

UNIVERSIDAD DE GRANADA

FACULTAD DE CIENCIAS



DEPARTAMENTO DE FISICA APLICADA

**CAMBIOS DE FASE EN SISTEMAS
RETICULARES FUERA DEL EQUILIBRIO
EN REGIMEN ESTACIONARIO**

PEDRO LUIS GARRIDO GALERA

TESIS DOCTORAL
GRANADA 1988



Biblioteca Universitaria de Granada



01611485



UNIVERSIDAD DE GRANADA
FACULTAD DE CIENCIAS

DON JUAN DE DIOS PEREZ JIMENEZ, PROFESOR Y
SECRETARIO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE -
LA UNIVERSIDAD DE GRANADA

Núm. 705

CERTIFICO: Que la presente Tesis Doctoral
corresponde a la defendida por D. Pedro -
Luis Garrido Galera, ante el Tribunal co-
rrespondiente que fue aprobado en Comi- -
sión de Doctorado celebrada el 9 de Marzo
de 1.988, obteniendo la calificación de -
Apto "cum laude" el 22 de Abril de 1.988,
siendo el tema "Cambios de Fase en Siste-
mas Reticulares Fuera del Equilibrio en -
Regimen Estacionario".

Y para que conste y surta los efec-
tos oportunos se expide la presente con -
el visto bueno del Ilmo. Sr. Decano en -
Granada a trece de Mayo de mil novecien--
tos ochenta y ocho.

Vº Bº
EL DECANO,

Carb, ll



J. D. Pérez

Esta Tesis Doctoral corresponde a la defendida por D. Pedro Luis Garrido Galera, para optar al grado de Doctor en Física, el día 22 de Abril de 1988, juzgada por el tribunal constituido por:

Presidente: Prof. Gerardo Pardo Sánchez
Catedrático de Física Aplicada
Dpto. de Física Aplicada.
Universidad de Granada.

Secretario: Prof. Jesús Biel Gayé
Catedrático de Física Aplicada
Dpto. de Física Aplicada.
Universidad de Granada.

Vocales: Prof. Maximino San Miguel Ruibal
Catedrático de Física Teórica
Departamento de Física.
Universidad de las Islas Baleares.

Prof. Jorge Wagensberg Lubinski
Prof. Titular
Departamento de Física Fundamental.
Universidad de Barcelona.

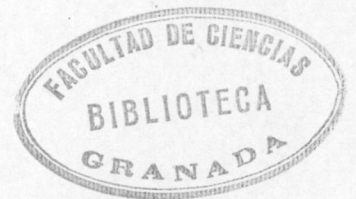
Prof. Jesús Sánchez Dehesa
Catedrático de Física Atómica
Departamento de Física Moderna.
Universidad de Granada.

R. 34960

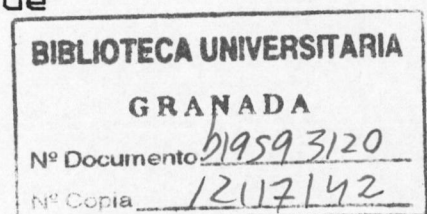
T-16/98

T
11
83

CAMBIOS DE FASE EN SISTEMAS RETICULARES
FUERA DEL EQUILIBRIO EN REGIMEN ESTACIONARIO



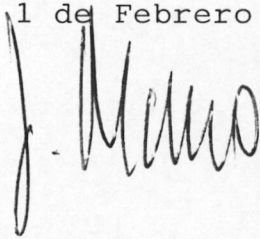
TESIS DOCTORAL
presentada por
PEDRO LUIS GARRIDO GALERA
para obtener el grado de
DOCTOR EN FISICA



DEPARTAMENTO DE FISICA
APLICADA
UNIVERSIDAD DE GRANADA
Febrero 1988.

Joaquin Marro Borau, Catedrático de Física Aplicada de la Universidad de Granada, CERTIFICA: que este trabajo ha sido realizado bajo mi dirección y constituye la Tesis Doctoral de D. Pedro Luis Garrido Galera.

Granada, 1 de Febrero de 1988.



Joaquin Marro Borau

II

En primer lugar, quiero expresar mi más profundo agradecimiento y cariño a mis padres que, en todo momento, me han apoyado en la realización de esta memoria.

Quiero también hacer público mi agradecimiento a mi director de tesis, D. Joaquin Marro, por su amistad e interés, sus enseñanzas, su constante dedicación y por el magnífico ambiente de trabajo con que hemos desarrollado esta tesis.

Agradezco asimismo a mis compañeros R.Toral (ahora en Temple University), J.L.Vallés (ahora en el Courant Institute of Math. Sc.), A.Labarta (U.Barcelona), J.M.González-Miranda (U.Barcelona) y A. López (U.Granada) por su amistad, apoyo y enseñanzas recibidas.

Agradezco también por sus críticas, comentarios y ánimos a los profesores: J.L.Lebowitz (Rutgers Univ.), A.Sokal (NYU), M.Zhang (NYU), H.Van Beijeren (Inst.Theoretische Physik), H.Spohn (U.München), L.M.Garrido (U.Barcelona), R.Dickman (NYU) y J.Biel (U.Granada).

Por último, quiero agradecer al antiguo Departamento de Física Teórica y al Departamento de Física Fundamental de la Universidad de Barcelona, al Departamento de Física Aplicada y a la residencia "Carmen de La Victoria" de la Universidad de Granada, su admisión en los mismos y, a todos los compañeros y amigos que ahí trabajan, por el ambiente agradable con que han sabido rodearme durante el periodo de realización de esta tesis.

III

Indice

I. <u>Introducción, motivación y conclusiones</u>	1
II. <u>Definiciones</u>	9
III. Modelos de Ising con interacciones anisotrópicas y perfil de temperaturas no uniforme : equilibrio local.	
III.1. Modelo.....	15
III.2. Caso unidimensional	
III.2.1. Interacciones entre vecinos proximos.	19
III.2.2. Interacciones tipo campo medio. Ecuaciones básicas.....	21
III.2.2.1. Diferentes perfiles de temperaturas.....	22
III.2.2.2. Relajación del sistema.....	29
III.2.3. Influencia de las probabilidades de transición.....	31
III.3. Caso bidimensional	
III.3.1. Interacciones entre vecinos próximos. Solución de orden cero.....	34
III.3.2. Interacciones tipo campo medio en una de las direcciones principales de la red.	
III.3.2.1. Ecuaciones generales.....	35
III.3.2.2. Aproximación de acoplamiento débil.....	38
III.3.2.3. Pequeñas desviaciones respecto al equilibrio.....	41

IV

III.3.3. Interacciones tipo campo medio en las dos direcciones principales de la red. Ecuaciones básicas.....	44
III.3.4. Impurezas.....	45
III.4. Conclusiones.....	48
<u>IV. Modelo con temperaturas compitiendo localmente.</u>	
IV.1. Modelo básico.....	51
IV.2. Interacciones tipo campo medio.....	54
IV.3. Caso unidimensional	
IV.3.1. Solución exacta para varias probabilidades de transición: Temperatura efectiva.....	60
IV.3.2. Tratamiento estadístico de la cinética de agrupaciones en modelos con inversión de espines.	
IV.3.2.1. Teoría.....	64
IV.3.2.2. Aplicación al modelo de la sección IV.1. en el caso de una dimensión.....	76
IV.4. Caso bidimensional	
IV.4.1. Cinética de agrupamientos locales.....	78
IV.4.2. Correlaciones aproximadas.....	83
IV.4.3. Comparación con un experimento Monte Carlo.....	87
IV.5. Conclusiones.....	90
<u>V. Modelo de Reacción-Difusión.</u>	
V.1. Definición del modelo.....	91
V.2. Formulación del problema en el límite $\Gamma \rightarrow \infty$..	94
V.3. Solución exacta del modelo $\Gamma \rightarrow \infty$ para diferentes probabilidades de transición en d-dimensiones.	
V.3.1. Probabilidad de transición tipo Glauber.	99

V.3.2.	Probabilidad de transición tipo Glauber modificado.....	100
V.3.3.	Probabilidad de transición genérica....	101
V.3.4.	Probabilidad de transición tipo Kawasaki	102
V.3.5.	Probabilidad de transición tipo Metropolis.....	106
V.3.6.	Probabilidad de transición con campo magnético externo.....	111
V.4.	Algunos teoremas generales.....	113
V.4.1.	Imposibilidad de cambio de fase en sistemas antiferromagnéticos.....	114
V.4.2.	Condiciones generales para la existencia de cambio de fase en una dimensión.	116
V.5.	Comparación con los resultados de una simulación por ordenador.....	118
V.6.	Conclusiones.....	125
VI.	<u>Modelo de Superconductor Iónico (SCI).</u>	
VI.1.	Introducción y definición del modelo.....	127
VI.2.	SCI unidimensional.	
VI.2.1.	Introducción.....	131
VI.2.2.	Cinética de agrupamientos locales: mecanismo de intercambio.....	132
VI.2.3.	Solución del SCI unidimensional.....	136
VI.2.3.1.	Evolución en el tiempo.....	140
VI.2.3.2.	Corriente y conductividad.....	141
VI.2.3.3.	Calor específico.....	153
VI.3.	Estudio del modelo de SCI en dos dimensiones.	
VI.3.1.	Introducción.....	156
VI.3.2.	Modelo de SCI de Van Beijeren-Schulman (VBS) generalizado.....	158

VI

VI.3.2.1. Resolución de la ecuación maestra (VI3.6). Ω -expansion.....	161
VI.3.2.2. Cálculo de la probabilidad de transición dada por (VI3.7).....	169
VI.3.2.3. Resultados.....	178
VI.3.3. Modelo de SCI generalizado.....	186
VI.3.3.1. Densidad $n=0,5$.	
VI.3.3.1.1. Parámetro de orden. Temperatura crítica.....	193
VI.3.3.1.2. Energía.....	201
VI.3.3.1.3. Parámetro de anisotropía y parámetro de orden de corto alcance.....	207
VI.3.3.1.4. Corrientes.....	211
VI.3.3.2. Densidad $n=0,1$	214
VI.3.3.2.1. Parámetro de orden. Temperatura crítica.....	215
VI.3.3.2.2. Energía.....	218
VI.3.3.2.3. Parámetro de orden de corto alcance y corrientes.....	221
VI.3.3.3. Metaestabilidad: algunos comentarios.....	223
VI.4. Conclusiones.....	225
Apéndice I: Un nuevo modelo anisotrópico para situaciones de equilibrio que puede resolverse exáctamente en presencia de un campo externo arbitrario.	
<hr/>	
I.1. Introducción.....	229
I.2. Interacciones entre vecinos próximos y campo coherente.....	231
I.3. Interacciones antiferromagnéticas.....	242
I.4. Sistema multidimensional en la aproximación de campo coherente.....	245
Referencias.....	251

Naturaleza es tu reflejo;
como tú, me presenta sus bellezas
y como tú, me oculta sus misterios.

I. INTRODUCCION, MOTIVACION Y RESUMEN DE CONCLUSIONES.

La teoría física actual centra sus esfuerzos en el estudio de los estados de equilibrio que, casi por definición, son más sencillos que cualesquiera otros. Pero este énfasis no se corresponde con la observación de que la mayoría de los sistemas macroscópicos naturales están alejados del estado de equilibrio termodinámico. Este alejamiento puede tener diversas causas; por ejemplo, es consecuencia, unas veces, de perturbaciones externas y de la relación que existe entre tiempos de relajación y tiempos característicos de observación y, otras veces, de las ligaduras (de no-equilibrio) que impone el entorno del sistema sobre éste, ligaduras que implican una corriente de alguna magnitud extensiva a través del sistema en cuestión. En estos últimos casos, el sistema puede encontrarse en un estado estacionario de no-equilibrio que, a diferencia del estado de equilibrio termodinámico, también estacionario, no es necesariamente único y puede depender de la historia del sistema.

El estudio de estos estados estacionarios constituye el objeto de esta tesis. Ha de notarse que, a pesar de que los estados estacionarios de no-equilibrio (EENE) constituyen, en efecto, las situaciones más sencillas de no-equilibrio, no puede hablarse todavía de una teoría general adecuada, ni

macroscópica ni mecanico-estadística, en la que los estados de equilibrio deberían de aparecer como un caso particular de estados estacionarios. Por ejemplo, la teoría de las colectividades de Gibbs, que constituye una herramienta extraordinariamente eficaz en mecánica estadística para estudiar las propiedades de los sistemas macroscópicos en equilibrio con un hamiltoniano bien definido, no puede aplicarse a EENE donde no se dispone de criterios a priori para construir colectividades apropiadas ni, generalmente, de hamiltonianos adecuados. En consecuencia, hoy sólo puede hablarse en este campo de un conjunto de métodos, generalmente aproximados, para tratar aspectos parciales del problema o sistemas muy determinados. Esta evidente ausencia de una teoría general de EENE supone un reto para el físico teórico que ha estimulado notablemente su actividad durante los últimos años. Estos estudios vienen condicionados también por su interés práctico, consecuencia de que los EENE son extraordinariamente frecuentes en la física de la materia condensada y en otros muchos campos de la Física y de la Química, la Biología, la Geología, etc., y su estudio es necesario a menudo en relación con importantes aplicaciones.

El estudio de EENE puede también motivarse mediante un argumento, más específico, que permite adelantar el enfoque de nuestro trabajo. El principio de máxima entropía de la teoría del equilibrio establece cómo la evolución natural de un sistema termodinámico conduce al estado de equilibrio. En particular, la entropía de un sistema aislado no puede dismi-

nuir, de modo que cualesquiera cambios conducen finalmente a un estado único, el de equilibrio termodinámico, caracterizado por el valor máximo de la entropía compatible con unas condiciones determinadas, hecho que impide la formación de estructuras ordenadas de baja entropía. La situación es distinta en el caso de sistemas cerrados, que pueden intercambiar energía con los alrededores, o de sistemas abiertos, que pueden también intercambiar materia: un sistema abierto en contacto con recipientes a distintas temperaturas, presiones y potenciales químicos para cada especie, alcanzará finalmente un estado estacionario que podría presentar un alto grado de orden. Si pueden conseguirse valores únicos, globales, para la temperatura, presión y potencial químico de cada especie, el estado final será de equilibrio, como para el sistema aislado, correspondiente al extremo (máximo o mínimo) del potencial termodinámico cuyas variables naturales coincidan con las variables que definen los distintos reservorios. Pero, al contrario que para el sistema aislado, esta situación es compatible con la aparición de estados ordenados de baja entropía, tales como cristales, cuando la temperatura es suficientemente baja y sólo están apreciablemente ocupados los estados del sistema de energías más bajas.

Se sigue inmediatamente que, con objeto de profundizar en la comprensión del orden que muestra la Naturaleza, es más interesante el estudio de sistemas abiertos en equilibrio que el de sistemas aislados; de hecho, esta observación justifica la popularidad de la teoría de los cambios de fase durante

los últimos cuarenta años. Es claro también, sin embargo, que estudiando sólo situaciones de equilibrio no puede llegar a explicarse la formación de esas estructuras extraordinariamente complejas y ordenadas que aparecen por doquier en la Naturaleza a temperaturas ordinarias; se trata de estructuras de muy baja entropía que, aparentemente, violan el segundo principio de la Termodinámica. Con objeto de comprender estas situaciones es necesario reconocer que, cuando no se consiguen valores únicos para la temperatura, presión y potenciales químicos en un sistema abierto, sino gradientes, se llegará a un estado estacionario de no-equilibrio con un cambio global para la entropía $\Delta S = \Delta S_e + \Delta S_i$ consecuencia, respectivamente, del intercambio con los alrededores y de la producción interna debida a los procesos irreversibles que ocurren en el sistema. Es decir, un flujo de entropía negativo, $-\Delta S_i = \Delta S_e < 0$, puede, en principio, mantener un estado estacionario ($\Delta S = 0$) de no-equilibrio de baja entropía. Este orden fuera del equilibrio se presenta, por ejemplo, cuando un sistema inicialmente homogéneo es sometido a un gradiente de temperatura, capaz de producir y mantener una separación de materia que implica una disminución de entropía respecto del estado inicial; un mecanismo semejante origina sin duda el alto grado de orden que caracteriza a los sistemas vivos.

En este trabajo estudiamos con detalle y rigor una serie de sistemas físicos matemáticamente bien definidos que, además de presentar un innegable interés práctico, casi siempre

constituyen una base firme para comprender las propiedades generales de los EENE. Haremos un énfasis en el estudio de sistemas reticulares y, en concreto, en ciertas variantes del popular modelo de Ising definidas de modo que presenten EENE.

El trabajo está organizado como sigue. En el CAPITULO II introducimos los conceptos y ecuaciones generales que se utilizan a lo largo de toda la memoria. En el CAPITULO III tratamos un modelo reticular bidimensional, tipo Ising, con interacciones diferentes a lo largo de cada eje principal, sobre el que actúa un mecanismo externo que provoca la aparición de un perfil de temperaturas no uniforme en el baño térmico que siempre se supone interaccionando (estocásticamente) con el sistema. Hemos resuelto este modelo analíticamente y numéricamente bajo diferentes hipótesis, llegando a revelar así una extraordinaria variedad y riqueza de los EENE y de sus cambios de fase; también estudiamos la relajación del sistema en algunos casos típicos. En el CAPITULO IV tratamos un modelo reticular en el que compiten localmente varias temperaturas y que, al igual que en el modelo del capítulo anterior, presenta comportamientos macroscópicos muy variados, dependiendo de la dimensión y de la magnitud de los parámetros que caracterizan la acción de los agentes externos. En el CAPITULO V presentamos un modelo de "reacción-difusión", más concretamente, un modelo de Ising que evoluciona bajo la acción combinada de una dinámica de inversión de espines y otra de intercambio de espines. El sistema, como los anteriores, está descrito por una ecuación maestra que,

en cierto límite y reescalando adecuadamente el espacio y el tiempo, se convierte en una ecuación macroscópica de tipo hidrodinámico que resolvemos exáctamente para varias clases de probabilidades de transición y cualquier dimensión. Por último, en el CAPITULO VI tratamos analíticamente un sistema fuera del equilibrio que tiene una extraordinaria importancia práctica: se trata de un modelo de superconductor iónico, del que estudiamos sus propiedades microscópicas y macroscópicas en una y dos dimensiones, presentando nuevas técnicas para el estudio de fenómenos fuera del equilibrio.

Las conclusiones más generales que se siguen de este trabajo giran entorno a tres propósitos fundamentales:

* Para introducirnos con cierto rigor en el estudio de los EENE, es necesario construir modelos bien definidos. En nuestro caso, usamos modelos reticulares puesto que, de acuerdo con la experiencia acumulada durante su utilización en el estudio de problemas del equilibrio, sabemos que son relativamente sencillos de tratar y, a la vez, suficientemente complejos como para ilustrar una gran cantidad de fenómenos físicos.

* Investigamos los cambios de fase (de no-equilibrio) que se presentan en estos modelos puesto que, a semejanza de lo que ocurre en el equilibrio, esperamos que conduzcan a obtener, al menos a medio plazo, sino inmediatamente, información global y universal que permita caracterizarlos y clasificarlos atendiendo a sus rasgos más fundamentales desde el punto de vista de una teoría

general. El estado actual de estos estudios de no-equilibrio puede compararse, de alguna forma, con el estado del conocimiento sobre los fenómenos críticos de equilibrio antes de la construcción del Grupo de Renormalización; esto es, se trata ahora, en efecto, de fenómenos en modelos concretos.

* Por último, buscamos, en la medida de lo posible, modelos que sean capaces de describir las características generales más esenciales de los sistemas reales para poder así comparar con los resultados obtenidos experimentalmente y tratar de comprender mejor los complejos mecanismos que aparecen en la realidad.

En particular, podemos destacar los siguientes logros de nuestro trabajo:

* Construcción teórica de una técnica de "cinética de agrupaciones locales" (CAL) para el estudio de sistemas reticulares caracterizados por una ecuación maestra y su correspondiente probabilidad de transición, y su aplicación a la solución de varios de los modelos que se definen en esta memoria.

* Definición original de los modelos de no-equilibrio estudiados en los capítulos III y IV, y de la variante de superconductor iónico en el capítulo VI.

* Resolución para un espacio de dimensión arbitraria de la ecuación macroscópica hidrodinámica del modelo de Ising de reacción-difusión, y el establecimiento de ciertos teoremas generales relevantes para el modelo,

por ejemplo, la demostración de la ausencia de cambio de fase en los sistemas antiferromagnéticos.

* Solución del modelo de Superconductor iónico en el caso más general conseguido hasta la fecha.

Las conclusiones concretas de nuestro trabajo se describen y discuten con detalle en las secciones y capítulos correspondientes.

Por último, queremos notar que parte de los resultados de este trabajo se describen también en las siguientes publicaciones:

* "Exactly soluble Ising models with anisotropic interactions and arbitrary external magnetic field"

P.L.Garrido y J.Marro

Journal of Physics A 20 1829-38 (1987).

* "Ising modelos with anisotropic interactions: Stationary nonequilibrium states with a nonuniform temperature profile"

P.L.Garrido y J.Marro

Physica A 144 585-603 (1987).

* "Stationary nonequilibrium states in the Ising model with locally competing temperatures"

P.L.Garrido y J.Marro

Journal of Statistical Physics 49 551-568 (1987).

* "Nonequilibrium phase diagram of Ising model with competing dynamics"

J.M.González-Miranda, P.L.Garrido, J.Marro y J.L.Lebowitz.

Physical Review Letters 59, 1934 (1987).

y esperamos publicar próximamente el resto de las conclusiones.

II. DEFINICIONES.

Es conveniente establecer aquí algunos conceptos fundamentales, el modelo matemático antecedente más próximo de los modelos que se introducen y estudian en este trabajo, y la notación que empleamos.

Diremos que un sistema físico macroscópico se encuentra en un estado estacionario cuando las magnitudes físicas que caracterizan el estado en cuestión sean independientes del tiempo. El estado estacionario más sencillo es el estado de equilibrio. En el caso de sistemas aislados, el estado de equilibrio es un estado estacionario sin histéresis, esto es, independiente de las manipulaciones que ha sufrido el sistema; esta última condición excluye los estados metaestables, también estacionarios. Sólo los estados de equilibrio son compatibles con las leyes de la termodinámica usual. Para que un sistema no aislado se encuentre en equilibrio es necesario que se establezca el equilibrio mutuo entre el sistema en cuestión y todos aquellos que interaccionan con él. Pero los sistemas no aislados pueden presentarse también en estados estacionarios que no son de equilibrio; en estos casos, como consecuencia de ligaduras o de la interacción con el entorno, se establece el flujo de alguna magnitud extensiva a través del sistema dado. En este trabajo interesan estos estados estacionarios fuera del equilibrio (EEFE), estados que (ex-

cluyendo algunos casos triviales) no son susceptibles de ser estudiados en principio ni mediante la Termodinámica ni mediante la teoría de las colectividades de Gibbs. Los EEFE son muy frecuentes en la naturaleza y, como los estados de equilibrio, pueden sufrir inestabilidades, roturas de simetría, situaciones metatestables, etc., dando lugar a una serie de fenómenos que presentan tanta analogía con los fenómenos correspondientes del equilibrio que podemos llamarlos cambios de fase fuera del equilibrio (CFFE). Este trabajo estudia diversos CFFE tal como ocurren en modelos simplificados de situaciones físicas.

Los modelos que estudiamos son variaciones del popular modelo de Ising que, a diferencia del modelo original, presentan EEFE y CFFE. El modelo de Ising, extensivamente estudiado en los últimos 40 años para tratar de comprender el complejo fenómeno de los cambios de fase, consiste esencialmente de una red regular, por ejemplo, una red cúbica simple en un espacio de d dimensiones, cada uno de cuyos nudos lleva asociado una variable de espín que sólo puede tomar dos valores distintos, $s_x = \pm 1$, $\underline{x} \in Z^d$. Las variables en los nudos contiguos más próximos (vecinos próximos) interaccionan dando lugar a una energía configuracional

$$H(\underline{s}) = -J \sum_{|\underline{x}-\underline{y}|=1} s_x s_y + h \sum_{\underline{x}} s_x \quad , \quad (\text{II.1})$$

donde h representa un campo exterior que condiciona los valores de las variables s_x , $\underline{y} \underline{s} = \{s_x / \underline{x} \in Z^d\}$. El modelo se

completa suponiendo que la probabilidad de una configuración del sistema en un instante t , $P(\underline{s};t)$, evoluciona de acuerdo con la ecuación maestra :

$$\frac{dP(\underline{s};t)}{dt} = \sum_{\underline{s}'} \left[c(\underline{s}|\underline{s}') P(\underline{s}';t) - c(\underline{s}'|\underline{s}) P(\underline{s};t) \right] \quad (\text{II.2})$$

donde $c(\underline{s}|\underline{s}')$ es la probabilidad por unidad de tiempo de tener una transición $\underline{s}' \rightarrow \underline{s}$. Si el mecanismo de evolución ocurre punto a punto en el sistema, tenemos la ecuación maestra más sencilla:

$$\frac{dP(\underline{s};t)}{dt} = \sum_{\underline{x}} \left[c(\underline{s}^{\underline{x}}; \underline{x}) P(\underline{s}^{\underline{x}};t) - c(\underline{s}; \underline{x}) P(\underline{s};t) \right] \quad (\text{II.3})$$

donde $\underline{s}^{\underline{x}}$ indica que el espín del lugar \underline{x} de la configuración \underline{s} está cambiado de signo. De esta ecuación es posible deducir inmediatamente (multiplicando por variables de espín y sumando sobre configuraciones) otras más específicas:

$$\frac{d}{dt} \langle s_{y_1} s_{y_2} \dots s_{y_n} \rangle = -2 \langle s_{y_1} \dots s_{y_n} \sum_{\substack{\underline{x}=\underline{y}_i \\ \forall i}} c(\underline{s}; \underline{x}) \rangle \quad (\text{II.4})$$

Para asegurar que el sistema tiende, a partir de casi cualquier condición inicial, al estado de equilibrio, por ejemplo, a una distribución canónica

$$P_0(\underline{s}) \propto \exp[-\beta H(\underline{s})] \quad (\text{II.5})$$

es suficiente, aunque no necesario, que las probabilidades de

transición satisfagan la condición de balance detallado:

$$C(\underline{s}; \underline{\chi}) = C(\underline{s}^{\chi}; \underline{\chi}) e^{-\beta \Delta H(\underline{s})}, \quad \Delta H(\underline{s}) = H(\underline{s}^{\chi}) - H(\underline{s}) \quad (\text{II.6})$$

De esta forma podemos construir una familia infinita de probabilidades de transición que conduzcan al mismo estado de equilibrio; las más familiares son:

$$\text{Metrópolis: } C(\underline{s}; \underline{\chi}) = \min(1, e^{-\beta \Delta H(\underline{s})}) \quad (\text{II.7})$$

$$\text{Glauber: } C(\underline{s}; \underline{\chi}) = 1 - \tanh(\Delta H(\underline{s})/2k_B T) \quad (\text{II.8})$$

$$\text{Kawasaki: } C(\underline{s}; \underline{\chi}) = [1 + e^{\beta \Delta H(\underline{s})}]^{-1} \quad (\text{II.9})$$

Si quisiésemos describir una colectividad de equilibrio que conservase la energía, tendríamos en una dimensión:

$$C(\underline{s}; \underline{\chi}) = \frac{1}{2} [1 - S_{\chi+1} S_{\chi-1}] \quad (\text{II.10})$$

donde hemos usado una notación evidente.

