de la renormalización acumulante. Antes de hacerlo, podemos simplificar un poco el problema, recordando que cuando el punto fijo está en el subespacio de las interacciones pares, la matriz de derivadas T^* se desdobra en dos bloques :

par-par e impar-impar respectivamente. Esto permite trabajar por separado con las interacciones pares del hamiltoniano, calcular la parte par de las ecuaciones G.R., evaluar el punto fijo (par, por hipótesis) y por último, el bloque par de T^* . De allí se obtiene el exponente γ_T .

Para la parte impar podemos hacer uso de la relación (3.32) para calcular los elementos de matriz. En efecto, para β impar, $(dG / dK_\beta) = 0$ allí y si evaluamos además la relación en el punto fijo, ésta se reduce a :

$$\sum_{\alpha} \left[\sum_{a \in \alpha} S_a \right] T_{\alpha\beta}^* = \left\langle \sum_{b \in \beta} S_b \right\rangle_{S'}^* \quad (5.11)$$

Expandiendo el miembro derecho de (5.11) en acumulantes, tenemos hasta términos de segundo orden :

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} \left[\sum_{a \in \alpha} S_a \right] T_{\alpha\beta}^* &= \left\langle \sum S_b \right\rangle_0^* + \left\langle \left(\sum S_b (V - \langle V \rangle_0) \right) \right\rangle_0 + \\ &+ \frac{1}{2} \left\langle \left(\sum S_b (V^2 - \langle V^2 \rangle_0) \right) \right\rangle_0 + \left\langle \left(\sum S_b (\langle V \rangle_0^2 - V \langle V \rangle_0) \right) \right\rangle_0 + \dots \quad (5.12) \end{aligned}$$

De esta manera, mediante (5.12) obtenemos cada elemento de matriz impar directamente como una expansión. Obtenido el bloque impar de esta manera, resta calcular su autovalor relevante y, de allí, el exponente Y_H .

Con los valores de Y_T e Y_H en la mano podemos calcular todos los exponentes críticos del sistema, según se mostró en el capítulo III.

Para que el programa anterior resulte, es necesario que el punto fijo sea par. Esto es ciertamente el caso cuando la única interacción impar es el campo magnético. Sin embargo, como veremos luego, la aproximación acumulante conlleva la aparición de interacciones que no estaban presentes originalmente en el hamiltoniano. En particular, aparecen nuevas interacciones impares. Entonces asumiremos de aquí en adelante que el punto fijo de la teoría que es relevante físicamente está en el subespacio par.

A continuación procederemos a renormalizar en acumulantes para obtener la parte par de las ecuaciones. Usaremos, por tanto, sólo la parte par del hamiltoniano (5.1).

Orden Cero: Hay que evaluar

$$e^{g_0 + h'_0(s'_{ij})} = \sum_{\{s^k_U\}} \chi(s^1_U | s^k_U) e^{h_0(s^k_U)} \quad (5.13)$$

con

$$h_0(s^k_U) = k(s^1_U s^2_U + s^2_U s^3_U + s^3_U s^1_U) \quad (5.14)$$

Como $h'_0(s')$ corresponde a la interacción a orden cero del spin de "celda", necesariamente es de la forma: $h'_0 \times S^1$ donde h'_0 es una constante, y corresponde al campo magnético renormalizado a orden cero.

Evaluando (5.13), resulta :

$$e^{g_0 + h'_0 S^1} = e^{3k} + 3e^{-k} \quad (5.15)$$

de donde se obtiene :

$$g_0(k) = \ln(e^{3k} + 3e^{-k}) ; h'_0 = 0 \quad (5.16)$$

es decir, hasta orden cero sólo aparecen contribuciones a la densidad de energía libre.

Primer orden : Hay que evaluar $\langle V(S) \rangle_0$. De acuerdo a (5.3), tenemos:

$$\langle V(S) \rangle_0 = K \sum_{ij} \left\{ \langle S_{ij}^1 \rangle (\langle S_{i,j+1}^3 \rangle + \langle S_{i+1,j}^3 \rangle) + \langle S_{ij}^2 \rangle (\langle S_{i+1,j-1}^1 \rangle + \langle S_{i,j-1}^1 \rangle) + \langle S_{ij}^3 \rangle (\langle S_{i-1,j+1}^2 \rangle + \langle S_{i-1,j}^2 \rangle) \right\} \quad (5.17)$$

Ahora, por ser \mathcal{L}_0 y $P(S',S)$ simétricos en S_{ij}^1, S_{ij}^2 y S_{ij}^3 , se tendrá que : $\langle S_{ij}^1 \rangle = \langle S_{ij}^2 \rangle = \langle S_{ij}^3 \rangle$. Omitiendo índices :

$$\langle S \rangle_0 = \frac{\sum \chi(s^1, s) s e^{\mathcal{L}_0}}{\sum \chi(s^1, s) e^{\mathcal{L}_0}} = \frac{(\gamma e^{3k} + \epsilon e^{-k})}{(e^{3k} + 3e^{-k})} \quad (5.18)$$

$$\text{es decir, } \langle S \rangle_0 = B(k) s^1 \quad (5.19)$$

$$\text{donde } B(k) = (\gamma e^{3k} + \epsilon e^{-k}) / (e^{3k} + 3e^{-k}) \quad (5.20)$$

Sustituyendo en (5.17), se halla:

$$\langle V \rangle_0 = K B^2(k) \sum_{ij} S_{ij}^1 (S_{i+1,j}^1 + S_{i,j+1}^1 + S_{i+1,j-1}^1 + S_{i,j-1}^1 + S_{i-1,j+1}^1 + S_{i-1,j}^1) \quad (5.21)$$

Al sumar en (5.21) sobre (i,j) se reproduce el doble de todas las interacciones de primeros vecinos en la "red de celdas".