El mecanismo de evolución descrito hasta aquí consiste en una inversión de espines, tal como resulta apropiado para modelar, por ejemplo, el comportamiento de sistemas magnéticos; a este mecanismo se le llama a veces "dinámica de Glauber". Es posible, sin embargo, suponer que el modelo evoluciona mediante intercambio de dos espines en lugares vecinos próximos; ésta es la llamada "dinámica de Kawasaki" (que

puede ocurrir con cualquiera de las probabilidades de transición (II.7)-(II.9), por ejemplo) caracterizada por conservar la magnetización total del sistema y ser así adecuada para modelar ciertas situaciones en fluidos simples, mezclas y aleaciones binarias, etc.

Notemos, por último, que también es posible diseñar adecuadamente las probabilidades de transición $c(\underline{s} | \underline{s}')$ con objeto de que el sistema no evolucione hacia un estado de equilibrio sino hacia un EEFE; esto se consigue de varias formas distintas en este trabajo, estableciendo así una serie de modelos físicamente relevantes que soportan EEFE y CFFE.

III. MODELOS DE ISING CON INTERACCIONES ANISOTROPICAS Y PERFIL DE TEMPERATURAS NO UNIFORME: EQUILIBRIO LOCAL.

III.1. Modelo.

Presentamos en este capítulo algunas generalizaciones del modelo de Ising cinético usual (Glauber, 1963; Kawasaki, 1972) que muestran cambios de fase en condiciones de equilibrio local, condiciones que suelen suponerse válidas en el caso de EFFE. La condición de no-equilibrio en este caso es consecuencia de la acción de algún agente externo que induce, solamente a lo largo de una de las direcciones principales de la red, una temperatura local no uniforme en el baño térmico que se supone interaccionando con el sistema de espines. Una versión sencilla del modelo ocurre en dos dimensiones cuando las interacciones en la dirección perpendicular a los gradientes de temperatura son de tipo campo medio. Esta y otras variaciones del modelo son estudiadas con algún detalle para estudiar cuestiones tales como la naturaleza de la relación del sistema y del estado estacionario producido por diferentes distribuciones de temperatura, la correspondiente conducta crítica, que parece ser siempre clásica, la influencia de la elección de las probabilidades de transición en las propiedades de los estados estacionarios, el caso de lugares de la red con impurezas, etc. Cuando la temperatura se supone

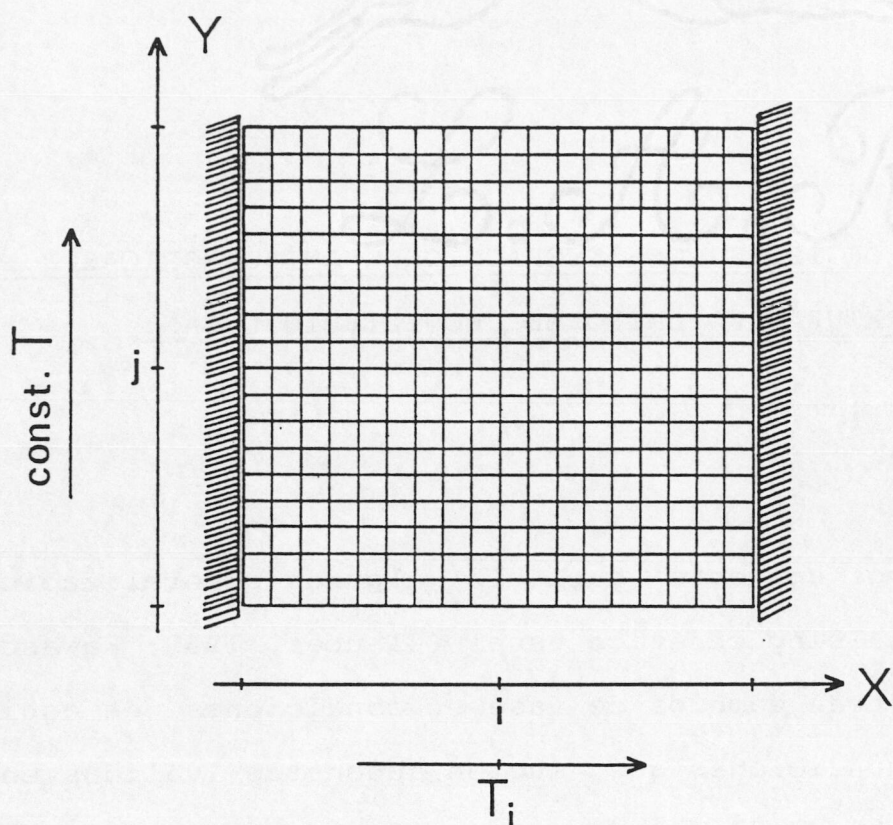


Fig.III1. Representación esquemática de un modelo reticular en dos dimensiones con una temperatura no uniforme a lo largo del eje X. Hay una variable de ocupación o variable de espín, $s_{ij} = \pm 1$, en cada lugar de la red en contacto con un baño térmico a una temperatura local T_i .

constante por todo el sistema, el modelo bidimensional básico se reduce al modelo de Ising de equilibrio con interacciones anisotrópicas que ya ha sido resuelto previamente (Garrido y Marro, 1987), ver Apéndice I.

El modelo básico de interés consiste de una red con $L_x \times L_y$ nudos (ver Figura III1) con variables de espín $s_{ij} = \pm 1$ ($i=1, \dots, L_x; j=1, \dots, L_y$). Algún agente externo induce un perfil de temperaturas dado y no constante a lo largo de la dirección X, como si los spines s_{ij} ($i=1, \dots, L_x; j=const.$) de cada columna estuviesen en contacto con baños térmicos a temperaturas diferentes T_i (o con un único baño

térmico con temperaturas locales T_i), mientras que hay una temperatura constante a lo largo de la dirección Y para cada valor del índice i . Las interacciones se supondrán anisotrópicas en el sentido de que hay un acoplamiento de vecinos próximos a lo largo del eje X , caracterizado por la energía de intercambio J_x , y una interacción de vecinos próximos (o de otro tipo) a lo largo del eje Y , caracterizada por J_y que puede diferir de J_x . En este modelo supondremos que la función de densidad de probabilidad configuracional cambia con el tiempo de acuerdo con una ecuación maestra markoviana, como la ecuación (II.10). Como explicamos en el capítulo anterior, estos requerimientos físicos sobre el sistema son introducidos "a priori" en la probabilidad de transición por unidad de tiempo que aparece en la ecuación maestra. En este caso, como pedimos que haya un baño térmico no homogéneo, deberemos de reflejar este carácter local en la probabilidad de transición. Así tomamos:

$$C(\underline{s}; \underline{\chi}) \equiv C_{ij}(\underline{s}) = \frac{\alpha_i}{2} \left[1 - \frac{\delta_i^x}{2} S_{ij} (S_{i-1,j} + S_{i+1,j}) \right] \left[1 - \frac{\delta_i^y}{2} S_{ij} (S_{i,j+1} + S_{i,j-1}) \right] \quad (\text{III.1.1})$$

donde

$$\delta_i^z = \tanh(2J_z / k_B T_i) \quad , \quad z \equiv x, y \quad (\text{III.1.2})$$

y α_i describe únicamente la escala de tiempo local en la cual tienen lugar las transiciones.

Una condición suficiente que puede ser usada para inter-

pretar nuestra elección (III.1) es la condición de balance detallado local

$$C_{ij}(\underline{s}) P_{ij}(\underline{s}) = C_{ij}(\underline{s}^x) P_{ij}(\underline{s}^x) \quad ; \quad \underline{x} = (i,j) \quad (\text{III.3})$$

donde

$$P_{ij}(\underline{s}) = A \exp \left[- E_{ij} / k_B T_i \right] \quad (\text{III.4})$$

con la definición

$$E_{ij} = - s_{ij} \left[J_x (s_{i-1,j} + s_{i+1,j}) + J_y (s_{i,j-1} + s_{i,j+1}) \right] ; \quad (\text{III.5})$$

aquí $p_{ij}(\underline{s})$ representa la probabilidad del estado $s_{ij} = \pm 1$ del spin ij mientras los otros quedan fijos. Estas expresiones implican suponer que el sistema se encuentra localmente en equilibrio a temperatura T_i . Notar que con esta forma de definir la probabilidad de transición, cuando $T_i = T \quad \forall i$ esto es, cuando tenemos una distribución uniforme de temperaturas, recobramos el modelo de Ising cinético usual.

Definimos una magnetización local como

$$m_{ij}(t) \equiv \langle s_{ij} \rangle = \sum_{\underline{s}} s_{ij} P(\underline{s}; t) \quad , \quad (\text{III.6})$$

y, utilizando la ecuación (II.4), tenemos:

$$\frac{dm_{ij}(t)}{dt} = - 2 \langle s_{ij} C_{ij}(\underline{s}) \rangle \quad (\text{III.7})$$

Esto es, cuando uno caracteriza el régimen estacionario mediante la condición $dm_{ij} / dt = 0$ y asume invariancia traslacional a lo largo del eje Y, en el sentido de que $\langle S_{ij} \rangle = \langle S_{ij+1} \rangle$ se sigue que

$$\langle S_i \rangle (1 - \gamma_i^y) - \frac{1}{2} \gamma_i^x (\langle S_{i-1} \rangle + \langle S_{i+1} \rangle) - \frac{1}{4} \gamma_i^x \gamma_i^y J_y^{-1} \langle [E_{ij} + J_x S_i (S_{i-1} + S_{i+1})] (S_{i-1} + S_{i+1}) \rangle = 0 \quad (\text{III1.8})$$

donde hemos eliminado la dependencia en j por claridad, y E_{ij} está definida en la Eq. (III1.5).

III.2. Caso unidimensional.

III.2.1. Interacciones entre vecinos próximos

El caso más sencillo del modelo descrito anteriormente ocurre cuando $J_y = 0$, como corresponde a un sistema unidimensional con interacciones entre vecinos próximos a lo largo de la dirección X. Se sigue entonces de la ecuación (III1.8) que

$$m_i = \frac{1}{2} \gamma_i [m_{i-1} + m_{i+1}] \quad , \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{III2.1a})$$

donde $\gamma_i \equiv \gamma_i^x$, para N espines interiores y

$$m_0 = \gamma_0 m_1 \quad , \quad m_{N+1} = \gamma_{N+1} m_N \quad (\text{III2.1b})$$

para los dos espines en los extremos ($N+2 = L_y$). La única

solución del sistema (III2.1) de $(N+2)$ ecuaciones es $m_i=0$ para cualquier i cuando el determinante correspondiente es diferente de cero; éste puede ser escrito como una función de

$$A_n \equiv \begin{vmatrix} 1 & -\gamma_n/2 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ -\gamma_{n+1}/2 & 1 & -\gamma_{n+1}/2 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & -\gamma_N/2 & 1 & -\gamma_N/2 & \\ 0 & \dots & \dots & 0 & -\gamma_{N+1} & 1 & \end{vmatrix} \quad (\text{III2.2})$$

$n=1, \dots, N-1$; $A_N = 1 - (1/2)\gamma_N\gamma_{N+1}$, que satisfacen las relaciones de recurrencia $A_n = A_{n+1} - \frac{1}{4}\gamma_n\gamma_{n+1}A_{n+2}$. Se sigue entonces para el determinante que

$$\det \vec{A} = A_1 - \frac{1}{2}\gamma_0\gamma_1A_2 \quad (\text{III2.3})$$

El determinante del sistema puede ser fácilmente evaluado en algunas condiciones límites. Por ejemplo, en el caso de acoplamiento débil, es decir, J_x pequeño de forma que $2J_x/kT_i$ sea lo bastante pequeño para todos los i , uno obtiene

$$\det \vec{A} = 1 - \left(\frac{J_x}{k_B}\right)^2 \left[\frac{1}{T_0T_1} + \frac{1}{T_1T_2} + \frac{1}{T_2T_3} + \dots + \frac{1}{T_N T_{N+1}} \right] \quad (\text{III2.4})$$

Por otra parte, si el perfil de temperaturas es lineal, $T_i = T_0 + i \vec{\nabla} T$, con un pequeño gradiente $\vec{\nabla} T$, se sigue

$$\det \vec{A} = 1 - \left(\frac{J_x}{k_B T_0}\right)^2 \left[1 - (N+1)^2 \nabla T / T_0 \right] \quad (\text{III2.5})$$

para cualquier valor de J_x . Ambas expresiones, (III2.4) y

(III2.5), son diferentes de cero en general, lo cual implica la ausencia de cambios de fase, como ocurre en el equilibrio, para casi cualquier perfil de temperatura.

III.2.2. Interacciones tipo campo medio. Ecuaciones básicas.

Como en el equilibrio, sin embargo, el modelo anterior puede ser forzado para que presente en general un cambio de fase (de no-equilibrio) a temperaturas finitas mediante la introducción de un acoplamiento tipo campo medio. Esto es, vamos a suponer ahora que las probabilidades de transición están dadas por

$$C_i(\underline{s}) = \frac{\alpha_i}{2} \left[1 - S_i \tanh \left(\tilde{E}_i / k_B T_i \right) \right] , \quad (\text{III2.6})$$

donde T_i representa el perfil de temperaturas a lo largo de la dirección principal, es decir X , y

$$\tilde{E}_i \equiv h + \sum_{\ell=1}^{L_x} J_{i\ell} s_\ell . \quad (\text{III2.7})$$

Aquí h representa una contribución de un campo magnético externo y cada espín se supone que interacciona con el resto via J_{ij} ; también estamos suponiendo que el sistema es macroscópico. Entonces, una hipótesis sencilla consistió en tomar $J_{ij} = J/N$ para cada lugar de la red y la condición de autoconsistencia $s_\ell = \langle s_\ell \rangle$; ésta es la llamada aproximación del campo coherente de Bragg y Williams (Ziman, 1979). El regi-

men estacionario correspondiente se puede ver que queda caracterizado por la condición

$$m = L_x^{-1} \sum_i \tanh [(h + Jm) / k_B T_i] \quad (\text{III2.8})$$

donde

$$m \equiv L_x^{-1} \sum_i \langle S_i \rangle \quad (\text{III2.9})$$

es la magnetización media o global.

III.2.2.1. Diferentes perfiles de temperaturas.

Para hacer evidente la existencia general de cambios de fase de no-equilibrio en el modelo de la sección III.2.2, uno puede hacer $h=0$ en la ecuación (III2.8) y considerar un perfil muy general, $T_i = T_0(1 + \bar{\alpha} f(i))$ donde $|f(i)|$ está acotada para todo i . En el caso de pequeños $\bar{\alpha}$, se sigue que

$$m \approx \tanh x - \frac{\bar{\alpha} x}{\cosh^2 x} [a(L_x) + \bar{\alpha} (1 - x \tanh x) b(L_x)] \quad (\text{III2.10})$$

con la notación $x = Jm/kT_0$ y

$$a(L_x) = L_x^{-1} \sum_i f(i), \quad b(L_x) = L_x^{-1} \sum_i f(i)^2. \quad (\text{III2.11})$$

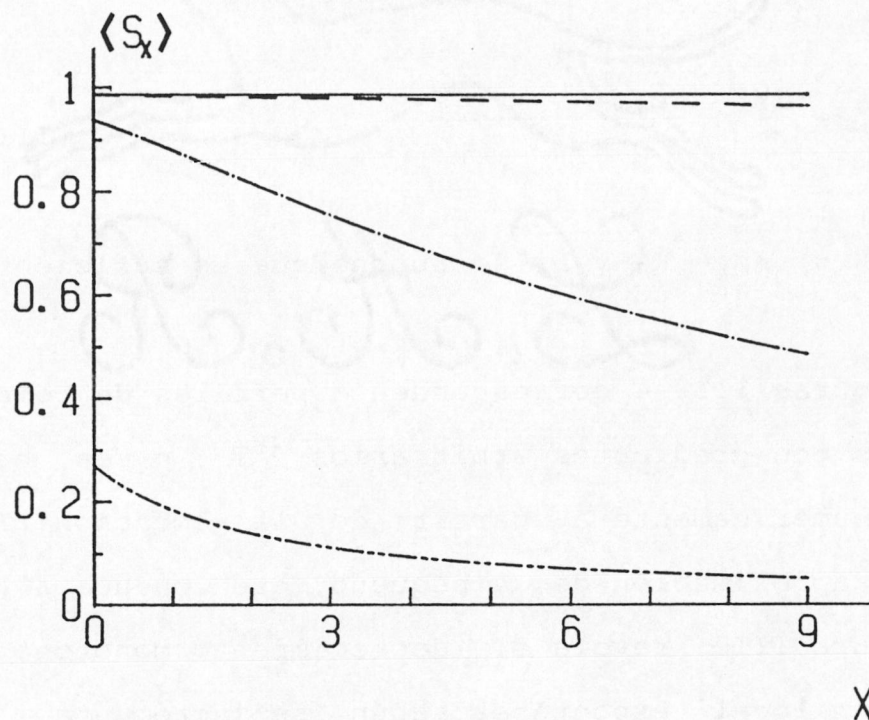


Fig.III2. Magnetización espontánea local como función de la posición a lo largo del eje X en el caso de un sistema unidimensional con 10 spines y un perfil de temperaturas lineal $T_i = T_0 + i \vec{\nabla} T$, $T_0 = 0.4$ (unidades $J/k=1$) $T_0 < T_0^c$ para valores diferentes del gradiente $\vec{\nabla} T$. La línea continua es para $\vec{\nabla} T = 0$ (equilibrio); las líneas discontinuas de arriba hacia abajo son, respectivamente, para $\vec{\nabla} T = 0.01, 0.1$ y 0.2 .

La temperatura crítica (con respecto al primer spin, $i=0$) viene entonces dada por

$$K_0^c = 1 - \bar{\alpha} a(L_x) + \bar{\alpha}^2 b(L_x) + \dots \quad (\text{III2.12})$$

donde $K_0 = kT_0/J$. Uno debe de notar que $\bar{\alpha}$ dependerá en general de la temperatura.

Lo anterior puede ser utilizado en particular para una conducta lineal, $T_i = T_0 + i \vec{\nabla} T$, con un gradiente pequeño de temperatura; tenemos en este caso que $f(i) = i$, $\bar{\alpha} = \vec{\nabla} T/T_0$, y

$$K_0^c = 1 - \frac{\Delta K}{2} + \frac{(\Delta K)^2}{3} + \dots \quad (\text{III2.13})$$

donde $\Delta K = K_{N+1} - K_0$ y L_x se supone que es suficientemente grande.

Las figuras III2-4 corresponden a perfiles de temperaturas lineales con gradientes arbitrarios $\vec{\nabla} T$, o sea, han sido calculadas numéricamente a partir de la ecuación (III2.8) evitando la aproximación de $\bar{\alpha}$ pequeño, que conduce a (III2.-13). La figura III2 revela el decrecimiento monótono de la magnetización local espontánea según se incrementa i ; esto es claramente implicado por las anteriores ecuaciones, e.g. $\langle s_i \rangle = \tanh(Jm/kT_i)$, y era esperado por coherencia física. Lo realmente relevante es que, cuando los gradientes de temperatura son pequeños, obtenemos un comportamiento lineal en la variación de la magnetización local con la distancia, mientras que cuando éstos son importantes, ese comportamiento desaparece y es claramente no lineal. Como se muestra en la figura III3, hay diferencias importantes cualitativas con $\vec{\nabla} T$ en el diagrama de las fases $m(T_0)$, donde T_0 es la temperatura correspondiente al primer espín de la izquierda de la línea; sin embargo m escala cerca de una temperatura crítica promedio cuando es representada como en la figura III4, o sea, cuando uno usa temperaturas promedio, definidas por

$$T \equiv L_x^{-1} \sum_i T_i, \quad T_c \equiv L_x^{-1} \sum_i T_i^c, \quad (\text{III2.14})$$

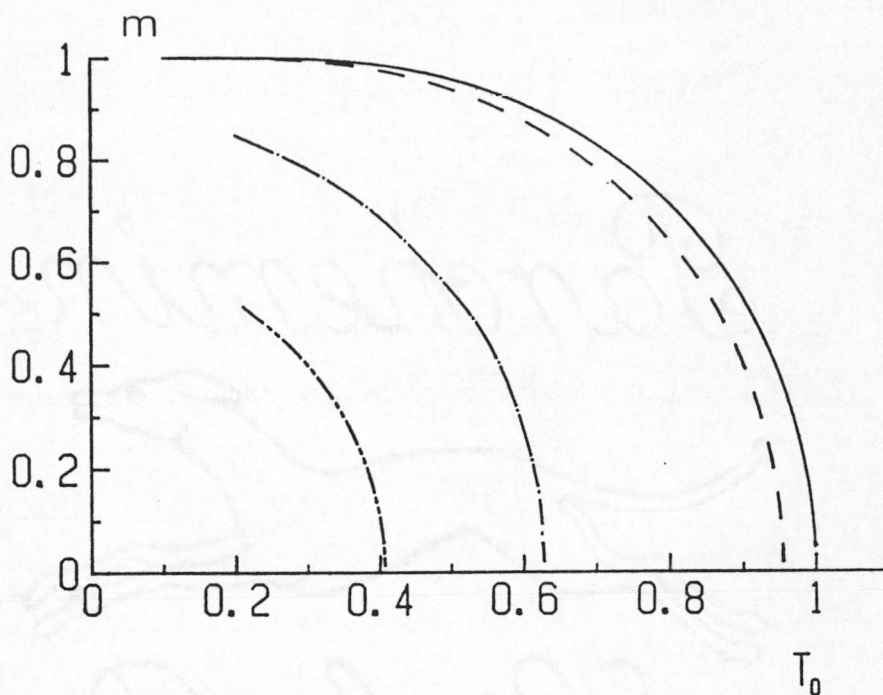


Fig III3. La magnetización media $m = L_x^{-1} \sum \langle s_i \rangle$ para el sistema en la figura III2 como función de T_0 (la temperatura del primer espín). Las curvas de arriba hacia abajo son, respectivamente, para $|\vec{\nabla}T| = 0, 0.01, 0.1$ y 0.2 ; las temperaturas críticas correspondientes son $T_0^c = 1, 0.944, 0.617$ y 0.405 respectivamente (unidades $J/k=1$).

donde $T_t^c \equiv T_0^c + i |\vec{\nabla}T|$, como variables naturales. La fig. III4 sugiere una conducta crítica semejante cerca de T_c ; de hecho, el análisis numérico de los diagramas de las fases en la figura III4 cerca de $T=T_c$ muestra que el exponente crítico para la magnetización promedio es $\beta = 1/2$, independiente de $|\vec{\nabla}T|$. Este hecho puede ponerse de manifiesto calculando explícitamente el exponente crítico β y la amplitud termodinámica correspondiente a partir de la ecuación de estado (III2.8) con $h=0$. Para ello, desarrollamos la ecuación (III2.8) teniendo en cuenta que estamos cerca de la tempera-

tura crítica; así obtenemos

$$m^2 = 3 \left[\frac{1}{N} \sum_j \frac{1}{T_j^{c3}} \right]^{-2} \times \left[1 + 3\epsilon \sum_j \frac{1}{T_j^{c4}} \right] \times \\ \times \left[\frac{1}{N} \sum_j \frac{1}{T_j^c} - 1 - \frac{\epsilon}{N} \sum_j \frac{1}{T_j^{c2}} \right] + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (\text{III2.15})$$

donde $T_j = T_j^c + \epsilon$ con $\epsilon = T_0 - T_0^c$. Vemos que es necesario que se cumpla $N^{-1} \sum_j (T_j^c)^{-1} = 1$ para que haya cambio de fase; así queda que

$$m \simeq A (-\epsilon)^\beta \quad (\text{III2.16})$$

con

$$\beta = 1/2 \quad , \quad A = \left[\frac{3 \sum_j (T_j^c)^{-2}}{\sum_j (T_j^c)^{-3}} \right]^{1/2} \quad , \quad (\text{III2.17})$$

como queremos mostrar. Notar sin embargo, que, como también es sugerido por la figura III4, el tamaño de la región crítica decrece según se va incrementando $\vec{\nabla} T$. Puesto que la versión del modelo para el equilibrio, $\vec{\nabla} T = 0$, ya está caracterizada por exponentes críticos clásicos (Ziman, 1979), este hecho aquí no ha de considerarse, sin embargo, como una peculiaridad del no-equilibrio.

Los casos $T_i = T_0 + \vec{\nabla} T \cdot \vec{\omega}^i \cdot f(\omega_i)$ con $f(z) = \sin(z)$ o $\cos(z)$ tienen también interés. La magnetización espontánea local correspondiente aparece en este caso oscilando alrededor de un valor constante, recordándonos las ondas estacionarias en una línea; la amplitud y frecuencia de estas oscila-

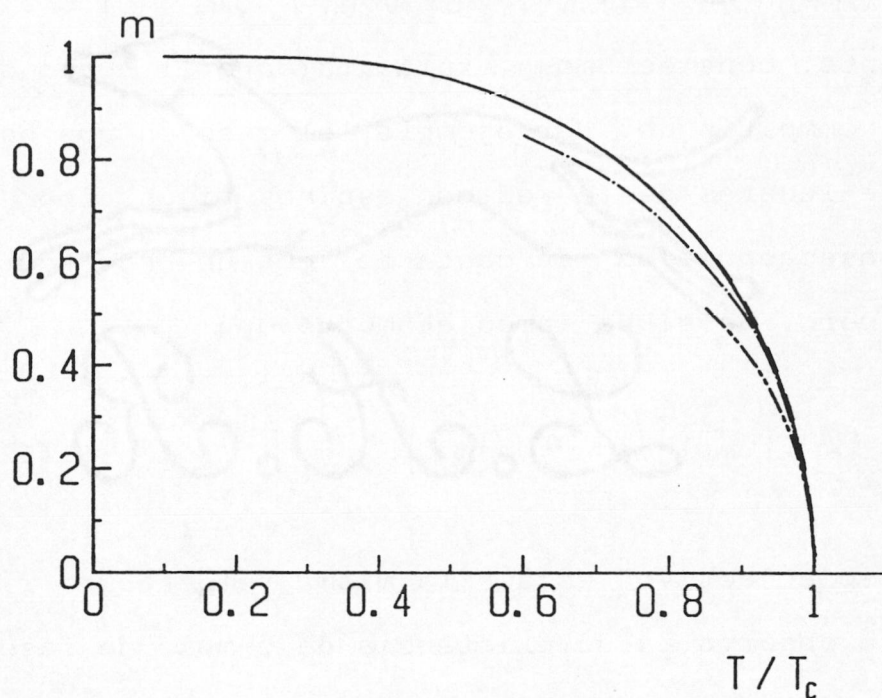


Fig.III4. Los mismos datos como en la figura III3, dibujados con respecto T/T_c ; ver ecuación (III2.14). La línea continua es para $\vec{\nabla}T = 0$ y $\vec{\nabla}T = 0.01$; las otras líneas son, de arriba hacia abajo, para $\vec{\nabla}T = 0.1$ y 0.2 respectivamente.

ciones espaciales dependen fuertemente de $\vec{\nabla}T$ y ω . Las curvas $m(T)$, por otra parte, se superponen para todos los valores de T , independientemente de $\vec{\nabla}T$ y ω . En particular, para $f(\omega i) = \sin(\omega i)$, $\bar{\alpha} = \vec{\nabla}T/T_0\omega$, uno encuentra a primer orden en $\bar{\alpha}$ que

$$\langle S_i \rangle \simeq \tanh(m/k_0) - \frac{\vec{\nabla}k \cdot m \cdot \text{sen}(\omega i)}{\omega k_0^2 \cosh^2(m/k_0)} \quad (\text{III2.18})$$

Algunas temperaturas críticas representativas (con respecto a la del primer espín) cuando $f(z) = \sin(z)$ son las siguientes:

$$T_0^c(\omega = \pi/10, \vec{\nabla}T = 0.01) = 0.99, \quad T_0^c(\omega = \pi/10, \vec{\nabla}T = 0.1) = 0.91,$$

$$T_0^c (\omega = 2\pi/10, \vec{\nabla}T = 0.1) = 1.11, \quad T_0^c (\omega = 2\pi/10, \vec{\nabla}T = 0.01) = 1.0.$$

Finalmente, consideramos explícitamente el caso de dos temperaturas compitiendo. Por ejemplo, el caso en que hay una fracción n de lugares de la red con espines fijos, por ejemplo como consecuencia de su contacto con un baño térmico a temperatura cero. Se sigue inmediatamente que

$$m = n + (1-n) \tanh [(h+Jm)/k_B T] \quad (\text{III2.19})$$

donde cada espín "activo" está a la misma temperatura T ; en este caso se observa la no existencia de cambio de fase. Uno también puede estudiar el caso de vacantes aleatoriamente distribuidas por la red, o sea, suponer que hay una fracción n de espines a temperatura infinita, lo cual da lugar a la ecuación

$$m = (1-n) \tanh [(h+Jm)/k_B T] \quad (\text{III2.20})$$

y a una temperatura crítica: $T^c = (1-n)J/k_B$, que es la misma expresión que se obtiene cuando se estudia este problema con técnicas de equilibrio en la aproximación de campo medio. Más interesante es el caso en el que la mitad del sistema (es decir $i < 0$) está a la temperatura T y la otra mitad ($i \geq 0$) a la temperatura T' ; se sigue entonces

$$2m = \tanh [(h+Jm)/k_B T] + \tanh [(h+Jm)/k_B T'] \quad (\text{III2.22})$$

y, cuando $h=0$, obtenemos

$$T^c = T \left[2k_B T / J - 1 \right]^{-1} \quad (\text{III2.23})$$

donde T necesita ser más grande que $J/2k$ para que pueda definirse una temperatura crítica. Notar que en particular la mitad del sistema ($i>0$) puede aun presentar orden cuando la otra mitad está completamente desordenada ($T \rightarrow \infty$).

II.2.2.2. Relajación del sistema.

La relajación del sistema hacia su estado de no-equilibrio está descrita por la ecuación

$$\frac{dm}{dt} = -m + L_x^{-1} \sum_i \tanh(Jm/k_B T_i) \quad (\text{III2.24})$$

donde m está definida por la ecuación (III2.9), y hay una ecuación separada para cada $\langle s_i \rangle$ de donde se sigue la ecuación (III2.8) (ponemos $h=0$ por simplicidad); también necesitamos suponer $\alpha_i = 1$, o sea, idénticas escalas de tiempo local para cada lugar de la red.

Para pequeñas desviaciones del estado estacionario y para temperaturas cercanas a la crítica, la ecuación (III2.24) puede ser aproximada por una ecuación diferencial de Bernouilli (Stanley, 1971; Glauber, 1963):

$$\frac{1}{2} \frac{dy}{dt} = (1-A)y + B \quad (\text{III2.25})$$

donde $y = m^{-2}$ y

$$A \equiv J L_x^{-1} \sum_i (k_B T_i)^{-1}, \quad B \equiv J^3 (3 L_x)^{-1} \sum_i (k_B T_i)^{-3}. \quad (\text{III2.26})$$

Esto conduce, en general, a una conducta tipo exponencial

$$m = (1-A)^{1/2} \left\{ [(1-A)m_0^{-2} + B] e^{(1-A)2t} - B \right\}^{-1/2}, \quad A \neq 1. \quad (\text{III2.27})$$

En la temperatura crítica, sin embargo, uno tiene $A=1$ (recordar la discusión que seguía a la ecuación (III2.14)) y se tiene una relajación más lenta

$$m = [2Bt + m_0^{-2}]^{-1/2}, \quad A = 1, \quad (\text{III2.28})$$

donde, en ambos casos, $m_0 = m(t=0)$. El parámetro de orden local, por otra parte, se relaja de acuerdo con

$$\langle s_i \rangle = e^{-t} \left[m_i^0 + \int_0^t dt' e^{t'} \left(\beta_i J m(t') - \frac{1}{3} \beta_i^3 J^3 m(t')^3 \right) \right], \quad (\text{III2.29})$$

donde $m=m(t)$ está dado por la ecuación (III2.27) cuando $A \neq 1$ o por (III2.28) cuando $A = 1$, $\beta_i = 1/kT_i$ y m_i^0 representa la condición inicial ($t=0$) para $\langle s_i \rangle$.

Las ecuaciones anteriores involucran una descripción general de la relajación del sistema en un cambio de fase de no-equilibrio. Una comparación entre diferentes casos está hecha en la Figura III5 cuando el sistema esta caracterizado por un perfil de temperaturas lineal; más detalles pueden ser fácilmente obtenidos.

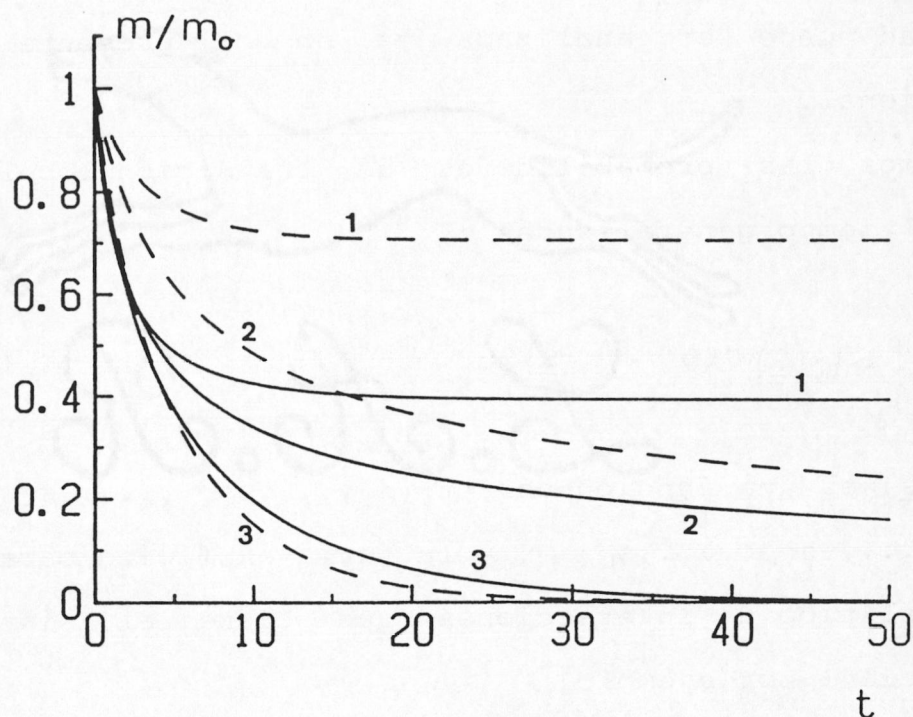


Fig.III5. Relajación temporal del parámetro de orden global, dado por la ecuación (III2.24), normalizado al valor inicial ($t=0$) en el caso de un perfil de temperaturas lineal $T_i = T_0 + i \nabla T$. La línea discontinua corresponde a $\nabla T = 0$ (o sea, relajación hacia el estado de equilibrio) para diferentes temperaturas del primer espín ($i=0$): $T_0 < T_0^c$ (curva 1), $T_0 = T_0^c$ (curva 2) y $T_0 > T_0^c$ (curva 3). Las líneas continuas, etiquetadas de la misma forma, corresponden a $\nabla T = 0.2$ o sea, relajación hacia un estado de no-equilibrio.

III.2.3. Influencia de las probabilidades de transición.

Los estados estacionarios de no-equilibrio pueden, en principio, depender de las probabilidades de transición que uno considere en la ecuación maestra (II.10); ésta es la observación en algunos experimentos Monte Carlo recientes en los que simulan estados estacionarios de no-equilibrio en un modelo de superconductor iónico (Marro et al., 1987). Esta

posibilidad puede ser analizada ya en el presente modelo unidimensional.

Tomemos las probabilidades de transición locales por unidad de tiempo generalizadas

$$c_i(\underline{s}) = f_i(\underline{s}) \exp [-A_i(\underline{s}) s_i] \quad (\text{III2.29})$$

donde $f_i(\underline{s})$ es una función par, $f_i(s_1, \dots, s_i, \dots, s_L) = f(s_1, \dots, -s_i, \dots, s_L)$, y la forma explícita para $A_i(\underline{s})$ depende del tipo de interacciones que tiene el sistema en consideración; por ejemplo

$$A_i = \frac{J_x}{k_B T_i} (s_{i-1} + s_{i+1}) \quad (\text{III2.30a})$$

para interacciones entre vecinos próximos como en la sección III.2.1., y

$$A_i = \frac{J_m}{k_B T_i} \quad (\text{III2.30b})$$

para un acoplamiento de campo coherente como en la sección III.2.2. El régimen estacionario está entonces caracterizado por

$$\sum_{\underline{s}} P(\underline{s}; t) f_i(1) \cosh(A_i) (1 - s_i \tanh A_i) = 0 \quad (\text{III2.31})$$

y

$$\sum_{\underline{s}} P(\underline{s}; t) s_i s_e [f_i(1) \cosh(A_i) (1 - s_i \tanh A_i) + f_e(1) \cosh(A_e) (1 - s_e \tanh A_e)] = 0 \quad (\text{III2.32})$$

como se sigue respectivamente de la estacionariedad del parámetro de orden $\langle s_i \rangle$ y las correlaciones $\langle s_i s_\ell \rangle$. Esto es, hay una dependencia no trivial del estado estacionario de noequilibrio en la elección de C_i . Por supuesto, la simple elección $f_i(s_i) \cosh A_i = \alpha_i$ produce

$$\langle s_i \rangle = \langle \tanh A_i \rangle \quad (\text{III2.33})$$

y

$$(\alpha_i + \alpha_e) \langle s_i s_e \rangle = \alpha_i \langle s_e \tanh A_i \rangle + \alpha_e \langle s_i \tanh A_e \rangle \quad (\text{III2.34})$$

mientras que otras elecciones pueden producir obviamente una conducta bastante diferente incluyendo, por ejemplo, una temperatura crítica diferente. Por supuesto, todas estas diferencias desaparecen en el caso del equilibrio, $T_i = T$ para todas la i , como uno puede probar facilmente de las ecuaciones (III2.33) y (III2.34). Un punto crucial, que sólo puede ser estudiado propiamente en un contexto más general que el actual, es encontrar condiciones para la probabilidad de transición de manera que obtengamos una clase de universalidad dada; como es sugerido por trabajos Monte Carlo previos (Marro et al., 1987), distintas elecciones deberian conducir a los mismos exponentes críticos (aunque temperaturas críticas diferentes), al menos para las elecciones más familiares de C . De todas formas, las influencias explícitas de la probabilidad de transición sobre los resultados los estudia-

remos más profundamente en los siguientes capítulos de la memoria.

III.3. Caso bidimensional.

III.3.1. Interacciones entre vecinos próximos. Solución de orden cero.

Los estados estacionarios de no-equilibrio para la red de Ising bi-dimensional con una distribución de temperaturas no uniforme, T_i , a lo largo de uno de los ejes principales, están caracterizados por la condición (III1.8), esto es,

$$\begin{aligned} \langle S_{ij} \rangle (1 - \gamma_i^y) - \frac{1}{2} \gamma_i^x (\langle S_{i-1,j} \rangle + \langle S_{i+1,j} \rangle) + \\ + \frac{1}{4} \gamma_i^x \gamma_i^y \langle S_{ij} (S_{i-1,j} + S_{i+1,j}) (S_{i,j-1} + S_{i,j+1}) \rangle = 0 \end{aligned} \quad (\text{III3.1})$$

donde γ_i^x y γ_i^y están definidas en la ecuación (III1.2).

Para seguir adelante, sin embargo, uno necesita desacoplar las correlaciones entre los tres espines del último término de la ecuación (III3.1). Una de las hipótesis más sencillas que podemos hacer a priori consiste en escribir $\langle s_{ij} s_{kj} s_{ij+1} \rangle = \langle s_{ij} s_{kj} s_{ij-1} \rangle = \langle s_{ij} \rangle^2 \langle s_{kj} \rangle$, ambos para $k=i-1$ y $k=i+1$; en el equilibrio ($T_i = T$ para todo i) esto produce las soluciones estacionarias

$$\langle s \rangle = \pm \left[(\gamma^x + \gamma^y - 1) / \gamma^x \gamma^y \right]^{1/2} \quad (\text{III3.2})$$

y el exponente crítico resultante para la magnetización es

$\beta = 1/2$. La dinámica también se sigue fácilmente en este caso; uno encuentra después de un poco de álgebra que, para una temperatura homogénea, es

$$\langle S \rangle = \left[4\gamma^x \gamma^y t + m_0^{-2} \right]^{-1/2}, \quad T = T_c \quad (\text{III.3.3})$$

y

$$\langle S \rangle = \left[\frac{(\gamma^x + \gamma^y - 1) m_0^2 A}{1 + \gamma^x \gamma^y m_0^2 A} \right]^{1/2}, \quad T \neq T_c \quad (\text{III.3.4})$$

donde

$$A \equiv (\gamma^x + \gamma^y - 1 - \gamma^x \gamma^y m_0^2)^{-1} \exp \left[4(\gamma^x + \gamma^y - 1)t \right] \quad (\text{III.3.5})$$

lo cual conduce a las soluciones (III.3.2) cuando $t \rightarrow \infty$. De cualquier forma, esta solución, a pesar de ser sencilla es poco relevante físicamente a causa de la "rotura" de correlaciones que hemos realizado, lo cual condiciona excesivamente al sistema, sobre todo cerca de la temperatura crítica.

III.3.2. Interacciones tipo campo medio en una de las direcciones principales de la red.

III.3.2.1. Ecuaciones generales.

Más interesante es analizar el modelo definido en la sección III.1 mediante la introducción de un acoplamiento

entre espines tipo campo medio a lo largo del eje Y ,tratando exáctamente las interacciones entre vecinos próximos a lo largo del eje X. Las probabilidades de transición (III1.1) se reducen en este caso a

$$C_{ij}(\underline{s}) = \frac{\alpha_i}{2} \left[1 - s_{ij} \frac{s_{i-1,j} + s_{i+1,j}}{2} \gamma_i \right] (1 - s_{ij} \bar{\gamma}_i) \quad (\text{III3.6})$$

donde el último paréntesis en la ecuación (III1.1) ha sufrido el tratamiento discutido en la sección III.2.2 , e introducimos la notación, $\gamma_i \equiv \gamma_i^x$ y $\bar{\gamma}_i \equiv \tanh(m_i J/kT_i)$. El régimen estacionario está entonces caracterizado por

$$\langle s_i \rangle = \bar{\gamma}_i + \frac{1}{2} \gamma_i \left(\langle s_{i-1} \rangle + \langle s_{i+1} \rangle \right) + \frac{1}{2} \gamma_i \bar{\gamma}_i \langle e_i \rangle J_x^{-1} \quad (\text{III3.7})$$

donde hemos eliminado la dependencia trivial en el índice j y hemos usado la notación

$$\langle e_i \rangle = -J_x \langle s_i (s_{i-1} + s_{i+1}) \rangle , \quad m_i = N^{-1} \sum_j \langle s_{ij} \rangle \quad (\text{III3.8})$$

Para poder continuar con esta ecuación, podemos suponer que las correlaciones $\langle e_i \rangle$ están dadas localmente por su valor de equilibrio. Esto es, cuando la distribución de temperaturas es homogénea, $T_i = T$ para toda i, uno puede calcular la función de partición canónica del sistema (ver Apéndice I, Garrido y Marro, 1987); en particular, se siguen de esa función de partición las correlaciones:

$$\langle S_{ij}(S_{i-1,j} + S_{i+1,j}) \rangle = 2K_B T \frac{\partial}{\partial J_x} \ln \lambda_+ \quad (\text{III3.9})$$

donde

$$\lambda_+ = \exp(J_x/k_B T) \cosh(Jm/k_B T) + \tilde{\alpha}(T, m, J_x, J) \quad (\text{III3.10})$$

con la notación

$$\tilde{\alpha} \equiv \left[\exp(2J_x/k_B T) \sinh^2(Jm/k_B T) + \exp(-2J_x/k_B T) \right]^{1/2} \quad (\text{III3.11})$$

y la magnetización se obtiene a través de la solución de la ecuación de autoconsistencia:

$$m = \tilde{\alpha}^{-1} \exp(J_x/k_B T) \sinh(Jm/k_B T) . \quad (\text{III3.12})$$

La solución general en esta hipótesis (equilibrio local termodinámico) es la dada por la ecuación (III3.7) en donde cada $\langle e_i \rangle$ se obtiene combinando las ecuaciones (III3.9) y (III3.-12). Más específicamente, la solución para el caso inhomogéneo es

$$m_i - \frac{1}{2} \gamma_i (m_{i-1} + m_{i+1}) = \bar{\gamma}_i \left[1 + \gamma_i (2J_x)^{-1} \langle \tilde{e}_i(T_i) \rangle \right] \quad (\text{III3.13})$$

donde $\langle \tilde{e}_i(T_i) \rangle$ significa la solución local combinada (mediante la eliminación de m) de

$$\langle e \rangle = -2J_x \tilde{\alpha}^{-1} \left[\exp(J_x/k_B T) \cosh(Jm/k_B T) - 2 \cosh(2J_x/k_B T) \lambda_+^{-1} \right] , \quad (\text{III3.14})$$

la cual se sigue de las ecuaciones (III3.8)-(III3.10), y (III3.12) para cada temperatura T_i . Debemos de volver a estas expresiones en la sección III.3.2.3.

III.3.2.2. Aproximación de acoplamiento débil.

Las anteriores ecuaciones nos permiten un análisis explícito de un gran número de interesantes situaciones. La más sencilla corresponde al caso $J=0$ que se reduce exactamente al sistema unidimensional inhomogéneo con interacciones a vecinos próximos que ya discutimos en la sección III.2.1. Por ello, parece ahora interesante estudiar qué pasa para valores suficientemente pequeños de J , por ejemplo, tales que nos permitan escribir $\bar{\gamma}_i = \tanh(Jm_i/kT_i) \approx Jm_i/kT_i$.

Nos referiremos explícitamente al caso de un sistema infinito con únicamente dos temperaturas, $T_i = T_1$ para $i \geq 0$, y $T_i = T_2$ para $i < 0$ y un acoplamiento de campo coherente débil en el sentido que hemos especificado antes. Uno tiene inmediatamente de la ecuación (III3.13) los dos conjuntos de ecuaciones (notar que $\gamma_i \equiv \tanh(2J_x/kT_i)$):

$$m_i - \frac{\gamma_1}{2} (m_{i-1} + m_{i+1}) = \frac{Jm_i}{k_B T_1} \left[1 + \frac{\gamma_1}{2J_x} \langle e_i(T_1) \rangle \right], i \geq 0, \quad (\text{III3.12a})$$

$$m_i - \frac{\gamma_2}{2} (m_{i-2} + m_{i+1}) = \frac{Jm_i}{k_B T_2} \left[1 + \frac{\gamma_2}{2J_x} \langle e_i(T_2) \rangle \right], i \leq -1, \quad (\text{III3.12b})$$

El sistema de ecuaciones (III3.12a) y (III3.12b) lo podemos representar por una sola ecuación:

$$m_{i+2} - m_{i+1} \frac{2}{\gamma_2} \left[1 - \frac{J}{k_B T_2} \left(1 + \frac{\gamma_2}{2J_x} \langle e(\tau_2) \rangle \right) \right] + m_i = 0 \quad (\text{III3.13})$$

donde $z=1$ para $i \geq -1$ y $z=2$ para $i < -1$. Ahora podemos utilizar los métodos estándar para la resolución de ecuaciones recurrentes, para ello hemos de escribir la ecuación indicial asociada a (III3.13)

$$s^2 - s \frac{2}{\gamma_2} \left[1 - \frac{J}{k_B T_2} \left(1 + \frac{\gamma_2}{2J_x} \langle e(\tau_2) \rangle \right) \right] + 1 = 0 \quad (\text{III3.14})$$

que tiene por soluciones

$$s_{\pm} = \frac{1}{\gamma_2} \left(1 \pm (1 - \gamma_2^2)^{1/2} \right) \left(1 \mp \frac{J}{k_B T_2} \right) \quad (\text{III3.15})$$

que cumplen que $s_+ > 1$ y $s_- < 1$, por lo que la solución general es

$$\begin{aligned} m_i &= A_{(1)} s_{+(1)}^{i-1} + B_{(1)} s_{-(1)}^{i-1}, \quad i \geq -1 \\ m_i &= A_{(2)} s_{+(2)}^{-i-2} + B_{(2)} s_{-(2)}^{-i-2}, \quad i < -1 \end{aligned} \quad (\text{III3.16})$$

Puesto que m_i necesita estar acotado para cualquier i , para que tenga sentido físico, la solución s_+ no debe de jugar ningún papel, por lo que las constantes $A_{(1)}$ y $A_{(2)}$ deben de ser cero. Imponiendo esta restricción obtenemos las soluciones físicas:

$$m_i = B_{(1)} s_{-(1)}^{i-1} \quad i \geq -1, \quad m_i = B_{(2)} s_{-(2)}^{-i-2} \quad i < -1 \quad (\text{III3.17})$$

Sustituyendo en esta expresión el valor de s_- , obtenemos

$$m_i = B_1 \left[\gamma_1^{-1} (1 - (1 - \gamma_1^2)^{1/2}) (1 + J/k_B T_1) \right]^{i-1}, \quad i \geq 1, \quad (\text{III3.18})$$

y

$$m_i = B_2 \left[\gamma_2^{-1} (1 - (1 - \gamma_2^2)^{1/2}) (1 + J/k_B T_2) \right]^{-i-2}, \quad i < -1, \quad (\text{III3.19})$$

y uno obtiene igualmente de las ecuaciones (III3.12) para $i=0,1$ que

$$m_0 = \frac{2}{\gamma_2} \left[1 - \frac{J}{k_B T_2} (1 - \gamma_2^2)^{1/2} \right] m_{-1} - B_2 \quad (\text{III3.20})$$

y

$$m_{-1} = \frac{2}{\gamma_1} \left[1 - \frac{J}{k_B T_1} (1 - \gamma_1^2)^{1/2} \right] m_0 - B_1 \quad (\text{III3.21})$$

donde B_1 y B_2 no pueden ser determinadas dentro de la presente teoría (uno debería de conocer el valor de $m(T)$ en dos puntos), esto es, esta teoría solo predice las variaciones espaciales de $m(T)$.

Las anteriores ecuaciones nos permiten considerar, la situación en la que la mitad del sistema está en contacto con un baño térmico a una temperatura muy alta, $T_2 = \infty$, y un valor finito para T_1 . Se sigue en este caso que $\gamma_2 = 0$, $B_2 = 0$ y, por lo tanto, que

$$m_0 = \frac{1}{2} B_1 \gamma_1 \left(1 + \frac{J}{k_B T_1} (1 - \gamma_1^2)^{1/2} \right) \quad (\text{III3.22})$$

y m_i , $i \geq 1$, están dadas por la ecuación (III.3.18). La naturaleza del estado estacionario en este caso depende de la dependencia funcional de B_1 en T_1 y J ; uno puede convencerse en particular que, para obtener un cambio de fase, $B_1(T_1, J)$ necesita ser tal que $B_1 \neq 0$ para $T_1 < T_1^c$, $B_1 = 0$ para $T_1 \geq T_1^c$.

III.3.2.3. Pequeñas desviaciones respecto del equilibrio.

Presentamos en esta sección una formulación diferente del modelo definido en la sección anterior mediante la introducción de las variaciones infinitesimales, $T_i = T + \delta T_i$ y $m_i = m + \delta m_i$ con respecto a la solución homogénea de equilibrio, $m = m(T)$, analizada en el Apéndice I, (Garrido y Marro, 1987); notar que hemos eliminado aquí la dependencia en j por simplicidad.