Luego, podemos reescribir (5.21) como:

$$\langle V \rangle_0 = 2K B^2(K) \sum_{\langle a,b \rangle} S_a S_b \quad (5.22)$$

Así, $\langle V(S) \rangle_0$ engendra una contribución a la interacción renormalizada de primeros vecinos K' :

$$K' = 2K B^2(K) \quad (5.23)$$

Por lo tanto, hasta primer orden, las ecuaciones de renormalización son :

$$K' = 2K B^2(K) \quad (5.24)$$

$$g = g_0 = \text{Im} (e^{3K} + 3e^{-K}) \quad (5.25)$$

Puntos fijos: La ecuación (5.24) presenta 3 puntos fijos, a saber :

$$K^* = 0 \quad (5.26)_a$$

$$K^* = \infty \quad (5.26)_b$$

$$K^* = \frac{1}{4} \ln \left[\frac{\frac{3}{\sqrt{2}} - \epsilon}{\gamma - \frac{1}{\sqrt{2}}} \right] \quad (5.26)_c$$

Interesan sólo aquellos que son inestables. Es decir, los que satisfacen :

$$|(dk'/dk)_*| > 1 \quad (5.27)$$

$$\text{Ahora } \left(\frac{dk'}{dk} \right)_* = 1 + \frac{4}{\sqrt{2}} K^* \left[\frac{\partial B(k)}{\partial k} \right]_* \quad (5.28)$$

Al sustituir (5.26)_a y (5.26)_b en (5.28) se concluye que $K^* = 0$ es marginal ($(dk'/dk)_0 = 1$) y que $K^* = \infty$ es irrelevante ($(dk'/dk)_\infty < 1$). Resta examinar la estabilidad del punto dado por (5.26)_c. La región en el plano $\gamma - \epsilon$ en la cual K^* es positivo e inestable se muestra en la fig. 5.3 como la zona sombreada. Como la condición de inestabilidad es $3\gamma < \epsilon$, en el punto especial $(\gamma, \epsilon) = (1/\sqrt{2}, 3/\sqrt{2})$ tenemos un punto fijo "marginal", que no es ni estable ni inestable. La "x" en la fig. representa la posición que ocupa la "regla de la mayoría".

Exponente γ_T :

$$\text{Sabemos: } \gamma_T = \frac{\ln L}{\ln [(dk'/dk)_*]} \quad (5.29)$$

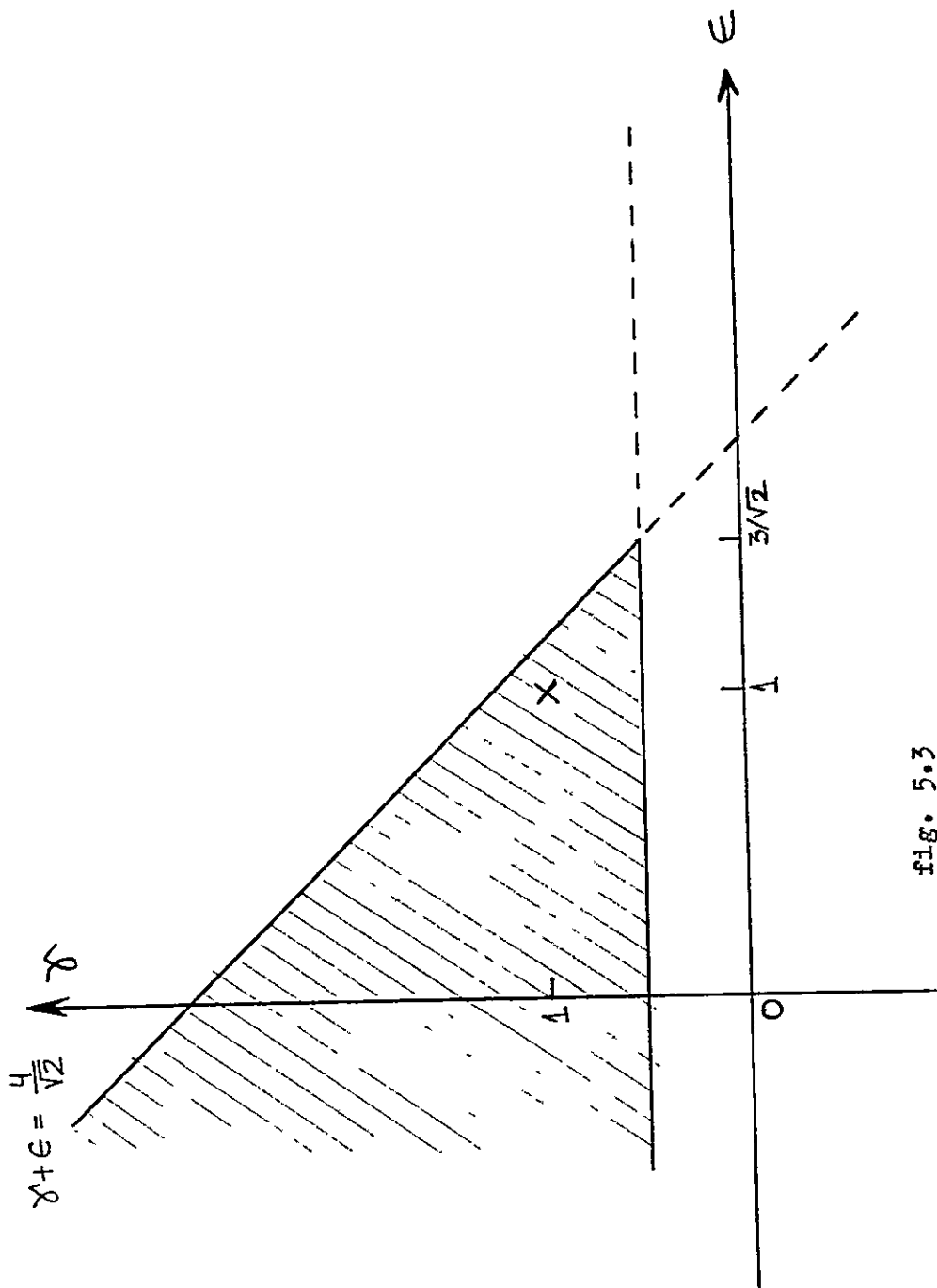


fig. 5.3

aquí $L = \sqrt{3}$. Usando (5.24), obtenemos:

$$Y_T = \frac{\ln \left(1 + \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\frac{3}{\sqrt{2}} - \epsilon}{\gamma - \frac{1}{\sqrt{2}}} \right) \frac{4(3\gamma - \sqrt{2})\gamma\epsilon + \epsilon - \frac{3}{\sqrt{2}}}{3\gamma - \epsilon} \right)}{\ln(\sqrt{3})} \quad (5.30)$$

y claramente, distintas elecciones para γ , ϵ conducirán a diferentes valores para Y_T . Antes de hablar sobre posibles criterios de elección para γ , ϵ calcularemos el exponente impar Y_H .

La parte impar de las ecuaciones G.R. a primer orden, se obtiene a partir del desarrollo (5.12), conservando hasta el término de primer orden. Poniendo $\beta =$ campo magnético, tenemos:

$$\langle \sum_{ij} S_{ij}^1 \rangle_{S^1} = \langle \sum (S_{ij}^1 + S_{ij}^2 + S_{ij}^3) \rangle_0 + \langle \sum (S_{ij}^1 + S_{ij}^2 + S_{ij}^3)(V - \langle V \rangle) \rangle_0 + \dots \quad (5.31)$$

$$= 3 \sum_{ij} \langle S_{ij}^1 \rangle_0 + 3 \sum_{ij} \langle S_{ij}^1 (V - \langle V \rangle) \rangle_0 + \dots \quad (5.32)$$

donde V está dado por (5.3). En el cálculo del segundo término de (5.32) interviene el promedio de dos spines: $\langle S^a S^b \rangle$

$a \neq b$. Tal promedio es (omitiendo índices de celda):

$$\langle S^a S^b \rangle = \frac{\sum \chi(s^1, s) s^a s^b e^{h_0(s)}}{\sum \chi(s^1, s) e^{h_0(s)}} \quad (5.33)$$

$$= (e^{3k} - e^{-k}) / (e^{3k} + 3e^{-k}) \equiv C(k) \quad (5.34)$$

en términos de $B(k)$ y $C(k)$ (5.32) queda como:

$$\langle \sum_{ij} s_{ij}^1 \rangle_{s_1} = 3B(k) [1 + 4k^* (1 + C(k) - 3B^2(k))] \sum_{ij} s_{ij}^1 \quad (5.35)$$

lo anterior implica

$$T_{HH}^* = (dH^1/dH)_* = 3B(k) [1 + 4k(1 + 2C(k) - 3B^2(k))] \quad (5.36)$$

$$\text{Como } Y_H = \ln(T_{HH}^*) / \ln(L) \quad (5.37)$$

entonces, reemplazando en (5.37) todo explícitamente en términos de γ y ϵ , obtenemos para Y_H :

$$Y_H = \frac{\ln \left\{ \frac{3}{\sqrt{2}} \left[1 + 2 \ln \left(\frac{\frac{3}{\sqrt{2}} - \epsilon}{\gamma - \frac{1}{\sqrt{2}}} \left(\frac{\frac{4}{\sqrt{2}} - \gamma - \epsilon}{3\gamma - \epsilon} - \frac{1}{4} \right) \right) \right] \right\}}{\ln(\sqrt{3})} \quad (5.38)$$

Ahora pasamos a discutir posibles criterios para asignar los valores para γ y ϵ .