Uno tiene inmediatamente que

$$\gamma_i^x \equiv \tanh(2J_x/k_B T_i) = \gamma^x + a^x \delta T_i / T \quad (\text{III.3.23})$$

donde $\gamma^x = \tanh(2J_x/kT)$ y $a^x = -2J_x(1 - (\gamma^x)^2)/kT$, y

$$\bar{\gamma}_i = \tanh(Jm_i/k_B T_i) = \bar{\gamma} + a \left(\frac{\delta T_i}{T} - \frac{\delta m_i}{m} \right) \quad (\text{III.3.24})$$

donde $\bar{\gamma} = \tanh(Jm/kT)$ y $a = -Jm(1 - \bar{\gamma}^2)/kT$. Sea \tilde{m}_i la solución local correspondiente a la temperatura local T_i ; de la condición de autoconsistencia del equilibrio Eq.(III.3.10)-(III.3.12), y escribiendo entonces $\tilde{m}_i = m + \delta \tilde{m}_i$; se sigue

después de algo de álgebra que

$$\frac{\delta \tilde{m}_i}{m} = A(m, T) \frac{\delta T_i}{T} \quad (\text{III3.25})$$

con la función auxiliar

$$A \equiv \left\{ 2J_x \left[m^2 e^{-4\beta J_x} - (1-m^2) \sinh^2(\beta J_m) \right] - J_m (1-m^2) \sinh(2\beta J_m) \right\} \times \\ \times \left[2k_B T \sinh^2(\beta J_m) - J_m (1-m^2) \sinh(2\beta J_m) \right]^{-1}, \quad (\text{III3.26})$$

$\beta = 1/kT$. En el mismo sentido, podemos escribir $\langle \tilde{e}_i(T_i) \rangle = \langle e \rangle + \delta \tilde{e}_i$ donde $\langle e \rangle$ se da en la ecuación (III3.14) y $\langle \tilde{e}_i(T_i) \rangle$ representa la solución local (mediante la eliminación de m) de las ecuaciones (III3.14) y (III3.12); se sigue entonces que

$$\delta \tilde{e}_i = B(m, T) \frac{\delta T_i}{T} \quad (\text{III3.27})$$

con la función auxiliar

$$B \equiv -\frac{2J_x}{\gamma^x} \left\{ \frac{m(1-\gamma^x)}{\gamma} \left[\frac{a^x}{\gamma^x} + \frac{a(1-A)}{\gamma} - A \right] + a^x \left(\frac{m}{\gamma} - \frac{1}{\gamma^x} \right) \right\} \quad (\text{III3.28})$$

notando el hecho que

$$\tilde{\gamma}_i \equiv \tanh \left(\frac{J \tilde{m}_i}{k_B T_i} \right) = \gamma + a(1-A) \frac{\delta T_i}{T} \quad (\text{III3.29})$$

Las anteriores expresiones nos permiten escribir inmediatamente de las ecuaciones (III3.13) que

$$\delta m_i = C(m, T) \frac{\delta T_i}{T} E(m, T) \quad (\text{III3.30})$$

donde hemos introducido la hipótesis de que $\delta m_{i+1} + \delta m_{i-1} \approx 2 \delta m_i$ o sea, pequeñas variaciones, y la notación

$$C \equiv (a\gamma^x + a^x\gamma) D(m, T) + a + a^x m + \gamma\gamma^x B/2J_x \quad (\text{III3.31})$$

con

$$D \equiv [(1-\gamma^x)m/\gamma - 1] / \gamma^x \quad (\text{III3.32})$$

y

$$E \equiv \left[1 - \frac{2a}{m} + \frac{1-\gamma^x}{\gamma} a + \gamma^x \right]^{-1} \quad (\text{III3.33})$$

Como era de esperar, esto implica en particular que $\delta m_i =$ constante para $\delta T_i =$ constante. Uno también obtiene para el parámetro de orden local que

$$\delta \langle s_i \rangle = C(m, T) \frac{\delta T_i}{T} (1-\gamma^x)^{-1} \left[1 - \frac{2a}{m} + \gamma^x \right] E(m, T) \quad (\text{III3.34})$$

en la hipótesis de que $\delta \langle s_{i+1} \rangle + \delta \langle s_{i-1} \rangle \approx 2 \delta \langle s_i \rangle$.

Las anteriores ecuaciones representan una solución completa para pequeñas desviaciones del estado de equilibrio. Para poder extraer de ellas alguna información concreta, uno puede definir :

$$\bar{m} = N^{-1} \sum_i m_i = m + N^{-1} \sum_i \delta m_i \quad (\text{III3.35})$$

y

$$\bar{T} = N^{-1} \sum_i T_i = T + N^{-1} \sum_i \delta T_i \quad (\text{III.3.36})$$

Se sigue entonces que

$$\bar{m} = m + T^{-1} C(m, T) E(m, T) (\bar{T} - T) \quad , \quad (\text{III.3.37})$$

mostrando que la temperatura crítica está dada por la condición $\bar{m} = 0$, o sea

$$\bar{T}^c = T \left[1 - m \left\{ C(m, T) E(m, T) \right\}^{-1} \right] \quad (\text{III.3.38})$$

III.3.3. Interacciones tipo campo medio en las dos direcciones principales. Ecuaciones básicas.

El sistema bidimensional básico de la sección anterior puede ser aproximado por una versión mucho más simple, suponiendo un acoplamiento de campo coherente a lo largo de las direcciones principales de la red X e Y. Esto es, escribimos ahora, con una notación obvia:

$$P_{ij}(\underline{s}) \propto \exp \left[(J_x m_i + J_y \tilde{m}_j) s_{ij} / k_B T_i \right] \quad (\text{III.3.39})$$

donde

$$m_i = N^{-1} \sum_j \langle s_{ij} \rangle \quad , \quad \tilde{m}_j = N^{-1} \sum_i \langle s_{ij} \rangle \quad (\text{III.3.40})$$

y, de esta forma, utilizando la condición de balance detallado local, obtenemos la probabilidad de transición

$$C_{ij}(\underline{\xi}) = \frac{\alpha_i}{2} [1 - S_{ij} \chi_i^x] [1 - S_{ij} \chi_{ij}^y] \quad (\text{III3.41})$$

donde

$$\chi_i^x = \tanh(J_x m_i / k_B T_i), \quad \chi_{ij}^y = \tanh(J_y \tilde{m}_j / k_B T_i) \quad (\text{III3.42})$$

El estado estacionario queda entonces caracterizado por

$$\langle S_{ij} \rangle = \tanh \left[(J_x m_i + J_y \tilde{m}_j) / k_B T_i \right], \quad (\text{III3.43})$$

y

$$m_i = N^{-1} \sum_j \tanh \left[(J_x m_i + J_y \tilde{m}_j) / k_B T_i \right], \quad (\text{III3.44})$$

$$\tilde{m}_j = N^{-1} \sum_i \tanh \left[(J_x m_i + J_y \tilde{m}_j) / k_B T_i \right]. \quad (\text{III3.45})$$

Diferentes perfiles de temperatura se pueden trabajar fácilmente a partir de esas ecuaciones, pero no queremos insistir en ellas en esta memoria.

III.3.4. Impurezas.

Nuestro modelo básico bidimensional también permite estudiar cómo influyen las impurezas en un gran número de

sistemas en régimen estacionario, tanto de equilibrio como de no-equilibrio. Para ilustrar este hecho, mencionamos primero el caso de espines fijos, $s_{ij} = 1$, para todos los i pares cuando hay un acoplamiento de campo coherente a lo largo del eje Y como ya describimos en la sección III.3.2. ; uno obtiene inmediatamente de las ecuaciones (III3.7) y (III3.8) para el estado estacionario que

$$m_i = \tanh \left[(2J_x + J_y m_i) / k_B T_i \right] \quad (\text{III3.46})$$

para i impares, y $m_i = 1$ para i pares. Cuando $T_i = T$ y $m_i = m$ para todas las i , la ecuación (III3.46) describe en particular el caso de una distribución homogénea de temperaturas y espines fijos (impurezas) impuros en columnas alternadas.

Para generalizar la situación anterior uno puede considerar la red cuadrada de Ising con interacciones de vecinos próximos a lo largo de ambas direcciones principales, X e Y , y una temperatura local T_{ij} en cada lugar de la red; esto es, ahora tenemos, en lugar de las ecuaciones (III1.4) y (III1.1);

$$P_{ij}(s_{ij}) \propto \exp \left[J_x s_{ij} (s_{i-1,j} + s_{i+1,j}) / k_B T_{ij} + J_y s_{ij} (s_{i,j-1} + s_{i,j+1}) / k_B T_{ij} \right] \quad (\text{III3.47})$$

y

$$C_{ij}(\underline{s}) = \frac{\alpha_{ij}}{2} \left[1 - s_{ij} \gamma_{ij}^x \frac{s_{i-1,j} + s_{i+1,j}}{2} \right] \left[1 - s_{ij} \gamma_{ij}^y \frac{s_{i,j-1} + s_{i,j+1}}{2} \right] \quad (\text{III3.48})$$

respectivamente, y se sigue la condición estacionaria

$$\begin{aligned} \langle S_{ij} \rangle - \frac{\delta_{ij}^x}{2} (\langle S_{i-1,j} \rangle + \langle S_{i+1,j} \rangle) - \frac{\delta_{ij}^y}{2} (\langle S_{i,j-1} \rangle + \langle S_{i,j+1} \rangle) + \\ + \frac{1}{4} \delta_{ij}^x \delta_{ij}^y \langle S_{ij} (S_{i-1,j} + S_{i+1,j})(S_{i,j-1} + S_{i,j+1}) \rangle = 0 \quad (\text{III3.49}) \end{aligned}$$

en lugar de la ecuación (III1.8).

Vamos a aplicar esta ecuación al caso de dos subredes acopladas, o sea, como aquéllas que caracterizan el estado fundamental del modelo de Ising antiferromagnético cuadrado. La primera subred está ocupada por espines fijos impuros, de tal forma que uno tiene $s_{ij} = 1$ cuando, ambos, i y j son a la vez pares o impares, o lo que es lo mismo, los espines correspondientes están en contacto con un baño a temperatura cero; por el contrario, los espines de la segunda subred están libres, de tal forma que pueden tomar cualquiera de los dos posibles valores $s_{ij} = \pm 1$ (con i y j teniendo diferente paridad) como consecuencia de sus interacciones con un único baño de calor a temperatura T ; se inducen transiciones $s_{ij} \rightarrow -s_{ij}$ con las probabilidades por unidad de tiempo (III3.48) con $\alpha_{ij} = \alpha$, $\delta_{ij}^x = \delta^x$ y $\delta_{ij}^y = \delta^y$ para i y j de la segunda subred. Cuando el lugar (i,j) recorre la primera subred, uno tiene $s_{ij} = 1$, $T_{ij} = 0$, $\delta_{ij} = 1$, y se sigue de la ecuación (III3.49) que

$$\langle S_{i-1,j} S_{i,j-1} \rangle = 2m - 1 \quad (\text{III3.50})$$

Cuando el lugar (i,j) recorre la segunda subred, uno tiene

que $\langle s_{ij} \rangle = m$, $T_{ij} = T$, y entonces

$$m = \tanh \left[2(J_x + J_y) / k_B T \right] \quad (\text{III.3.51})$$

que se puede combinar con la ecuación (III.3.50). Vemos que, en cualquier caso, este modelo no presenta cambio de fase.

III.4. Conclusiones.

En este capítulo hemos definido un nuevo modelo reticular tipo Ising caracterizado por un baño térmico no uniforme. Suponiendo que la acción del baño sobre el sistema es de tipo marcoviano y aplicando la hipótesis de equilibrio local, hemos logrado construir la ecuación maestra cuya solución describe el comportamiento del sistema.

Hemos demostrado, en el caso de un sistema unidimensional con interacciones entre vecinos próximos, que no aparece un cambio de fase cuando utilizamos una probabilidad de transición tipo Glauber (sea cual sea el perfil de temperaturas). Por otra parte, hemos hallado un cambio de fase, al utilizar interacciones de largo alcance de tipo campo medio. Este caso lo hemos resuelto en general para cualquier perfil de temperaturas y nos hemos centrado, en particular, en perfiles lineales y sinusoidales, estudiando, en cada caso, entre otras cosas, el comportamiento crítico que, como era esperado, es clásico.

En dos dimensiones el cálculo se hace mucho más difícil

y, para obtener resultados, hemos tenido que realizar varias aproximaciones y simplificaciones al modelo. En una de ellas, hemos supuesto que en una de las direcciones principales de la red, la interacción se realiza entre vecinos próximos y, en la otra, es de tipo campo medio. En estas condiciones, hemos estudiado al sistema en dos límites diferentes: si la interacción entre vecinos próximos es muy débil y, por otra parte, cuando tenemos un perfil de temperaturas cercano al perfil uniforme que corresponde al caso de equilibrio.

Por último, hemos apuntado la posibilidad de utilizar el modelo para estudiar otros sistemas, por ejemplo sistemas con impurezas, y para ver la influencia de las probabilidades de transición en las propiedades macroscópicas del modelo.

IV. MODELO CON TEMPERATURAS COMPITIENDO LOCALMENTE.

IV.1. Modelo básico.

En el capítulo anterior consideramos un modelo reticular con un agente externo que implicaba un baño térmico espacialmente inhomogéneo, y conseguimos una descripción del sistema postulando unas probabilidades de transición locales basadas en las hipótesis de balance detallado y equilibrio local. Sabemos que este último postulado parece ser una buena aproximación en el estudio de sistemas físicos no muy alejados del equilibrio, pero no está muy claro que funciones bien en condiciones generales.

Este argumento nos sugiere un nuevo paso en el estudio de sistemas fuera del equilibrio. Deberíamos construir y estudiar un modelo con un mecanismo de evolución que cumpliera fundamentalmente dos condiciones: que no involucre hipótesis restrictivas de equilibrio local, y que podamos tomar como referencia su estado de equilibrio, esto es, que cuando no actúe el agente externo, recuperemos los resultados del equilibrio.

La primera de estas condiciones se consigue considerando sistemas espacialmente homogéneos, o sea, que no necesitemos conocer el lugar del sistema a estudiar puesto que en todos

ellos ocurren fundamentalmente los mismos procesos. El recuperar los resultados del equilibrio cuando no funciona el mecanismo externo viene impuesto por la necesidad de tener un estado de referencia bien conocido con el que comparar los cambios que acontecen cuando actúe el agente externo. Además, es muy interesante, cuando se realizan aproximaciones durante un cálculo teórico, saber qué parte de los resultados son debidos a la aproximación y qué parte lo son a efectos de no-equilibrio. Con este propósito en mente, vamos a definir un modelo que resulta de gran utilidad.

Supongamos un modelo reticular sobre el que actúa un mecanismo que consiste en la competición local entre baños térmicos a distintas temperaturas T_j , cada uno con probabilidad p_j . Este mecanismo actúa idénticamente sobre cada nudo de la red por lo que estamos garantizando la homogeneidad del sistema y, además, cuando todos los baños térmicos tienen la misma temperatura, conseguimos recuperar el estado de equilibrio. Así pues, este modelo parece apto para dar el siguiente paso en el estudio de estados estacionarios. No conocemos una situación física real que sea bien representada por el modelo, pero creemos que ya tiene interés su estudio por el hecho de constituir un modelo reticular sencillo y bien definido que presenta EEFE y CFFE.

Concretando, tomamos la probabilidad de transición

$$C(\underline{z}; \underline{X}) = \sum_{i=1}^{\bar{n}} p_i C^{(i)}(\underline{z}; \underline{X}) \quad (\text{IV1.1})$$

donde \bar{n} es el número de mecanismos microscópicos que están actuando localmente, y

$$\sum_{i=1}^{\bar{n}} p_i = 1, \quad p_i \geq 0 \quad \forall i. \quad (\text{IV1.2})$$

Cada mecanismo, i , está caracterizado por una probabilidad de transición canónica $c^{(i)}$ que satisface individualmente una condición de balance detallado a temperatura T_i . Esto es, aplicando la ecuación (II.10) hay un régimen estacionario

$$\sum_{i=1}^{\bar{n}} p_i \langle s_x c^{(i)}(\underline{s}; \underline{x}) \rangle_{st} = 0 \quad (\text{IV1.3})$$

y ecuaciones similares para productos más elevados de espines. Una nota aquí que el caso en el que cada probabilidad de transición debería de dirigir al sistema a un mismo estado de equilibrio satisface $\langle s_x c^{(i)}(\underline{s}; \underline{x}) \rangle_{st} = 0$ para todas las i , cumpliéndose entonces la ecuación (IV1.3) trivialmente, mientras que aparecerá un régimen estacionario de no-equilibrio cuando cada mecanismo por sí solo conduzca al sistema a diferentes estados de equilibrio apareciendo una competición entre ellos; este régimen puede depender de las $c^{(i)}$'s y de las p_i 's.

Aunque el modelo anterior puede ser trabajado, al menos formalmente y algunas veces explícitamente, para diferentes distribuciones de temperaturas T_i , nos referiremos aquí por simplicidad al caso de únicamente dos temperaturas compitiendo, T_1 y T_2 ; esto es

$$C(\underline{s}; \underline{x}) = p C^{(1)}(\underline{s}; \underline{x}) + (1-p) C^{(2)}(\underline{s}; \underline{x}) \quad (\text{IV1.4})$$

Esto puede ser interpretado suponiendo que la inversión de espín en cada lugar \underline{x} es intentada con probabilidad p "como si" el sistema estuviese en contacto con un baño térmico a la temperatura $T_1 = T - \Delta T$ y con probabilidad $1-p$ "como si" el baño térmico que induce la transición tuviera una temperatura $T_2 = T - \Delta T$; $T \gg \Delta T \gg 0$. Cuando hacemos el límite $\Delta T \rightarrow 0$, recobramos el caso usual del equilibrio, mientras que $\Delta T \neq 0$ revela una conducta de no-equilibrio rica, que describimos en las siguientes secciones. El modelo será estudiado cuando $h=0$ y $J > 0$, resolviendolo en el caso de $d = 1$, considerando dos soluciones diferentes aproximadas de campo medio y un tratamiento perturbativo alrededor de la solución de equilibrio de Onsager, y comparando con una simulación Monte Carlo en el caso de $d=2$; también consideramos aquí el caso $\Delta T = \text{constante}$ y el caso en que hay una dependencia en la temperatura del incremento de temperatura, es decir $T_{1,2} = (1 \mp \delta) T$, $\delta = \text{constante}$.

IV.2. Interacciones tipo campo medio.(Bragg-Williams).

Vamos a considerar aquí una versión campo medio del modelo con probabilidades de transición (IV1.1), tal como es definida en la aproximación de Bragg-Williams (Thompson, 1972); en este caso:

$$C^{(i)} = \frac{1}{2} \alpha \left[1 - \bar{\delta}_i S_x \right] \quad (\text{IV2.1})$$

donde

$$\bar{\gamma}_i \equiv \tanh (Jm / k_B T_i) \quad , \quad J > 0 \quad (\text{IV2.2})$$

y $m = \langle s(\underline{x}) \rangle_{st} = N^{-1} (s(1) + s(2) + \dots + s(N))_{st}$; la última ecuación se convierte en identidad cuando $N \rightarrow \infty$. Se sigue entonces de la ecuación (IV1.3) que

$$\frac{dm}{d\tau} = p (\bar{\gamma}_1 - m) + (1-p) (\bar{\gamma}_2 - m) \quad (\text{IV2.3})$$

donde $\tau \equiv \alpha t$. Esto predice orden ferromagnético en el estado estacionario por debajo de una temperatura crítica media, o sea cuando $T \leq T_c$ donde T_c será determinada más adelante. Antes de ver explícitamente esto, notamos que la ecuación no lineal (IV2.3) puede ser desarrollada alrededor de $m = 0$ y podemos escribir

$$\frac{dm}{d\tau} \cong - (1-A)m - Bm^3 \quad (\text{IV2.4})$$

con

$$A \equiv p K_1^{-1} + (1-p) K_2^{-1} \quad , \quad B \equiv \frac{1}{3} [p K_1^{-3} + (1-p) K_2^{-3}] \quad (\text{IV2.5})$$

donde hemos introducido la notación $K \equiv kT/J$, etc. Las soluciones correspondientes son

$$m = \tilde{A}^{1/2} \left[(\tilde{A} m_0^{-2} + B) \exp(2\tilde{A}\tau) - B \right]^{-1/2} \quad (\text{IV2.6})$$

donde $m_0 = m(t=0)$, cuando $\tilde{A} \equiv 1-A \neq 0$, y

$$m = (2Bz + m_0^{-2})^{-1/2} \quad (\text{IV2.7})$$

cuando $A=1$. La interpretación de las ecuaciones (IV2.6) y (IV2.7) es similar a la del caso de equilibrio : la relajación desde cualquier magnetización inicial m_0 se vuelve cada vez más lenta según nos vamos aproximando a la condición $A=1$. Esta condición corresponde a la de temperatura crítica K_c dado que el régimen estacionario para $K < K_c$ ($m=0$) está caracterizado , de acuerdo con la ecuación (IV2.4), por la condición $B m^2 + (1 - A) = 0$, obteniendo en particular que $A \rightarrow 1$ cuando $m \rightarrow 0$.

La temperatura crítica viene entonces determinada por la condición

$$K_c^2 - \Delta K^2 = p(K_c + \Delta K) + (1-p)(K_c - \Delta K) \quad (\text{IV2.8})$$

o, eliminando el signo menos alternativo que resulta ser físicamente irrelevante,

$$K_c = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \left[1 + 4(2p-1)\Delta K + 4\Delta K^2 \right]^{1/2} \right\} . \quad (\text{IV2.9})$$

Esta expresión existe para todos los ΔK y p y tiene la conducta correcta cuando $p \rightarrow 0,1$, o sea para los casos de campo medio "puro" del equilibrio a las temperaturas de $K \mp \Delta K$ con temperaturas críticas $1 \mp \Delta K$, respectivamente. En particu-

lar, uno obtiene para pequeños ΔK :

$$K_c = 1 + (2p-1) \Delta K + 4p(1-p) \Delta K^2 + \mathcal{O}(\Delta K^3) \quad (\text{IV2.10})$$

que predice correcciones muy pequeñas al caso del equilibrio $K_c = 1$ cuando $p=1/2$. Uno también tiene de la ecuación (IV2.3) en el estado estacionario

$$m = p \tanh(m/K_1) + (1-p) \tanh(m/K_2) \quad (\text{IV2.11})$$

Notar que, en esta aproximación, son idénticos los siguientes sistemas:

- * Sistema con una densidad n de nudos de la red a temperatura T_1 y $1-n$ a temperatura T_2 , con hipótesis de equilibrio local.
- * Sistema con probabilidad n de que actúe una temperatura T_1 localmente y $1-n$ de que actúe T_2 .

Esto es debido a que una aproximación como la de campo medio lo que hace es "deslocalizar" los espines de la red.

Para valores pequeños de m , la ecuación (IV2.11) se comporta como

$$m \sim \tilde{B} (-\epsilon)^\beta, \quad \epsilon \equiv T/T_c - 1, \quad (\text{IV2.12})$$

con

$$\tilde{B}^2 = B^{-1} [pK_1^{-2} + (1-p)K_2^{-2}] \quad (\text{IV2.13})$$

y $\beta = 1/2$.

El anterior modelo con $\Delta K =$ constante está caracterizado por una conducta crítica clásica. Sin embargo, se tiene una situación más interesante (dentro de la presente aproximación de campo medio) cuando ΔK es dependiente de la temperatura. Sea $0 < \Delta K = f(K) < K$ y, cerca de la temperatura crítica, $\Delta K = f(K_c) + a\epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^2)$, donde $\epsilon = K/K_c - 1$ y $a \equiv (\partial f(K)/\partial K)_{K_c} \cdot K_c$. Entonces $K_{1,2} \approx K_{1,2}^c + (K_c \mp a) \epsilon > 0$, con $K_{1,2}^c \equiv K_c \mp f(K_c)$. Por otra parte, el estado estacionario cerca de K_c puede ser caracterizado, de acuerdo con la ecuación (IV2.4), como $(1-A) + B m^2 - \mathcal{O}(m^4) = 0$ donde A y B son funciones definidas en la ecuación (IV2.5) las cuales pueden ser desarrolladas como

$$A = 1 + (-\epsilon) a_1 + \epsilon^2 a_2 + \mathcal{O}(\epsilon^3) \quad (\text{IV2.14})$$

con

$$a_1 \equiv p(K_c - a) K_1^{c-2} + (1-p)(K_c + a) K_2^{c-2} , \quad (\text{IV2.15})$$

$$a_2 \equiv p(K_c - a) K_1^{c-3} + (1-p)(K_c + a) K_2^{c-3} , \quad (\text{IV2.16})$$

con $a_2 > 0$ para cualquier \underline{a} y p , y $B = B_c + \mathcal{O}(\epsilon)$, $B_c > 0$ para cualquier \underline{a} y p . La condición de estado estacionario puede ser escrita ahora :

$$m^2 B_c = -a_1 \epsilon + a_2 (-\epsilon)^2 + \mathcal{O}(m^4, \epsilon^3, m^2 \epsilon) ; a_2, B_c > 0 . \quad (\text{IV2.17})$$

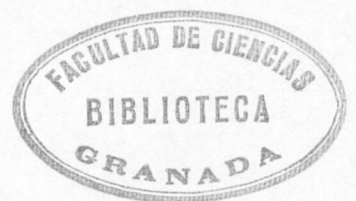
Tres casos parecen interesantes. Cuando $a_1 = 0$, uno tiene de la ecuación (IV2.17) que $m \sim (-\epsilon) [a_2/B_c]^{1/2}$ implicando $\beta = 1$. El caso $a_1 > 0$, por el contrario, es otra vez clásico dado que implica $m \sim (-\epsilon)^{1/2} [a_1/B_c]^{1/2} + \Theta(\epsilon)$; el ejemplo relevante $K_{1,2} = (1 \mp \delta)K$, $0 < \delta < 1$, de tal forma que $\Delta K = f(K) = \delta \cdot K$, implica que $a = \delta \cdot K_c$. Finalmente cuando $a_1 < 0$ la solución m de la ecuación (IV2.17) no es real. El ejemplo $\Delta K \sim \delta \epsilon$, $\delta =$ constante, cerca de K_c es compatible con los anteriores tres casos. Uno tiene inmediatamente $K_1^c = K_2^c = K^c = 1$ y $a_1 = 1 + \delta(1-2p)$ de forma que $a_1 = 1$ para $p = 1/2$; cuando $p > 1/2$ ($p < 1/2$ es simétrico con $\delta < 0$), a_1 es positivo, cero o negativo dependiendo de si δ es más pequeña, igual o más grande que $(2p-1)^{-1}$.

Vamos a considerar ahora dos límites interesantes en las anteriores ecuaciones: i) la temperatura más baja es cero, $K_1 = 0$, y K_2 es finita, y ii) $K_1 = K$ es finita y $K_2 = K + \Delta K$ es una temperatura muy alta, es decir $\Delta K = \infty$.