Elección de γ y ϵ a primer orden

Los exponentes Y_T e Y_H son observables físicos, y por lo tanto no debieran depender de parámetros de libre elección como γ , ϵ . Esto

esperamos sea cierto para una renormalización exacta. Si la renormalización es perturbativa, como en nuestro caso, esperamos que exista una dependencia en los parámetros que disminuya progresivamente al ir tomando en cuenta órdenes mayores en la expansión. Lo que nos concierne en este momento es hallar criterios que puedan usarse orden a orden.

Recordemos en este punto a la función de peso "de celda" $X(S', S)$. En cierto sentido representa la probabilidad de que, dado S' para una celda, la configuración $\{ S \}$ de los spines dentro de esa celda sea mapeada en S' . Supongamos, por ejemplo, que en alguna celda todos los spines están hacia arriba y nos preguntamos por la probabilidad de que sean mapeados a un sólo spin "hacia arriba" ó "hacia abajo" (ver fig. 5.4). Las probabilidades son de $(1/2)(1 + \gamma)$ y $(1/2)(1 - \gamma)$, respectivamente.

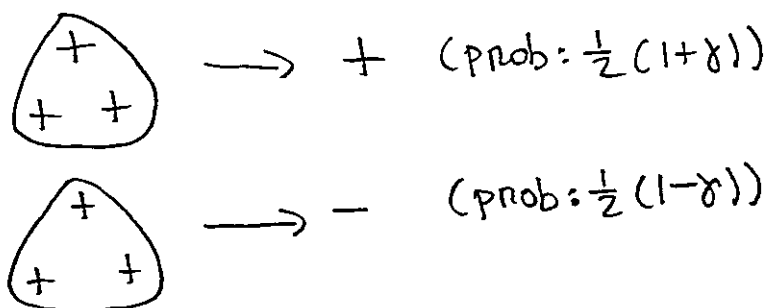


fig.5.4

Lo más natural sería exigir que la probabilidad en el primer caso sea 1 y 0 en el segundo caso, pues de esta manera el estado base de la red original es mapeado en el

estado base de la red renormalizada. Todo lo anterior implica $\gamma = 1$. Este criterio es aplicable a todo orden, como se puede ver. Falta hallar un criterio para ajustar ϵ . Una posibilidad es la siguiente:

En base a desigualdad $\exp(X) > 1 + X$ se puede demostrar que si Z es la función partición de la red original, entonces se cumple:

$$Z \geq \sum_{\{s'\}} e^{G_0 + H_0'(s') + \langle V \rangle_0} \quad (5.39)$$

donde el argumento de la exponencial es justamente el hamiltoniano renormalizado a primer orden. Denotando por $f_1(k)$ a la energía libre obtenida usando las ecuaciones G.R. a primer orden, y $f(k)$ a la energía libre exacta, se tiene, de (5.39):

$$f(k) \geq f_1(k) \quad (5.40)$$

Luego, dado $\gamma = 1$, podríamos tomar ϵ tal que haga que $f_1(k)$ sea máximo, de modo que simule en la mejor forma posible a la energía libre exacta. Usando (5.24) y (5.25) en (3.12), la serie para f_1 es:

$$f_1(k) = \frac{1}{3} \ln(e^{3k} + 3e^{-k}) + \frac{1}{9} \ln(e^{6kB^2} + 3e^{-2kB^2}) + \dots \quad (5.41)$$

$$\text{con } B(K) = \frac{\gamma e^{3K} + \epsilon e^{-K}}{e^{3K} + 3e^{-K}} \quad (5.42)$$

Como \ln crece lentamente, aproximamos (5.41) conservando sólo hasta el segundo término. Dado K , $e^{6KB^2} + 3e^{-2KB^2}$ crece monótonamente con B . Como B es creciente monótonamente con γ y ϵ , significa que $f_1(K)$ es aproximadamente máximo cuando γ, ϵ toman los máximos valores permitidos. Una inspección numérica apoya esta idea pues, para K variando de 0.1 a 1.0, $f_1(K)$ resultó siempre creciente con γ, ϵ . De la fig. 5.3 vemos que el mayor valor permitido para ϵ (cuando $\gamma = 1$) es $(4\sqrt{2}) - 1$.

$$\text{Así, hemos llegado a } \begin{aligned} \gamma &= 1.0 \\ \epsilon &= 1.828 \end{aligned} \quad (5.43)$$

para estos valores, resulta:

$$\begin{aligned} K^* &= 0 \\ \gamma_T &= 0 \\ \gamma_H &= 1.36907 \end{aligned} \quad (5.44)$$

Comparando con los valores exactos⁽³⁾:

$$\begin{aligned} K_c &= 0.27465 \\ \gamma_T &= 1.0 \\ \gamma_H &= 1.875 \end{aligned} \quad (5.45)$$

vemos que el criterio anterior arroja malos resultados.

La mayoría de los autores impone una severa restricción sobre $P(S',S)$ desde la partida: $P(S',S) > 0$. Con esto se aseguran que el miembro derecho de (5.13) sea siempre positivo y, por tanto, el hamiltoniano renormalizado sea siempre real. Es claro que esta es una condición suficiente pero no necesaria para conseguirlo. Si imponemos $P(S',S) > 0$, el mayor ϵ es 1. Es decir, se tiene:

$$\gamma = \epsilon = 1.0 \quad (5.46)$$

conocida también como la "regla de la mayoría". Usando (5.46), obtenemos:

$$\begin{aligned} K^* &= 0.3356 && (22\% \text{ error }) \\ Y_T &= 0.8822 && (6\% \text{ error }) \\ Y_H &= 2.0340 && (9\% \text{ error }) \end{aligned} \quad (5.47)$$

Resultado marcadamente superior al obtenido en (5.44).

Como dato anecdotico, vale consignar que los valores "óptimos" para γ y ϵ , es decir, aquellos que dan los valores exactos para Y_T e Y_H son:

$$\begin{aligned} \gamma_{op} &= 1.0984 \\ \epsilon_{op} &= 0.773 \end{aligned} \quad (5.48)$$

relativamente cercanos a la "regla de la mayoría".

Segundo orden:

Ahora calculamos la parte parte de las ecuaciones G.R. hasta segundo orden.

Hay que evaluar: $\frac{1}{2!} \langle V^2 - \langle V \rangle_0^2 \rangle_0$

con V dado por (5.3). Esto involucra una suma de términos tipo

$$\frac{K^2}{2} \sum_{\substack{i,j \\ a,b}} \sum_{\substack{k,l \\ c,d}} \left\{ \langle S_i^a S_j^b S_k^c S_l^d \rangle - \langle S_i^a \rangle \langle S_j^b \rangle \langle S_k^c \rangle \langle S_l^d \rangle \right\} \quad (5.49)$$

donde i, j, k, l son celdas, siendo i, j vecinas entre sí y, similarmente k, l . Sólo contribuyen en (5.49) los casos en que i, j, k, l forman una cadena conectada de 2 pares de celdas con al menos una celda en común. La fig. 5.5 muestra algunos posibles arreglos para las celdas que arrojan contribuciones no nulas en (5.49). El caso (a) origina contribuciones a la interacción de primeros vecinos. En los casos (b) y (c) obtenemos contribuciones a interacciones de segundos vecinos (cuya constante de acoplamiento designaremos por L') y en (c), aparece una contribución a una interacción de terceros vecinos (cuyo acoplamiento designaremos por M'). Los resultados son las siguientes contribuciones a segundo orden:

$$(K')_2 = 4B^2 K^2 (1 + C - 2B^2) \quad (5.50)$$

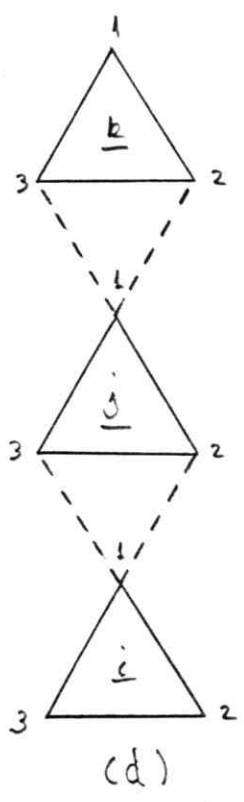
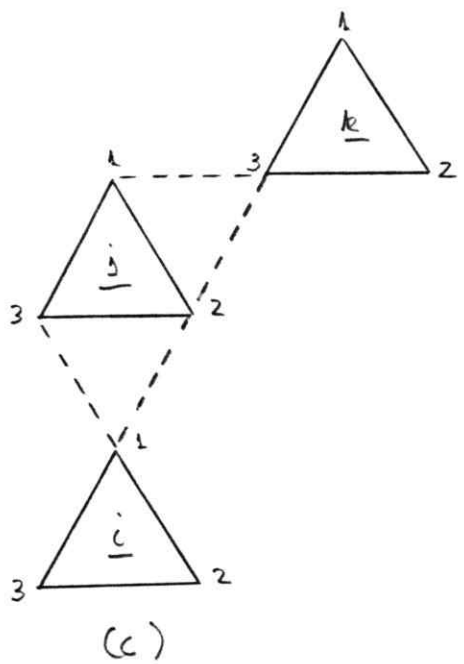
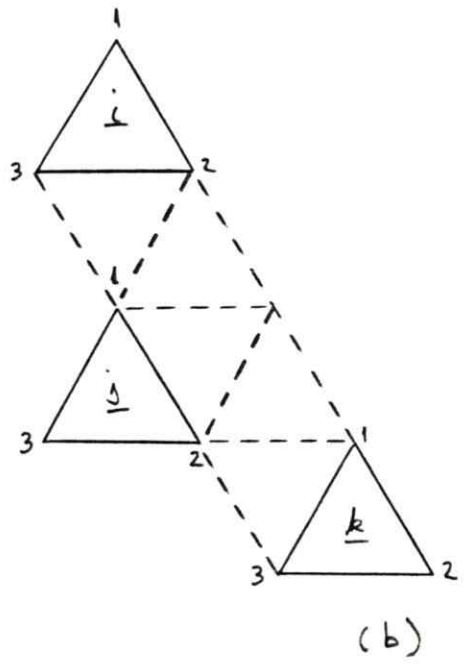
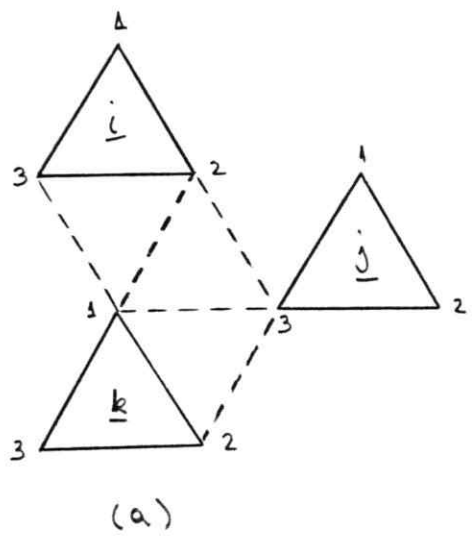