La solución de campo medio (ecuación (IV2.11)), se reduce en el caso i a

$$m = p + (1-p) \tanh(m/K_2) \quad (\text{IV2.18})$$

implicando $m > 0$ para todas las $p (> 0)$ y K_2 ; o sea, una temperatura finita no puede destruir completamente el "congelamiento" producido por la temperatura más baja. En particular, cuando K_2 es bastante grande uno obtiene de la ecuación (IV2.18) que



$$m \approx p \left[1 + (1-p)/\Delta K \right] . \quad (\text{IV2.19})$$

El caso ii , por otra parte, está caracterizado por

$$m = p \tanh(m/K) \quad (\text{IV2.20})$$

volviéndose distinto de cero para $K < K_c = p$, o sea hay siempre un cambio de fase (en la presente aproximación de campo medio) a estados con alguna magnetización espontánea a pesar de la fuerte perturbación introducida por el mecanismo a temperatura infinita.

IV.3. Caso unidimensional

IV.3.1. Solución exacta para varias probabilidades de transición: temperatura efectiva.

Vamos primero a considerar explícitamente el caso unidimensional $d=1$, ($h=0$) y probabilidades de transición tipo Glauber (Glauber, 1963) definidas como

$$C^{(i)}(\underline{s}; \underline{\chi}) = \frac{1}{2} \alpha \left\{ 1 - \frac{1}{2} \delta_i S_x [S_{x+1} + S_{x-1}] \right\} \quad (\text{IV3.1})$$

donde

$$\delta_i = \tanh(2J/K_B T_i) , \quad J > 0 . \quad (\text{IV3.2})$$

Se sigue fácilmente de la ecuación (IV1.3) que el régimen estacionario está caracterizado por

$$m \left[1 - p\delta_1 - (1-p)\delta_2 \right] = 0 \quad (\text{IV3.3})$$

donde $m \equiv \langle s_x \rangle_{st}$, independiente de x . La única solución de la ecuación (IV3.3) con una relevancia física en el presente caso ($\Delta T > 0$), es $m = 0$, o sea que cualquier estado que es invariante traslacional de un modelo ferromagnético debe de tener magnetización cero para todas las temperaturas posibles $0 \leq T_1 < T_2$; aun más, como éste es un sistema de espines con interacción atractiva e invariante traslacional, se sigue (Ligett, 1985) la unicidad del estado estacionario.

Concerniente a las funciones de correlación de espín (mayor orden), uno solo necesita saber que la probabilidad de transición global está dada por

$$C(\underline{s}; \underline{x}) = \frac{\alpha}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \gamma_{\text{eff}} s_x [s_{x+1} + s_{x-1}] \right\}, \quad \gamma_{\text{eff}} \equiv \sum_i p_i \delta_i \quad (\text{IV3.4})$$

para la elección (IV1.1); por lo que se obtiene la misma solución que la del modelo de equilibrio ($d=1$) (Glauber, 1963) con una temperatura efectiva dada por

$$\tanh(2J/k_B T_{\text{eff}}) = \sum_i p_i \tanh(2J/k_B T_i) \quad (\text{IV3.5})$$

Como estamos trabajando con estados de no-equilibrio, éstos pueden depender esencialmente de la elección particular para

las $c^{(i)}$. Por ejemplo, cuando uno introduce en (IV1.1) las probabilidades de transición de Metrópolis,

$$c^{(i)} = \frac{1}{4} (3 + \gamma'_i) + \frac{1}{4} (\gamma'_i - 1) \left\{ S_x [S_{x+1} + S_{x-1}] + S_{x+1} S_{x-1} \right\} \quad (\text{IV3.6})$$

para $d=1$ donde

$$\gamma'_i \equiv \exp(-4J/k_B T_i), \quad (\text{IV3.7})$$

se sigue otra vez la misma solución que para el caso del equilibrio, excepto que la temperatura efectiva es ahora

$$T_{\text{eff}}^{-1} = - \left(\frac{k_B}{4J} \right) \ln \sum_i p_i e^{-4J/k_B T_i} \quad (\text{IV3.8})$$

en lugar de (IV3.5), mientras que la elección especial (De Masi et al., 1985)

$$c^{(i)} = 1 - \gamma''_i S_x [S_{x+1} + S_{x-1}] + (\gamma''_i)^2 S_{x+1} S_{x-1}, \quad (\text{IV3.9})$$

$\gamma''_i = \tanh(J/kT_i)$, conduce a

$$m (1 - 2 \overline{\gamma''}) + \overline{(\gamma'')^2} \langle S_{x+1} S_x S_{x-1} \rangle = 0, \quad (\text{IV3.10})$$

donde

$$\overline{\gamma''} \equiv \sum_i p_i \gamma''_i, \quad \overline{(\gamma'')^2} \equiv \sum_i p_i (\gamma''_i)^2, \quad (\text{IV3.11})$$

lo cual se revela como un caso de mayor dificultad que el (IV3.1) y (IV3.6) (en particular, (IV3.10) muestra la posibilidad de tener estados de magnetización diferente de cero en una dimensión para una combinación de mecanismos dinámicos (IV3.9) cuando la distribución de los valores de s_x sea no gaussiana).

IV.3.2. Tratamiento estadístico de la cinética de agrupamientos en modelos con inversiones de espín.

El modelo básico de la sección IV.3 puede ser resuelto aproximadamente mediante un procedimiento consistente en evaluar las probabilidades de las diferentes transiciones que pueden ocurrir en las distintas configuraciones de agrupaciones ("clusters") locales. Este método es una generalización al caso de problemas dinámicos del método de Kikuchi (Kikuchi, 1951) conocido como "cluster variation" y ha sido usado recientemente por Dickman (Dickman, 1987) en un problema de no-equilibrio (De Masi et al., 1985) diferente del que consideramos aquí. De hecho, el método varía esencialmente según el sistema evolucione de acuerdo con una dinámica de Glauber (inversión de espines) o de Kawasaki (intercambio de espines). Aquí describimos el método en el caso de un sistema con inversión de espines.

IV.3.2.1. Teoría.

Es importante notar que, cuando éste método se aplica a problemas del equilibrio, se obtienen ecuaciones similares a las obtenidas en la aproximación de campo medio tipo Bethe-Peierls o "Pair approximation". Se trata de una aproximación de campo medio porque el método descansa en la construcción de ecuaciones específicas para variables promedio que describen el comportamiento dinámico del sistema. Estas ecuaciones se escriben con la misma filosofía con que se escribe la ecuación maestra

$$\frac{dP(\underline{s};t)}{dt} = \sum_{\underline{x}} \left[c(\underline{s}^{\underline{x}}; \underline{x}) P(\underline{s}^{\underline{x}}; t) - c(\underline{s}; \underline{x}) P(\underline{s}; t) \right] \quad (\text{IV3.12})$$

Supongamos entonces que realizamos una partición T del sistema, Z^d , de forma que los dominios resultantes cumplen: $q_{\underline{y}} \in T(Z^d)$ tal que $q_{\underline{y}} \cap q_{\underline{y}'} = \emptyset$ para todo $\underline{y} \neq \underline{y}'$ y $\bigcup_{\underline{y}} q_{\underline{y}} = Z^d$; el subíndice \underline{y} indica la situación del dominio $q_{\underline{y}}$ en el sistema. Sea $S_{\underline{y}}$ la superficie del dominio \underline{y} , esto es, el conjunto de los puntos del dominio cuya probabilidad de transición $c(\underline{s}; \underline{z})$, $\underline{z} \in q_{\underline{y}}$, depende de algún espín situado fuera de éste. De una forma obvia, podemos definir el interior del dominio \underline{y} como: $I_{\underline{y}} = q_{\underline{y}} - S_{\underline{y}}$, que es el conjunto de los puntos del dominio cuyas probabilidades de transición sólo dependen de espines que están en el dominio. Por ejemplo, si la interacción es del tipo Bragg-Williams, entonces $c(\underline{s}; \underline{x}) = f(s_{\underline{x}})$, luego $S_{\underline{x}} = \emptyset$ y $I_{\underline{x}} = q_{\underline{x}}$.

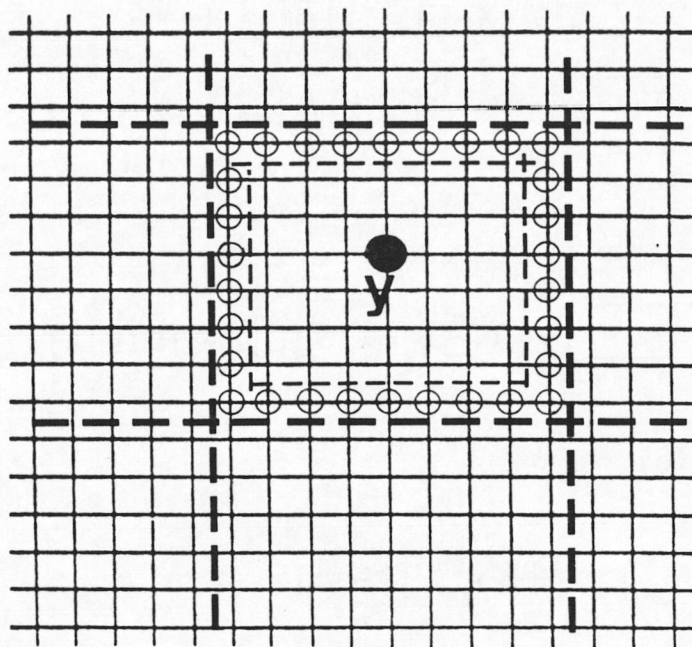


Fig. IV.0. Dibujo esquemático de una partición arbitraria sobre una red Z^d , $d=2$. Los círculos indican elementos de la superficie del dominio (S_y) y el resto de los puntos los elementos del interior (I_y) si las interacciones son entre vecinos próximos; y es un punto arbitrario del dominio que permite localizarlo.

Sea $A(\underline{s}_{q_y}; \underline{y})$, $\underline{s}_{q_y} = \{s_x | \underline{x} \in q_y\}$, una variable local que depende únicamente de espines pertenecientes al dominio q_y .

Definimos:

$$\langle A(\underline{y}) \rangle_t \equiv \sum_{\underline{s}} A(\underline{s}_{q_y}; \underline{y}) P(\underline{s}; t) \quad ; \quad (\text{IV3.13})$$

para hallar la ecuación de evolución de $\langle A(\underline{y}) \rangle_t$ hemos de multiplicar la ecuación (IV3.12) por $A(\underline{s}_{q_y}; \underline{y})$ y sumar sobre configuraciones:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle A(\underline{y}) \rangle_t}{dt} &= \sum_{\underline{s}} \sum_{\underline{x}} c(\underline{s}^{\underline{x}}; \underline{x}) P(\underline{s}^{\underline{x}}; t) A(\underline{s}_{q_y}; \underline{y}) - \\ &- \sum_{\underline{s}} \sum_{\underline{x}} c(\underline{s}; \underline{x}) P(\underline{s}; t) A(\underline{s}_{q_y}; \underline{y}) ; \end{aligned} \quad (\text{IV3.14})$$

por lo tanto:

$$\frac{d\langle A(\underline{y}) \rangle_t}{dt} = \sum_{\underline{s}} \sum_{\underline{x} \in q_y} \Delta A(\underline{s}_{q_y}; \underline{y}; \underline{x}) c(\underline{s}; \underline{x}) P(\underline{s}; t) \quad (\text{IV3.15})$$

donde hemos definido:

$$\Delta A(\underline{s}_{q_y}; \underline{y}; \underline{x}) \equiv A(\underline{s}_{q_y}^{\underline{x}}; \underline{y}) - A(\underline{s}_{q_y}; \underline{y}) . \quad (\text{IV3.16})$$

La ecuación (IV3.14) puede ser reescrita teniendo en cuenta la definición de superficie e interior del dominio, esto es,

$$\begin{aligned} \frac{d\langle A(\underline{y}) \rangle_t}{dt} &= \sum_{\underline{x} \in I_y} \sum_{\underline{s}_{q_y}} \Delta A(\underline{s}_{q_y}; \underline{y}; \underline{x}) c(\underline{s}_{q_y}; \underline{x}) Q(\underline{s}_{q_y}; t) + \\ &+ \sum_{\underline{x} \in S_y} \sum_{\underline{s}} \Delta A(\underline{s}_{q_y}; \underline{y}; \underline{x}) c(\underline{s}; \underline{x}) P(\underline{s}; t) \end{aligned} \quad (\text{IV3.17})$$

donde

$$Q(\underline{s}_{q_y}; t) \equiv \sum_{\underline{s} = \underline{s}_{q_y}} P(\underline{s}; t) \quad (\text{IV3.18})$$

no es más que la probabilidad de encontrar una configuración local \underline{s}_{q_y} en un instante t . A partir de ahora nos restringimos al estudio de sistemas homogéneos, esto es, aquellos cuyas propiedades medias no dependen del punto que consideremos:

$\langle A(\underline{y}) \rangle \equiv \langle A \rangle$, $q_y \equiv q$, $S_y \equiv S$, $I_y \equiv I$; supondremos también que la partición es regular, esto es, todos los dominios son topoló-

gicamente idénticos; entonces:

$$\frac{d\langle A \rangle_t}{dt} = \sum_{\underline{x} \in \Gamma} \sum_{\underline{s}_q} \Delta A(\underline{s}_q; \underline{x}) c(\underline{s}_q; \underline{x}) Q(\underline{s}_q; t) + \sum_{\underline{x} \in S} \sum_{\underline{s}} \Delta A(\underline{s}_q; \underline{x}) c(\underline{s}; \underline{x}) P(\underline{s}; t) \quad (\text{IV3.19})$$

Vemos que esta ecuación exácta tiene dos términos: uno depende únicamente de lo que ocurre en el interior del dominio, y en el otro está implícita la interacción con los alrededores, ésta hace que la ecuación sea prácticamente inabordable. Así, la primera aproximación que vamos a hacer sobre la ecuación (IV3.19) consiste en despreciar el efecto superficial descrito por el último término.

Estudiemos pues la naturaleza de la aproximación:

$$\sum_{\underline{x} \in S_q} \sum_{\underline{s}} \Delta A(\underline{s}_q; \underline{x}) c(\underline{s}; \underline{x}) P(\underline{s}; t) \simeq 0 \quad (\text{IV3.20})$$

Como $A(\underline{s}_q; \underline{x})$ puede escribirse:

$$A(\underline{s}_q; \underline{x}) = a(\underline{s}_{\tilde{q}}) + s_{\underline{x}} b(\underline{s}_{\tilde{q}}) \quad , \quad (\text{IV3.21})$$

donde $\underline{s}_{\tilde{q}}$ indica el conjunto de espines pertenecientes al dominio $\tilde{q} = q - \{\underline{x}\}$, la ecuación (IV3.20) queda:

$$\sum_{\underline{x} \in S_q} \sum_{\underline{s}} b(\underline{s}_{\tilde{q}}) s_{\underline{x}} c(\underline{s}; \underline{x}) P(\underline{s}; t) = \sum_{\underline{x} \in S_q} \langle b(\underline{s}_{\tilde{q}}) s_{\underline{x}} c(\underline{s}; \underline{x}) \rangle_t \simeq 0 \quad , \quad (\text{IV3.22})$$

que debe de cumplirse para toda $b(\underline{s}_{\tilde{q}})$, luego la condición suficiente para que esto ocurra es:

$$\sum_{\underline{\chi} \in S_q} s_{\underline{x}} C(\underline{s}; \underline{\chi}) \simeq 0, \quad \forall \underline{s}. \quad (\text{IV3.23})$$

Como la ecuación de evolución de la magnetización, $\langle s_{\underline{x}} \rangle_t$, viene dada por la ecuación

$$\frac{d\langle s_{\underline{x}} \rangle_t}{dt} = \left\langle \frac{\delta s_{\underline{x}}}{\delta t} \right\rangle_t, \quad \frac{\delta s_{\underline{x}}}{\delta t} \equiv -2s_{\underline{x}} C(\underline{s}; \underline{\chi}) \quad (\text{IV3.24})$$

donde $\delta s_{\underline{x}} / \delta t$ lo interpretamos como la variación del espín $s_{\underline{x}}$ en la unidad de tiempo dada una configuración de espines, entonces la condición (IV3.23) puede escribirse como:

$$\sum_{\underline{\chi} \in S_q} \frac{\delta s_{\underline{x}}}{\delta t} \simeq 0, \quad \forall \underline{s} \quad (\text{IV3.25})$$

Así pues, cuando realizamos la aproximación de despreciar el segundo término de la ecuación (IV3.19), estamos suponiendo que los dominios q están aislados cinéticamente de su entorno, esto es, que el exterior del dominio es tal que no provoca ninguna variación temporal neta en la magnetización y, por lo tanto, es "como si" el dominio se encontrase en un cierto régimen estacionario respecto de sus alrededores. Notar también que cuando describimos un sistema en equilibrio, la ecuación (IV3.20) se cumple exáctamente.

En conclusión, en esta aproximación utilizamos la ecuación cinética:

$$\frac{d\langle A \rangle_t}{dt} = \sum_{\underline{\chi} \in I} \sum_{S_q} \Delta A(\underline{s}_q; \underline{\chi}) C(\underline{s}_q; \underline{\chi}) Q(\underline{s}_q; t) \quad (\text{IV3.26})$$

Para poder trabajar con ésta ecuación, hemos de conocer $Q(\underline{s}_q; t)$; su construcción requiere una segunda aproximación.

Sabemos que $Q(\underline{s}_q; t)$ se puede escribir exáctamente como:

$$Q(\underline{s}_q; t) = 1 + \langle S \rangle_t \sum_{x \in q} S_x + \sum_{x, y \in q} \langle S_x S_y \rangle_t S_x S_y + \dots + \left\langle \prod_{x \in q} S_x \right\rangle_t \prod_{x \in q} S_x. \quad (\text{IV3.27})$$

Nuestra aproximación consiste en expresar todas las correlaciones entre n espines, $\langle s_{x_1} s_{x_2} \dots s_{x_n} \rangle$, en función de un solo tipo de ellas; así, por ejemplo, la aproximación más trivial consistirá en romper todas las correlaciones, $\langle s_{x_1} s_{x_2} \dots s_{x_n} \rangle = \langle s \rangle_t^n$. Tendríamos entonces

$$Q(\underline{s}_q; t) = 1 + \langle S \rangle_t \sum_{x \in q} S_x + \langle S \rangle_t^2 \sum_{x, y \in q} S_x S_y + \dots \quad (\text{IV3.28})$$

que, en un modelo de Ising, sería equivalente a trabajar con temperatura infinita. La siguiente aproximación en dificultad consiste en expresar todas las correlaciones en función de la magnetización y la correlación entre vecinos próximos, o sea, $\langle s \rangle$ y $\langle ss \rangle_{nn} \equiv \langle s_x s_y \rangle$ con $|\underline{x} - \underline{y}| = 1$. De esta forma podemos escribir la ecuación (IV3.28) como:

$$Q(\underline{s}_q; t) \equiv Q(\underline{s}_q; \langle s \rangle, \langle ss \rangle_{nn}; t) = 1 + f_1 \sum_{x \in q} S_x + f_2 \sum_{x, y \in q} S_x S_y + \dots + f_n \prod_{x \in q} S_x \quad (\text{IV3.29})$$

donde f_i , $i=1, \dots, n$, dependen de $\langle s \rangle$ y $\langle ss \rangle_{nn}$, lo cual es equivalente a expresar Q en función de las densidades en el

sistema de los tres tipos de agrupaciones de dos espines, ++, +- y --, densidades que expresaremos u, s, z respectivamente. Notar que dichas densidades están relacionadas entre si a través de una ligadura de tipo geométrico : $u+s+z=1$, por lo que sólo dos serán independientes (por ejemplo u y z). Utilizar esta ecuación en un problema de equilibrio sería equivalente a trabajar en la llamada "pair approximation" usada por Kikuchi (Kikuchi, 1951). Este nivel de aproximación es el que vamos a utilizar aquí puesto que ya proporciona una descripción física relevante del sistema.

Volviendo a la ecuación (IV3.26), elegiremos por sencillez una partición tal que el interior (I) de los dominios tenga sólo un espín; además, tomaremos probabilidades de transición $c(\underline{s}_q; \underline{x})$ que sólo dependan de s_x y de espines vecinos próximos a él. En estas condiciones, una agrupación típica en dos dimensiones es:

$$+ \begin{array}{|c|} \hline + \\ \hline \end{array} - \\ -$$

donde $\boxed{+}$ indica el único espín perteneciente a su interior. En general, en un sistema d -dimensional, una agrupación queda caracterizada por un espín central s y $2d$ espines vecinos de éste, de los cuales n_+ son positivos y $2d-n_+$ negativos; entonces, la probabilidad de encontrar esa agrupación en un instante t la podemos escribir:

$$Q(\underline{s}_q; t) \equiv Q(s, n_+; u, z) = \text{Deg}(n_+) P(s) P(+|s)^{n_+} P(-|s)^{2d-n_+} \quad (\text{IV3.30})$$

donde $\text{Deg}(n_+)$ indica las formas posibles de colocar n_+ espines positivos en $2d$ lugares, $p(s)$ es la probabilidad de encontrar un espín s y $p(\pm|s)$ es la probabilidad condicional de que, teniendo un espín s , encontremos un espín vecino \pm . Como

$$p(\pm|s) = \frac{P(\pm, s)}{p(s)} \quad (\text{IV3.31})$$

donde $p(\pm, s)$ es la probabilidad conjunta de encontrar una pareja \pm, s de espines, la ecuación (IV3.30) queda:

$$Q(s, n_+; u, z) = \binom{2d}{n_+} \frac{P(+, s)^{n_+} P(-, s)^{2d-n_+}}{p(s)^{2d-1}} \quad (\text{IV3.32})$$

Si tenemos ahora en cuenta las relaciones geométricas:

$$\begin{aligned} p(+, +) &= u \\ p(-, -) &= z \\ p(+, -) + p(-, +) &= 1 - u - z \\ p(+, -) &= p(-, +) \\ p(+, +) + p(+, -) &= p(+)\equiv n \\ p(-, -) + p(+, -) &= p(-)\equiv 1-n \quad , \end{aligned} \quad (\text{IV3.33})$$

donde \underline{n} es la densidad de espines (+) en el sistema, la ecuación (IV3.32) queda:

$$Q(+1, n_+; u, z) = \binom{2d}{n_+} \frac{u^{n_+} \left[\frac{1}{2} (1-u-z) \right]^{2d-n_+}}{n^{2d-1}} \quad (\text{IV3.34})$$

$$Q(-1, n_+; u, z) = \binom{2d}{n_+} \frac{\left[\frac{1}{2}(1-u-z)\right]^{n_+} z^{2d-n_+}}{(1-n)^{2d-1}} \quad (\text{IV3.35})$$

donde se puede comprobar fácilmente que Q está normalizada, o sea:

$$\sum_{n_+=0}^{2d} \left[Q(+1, n_+; u, z) + Q(-1, n_+; u, z) \right] = 1 \quad \forall u, z. \quad (\text{IV3.36})$$

Así pues, para conocer Q, hemos de saber el valor de u y z; para ello acudimos a la ecuación (IV3.26), tomamos $A=u, z$ y sustituimos Q por las ecuaciones (IV3.34) y (IV3.35), quedando:

$$\frac{du}{dt} = \sum_{n_+=0}^{2d} \binom{2d}{n_+} n_+ \left\{ c(\Delta E) \frac{\left[\frac{1}{2}(1-u-z)\right]^{n_+} z^{2d-n_+}}{(1-n)^{2d-1}} - c(-\Delta E) \frac{u^{n_+} \left[\frac{1}{2}(1-u-z)\right]^{2d-n_+}}{n^{2d-1}} \right\} \quad (\text{IV3.37})$$

$$\frac{dz}{dt} = \sum_{n_+=0}^{2d} \binom{2d}{n_+} (n_+ - 2d) \left\{ c(\Delta E) \frac{\left[\frac{1}{2}(1-u-z)\right]^{n_+} z^{2d-n_+}}{(1-n)^{2d-1}} - c(-\Delta E) \frac{u^{n_+} \left[\frac{1}{2}(1-u-z)\right]^{2d-n_+}}{n^{2d-1}} \right\} \quad (\text{IV3.38})$$

donde, para un hamiltoniano de interacción tipo Ising, es $\Delta E = -4J(n_+ - d)$, y $c(\Delta E)$ es la probabilidad de transición que, en los casos más usuales, dependerá del incremento ΔE de energía. Para calcular las fórmulas (IV3.37) y (IV3.38) hemos usado: $n_{++} = (1-s)n_+ / 2$, $n_{--} = (1-s)(2d-n_+) / 2$, $n_{+-} = (1+s)d - sn_+$ y $\Delta s = -2$, donde n_{++} , n_{--} y n_{+-} indican el número de parejas ++, -- y +-, respectivamente, de una configuración caracterizada por s y n_+ . Si utilizamos ahora el hecho de que $u-z=2n-1$, podemos trabajar, como es usual (Dickman. 1987), con las

variables n y u ; así, junto la ecuación (IV3.37), utilizaremos

$$\frac{dn}{dt} = d \sum_{n_+=0}^{2d} \binom{2d}{n_+} \left\{ c(\Delta E) \frac{(n-u)^{n_+} (1-2n+u)^{2d-n_+}}{(1-n)^{2d-1}} - c(-\Delta E) \frac{u^{n_+} (n-u)^{2d-n_+}}{n^{2d-1}} \right\} \quad (\text{IV3.39})$$

donde hay que recordar que la magnetización puede escribirse $m=2n-1$ y la densidad de energía $e=-qJ(1-4n+4u)/2$. Así pues, el método de trabajo en esta aproximación consiste en, dada la probabilidad de transición c , utilizar las ecuaciones (IV3.37) y (IV3.39), hallar $n(t)$ y $u(t)$ (esto es, $m(t)$ y $e(t)$) y, con ellas, utilizando (IV3.34), (IV3.35) y (IV3.26), calcular cualquier otra magnitud local.