fig. 5.5

$$(L')_2 = B^2 K^2 (1 + 7C - 8B^2) \quad (5.51)$$

$$(M')_2 = 4B^2 K^2 (C - B^2) \quad (5.52)$$

Así, a segundo orden, nuevas interacciones han sido generadas. Esto no debe preocuparnos en exceso pues, debido al fenómeno de universalidad, el comportamiento crítico será el mismo. Si consideramos el acoplamiento a primeros vecinos K , como cantidad de primer orden entonces L' y M' son de segundo orden en K y cualquier otra interacción, de orden superior. Para que el cálculo sea completo a segundo orden hay que reintroducir los acoplamientos L y M en el acumulante de primer orden. Es decir, sumamos a V los términos V_L y V_M , definidos por:

$$V_L = L \sum_{ij} S_D^1 (S_{i-1,j+1}^1 + S_{i+1,j}^1 + S_{i,j-1}^1) + S_D^2 (S_{i-1,j+1}^2 + S_{i+1,j}^2 + S_{i,j-1}^2) + S_D^3 (S_{i-1,j+1}^3 + S_{i+1,j}^3 + S_{i,j-1}^3) \quad (5.53)$$

$$V_M = M \sum_{ij} S_D^1 (S_{i-1,j+2}^1 + S_{i+1,j}^1 + S_{i-1,j}^1) + S_D^2 (S_{i,j+1}^2 + S_{i+2,j-1}^2 + S_{i,j-1}^2) + S_D^3 (S_{i-1,j+1}^3 + S_{i+1,j-1}^3 + S_{i-1,j-1}^3) \quad (5.54)$$

obtenemos así contribuciones adicionales de primer orden a K' y L' :

$$(K')_1 = 3LB^2 + 2MB^2 \quad (5.55)$$

$$(L')_1 = MB^2 \quad (5.56)$$

Sumando las contribuciones de primer y segundo orden, obtenemos las ecuaciones G.R. completas a segundo orden:

$$K^1 = 2KB^2 + 3LB^2 + 2MB^2 + 4B^2K^2(1+C-2B^2) \quad (5.57)$$

$$L^1 = MB^2 + K^2B^2(1+7C-8B^2) \quad (5.58)$$

$$M^1 = 4B^2K^2(C-B^2) \quad (5.59)$$

donde B y C están definidos en (5.20) y (5.35):

$$B = (\gamma e^{3k} + \epsilon e^{-k}) / (e^{3k} + 3e^{-k}) \quad (5.20)$$

$$C = (e^{3k} - e^{-k}) / (e^{3k} + 3e^{-k}) \quad (5.35)$$

donde γ , ϵ son parámetros libres.

Cálculo del bloque par de la matriz T^*

Tomando derivadas parciales en (5.57), (5.58) y (5.59), los elementos de matriz $T_{\alpha\beta}^* = (dK'_\alpha / dK'_\beta)^*$ resultan:

$$(\partial K' / \partial K)^* = B_*^2 \left\{ (2K + 3L + 2M)\Delta + (1 + C - 2B^2)(4K^2\Delta + 8K) + 2 + 4K^2(C\Box - 2B^2\Delta) \right\}^* \quad (5.60)$$

$$(\partial K' / \partial L)^* = 3B_*^2 \quad (5.61)$$

$$(\partial K' / \partial M)^* = 2B_*^2 \quad (5.62)$$

$$(\partial L' / \partial K)^* = B_*^2 \left\{ M\Delta + (1 + 7C - 8B^2)(K^2\Delta + 2K) + K^2(7C\Box - 8B^2K) \right\} \quad (5.63)$$

$$(\partial L' / \partial L)^* = 0 = (\partial M' / \partial L)^* = (\partial M' / \partial M)^* \quad (5.64)$$

$$(\partial L' / \partial M)^* = B_*^2 \quad (5.65)$$

$$(\partial M' / \partial K)^* = B_*^2 \left\{ (C - B^2)(4K^2\Delta + 8K) + 4K^2(C\Box - B^2\Delta) \right\} \quad (5.66)$$

donde hemos definido

$$\Delta = 2 \left(\frac{3\gamma e^{3k} - \epsilon e^{-k}}{\gamma e^{3k} + \epsilon e^{-k}} - 3c \right) \quad (5.67)$$

$$\square = \left(\frac{3e^{3k} + e^{-k}}{e^{3k} - e^{-k}} - 3c \right) \quad (5.68)$$

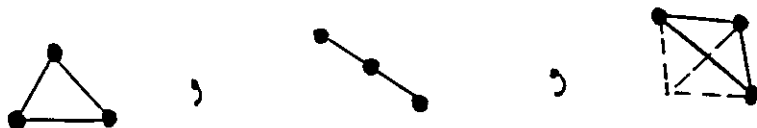
y es claro que los posibles autovalores de esta matriz dependerán de los valores que demos a γ y ϵ .

Cálculo del bloque impar de T *

Los elementos del bloque impar se obtienen haciendo uso de (5.12) y del punto fijo (par) de las ecuaciones (5.57)-(5.59). Partimos poniendo $\beta =$ clase de "un sitio" y evaluamos:

$$\frac{1}{2} \langle (\sum S_b) (V^2 - \langle V^2 \rangle) \rangle_0 + \langle (\sum S_b) (\langle V \rangle_0^2 - V \langle V \rangle_0) \rangle_0$$

con $V = V(k)$ solamente. Como resultado se obtienen contribuciones a las siguientes interacciones impares (no presentes inicialmente):



Imponiendo un criterio de truncamiento análogo al

empleado en la parte par de T^* , consideramos estas nuevas interacciones como de segundo orden en K . Para ser consistente hasta segundo orden, se reintroducen en (5.12) hasta primer orden, pero ahora tomando V par completo, es decir, $V = V(K, L, M)$.

Así, el bloque impar de T^* resulta de 16 elementos. El cálculo completo de estos elementos de matriz implica considerar un gran número de términos (del orden de 10^3), y no fue completado debido al poco tiempo disponible. Sólo se calculó el elemento T_{HH}^* que resultó ser:

$$T_{HH}^* = 3B_* + 6B_*(2K+3L+3M)_*(1+2C-3B^2)_* + \\ + 3K^2 \left\{ BC(47+60C) + D + 6B(2-15B^2C-5B^2) \right\}_* \quad (5.69)$$

donde D proviene del promedio del producto de 3 spines en una celda:

$$\langle S_U^1 S_U^2 S_U^3 \rangle = D S_U^1$$

$$\text{con } D = (\gamma e^{3K} - 3\epsilon e^{-K}) / (e^{3K} + 3e^{-K}) \quad (5.70)$$


Elección de γ y ϵ a segundo orden

Ya no podemos aplicar el criterio "termodinámico" que usamos a primer orden ya que está basado en la desigualdad (5.40) que sólo es válida a primer orden. Existe, sin embargo, otro criterio basado en el comportamiento asintótico de la función de correlación⁽⁴⁾. Se puede demostrar que existen conexiones entre los exponentes Y_H e Y_T y ciertas componentes de los autovectores izquierdos de T^* . Para el caso de la red triangular, las relaciones son:

$$L^{d-\gamma_H} \phi_S^H = \frac{3}{4} (\gamma + \epsilon) \phi_S^H + \frac{(\gamma - 3\epsilon)}{4} \phi_t^H \quad (5.71)$$

$$L^{d-\gamma_T} \phi_{(1)}^T = \frac{(\gamma + \epsilon)^2}{16} [2\phi_{(1)}^T + 3\phi_{(2)}^T + 2\phi_{(3)}^T + 2\phi_{(4)}^T] + \frac{(\gamma + \epsilon)(\gamma - 3\epsilon)}{8} [2\phi_{\Delta}^T + \phi_{\triangle}^T] + \frac{(\gamma - 3\epsilon)^2}{16} \phi_{\triangle\triangle}^T \quad (5.72)$$

con ϕ_S^H : componente "1-sitio" del autovector izquierdo relevante del bloque impar de T^* .

ϕ_t^H : componente "3-sitios" () del autovector izquierdo relevante del bloque impar de T^* .

$\phi_{(l)}^T$: componente de l-ésimo vecino del autovector izquierdo relevante del bloque par de T^* .

Por último Δ y \triangle simbolizan "cuartetos" de spines y $\triangle\triangle$ a un "sexteto" de spines.

Así surge el siguiente criterio para asignar γ y ϵ :
escoger γ y ϵ tales que las expresiones para Y_H e

Y_T coincidan con aquellas que se extraen de las ecuaciones G.R. de segundo orden. Sin embargo tenemos un problema, puesto que no tenemos el bloque impar de T^* . Por otro lado, en (5.72) aparecen 4 interacciones pares que no tenemos a segundo orden. Como el reintroducirlas en el hamiltoniano haría larguísimo el cálculo, optamos por aproximar (5.72) por:

$$L^{d-\eta_T} \phi^T_{(i)} \simeq \frac{(\gamma+\epsilon)^2}{16} [2\phi^T_{(1)} + 3\phi^T_{(2)} + 2\phi^T_{(3)}] \quad (5.73)$$

De (5.73) podemos despejar Y_T en términos de los elementos de matriz del bloque par como:

$$\eta_T = \ln(\lambda_T) / \ln(\sqrt{3}) \quad (5.74)$$

con

$$\lambda_T = \frac{-\left(3T_{KL}^* + 2T_{KM}^* - \frac{3}{\alpha^2}\right) + \left\{\left(3T_{KL}^* + 2T_{KM}^* - \frac{3}{\alpha^2}\right)^2 - 16T_{KL}^* T_{LM}^*\right\}^{1/2}}{4} \quad (5.75)$$

y donde T_{KL} , T_{KM} y T_{LM} vienen dados por

$$(5.61), (5.62) \text{ y } (5.65) \quad \text{y} \quad \alpha = (\gamma + \epsilon) / 4$$

Imponiendo igualdad entre (5.74) y el Y_T extraído

directamente del bloque par resulta una ecuación entre γ y ϵ .