También nos interesa estudiar las soluciones estacionarias de esas ecuaciones y su estabilidad. Esto es, tenemos dos ecuaciones diferenciales no lineales:

$$\frac{dn}{dt} = F_1(n, u; t) \quad (\text{IV3.40})$$

$$\frac{du}{dt} = F_2(n, u; t) \quad (\text{IV3.41})$$

cuyas soluciones estacionarias vienen dadas implícitamente por:

$$F_1(n_{st}, u_{st}) = 0 \quad , \quad F_2(n_{st}, u_{st}) = 0 \quad (\text{IV3.42})$$

Para que estas soluciones sean físicamente relevantes, han de

ser estables respecto a pequeñas perturbaciones; vamos a establecer pues un criterio de estabilidad local. Para ello, desarrollamos $F_{1,2}$ alrededor de la solución estacionaria (IV3.42); así, las ecuaciones (IV3.40) y (IV3.41) quedan:

$$\frac{d\bar{\eta}}{dt} \cong \frac{F_1(n_{st}, u_{st})}{0} + \left(\frac{\partial F_1}{\partial n}\right)_{st} \bar{\eta} + \left(\frac{\partial F_1}{\partial u}\right)_{st} \bar{e} + \mathcal{O}(\bar{\eta}^2, \bar{e}^2, \bar{\eta}\bar{e}) \quad (\text{IV3.43})$$

$$\frac{d\bar{e}}{dt} \cong \frac{F_2(n_{st}, u_{st})}{0} + \left(\frac{\partial F_2}{\partial n}\right)_{st} \bar{\eta} + \left(\frac{\partial F_2}{\partial u}\right)_{st} \bar{e} + \mathcal{O}(\bar{\eta}^2, \bar{e}^2, \bar{\eta}\bar{e}) \quad (\text{IV3.44})$$

donde $n = n_{st} + \bar{\eta}$, $u = u_{st} + \bar{e}$. Estas ecuaciones pueden escribirse

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \bar{\eta} \\ \bar{e} \end{pmatrix} \cong \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial F_1}{\partial n}\right)_{st} & \left(\frac{\partial F_1}{\partial u}\right)_{st} \\ \left(\frac{\partial F_2}{\partial n}\right)_{st} & \left(\frac{\partial F_2}{\partial u}\right)_{st} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{\eta} \\ \bar{e} \end{pmatrix} \quad (\text{IV3.45})$$

Este sistema de ecuaciones puede resolverse de manera estándar; así hallamos la solución:

$$\bar{\eta} \approx \bar{\eta}_0 e^{\lambda t}, \quad \bar{e} \approx \bar{e}_0 e^{\lambda t}, \quad (\text{IV3.46})$$

donde λ queda determinada por

$$\begin{vmatrix} \left(\frac{\partial F_1}{\partial n}\right)_{st} - \lambda & \left(\frac{\partial F_1}{\partial u}\right)_{st} \\ \left(\frac{\partial F_2}{\partial n}\right)_{st} & \left(\frac{\partial F_2}{\partial u}\right)_{st} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{IV3.47})$$

o sea,

$$\lambda^2 - \lambda \left[\left(\frac{\partial F_1}{\partial n}\right)_{st} + \left(\frac{\partial F_2}{\partial u}\right)_{st} \right] + \left(\frac{\partial F_1}{\partial n}\right)_{st} \left(\frac{\partial F_2}{\partial u}\right)_{st} - \left(\frac{\partial F_1}{\partial u}\right)_{st} \left(\frac{\partial F_2}{\partial n}\right)_{st} = 0 \quad (\text{IV3.48})$$

Esta ecuación tiene dos soluciones que llamaremos λ_+ y λ_- . Si las partes reales de λ_+ y λ_- son negativas, las soluciones serán estables puesto que entonces, cuando $t \rightarrow \infty$, las soluciones de (IV3.46) irán a cero. Otro criterio que puede utilizarse es el de Hurwitz: las partes reales de las soluciones de la ecuación (IV3.48) serán negativas si se cumple:

$$a) \left(\frac{\partial F_1}{\partial n} \right)_{st} + \left(\frac{\partial F_2}{\partial u} \right)_{st} < 0 \quad (\text{IV3.49})$$

$$b) \left(\frac{\partial F_1}{\partial n} \right)_{st} \left(\frac{\partial F_2}{\partial u} \right)_{st} - \left(\frac{\partial F_1}{\partial u} \right)_{st} \left(\frac{\partial F_2}{\partial n} \right)_{st} > 0 \quad (\text{IV3.50})$$

Así pues, las condiciones (IV3.49) y (IV3.50) son las que nos dicen si el sistema es o no es estable localmente para los valores estacionarios n_{st} y u_{st} . De todas maneras, nos interesa encontrar, además, condiciones necesarias (pero no suficientes) sencillas de estabilidad. Así, por ejemplo, si separamos al sistema de su estado estacionario variando únicamente n , entonces, de las ecuaciones (IV3.43) y (IV3.44) tenemos:

$$\frac{d\bar{\eta}}{dt} \simeq \left(\frac{\partial F_1}{\partial n} \right)_{st} \bar{\eta} \quad ; \quad \left(\frac{\partial F_2}{\partial n} \right)_{st} = 0 \quad (\text{IV3.51})$$

Así pues:

$$\bar{\eta} \simeq \bar{\eta}_0 e^{t \left(\frac{\partial F_1}{\partial n} \right)_{st}} \quad (\text{IV3.52})$$

por lo que $\bar{\eta}_{st}$ será estable si se cumple

$$\left(\frac{\partial F_3}{\partial n}\right)_{st} < 0 \quad (\text{IV3.53})$$

y será inestable si la derivada es mayor que cero; en cualquier caso, tendremos un punto crítico de estabilidad cuando $(\partial F_3/\partial n)_{st}=0$. Como veremos, este punto crítico estará asociado normalmente con cambios de fase.

IV.3.2.2. Aplicación al modelo de la sección III.1 en el caso de una dimensión.

En este caso, las ecuaciones (IV3.34) y (IV3.36) quedan:

$$\begin{aligned} \frac{dn}{dt} = & c(4J) \left[\frac{(1-2n+u)^2}{1-n} - \frac{u^2}{n} \right] + 2c(0)(n-u) \left[\frac{1-2n+u}{1-n} - \frac{u}{n} \right] + \\ & + c(-4J)(n-u)^2 \left(\frac{1}{1-n} - \frac{1}{n} \right) \end{aligned} \quad (\text{IV3.54})$$

$$\frac{du}{dt} = 2c(0)(n-u) \left[\frac{1-2n+u}{1-n} - \frac{u}{n} \right] + 2c(-4J) \frac{(n-u)^2}{1-n} - 2c(4J) \frac{u^2}{n} \quad (\text{IV3.55})$$

donde $c=c(\Delta H)$ es la probabilidad de transición, n la densidad de espines (+) y u la densidad de parejas ++. Particularizamos estas ecuaciones al caso de un probabilidad de transición tipo Metropolis, esto es,

$$c(\Delta H) = p \min \left[1, e^{-\beta_1 \Delta H} \right] + (1-p) \min \left[1, e^{-\beta_2 \Delta H} \right] \quad (\text{IV3.56})$$

donde $\beta_i = 1/k_B T$. En este caso, las ecuaciones (IV3.54) y (IV3.55) quedan:

$$\frac{dn}{dt} = F_1(n, u; \eta) \quad (\text{IV3.57})$$

$$\frac{du}{dt} = F_2(n, u; \eta) \quad (\text{IV3.58})$$

donde

$$F_1(n, u; \eta) = \eta \left[\frac{(1-2n+u)^2}{1-n} - \frac{u^2}{n} \right] + 2(n-u) \left[\frac{1-2n+u}{1-n} - \frac{u}{n} \right] + (n-u)^2 \left(\frac{1}{1-n} - \frac{1}{n} \right) \quad (\text{IV3.59})$$

$$F_2(n, u; \eta) = -2\eta \frac{u^2}{n} - 2u \frac{n-u}{n} + 2 \frac{(n-u)^2}{1-n} + 2(n-u) \frac{1-2n+u}{1-n} \quad (\text{IV3.60})$$

con $\eta \equiv p \exp(-\beta_1 4J) + (1-p) \exp(-\beta_2 4J)$; hemos supuesto $J > 0$ i.e. interacciones ferromagnéticas. Si estamos interesados en el régimen estacionario, $F_1 = F_2 = 0$. Sabemos a priori que, más allá de una temperatura crítica T_c , el sistema puede también ser caracterizado por la propiedad de que su parámetro de orden, $m = 2n - 1$, sea igual a cero y, consecuentemente, que $n = 1/2$ de tal forma que se sigue para el estado estacionario que F_1 es idénticamente igual a cero, y de la ecuación $F_2 = 0$ que:

$$u = \frac{1}{2} \frac{1}{1 + \eta^{1/2}}, \quad T \gg T_c \quad (\text{IV3.61})$$

El punto crítico será aquel en el que la estabilidad de la solución $n = 1/2$ y u dada por (IV3.61) se rompe; esto es, de la ecuación (IV3.53) obtenemos:

$$\left(\frac{\partial F_1}{\partial n} \right)_{n=1/2, u=u_c} = 0 \quad (\text{IV3.62})$$

o explícitamente;

$$\eta^{-2} \left[\eta (1-u)u + \left(\frac{1}{2}-u\right)^2 \right] \Big|_{\substack{n=1/2, u=u_c \\ \eta=\eta_c}} = 0 \quad (\text{IV3.63})$$

cuya única solución (que es también solución de la ecuación (IV3.61)) es

$$u_c = \frac{1}{2}, \quad \eta_c = 0 \quad (\text{IV3.64})$$

Así pues, la condición de criticalidad es:

$$\eta_c \equiv p e^{-\beta_1^c 4J} + (1-p) e^{-\beta_2^c 4J} = 0 \quad (\text{IV3.65})$$

que, para $p=1,0$ ó $\beta_1 = \beta_2 = \beta$ (equilibrio) implica $\beta_c = \infty$ ($T_c = 0$), como el caso de la aproximación de Bethe cuando el número de coordinación de la red es $q=2$. En cualquier otro caso (no-equilibrio) η_c es siempre estrictamente positivo; así pues, podemos concluir que no existe un punto crítico y por lo tanto no hay cambio de fase.

IV.4. Caso bidimensional.

IV.4.1. Cinética de agrupamientos locales.

Si aplicamos las ecuaciones (IV3.37), (IV3.39), (IV3.40) y (IV3.41) al problema bidimensional tenemos que las funciones relevantes en este caso son:

$$F_1 = (n-u)^4 \left(\frac{1}{v^3} - \frac{1}{n^3} \right) + 4(n-u)^3 \left(\frac{z}{v^3} - \frac{u}{n^3} \right) + 6(n-u)^2 \left(\frac{z^2}{v^3} - \frac{u^2}{n^3} \right) + 4\eta_1(n-u) \left(\frac{z^3}{v^3} - \frac{u^3}{n^3} \right) + \eta_2 \left(\frac{z^4}{v^3} - \frac{u^4}{n^3} \right) \quad (\text{IV4.1})$$

y

$$\frac{1}{4} F_2 = \frac{(n-u)^4}{v^3} + (n-u)^3 \left(\frac{3z}{v^3} - \frac{u}{n^3} \right) + 3(n-u)^2 \left(\frac{z^2}{v^3} - \frac{u^2}{n^3} \right) + \eta_1(n-u) \left(\frac{z^3}{v^3} - \frac{3u^3}{n^3} \right) - \eta_2 \frac{u^4}{n^3} \quad (\text{IV4.2})$$

donde $v=1-n$, $z=1-2n+u$, $\eta_1 = p\eta + (1-p)\eta'$ y $\eta_2 = p\eta^2 + (1-p)\eta'^2$ con $\eta = \exp(-4/(K-\Delta K))$ y $\eta' = \exp(-4/(K+\Delta K))$ para la dinámica de Metropolis. Para $T \geq T_c$ (o sea, $m=0$: $n=v=1/2$ y $u=z$) uno tiene que el estado estacionario queda caracterizado por:

$$(1-2u)^3(1+2u) - 16u^3 [u(\eta_2 - 2\eta_1) + \eta_1] = 0, \quad (\text{IV4.3})$$

que establece $u(T \geq T_c)$ como una función de K , ΔK y p , mientras que la condición de estabilidad crítica (IV3.53) produce

$$\eta_2^c u_c^3 \left(\frac{3}{2} u_c - 1 \right) - 6\eta_1^c u_c^2 \left(\frac{1}{2} - u_c \right)^2 + 3u_c \left(\frac{1}{2} - u_c \right)^2 (3u_c - 1) + \left(\frac{1}{2} - u_c \right)^3 (6u_c - 1) + \frac{3}{2} \left(\frac{1}{2} - u_c \right)^4 = 0 \quad (\text{IV4.4})$$

Cuando $u = u_c = 1/3$, ambas ecuaciones, (IV4.3) y (IV4.4), se reducen a una única:

$$5 - 16(\eta_1^c + \eta_2^c) = 0 \quad (\text{IV4.5})$$

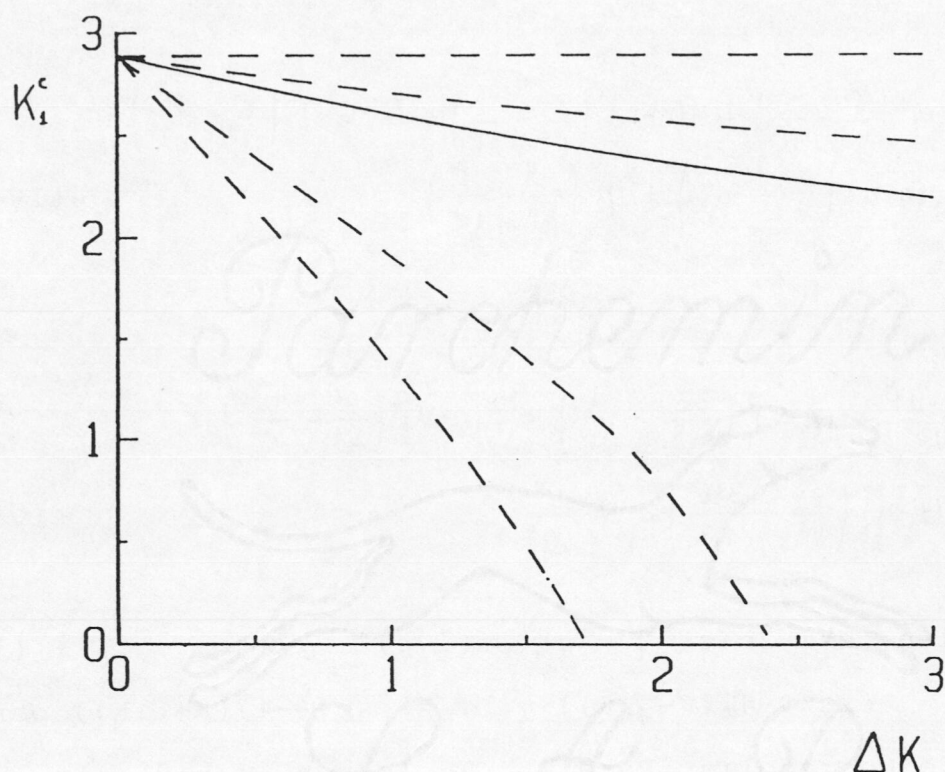


Fig. IV1. La temperatura crítica K_1^c como función de ΔK , de la ecuación (IV4.5), para diferentes valores de p : $p = 1, 0.9, 0.84375, 0.5$ y 0.25 de arriba hacia abajo.

que caracteriza la temperatura crítica como una función de p y ΔK . Las figuras IV1 y IV2 representan las variaciones de K_1^c , con p y ΔK . La figura IV3, por otra parte, representa la curva de coexistencia $m = m(K_1)$ para valores diferentes de ΔK y p y ha sido obtenida como solución de $F_1 = 0$ y $F_2 = 0$.

Todas estas figuras revelan un hecho interesante. Así, la figura IV1, por ejemplo, muestra un decrecimiento monótono de K_1^c hacia cero al crecer ΔK cuando p es más pequeño que p^* (representada por una línea continua en la figura), revelando que no hay solución positiva $K_1^c(p, \Delta K)$ cuando $\Delta K > \Delta K^*(p)$. La función $\Delta K^*(p)$ se muestra en la figura IV4. El valor anterior para p^* puede ser obtenido haciendo $K_1^c = 0$ en

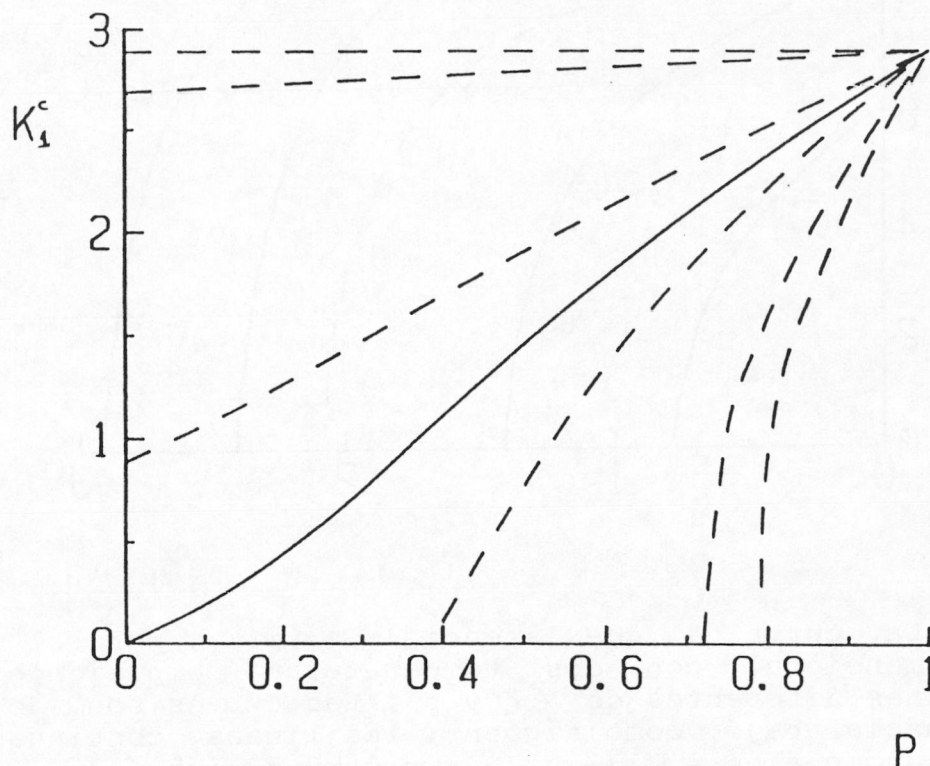


Fig.IV2. K_1^c como función de p , de la ecuación (IV4.5), para diferentes valores de ΔK : $\Delta K = 0, 0.1, 1, 1.44269, 2, 5$ y 10 de arriba hacia abajo.

la ecuación (IV4.5); se sigue que los valores de K_2^c para los que $K_1^c = 0$ están dados por

$$\eta_2' \equiv \exp(-4/K_2^c) = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left[1 + \frac{5}{4(1-p)} \right]^{1/2} \quad (\text{IV4.6})$$

ecuación que no puede verificarse ($\eta_2' \leq 1$) cuando $p > p^* = 27/32$.

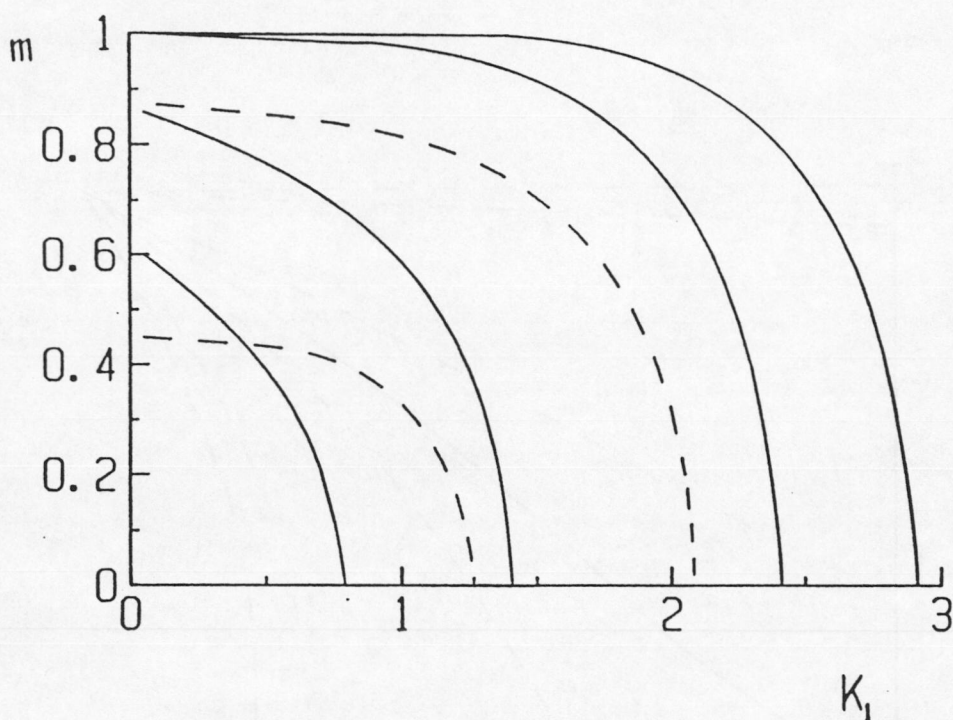


Fig. IV3. La curva de coexistencia $m = m(K_1)$ para el modelo bidimensional con dos temperaturas compitiendo para valores diferentes de ΔK y p . Las curvas son, de arriba hacia abajo, como siguen: las líneas continuas corresponden a $p = 1/2$ y $\Delta K = 0, 0.5, 1.5$ y 2 ; las líneas discontinuas corresponden a $p = 0.8$ y $\Delta K = 2.5$ y 3.75 .

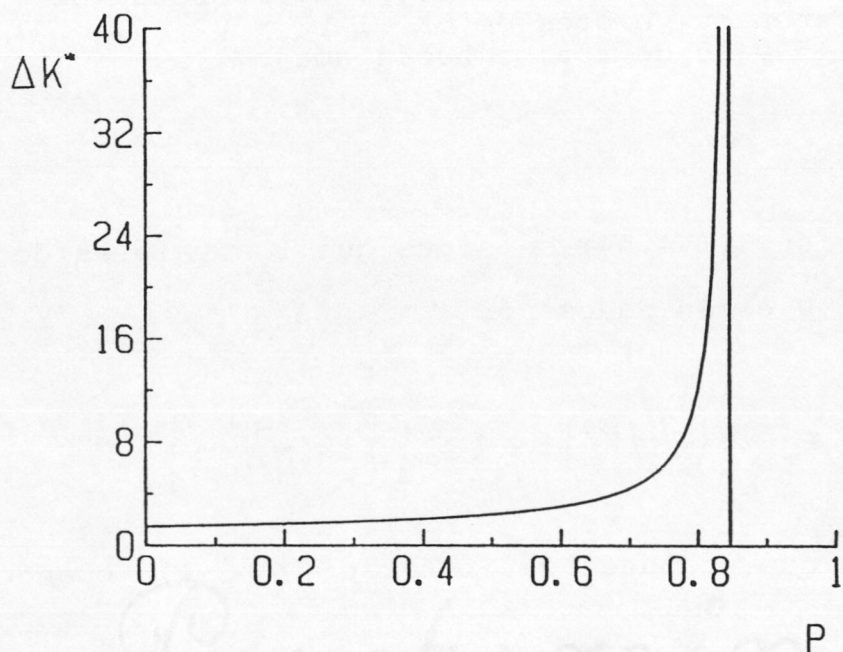


Fig. IV4. La cantidad ΔK^* , que produce un valor crítico de cero para la temperatura más baja, $K_1^c = 0$, como función de p . La línea vertical es la asíntota $p = 27/32$. Esto es, sólo la región por debajo de la derecha de la línea continua $\Delta K^*(p)$ se corresponde a la existencia de una temperatura crítica positiva K^c .

IV.4.2. Correlaciones aproximadas.

Vamos a considerar en esta sección la versión bidimensional del modelo con interacciones entre vecinos próximos en el caso de una probabilidad de transición dada por

$$C^{(i)} = \frac{\alpha}{2} \left[1 - \frac{1}{2} \chi_i S_{x,y} (S_{x+1,y} + S_{x-1,y}) \right] \times \\ \times \left[1 - \frac{1}{2} \chi_i S_{x,y} (S_{x,y+1} + S_{x,y-1}) \right] \quad (\text{IV4.7})$$

donde $i=1,2$, y $\chi_i = \tanh(2J/kT_i)$, $T_{1,2} = T \mp \Delta T$ y $x(y)$ representan los índices que describen los nudos de la red en la dirección horizontal (vertical). Las propiedades del estado estacionario se siguen de la ecuación (IV1.3) como

$$m \left[1 + 2p (\chi_2 - \chi_1) - 2\chi_2 \right] + \frac{1}{4} \left[p \chi_1^2 + (1-p) \chi_2^2 \right] \times \\ \times \left\langle S_{x,y} (S_{x+1,y} + S_{x-1,y}) (S_{x,y-1} + S_{x,y+1}) \right\rangle_{st} = 0 \quad (\text{IV4.8})$$

En principio, las funciones de correlación en esta aproximación pueden ser tratadas mediante la hipótesis de que su conducta de no-equilibrio con la temperatura es la media aritmética pesada de las correspondientes conductas exáctas de equilibrio a las temperaturas T_1 y T_2 (o sea con pesos p y $(1-p)$ respectivamente), estas últimas obtenidas a partir de la solución de Onsager. Esto implica, en particular, la desaparición de algunos efectos de no-equilibrio en las funciones de correlación pero, como la aproximación se vuelve exácta cuando $\Delta T \rightarrow 0$, uno espera obtener una buena descripción para

pequeños valores de ΔT ; por supuesto, las desviaciones más importantes de la conducta real se mostrarán cerca de la temperatura crítica, donde la situación está esencialmente gobernada por las correlaciones.

Sea $m_0(T)$ la solución de Onsager a temperatura T ,

$$m_0(T) = \left[1 - (1 - \gamma^2)^2 \gamma^{-4} \right]^{1/8} \quad (\text{IV4.9})$$

Uno tiene de la ecuación para el estado de equilibrio:

$$m_0(T_i) (1 - 2\gamma_i) + \frac{1}{4} \gamma_i^2 \langle s(s+s)(s+s) \rangle_i = 0 \quad (\text{IV4.10})$$

donde $s(s+s)(s+s)$ es una notación simplificada para la magnitud promediada en la ecuación (IV4.8) y $\langle \rangle_i$ representa el promedio del equilibrio a la temperatura T_i . Nuestra hipótesis es entonces

$$\begin{aligned} \langle s(s+s)(s+s) \rangle_{st} = & -4p\gamma_1^{-2} m_0(T_1) (1 - 2\gamma_1) - \\ & -4(1-p)\gamma_2^{-2} m_0(T_2) (1 - 2\gamma_2) \end{aligned} \quad (\text{IV4.11})$$

que puede ser usada en la ecuación (IV4.8) para obtener la ecuación básica del modelo :

$$\begin{aligned} m(T) = & \frac{p\gamma_1^2 + (1-p)\gamma_2^2}{1 + 2p(\gamma_2 - \gamma_1) - 2\gamma_2} \left[p\gamma_1^{-2} m_0(T_1) (1 - 2\gamma_1) + \right. \\ & \left. + (1-p)\gamma_2^{-2} m_0(T_2) (1 - 2\gamma_2) \right] . \end{aligned} \quad (\text{IV4.12})$$

Esto puede ser generalizado fácilmente a lo largo de dos

lineas diferentes: considerar más de dos temperaturas, como ya indicamos en la sección IV.1, e introducir constantes de acoplamiento diferentes, es decir J_x y J_y , para las dos direcciones principales de la red.