Como no contamos, por el momento, con el análogo impar, ponemos $\gamma = 1.0$, elección que parece justificada según se discutió antes, y nos quedamos así con una ecuación que determina ϵ .

$$\text{El resultado es: } \epsilon = 1.115 \quad (5.76)$$

Con esto, el punto fijo se halla en:

$$K = 0.2986 \quad ; \quad L = -0.0272 \quad ; \quad M = -0.0221 \quad (5.77)$$

Bastante cercano al eje "Ising puro". El exponente Y_T resulta:

$$Y_T = 1.024 \quad (2\% \text{ error}) \quad (5.78)$$

Como el punto fijo está tan cercano al eje Ising, tiene sentido aproximar la superficie crítica por un plano tangente en el punto fijo. Este plano corta al eje Ising en :

$$K_c = 0.2581 \quad (5.9\% \text{ error}) \quad (5.79)$$

Para el caso de la "regla de la mayoría" ($\gamma = \epsilon = 1$) resulta:

$$Y_T = 1.0426 \quad (4\% \text{ error})$$

VI. CONCLUSIONES

Aunque los resultados obtenidos en V están lejos de ser concluyentes, son bastante sugerentes y confirman la importancia de la renormalización paramétrica, enfoque que no es mencionado a menudo en la literatura corriente sobre renormalización. La razón puede estribar en que, para celdas grandes, la función de peso más general constará de muchos parámetros y el poder ajustarlos requiere posiblemente del cálculo de un número creciente de funciones de correlación. Así, el método que se ha mostrado sólo es práctico para sistemas que puedan ser subdivididos en celdas pequeñas. Como cada celda es reemplazada por un sitio mediante la transformación de renormalización, si la celda es pequeña, el cambio es menos "brusco" y, por tanto, es posible que describa de manera más precisa la situación cerca de la criticalidad. más aún, como se trabaja con la aproximación acumulante, el tener celdas pequeñas reduce la cantidad de interacciones intraceldas y por tanto, se reduce también el volumen de cálculo algebraico en general.

Los resultados del primer orden parecen indicar que

la "regla de la mayoría" es la mejor elección para la función de peso. El criterio "termodinámico" falló en predecir esto, aunque no es de extrañar ya que una mera desigualdad para la energía libre no dice nada sobre la termodinámica, la cual depende de las derivadas de $f(K)$.

A segundo orden, el criterio de ajustar uno de los parámetros usando la forma asintótica de la función de correlación trabajó muy bien, considerando que se hizo una aproximación extra. Creo que este tipo de criterio, que se podría considerar como de autoconsistencia, trabajaría bien a todo orden. Parece claro, sin embargo que usar aproximación acumulante más allá de segundo orden implicaría demasiado cálculo algebraico como para ser un método práctico; a no ser que uno se ayude con un lenguaje computacional simbólico (REDUCE, MAXIMA). Aún si se cuenta con tal ayuda, es posible que no convenga ir a órdenes muy altos, pues la convergencia de la serie acumulante es dudosa (algunos autores conjeturan que se trata de una expansión asintótica).

Sería interesante poder hacer el cálculo del bloque impar de la matriz T^* con todos los términos que ello implicaría (alrededor de 1000), y así poder ajustar ambos parámetros γ y ϵ simultáneamente, usando funciones de correlación. Un cálculo análogo para la red Ising sería directo pues si la subdividimos en celdas

de 4 spines, la función de peso dependerá también de dos parámetros.

REFERENCIAS

- (1) L.P. Kadanoff, Physics 2, (1966) 263
- (2) B. Widom, J. Chem. Phys. 43, 3982 (1965)
C. Domb and D. Hunter, Proc. Phys. Soc. 86, 1147 (1965)
- (3) Wannier, Phys. Rev. 79, 357 (1950)
Houtappel, Physica 16, 425 (1950)
Husini and Syozi, Prog. Theor. Phys. 5, 177, 341 (1950)
Newell, Phys. Rev. 79, 876 (1950)
Temperley, Proc. Roy. Soc. A 202, 202 (1950)
- (4) Niemeijer, Th. and J.M.J. Van Leeuwen, 1976 in
Phase Transitions and Critical Phenomena, edited by
C. Domb and M.S. Green (Academic, London), vol 6.
- otra referencia útil sobre renormalización en
espacio real es:
- Bambi Hu, Phys. Rep. 91, 234 (1982)
- (5) Rushbrooke, G.S. , 1963, J. Chem. Phys., 39, 842
Griffiths, R.B., 1965, Phys. Rev. Lett. 14, 623
- (6) L.P. Kadanoff, Rev. Mod. Phys. 49, 267-296 (1977)
- (7) C.N. Yang and T.D. Lee, Phys. Rev. 87, 404, 410 (1952)