La expansión de la ecuación (IV4.12) para valores pequeños de ΔT produce, después de algo de álgebra, el resultado

$$m(T) = m_0(T) - (2p-1)\Delta T \frac{\partial m_0}{\partial T} + \dots \quad (\text{IV4.13})$$

donde el término de orden ΔT^2 , que representa la desviación del valor del equilibrio m_0 cuando $p=1/2$, es una función complicada de p , χ , m_0 , $\partial m_0 / \partial T$ y $\partial^2 m_0 / \partial T^2$; evitamos escribirla explícitamente aquí porque parece más conveniente usar la ecuación (IV4.12) directamente para propósitos prácticos, y también porque el rango de validez de la presente aproximación se reduce en la práctica a valores muy pequeños de ΔT . El interés de la ecuación (IV4.13), que tiene una singularidad en $T = T_c^{\text{Onsager}}$, donde $\partial m_0 / \partial T$ no está bien definida, reside en el hecho de mostrar explícitamente cómo la consideración de algunos efectos de no-equilibrio introduce correcciones a la conducta de equilibrio $m_0(T)$. También podemos encontrar un criterio para la validez de esta aproximación; esto es, de la condición $(2p-1) \cdot \Delta T (\partial m_0 / \partial T) \ll m_0(T)$ se sigue el requerimiento

$$T \ll T_c^{\text{Onsager}} - \frac{1}{8} (2p-1) \Delta T \quad (\text{IV4.14})$$

implicando, en particular, que uno no debería intentar estudiar la conducta crítica (por ejemplo los valores de los exponentes críticos) dentro de esta aproximación. La conducta que predice la ecuación (IV4.12) solo se compara bien con los datos Monte Carlo para $\Delta T \ll 0.05$. Una mejor aproximación requeriría la introducción del concepto de temperatura efectiva (en el sentido expresado al final de la sección IV.3) y de un hamiltoniano apropiadamente renormalizado, una tarea que va más allá del objetivo en el presente capítulo.

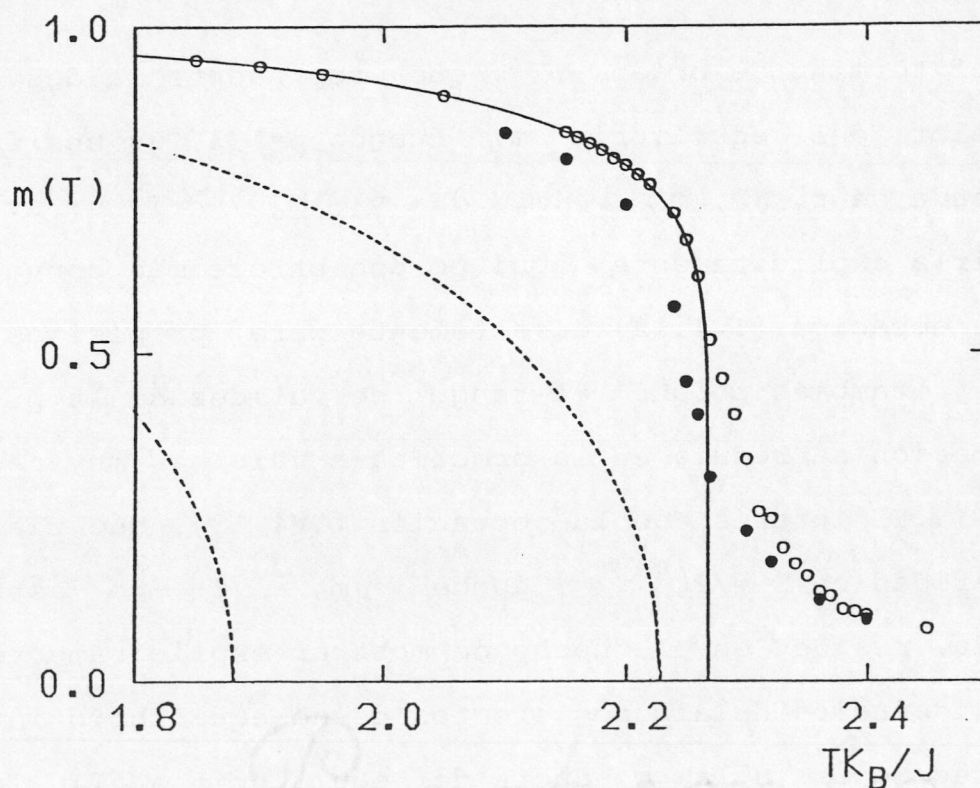


Fig.IV5. La magnetización del sistema, como función de la temperatura media, en una serie de experimentos Monte Carlo para $\Delta T = 0.05$ (círculos vacíos) y 0.5 (círculos llenos), $p_1 = p_2 = 1/2$, es comparada aquí con el resultado del equilibrio (línea continua) y con las predicciones respectivas (líneas discontinuas) en la sección IV.4. Las líneas discontinuas son también para $\Delta T = 0.05$ (la de arriba) y 0.5 , y están normalizadas horizontalmente a la temperatura crítica de Onsager.

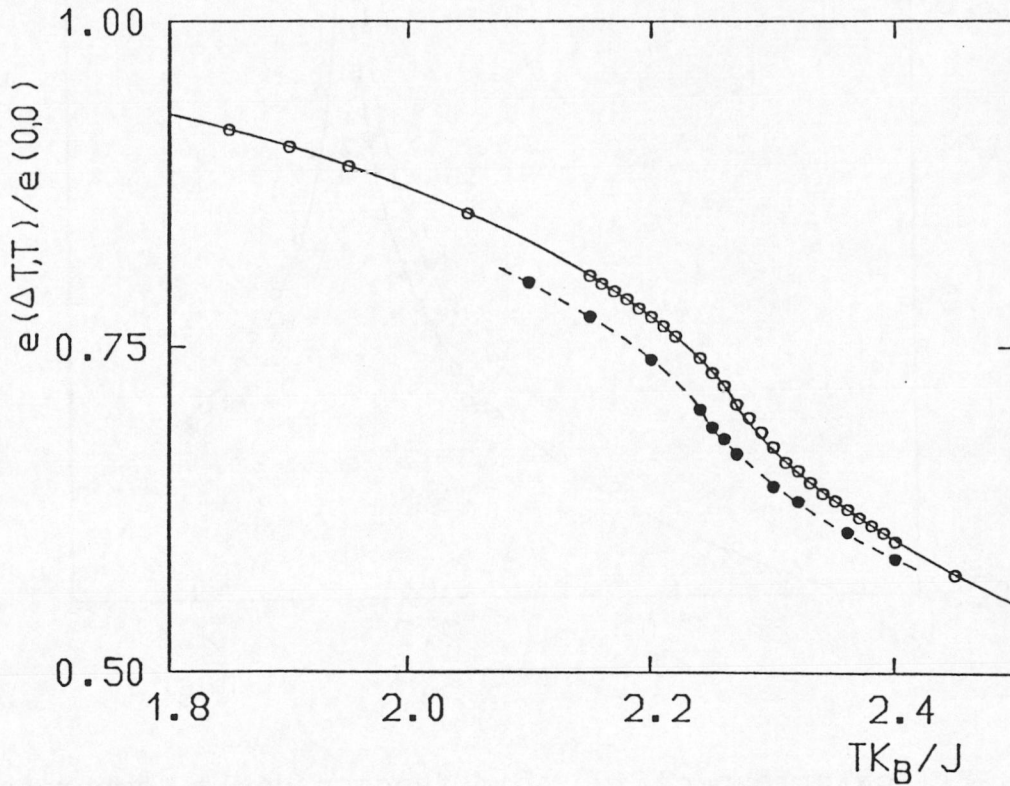


Fig.IV6. La energía del sistema en función de la temperatura en el caso de un experimento Monte Carlo; iguales símbolos que los de la Fig.IV5. La línea continua es el resultado del equilibrio de Onsager; la línea a trazos es una interpolación cúbica de los datos.

IV.4.3. Comparación con un experimento Monte Carlo.

Los resultados obtenidos mediante diferentes aproximaciones en las secciones precedentes pueden ser comparados con la conducta del modelo básico en una serie de experimentos Monte Carlo realizados por A. Labarta y J. Marro. El modelo de la sección IV.1 fue implementado en el ordenador escogiendo aleatoriamente, con probabilidad p_i , la temperatura T_i que aparece en la probabilidad de transición para la inversión del espín previamente seleccionado al azar. Nos referiremos al caso $T_1 = T - \Delta T$, $T_2 = T + \Delta T$, $p_1 = p_2 = 1/2$, y a la

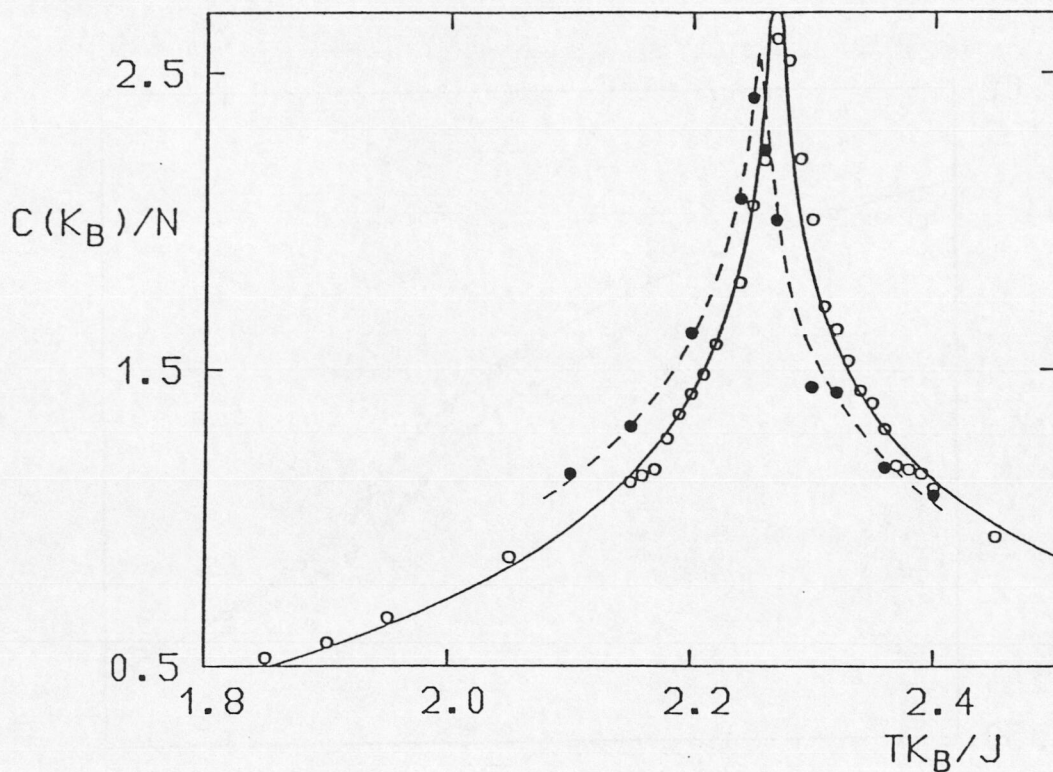


Fig.IV7. El calor específico como función de la temperatura; los círculos representan (igual notación que en la figura IV5) los valores obtenidos de las fluctuaciones de la energía, las líneas se obtienen de la derivada de los datos de la energía con respecto de la temperatura de la figura IV6 (después de realizar interpolaciones cúbicas a los datos).

dinámica de Metrópolis. El sistema es una red cuadrada de tamaño 96×96 (y algunas veces de 152×152).

Los datos de la magnetización para redes de 96×96 se presentan en la Figura IV5. Nuestra primera observación aquí se refiere a los efectos de tamaño finito lo cuales son aparentemente más grandes que los del equilibrio (o sea $\Delta T = 0$); así, por ejemplo, las colas de tamaño finito de la figura IV5 son similares a las que se tienen cuando la red es 60×60 para $\Delta T = 0$, y decrecen en un 15 % cuando utilizamos redes 152×152 . La situación mostrada en la Figura IV5 es, por otra parte, más clara: $\Delta T = 0.05$ produce unas diferen-

cias casi inobservables con respecto al caso del equilibrio de Onsager, mientras que $\Delta T = 0.5$ muestra un shift definido de la temperatura crítica hacia T_c ($\Delta T = 0.5$) = (2.25 ± 0.01) J/k_B. Como era de esperar, la aproximación de campo medio de la sección IV.4 solo describe los datos de una manera cualitativa (ver figura IV5); notar, sin embargo que algunas de las diferencias entre los resultados campo medio y Monte Carlo son probablemente consecuencia única de las diferencias entre las dinámicas implicadas por la aproximación de campo medio. La aproximación en la sección IV.4.2 es más cuidadosa, pero falla al intentar reproducir los datos cerca de T_c , incluso para $\Delta T = 0.05$.

Los datos de la energía están representados en la Figura IV6; éstos confirman básicamente nuestras anteriores observaciones. En particular, Fig. IV6 revela que la única diferencia entre los datos para $\Delta T = 0.05$ y el resultado de Onsager ocurren extremadamente cerca de la temperatura crítica. La figura IV7 muestra la conducta del calor específico obtenido de las fluctuaciones de la energía; estos datos son también comparados con la derivada de la energía respecto de la temperatura, obteniendo el mismo resultado para el presente problema de no-equilibrio.

Estamos realizando actualmente un análisis de los exponentes críticos para este sistema utilizando técnicas de escala con el tamaño. Los primeros resultados indican que no varían los exponentes críticos respecto de los del equilibrio, hecho que esperamos confirmar en breve.

IV.5. Conclusiones.

En este capítulo, hemos definido un modelo reticular en el que su dinámica no es más que la competición local de varias dinámicas donde, cada una de ellas, describe al modelo de equilibrio en un estado particular.

Al igual que en el capítulo anterior, en primer lugar, hemos resuelto el caso unidimensional con interacciones entre vecinos próximos. Encontramos, en este caso, que la mayoría de estos modelos pueden asimilarse a modelos de equilibrio y, por lo tanto, para su resolución podemos aplicar las técnicas de las colectividades de Gibbs, obteniendo, entre otras cosas, la no existencia de cambio de fase. En dos dimensiones, esta asimilación no es trivial y queremos estudiarla, de forma más amplia, a corto plazo. Por otra parte, hemos estudiado el modelo con interacciones de tipo campo medio, obteniendo su comportamiento dinámico y estacionario, además de su comportamiento crítico para varios casos típicos.

Para el estudio del modelo en dos dimensiones, hemos desarrollado la técnica de la cinética de agrupaciones locales (CAL) para un mecanismo de inversión de espines. Esta técnica, que no es más que una aproximación de campo medio tipo Bethe, nos ha permitido el estudio analítico de este modelo, obteniendo una descripción completa del mismo en un caso típico. También hemos estudiado el modelo bidimensional cuando está cerca del equilibrio obteniendo, para este caso, una buena descripción para zonas alejadas de la zona crítica.

V. MODELO REACCION-DIFUSION.

V.1. Definición del modelo.

En este capítulo estudiamos un modelo reticular de no-equilibrio que, en ciertos límites, puede ser resuelto exáctamente y que, como veremos, es físicamente muy relevante.

El modelo consiste en un sistema de espines tipo Ising en una red de d -dimensiones que evoluciona estocásticamente mediante una combinación de inversión de espines (dinámica de Glauber (Glauber, 1963)) e intercambios entre vecinos próximos (dinámica de Kawasaki (Kawasaki, 1972)). Los dos procesos ocurren independientemente uno del otro, con una relación Γ entre el número de intercambios intentados por nudo y el número de inversiones intentados por nudo.

La dinámica de Glauber ocurrirá en el modelo con una probabilidad de transición $c(\underline{s}; \underline{x})$, que dependerá en general de $\Delta H = H(\underline{s}^x) - H(\underline{s})$, donde $H(\underline{s})$ es el hamiltoniano de interacción del sistema, mientras que la dinámica de Kawasaki ocurre a velocidad constante, independientemente de la configuración de espines del sistema, \underline{s} , o sea, actuará como si el sistema estuviese a una temperatura infinita. El hamiltoniano de interacción es el de Ising

$$H(\underline{s}) = -J \sum_{|\underline{x}-\underline{y}|=1} s_{\underline{x}} s_{\underline{y}} = u_0 - J s_{\underline{x}} \sum_{\underline{y}}' s_{\underline{y}} \quad , \quad (V1.1)$$

donde la primera suma es sobre todas las parejas de vecinos próximos, la segunda suma es sobre los q vecinos próximos del lugar \underline{x} , y U_0 está definida por la ecuación (V1.1) y no contiene información sobre $s_{\underline{x}}$ y sus vecinos próximos.

Realizamos muy pocas restricciones sobre $c(\underline{s}; \underline{x})$. En particular, supondremos que satisface la condición de balance detallado para el estado de equilibrio de un modelo de Ising con interacciones descritas por la ecuación (V1.1) a una temperatura T . Esto es:

$$c(\underline{s}; \underline{x}) = e^{-\beta \Delta H} c(\underline{s}^{\underline{x}}; \underline{x}), \quad \Delta H \equiv H(\underline{s}^{\underline{x}}) - H(\underline{s}) \quad (\text{V1.2})$$

Con toda generalidad, podemos escribir

$$c(\underline{s}; \underline{x}) = \bar{f}(\underline{s}) \exp \left[-\beta J s_{\underline{x}} \sum_{\underline{y}}' s_{\underline{y}} \right] \quad (\text{V1.3})$$

donde $\bar{f}(\underline{s})$ es una función arbitraria que distingue entre sí las diferentes probabilidades de transición para el proceso de inversión de spin; como consecuencia de la condición (V1.2), se debe de cumplir que $\bar{f}(\underline{s}) = \bar{f}(\underline{s}^{\underline{x}})$.

La ecuación maestra que describe la evolución de la distribución de probabilidad configuracional del sistema es

$$\begin{aligned} \frac{dP(\underline{s}; t)}{dt} = & \Gamma \sum_{|\underline{x}-\underline{y}|=1} \left[P(\underline{s}^{\underline{x}, \underline{y}}; t) - P(\underline{s}; t) \right] + \\ & + \sum_{\underline{x}} \left[c(\underline{s}^{\underline{x}}; \underline{x}) P(\underline{s}^{\underline{x}}; t) - c(\underline{s}; \underline{x}) P(\underline{s}; t) \right] \end{aligned} \quad (\text{V1.4})$$

donde

$$\underline{S}^{\underline{x}, \underline{y}}(\underline{z}) = \begin{cases} S_{\underline{z}} & , \quad \underline{x}, \underline{y} \neq \underline{z} \\ S_{\underline{y}} & , \quad \underline{x} = \underline{z} \\ S_{\underline{x}} & , \quad \underline{y} = \underline{z} \end{cases} \quad (\text{V1.5})$$

El estado estacionario $P_{st}(\underline{s})$ dependerá de dos parámetros, β y Γ , y de la forma específica que tomemos para la función \bar{f} , o sea, de la probabilidad de transición $c(\underline{s}; \underline{x})$. Nuestro interés aquí se centra en la naturaleza de los estados estacionarios para probabilidades de transición diferentes (y familiares), o sea, los diferentes diagramas de las fases que aparecen según vamos variando los parámetros $\beta \in (0, \infty)$ y $\Gamma \in (0, \infty)$.

Es conveniente empezar haciendo algunas puntualizaciones importantes:

- i) Para $\Gamma = 0$, el sistema evoluciona bajo la acción de una dinámica de Glauber que satisface el balance detallado (V1.2) con respecto al estado de Gibbs con energía $H(\underline{s})$. De esta forma, los estados estacionarios para $\Gamma = 0$ son los mismos que los estados de equilibrio para $H(\underline{s})$. Su naturaleza ya es bien conocida (Thompson, 1972). En particular, para $d \geq 2$ hay una temperatura crítica $\beta = \beta_c$ tal que existe magnetización espontánea para $\beta > \beta_c$.
- ii) Para $\Gamma = \infty$, los estados estacionarios, como veremos, son de tipo Bernouilli, o sea, no hay correlación entre distintos lugares de la red.
- iii) Para Γ finita, hay dos casos a considerar : a) cuando

$\beta = 0$, hay un único estado estacionario tipo Bernouilli con magnetización igual a cero; b) cuando $\beta \neq 0$, el estado estacionario no es un estado de equilibrio para cualquier potencial razonable y sus propiedades no son conocidas. En particular, no se sabe todavía rigurosamente si el estado estacionario es único para $d = 1$, o sea, si hay un cambio de fase para este sistema en una dimensión.

Nosotros estudiaremos aquí exactamente alguna de las consecuencias de la ecuación maestra (V1.4) en el límite cuando $c(\underline{s}; \underline{x})$ representa las probabilidades de transición más familiares del proceso de inversión de espín. En particular, buscaremos las correspondientes soluciones espacialmente homogéneas e independientes del tiempo de (V1.4); veremos que éstas dependen crucialmente de la dimensión del sistema d , de la forma de c , y del signo de J .

V.2. Formulación del problema en el límite $\Gamma \rightarrow \infty$.

Notamos primero que, para $\Gamma = 0$, todas las dinámicas tipo Glauber cuyas probabilidades de transición satisfacen la propiedad de balance detallado (V1.3) tienen el mismo estado estacionario (y hay, de hecho, infinitas de estas c 's). Esto, sin embargo, no es verdad cuando $\Gamma > 0$; así, por ejemplo, multiplicando $c(\underline{s}; \underline{x})$ por una constante puede cambiar el estado estacionario de forma dramática. Esto ya está implícito en

las versiones más sencillas del modelo; por ejemplo, el caso $\Gamma \rightarrow \infty$ previamente investigado por De Masi y Ferrari (1985, 1986), Lebowitz (1986) y González-Miranda, Garrido, Marro y Lebowitz (1987). Más precisamente, reescalando el tiempo con Γ y el espacio con $\Gamma^{1/2}$ se demostró (de Masi et al., 1986) que, en el límite $\Gamma \rightarrow \infty$, la magnetización macroscópica $m(\underline{r}, t)$, $\underline{r} \in \mathbb{R}^d$, satisface una "ecuación de reacción-difusión" esto es, una ecuación de la forma

$$\frac{\partial m(\underline{r}; t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \vec{\nabla}^2 m(\underline{r}; t) + F(m(\underline{r}; t)) . \quad (\text{V2.1})$$

Aquí $F(m)$ es un polinomio en m , que puede ser interpretado como la derivada de un potencial Ψ , $F = \partial \Psi(m) / \partial m$, dado por

$$F(m) = -2 \langle S_{\underline{x}} c(\underline{s}; \underline{x}) \rangle_m \quad (\text{V2.2})$$

donde el promedio está tomado con respecto a un estado de Bernouilli con magnetización uniforme.

Para más detalles sobre el caso $\Gamma \rightarrow \infty$, el lector puede consultar las referencias (De Masi et al., 1985, 1986; Lebowitz, 1986; González-Miranda et al., 1987). Sin embargo, el teorema básico de De Masi, Ferrari y Lebowitz puede ser entendido de una manera sencilla. Después de multiplicar la ecuación (V1.4) por $S_{\underline{z}}$, y sumar sobre \underline{s} , uno tiene

$$\begin{aligned} \frac{d\langle S_{\underline{z}} \rangle}{dt} = & -2 \langle S_{\underline{z}} c(\underline{s}; \underline{z}) \rangle + \\ & + \Gamma \sum_{\underline{s}} S_{\underline{z}} \sum_{|\underline{x}-\underline{y}|=1} [P(\underline{s}^{\underline{x}\underline{y}}; t) - P(\underline{s}; t)] \end{aligned} \quad (\text{V2.3})$$

donde los paréntesis indican promedios con medida $P(\underline{s}; t)$.

El último término de la ecuación (V2.3) puede ser escrito

$$\begin{aligned} & \prod_{\underline{z}} s_{\underline{z}} \sum_{|\underline{x}-\underline{z}|=1} [P(\underline{s}^{\underline{x}, \underline{z}}; t) - P(\underline{s}; t)] + \\ & + \prod_{\substack{|\underline{x}-\underline{y}|=1 \\ \underline{x}, \underline{y} \neq \underline{z}}} \sum_{s_{\underline{z}}} s_{\underline{z}} \sum_{\underline{s} \neq s_{\underline{z}}} [P(\underline{s}^{\underline{x}, \underline{y}}; t) - P(\underline{s}; t)] = \\ & = \prod_{i=1}^d \sum_{s(\underline{z}, \underline{i})} s_{\underline{z}} \sum_{\underline{x}=\underline{z}+\underline{i}} \sum_{\underline{s} \neq s(\underline{z}, \underline{i})} [P(\underline{s}^{\underline{x}, \underline{z}}; t) - P(\underline{s}; t)] \end{aligned} \quad (V2.4)$$

donde nos hemos restringido, por sencillez, a redes cúbicas simples ($q=2d$), $\underline{z} \pm \underline{i}$ representan los lugares vecinos de \underline{z} a lo largo de las direcciones $\pm \underline{i}$, donde $i=1, 2, \dots, d$, y $s(\underline{z}, \underline{i})$ denota la variable de espín en el lugar \underline{z} y sus $2d$ vecinos próximos. Ahora es conveniente introducir la función con argumentos ordenados:

$$\bar{P}(s_{\underline{z}-\underline{i}}, s_{\underline{z}}, s_{\underline{z}+\underline{i}}) = \sum_{\underline{s} \neq s(\underline{z}, \underline{i})} P(\underline{s}) \quad (V2.5)$$

que permite escribir el último término de (V2.4) como

$$\prod_{i=1}^d \sum_{s(\underline{z}, \underline{i})} (s_{\underline{z}+\underline{i}} - 2s_{\underline{z}} + s_{\underline{z}-\underline{i}}) \bar{P}(s_{\underline{z}-\underline{i}}, s_{\underline{z}}, s_{\underline{z}+\underline{i}}) \quad (V2.6)$$

Esto es, la ecuación (V2.3) queda

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle s_{\underline{z}} \rangle}{\partial t} &= -2 \langle s_{\underline{z}} C(\underline{s}; \underline{z}) \rangle + \\ &+ \prod_{i=1}^d \left[\langle s_{\underline{z}+\underline{i}} \rangle - 2 \langle s_{\underline{z}} \rangle + \langle s_{\underline{z}-\underline{i}} \rangle \right] \end{aligned} \quad (V2.7)$$

Introducimos entonces nuevas variables para el tiempo, $\tau = \epsilon^{-2} t$, y para el espaciado de la red $a = a_0 / \epsilon$, $\underline{i} = \epsilon \hat{a} \underline{i}$, implicando

nuevas probabilidades de transición por unidad de tiempo $\tilde{c} = c \epsilon^2$, $\tilde{\Gamma} = \Gamma \epsilon^2$, y escribimos $\tilde{\Gamma} = 1/2 \epsilon^2$; en el límite $\epsilon \rightarrow 0$, $t \rightarrow 0$, $a_0 \rightarrow 0$, ζ y a continúan siendo finitas, y tenemos en la descripción continua, $\underline{r} = \{r_i \hat{i}\}$:

$$\frac{\partial \langle S_{\underline{r}} \rangle}{\partial \tau} = -2 \langle S_{\underline{r}} C(\underline{s}; \underline{r}) \rangle_m + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} \langle S_{\underline{r}} \rangle_m \quad (V2.8)$$

donde la nueva medida $\tilde{\mu} = \epsilon^d \mu$ es Bernouilli. Esto es, los intercambios son lo bastante rápidos en el límite $\epsilon \rightarrow 0$ como para llevar al sistema a un equilibrio local a temperatura infinita, la temperatura de la dinámica de Kawasaki, donde no hay correlaciones; la magnetización está entonces gobernada por las ecuaciones macroscópicas de reacción-difusión (V2.8) con los coeficientes evaluados en la colectividad del equilibrio local.

La importancia física de la ecuación macroscópica (V2.8) reside en que ha sido deducida a partir de la dinámica microscópica estocástica que caracteriza al sistema. Esta conexión entre dinámica microscópica y macroscópica sólo ha podido ser establecida rigurosamente hasta ahora en sistemas muy especiales (como en el caso de esferas rígidas en una dimensión, donde la dinámica es muy sencilla). Nosotros, en este capítulo, no vamos a profundizar sobre las características de esta conexión, aunque es muy interesante, sino que vamos a estudiar las características físicas que tiene este sistema descrito por la ecuación macroscópica (V2.8) y en particular, vamos a profundizar en su comportamiento crítico,

en sus posibles cambios de fase de no-equilibrio y en la influencia que tienen las distintas dinámicas microscópicas, en el comportamiento macroscópico del sistema.

Para calcular los promedios Bernouilli (V2.2) para las diferentes probabilidades de transición $c(\underline{s}; \underline{x})$, es conveniente escribir

$$c(\underline{s}; \underline{x}) = f(\underline{s}) [A_+(\underline{s}) + s_x A_-(\underline{s})] \quad (\text{V2.9})$$

donde, para el caso de redes hiper-cúbicas simples, es

$$f(\underline{s}) \equiv \bar{f}(\underline{s}) \prod_{i=1}^d \cosh[\beta J (S_{x+i} + S_{x-i})], \quad (\text{V2.10})$$

con

$$f(\underline{s}) = f(\underline{s}^x) \quad (\text{V2.11})$$

como consecuencia de la propiedad de balance detallado (V1.2), y

$$A_{\pm}(\underline{s}) = \frac{1}{2} \left\{ \prod_{i=1}^d \left[1 - \frac{\gamma}{2} (S_{x+i} + S_{x-i}) \right] \pm \prod_{i=1}^d \left[1 + \frac{\gamma}{2} (S_{x+i} - S_{x-i}) \right] \right\} \quad (\text{V2.12})$$

$\gamma = \tanh(2\beta J)$. Esto es, las soluciones estacionarias uniformes m son soluciones de la ecuación (V2.8) o sea, cumplen:

$$\langle f(\underline{s}) [s_x A_+(\underline{s}) + A_-(\underline{s})] \rangle_m = 0 \quad (\text{III2.13})$$

donde A_{\pm} no tiene una dependencia explícita en s_x .

V.3. Solución exacta del modelo $\Gamma \rightarrow \infty$ para diferentes probabilidades de transición, en d-dimensiones.

Las probabilidades de transición más familiares en la literatura, usualmente relacionadas con problemas de equilibrio, difieren unas de otras en la forma de la función $f(\underline{s})$. Consideraremos aquí los casos más interesantes para dimensión arbitraria d y $J > 0$ (interacciones ferromagnéticas); el caso $J < 0$ (antiferromagnético) será considerado en la sección V.4.1.

V.3.1. Probabilidad de transición tipo Glauber.

La probabilidad de transición introducida originalmente por Glauber (Glauber, 1963) para inversión de espín en el modelo de Ising unidimensional puede ser generalizada a dimensión arbitraria d mediante la ecuación (V2.9) con $f(\underline{s}) = \text{constante}$. Se sigue de la ecuación (V2.13) que

$$m \langle A_+(\underline{s}) \rangle_m + \langle A_-(\underline{s}) \rangle_m = 0 \quad (\text{V3.1})$$

que se reduce a

$$(1-m\gamma)^d (m+1) + (1+m\gamma)^d (m-1) = 0 \quad (\text{V3.2})$$

Esto implica que $m=0$ es siempre una solución y que otras soluciones aparecen como parejas simétricas $\pm m$. Desarrollando la ecuación (V3.2) alrededor de $m = 0$ obtenemos.

$$2m + d(d-1)\gamma^2 m^3 - 2d\gamma m - \frac{1}{3}d(d-1)(d-2)\gamma^3 m^3 + \mathcal{O}(m^4) = 0 \quad (\text{V3.3})$$

y, cuando $m \rightarrow 0$,

$$\gamma_c = \tanh(2\beta_c d) = d^{-1} \quad (\text{V3.4})$$

Esto es, β_c es finito cuando $1 < d < \infty$, $\beta_c \rightarrow \infty$ cuando $d \rightarrow 1$ y $2\beta_c J \cong d^{-1}$ cuando $d \rightarrow \infty$. Uno puede también demostrar después de algo de álgebra que

$$m \sim B \tilde{\epsilon}^{1/2}, \quad \tilde{\epsilon} \equiv 1 - \beta_c / \beta \rightarrow 0^-, \quad (\text{V3.5})$$

con $B^2 = 6\beta_c J d$, y $B^2 \rightarrow 3$, $d \rightarrow 0$.

V.3.2. Probabilidad de transición tipo Glauber-modificado.

Dado que la probabilidad de transición en el apartado V.3.1 solo produce un punto crítico a temperatura cero en el caso de un sistema unidimensional, De Masi et al., (1986) han usado la modificación

$$C(\underline{\xi}; \underline{\chi}) = 1 - \tilde{\gamma} S_x [S_{x+1} + S_{x-1}] + \tilde{\gamma}^2 S_{x+1} S_{x-1} \quad (\text{V3.6})$$

donde $\tilde{\gamma} = \tanh \beta J$. Esto puede ser generalizado para dimensión arbitraria mediante la ecuación (V2.9) con

$$f(\underline{s}) = \prod_{i=1}^d \left[1 + \tilde{\gamma}^2 s_{\underline{x}+\hat{i}} s_{\underline{x}-\hat{i}} \right], \quad (\text{V3.7})$$

obteniéndose en ese caso:

$$(1 - m\tilde{\gamma})^{2d} (m+1) + (1 + m\tilde{\gamma})^{2d} (m-1) = 0 \quad (\text{V3.8})$$

por substitución en la ecuación (V2.13). Esta ecuación es precisamente la ecuación (V3.2) con las transformaciones $d \rightarrow 2d$, $J \rightarrow J/2$, luego uno tiene las mismas conclusiones que las del apartado V.3.1, excepto que

$$\tilde{\gamma}_c = \tanh(\beta_c J) = (2d)^{-1} \quad (\text{V3.9})$$

y, como era esperado (De Masi et al., 1985), el sistema tiene una β_c finita para $d = 1$ y $J > 0$. Vemos, pues, como la probabilidad de transición puede cambiar profundamente el comportamiento macroscópico de un sistema fuera del equilibrio.

V.3.3. Probabilidad de transición genérica.

El hecho de que los estados estacionarios del modelo dependan fuertemente de la elección de $f(\underline{s})$ puede también ser ilustrado tomando f como una función de \underline{s} , excepto de s_x

y de sus vecinos próximos. Uno tiene entonces que

$$f(m) \langle S_x [A_+(\underline{s}) + S_x A_-(\underline{s})] \rangle_m = 0 \quad . \quad (V3.10)$$

Como consecuencia, a las soluciones que caracterizan el apartado V.3.1 y V.3.2 hay que añadir ahora las soluciones $f(m)=0$ que pueden ser tan variadas como uno desee.

V.3.4. Probabilidad de transición tipo Kawasaki.

Más familiares, usadas en problemas del equilibrio y en el estudio de la evolución temporal de modelos de aleaciones binarias en el formalismo canónico (Thompson, 1972), son las probabilidades de transición de Kawasaki (Kawasaki, 1972) que también pueden ser aplicadas a procesos de inversión de espín; están definidas por

$$C(\underline{s}; \underline{\chi}) = [1 + \exp(\beta \Delta H)]^{-1} \quad (V3.11)$$

o pueden ser caracterizadas aquí mediante la ecuación (V2.9) con

$$f(\underline{s}) = A_+^{-1} \quad (V3.12)$$

Esto es

$$m = - \left\langle \frac{A_-}{A_+} \right\rangle_m = \left\langle \tanh [\beta] \sum_{i=1}^d (S_{x+\hat{i}} + S_{x-\hat{i}}) \right\rangle_m \quad (V3.13)$$

Aquí los cálculos son más laboriosos que en los anteriores casos; veamos algunos detalles.

La magnitud promediada en la ecuación (V3.13) puede ser escrita

$$\begin{aligned} \tanh \left[\beta J \sum_{i=1}^{2d} S_i \right] &= A_0 + A_1 \sum_{i=1}^{2d} S_i + \\ &+ A_2 \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + \dots + A_{2d} S_1 \dots S_{2d} \end{aligned} \quad (\text{V3.14})$$

donde las sumas recorren n-plas de espines diferentes y hemos simplificado los índices de las variables de espín de la ecuación (V3.13) porque son irrelevantes para los propósitos del presente cálculo: así, lo que ocurre es que s_i $i=1, \dots, 2d$, son variables diferentes. Cada configuración de $2d$ espines puede ser caracterizada mediante

$$r \text{ espines negativos, } 2d-r \text{ espines positivos} \quad (\text{V3.15})$$

para los cuales la ecuación (V3.14) tiene la forma

$$\tanh \left[2\beta J (d-r) \right] = \sum_{n=0}^{2d} a_n A_n \quad (\text{V3.16})$$

$a_0 = 1$. Aquí necesitamos calcular los coeficientes a_n : el conjunto de $2d$ ecuaciones (V3.16) nos permitirá entonces calcular las A_n desconocidas de la ecuación (V3.14).

Sea $p(s, n-s)$ la probabilidad de tener n espines, de una de las configuraciones de (V3.15), tales que s son positivos y $n-s$ son negativos,

$$p(s, n-s) = \frac{(2d-r)! r! (2d-n)!}{(2d)!} \binom{n}{s} \frac{1}{(2d-r-s)!} \frac{1}{(r+s-n)!} \quad (\text{V3.17})$$

Uno tiene las condiciones de contorno $\max(0, n-r) \leq s \leq \min(n, 2d-r)$, la propiedad de simetría $p(s, n-s) = p(n-s, s)$ y, entonces,

$$a_n = \binom{2d}{n} \sum_s p(s, n-s) (-1)^{n-s} \quad (\text{V3.18})$$

tal que $a_n(r) = (-1)^n \cdot a_n(2d-r)$, $a_n(d) = 0$ para cualquier n impar. Esto es, $A_n = 0$ para cualquier n par y se sigue que

$$\langle \tanh(\beta \sum_{i=1}^{2d} s_i) \rangle = \sum_{n=1}^d A_{2n-1} m^{2n-1} \binom{2d}{2n-1} . \quad (\text{V3.19})$$

Si definimos los nuevos coeficientes $b_n \equiv a_{2n-1}$, $B_n \equiv A_{2n-1}$, e introducimos la notación matricial $b_{rn} = b_n(r)$, obtenemos las ecuaciones

$$m = \sum_{n=1}^d B_n m^{2n-1} \binom{2d}{2n-1} \quad (\text{V3.20})$$

donde

$$B_n = \sum_{s=0}^{d-1} (b^{-1})_{ns} P_s \quad (\text{V3.21})$$

con

$$P_r \equiv \tanh[2\beta J(d-r)] \quad (\text{V3.22})$$

$r = 0, \dots, d-1, n = 1, \dots, d$, y

$$(b)_{rs} = \sum_{s=\max(0, 2n-1-r)}^{\min(2n-1, 2d-r)} (-1)^{s+1} \binom{2d-r}{s} \binom{r}{2n-1-s} \quad (V3.23)$$

Esto implica que la función $F(m)$ definida en la ecuación (V2.2) es $F(m) = m F'(m^2)$ con $F'(m^2)$ un polinomio de orden d . Esto es, $m = 0$ es siempre una solución y hay una temperatura crítica dada por

$$B_1^c = (2d)^{-1}. \quad (V3.24)$$

Uno puede también concluir de la ecuación (V3.20), en general, que el exponente crítico de la magnetización es $1/2$ (a menos que $B_2=0$), independiente de d .

Podemos concretar las anteriores expresiones para dimensiones 1, 2 y 3. Para $d = 1$ tenemos $b_{01} = 2$ y $B_1 = \gamma/2$, implicando un punto crítico a temperatura cero, o sea, no hay cambio de fase. Por otra parte, para $d = 2$ tenemos

$$\underline{b}^{-1} = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & -2 \end{pmatrix}, \quad (V3.25)$$

$$B_{1,2} = \frac{1}{8} \left[\tanh(4\beta J) \pm 2\gamma \right] \quad (V3.26)$$

y la ecuación (V3.20), $1 = 4B_1 + 4m^2 B_2$, da

$$m = \pm \left[\frac{\gamma^3 - \gamma^2 + 2\gamma - 1}{\gamma^3} \right]^{1/2}; \quad (V3.27)$$

donde $\chi \equiv \tanh(2\beta J)$ como antes. Esto implica un punto crítico para $\chi_c = 0.569840$ ($\beta_c = 0.3236 J^{-1}$). Finalmente, para $d = 3$ tenemos

$$\underline{b}^{-1} = \frac{1}{32} \begin{pmatrix} 1 & 4 & 5 \\ 1 & 0 & -3 \\ 1 & -4 & 5 \end{pmatrix} \quad (\text{V3.28})$$

y

$$\begin{aligned} B_{1,3} &= \frac{1}{32} \left[\tanh(6\beta J) \pm 4 \tanh(4\beta J) + 5\chi \right], \\ B_2 &= \frac{1}{32} \left[\tanh(6\beta J) - 3\chi \right], \end{aligned} \quad (\text{V3.29})$$

dando lugar a $\chi_c = 0.37499$ ($\beta_c = 0.197 J^{-1}$).

V.3.5. Probabilidad de transición tipo Metropolis.

Consideraremos ahora explícitamente la familiar probabilidad de transición de Metropolis (Metropolis et al., 1953) definida como

$$C(\underline{\xi}; \underline{\chi}) = \min \left[1, \exp(-\beta \Delta U) \right]. \quad (\text{V3.30})$$

Esto puede ser escrito para $d = 1$ como

$$\begin{aligned} C(\underline{\xi}; \chi) &= \frac{1}{4} (3 + \tilde{\chi}) + \\ &+ \frac{1}{4} (\tilde{\chi} - 1) \left\{ S_x [S_{x+1} + S_{x-1}] + S_{x+1} S_{x-1} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{V3.31})$$

$\tilde{\gamma} = \exp(-4 \beta J)$, y para dimensión arbitraria d como en la ecuación (V2.9) con

$$f(\underline{s}) = \exp \left[-\beta J \left| \sum_{i=1}^d (s_{x+i} + s_{x-i}) \right| \right] \prod_{i=1}^d \cosh \left[\beta J (s_{x+i} + s_{x-i}) \right]. \quad (V3.32)$$

Esto es, la ecuación (V2.13) implica ahora que

$$m = - \langle f(\underline{s}) A_- \rangle_m / \langle f(\underline{s}) A_+ \rangle_m \quad (V3.33)$$

que podemos calcular de forma análoga a la utilizada en el apartado V.3.4. Uno solo necesita darse cuenta ahora de que podemos escribir

$$f(\underline{s}) A_{\pm} = A_0^{\pm} + \dots + A_{2d}^{\pm} s_1 \dots s_{2d}, \quad (V3.34)$$

como en la ecuación (V3.14), y de que, en lugar de la ecuación (V3.16), uno tiene ahora las dos ecuaciones ($J > 0$):

$$e^{-2\beta J |d-r|} \begin{cases} \cosh \\ \sinh \end{cases} (2\beta J |d-r|) = \sum_{n=0}^{2d} a_n A_n^{\pm}; \quad (V3.35)$$

notar también que $A_n^- = 0$ para cualquier n par, mientras que $A_n^+ = 0$ para cualquier n impar. Después de renombrar las variables a y A por b y B respectivamente de una manera análoga a la del apartado V.3.4, obtenemos

$$\langle f(\underline{s}) A_+ \rangle_m = \sum_{n=0}^d \binom{2d}{2n} B_n^+ m^{2n} \quad (V3.36)$$

y

$$\langle f(\xi) A_- \rangle_m = - \sum_{n=1}^d \binom{2d}{2n-1} B_n^- m^{2n-1} \quad (\text{V3.37})$$

donde

$$e^{-2\beta J(d-r)} \cosh[2\beta J(d-r)] = \sum_{n=0}^d b_m^+ B_n^+ \quad , \quad (\text{V3.38})$$

 $r = 0, 1, \dots, d$, y

$$e^{-2\beta J(d-r)} \sinh[2\beta J(d-r)] = \sum_{n=1}^d b_m^- B_n^- \quad , \quad (\text{V3.39})$$

 $r = 0, 1, \dots, d-1$, con

$$b_m^+ = \sum_{s=\max(0, 2n-r)}^{\min(2n, 2d-r)} (-1)^s \binom{2d-r}{s} \binom{r}{2n-s} \quad (\text{V3.40})$$

y

$$b_m^- = \sum_{s=\max(0, 2n-1-r)}^{\min(2n-1, 2d-r)} (-1)^{s+1} \binom{2d-r}{s} \binom{r}{2n-1-s} \quad (\text{V3.41})$$

Se sigue de la ecuación (V3.33) que

$$m \sum_{n=0}^d \binom{2d}{2n} B_n^+ m^{2n} = \sum_{n=1}^d \binom{2d}{2n-1} B_n^- m^{2n-1} \quad , \quad (\text{V3.42})$$

implicando que $m = 0$ es siempre solución y que existe una temperatura crítica definida mediante la ecuación:

$$(B_0^+ / B_1^-)^c = 2d \quad (\text{V3.43})$$

En particular uno tiene para $d = 1$ que

$$(\underline{b}^+)^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad \underline{b}^- = 2, \quad (V3.44)$$

$$\begin{aligned} B_{0,1}^+ &= \frac{1}{2} \tilde{\gamma}^{1/2} \cosh(2\beta J) \pm 1 \\ B_1^- &= \frac{1}{2} \tilde{\gamma}^{1/2} \sinh(2\beta J) \end{aligned} \quad (V3.45)$$

Además de la solución $m = 0$ esto sólo da lugar a la solución $m = \pm ((3\tilde{\gamma} + 1)/(1 - \tilde{\gamma}))$, que no está normalizada correctamente salvo para $\beta J = 0$. Para $d = 2$, por otra parte, uno tiene

$$(\underline{b}^+)^{-1} = \begin{pmatrix} -2 & -8 & -6 \\ -2 & 0 & 2 \\ -2 & 8 & -6 \end{pmatrix}, \quad (\underline{b}^-)^{-1} = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & -2 \end{pmatrix}, \quad (V3.46)$$

y

$$\begin{aligned} B_2^+ &= \frac{1}{8} \left[\tilde{\gamma} \cosh 4\beta J \pm 4\tilde{\gamma}^{1/2} \cosh 2\beta J + 3 \right] \\ B_1^+ &= \frac{1}{8} \left[\tilde{\gamma} \cosh 4\beta J - 1 \right] \\ B_2^- &= \frac{1}{8} \left[\tilde{\gamma} \sinh 4\beta J \pm 2\tilde{\gamma}^{1/2} \sinh 2\beta J \right], \end{aligned} \quad (V3.47)$$

y la ecuación (V3.42) da, además de $m = 0$:

$$F'(\lambda) = a\lambda^2 + b\lambda + c = 0 \quad (V3.48)$$

donde $\lambda = m^2$ y

$$\begin{aligned}
 a &\equiv B_2^+ = \frac{1}{16} (1 - \tilde{\gamma})(3 - \tilde{\gamma}) \\
 b &\equiv 6B_1^+ - 4B_2^- = \frac{1}{16} (10\tilde{\gamma}^2 - 8\tilde{\gamma} - 2) \\
 c &\equiv B_0^+ - 4B_1^- = \frac{1}{16} (5\tilde{\gamma}^2 + 12\tilde{\gamma} - 1)
 \end{aligned}
 \tag{V3.49}$$

La transición ocurrirá ahora para el valor de $\tilde{\gamma}$ para el que una pareja de raíces complejas de F' se vuelve una raíz real positiva. Esto significa que tenemos un salto discontinuo en la magnetización espontánea,

$$m^2 = \frac{2 + 8\tilde{\gamma}_c - 10\tilde{\gamma}_c^2}{(1 - \tilde{\gamma}_c)(3 - \tilde{\gamma}_c)} \quad ,
 \tag{V3.50}$$

donde $\tilde{\gamma}_c$ es la solución de

$$5\tilde{\gamma}_c^3 - 3\tilde{\gamma}_c^2 + 7\tilde{\gamma}_c - 1 = 0 \quad ,
 \tag{V3.51}$$

o sea, $\tilde{\gamma}_c = 0.1501$ o $\beta_c = 0.4741 \text{ J}^{-1}$. Finalmente, para $d = 3$ uno tiene

$$(\underline{b}^+)^{-1} = \frac{1}{592} \begin{pmatrix} 56 & 186 & 240 & 110 \\ 16 & 32 & -16 & -32 \\ 16 & -42 & -16 & 42 \\ 56 & -36 & 240 & -260 \end{pmatrix}, \quad (\underline{b}^-)^{-1} = \frac{1}{32} \begin{pmatrix} 1 & 4 & 5 \\ 1 & 0 & -3 \\ 1 & -4 & 5 \end{pmatrix},
 \tag{V3.52}$$

y las soluciones (excepto $m = 0$) satisfacen

$$F'(\lambda) = a\lambda^3 + b\lambda^2 + c\lambda + d = 0
 \tag{V3.53}$$

con

$$\begin{aligned} a &= B_3^+ , \quad b = 15B_2^+ - 6B_3^- , \\ c &= 15B_1^+ - 20B_2^- , \quad d = B_0^+ - 6B_1^- , \end{aligned} \quad (V3.54)$$

$$\begin{pmatrix} B_0^+ \\ B_1^+ \\ B_2^+ \\ B_3^+ \end{pmatrix} = (\underline{b}^+)^{-1} \begin{pmatrix} \tilde{\gamma}^{3/2} \cosh 6\beta J \\ \tilde{\gamma} \cosh 4\beta J \\ \tilde{\gamma}^{1/2} \cosh 2\beta J \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} B_1^- \\ B_2^- \\ B_3^- \end{pmatrix} = (\underline{b}^-)^{-1} \begin{pmatrix} \tilde{\gamma}^{3/2} \sinh 6\beta J \\ \tilde{\gamma} \sinh 4\beta J \\ \tilde{\gamma}^{1/2} \sinh 2\beta J \end{pmatrix}. \quad (V3.55)$$

La temperatura crítica es la solución de

$$167\tilde{\gamma}_c^3 + 630\tilde{\gamma}_c^2 + 795\tilde{\gamma}_c - 408 = 0 , \quad (V3.56)$$

o sea, $\tilde{\gamma}_c = 0.3843$ o $\beta_c = 0.2391 \text{ J}^{-1}$.

V.3.6. Probabilidad de transición con campo magnético externo.

Para acabar, volvemos a la consideración explícita de un campo magnético externo; es decir utilizamos ahora el hamiltoniano

$$H(\underline{s}) = -J \sum_{|x-y|=1} S_x S_y + h \sum_x S_x \quad (V3.57)$$

en lugar de la ecuación (V1.1). Es muy sencillo demostrar, siguiendo los procedimientos de las secciones V.2 y V.3, que la condición de estacionariedad que daba la ecuación (V2.13) es reemplazada ahora por

$$(m \cosh \beta h - \sinh \beta h) \langle f(\underline{s}) A_+(\underline{s}) \rangle_m + \\ + (\cosh \beta h - m \sinh \beta h) \langle f(\underline{s}) A_-(\underline{s}) \rangle_m = 0 \quad (\text{V3.58})$$

Vamos a considerar $f(\underline{s}) = \text{constante}$, lo que se corresponde con una probabilidad de transición tipo Glauber, y vamos a usar el hecho de que $\gamma_c = d^{-1}$ para $h = 0$, como se sigue de la ecuación (V3.4). Se obtiene después de algo de cálculo que

$$m \sim A h^{1/\delta} \quad (\text{V3.59})$$

con $\delta = 3$ y $A^3 = 3 \beta_c d^2 / (d^2 - 1)$, por lo que $d = 1$ es otra vez singular; por otra parte, uno tiene que $A \rightarrow 0$ cuando $d \rightarrow \infty$.

También parece interesante referirse explícitamente a una probabilidad de transición tipo Glauber modificada con $d = 1$, o sea, a la probabilidad de transición definida por la ecuación (V3.6), en presencia de un campo magnético externo. Uno obtiene inmediatamente que

$$A_+ = 1, \quad A_- = -\frac{1}{2} \gamma (S_{x+\hat{i}} + S_{x-\hat{i}}), \quad (\text{V3.60})$$

$$f(\underline{s}) = 1 + \tilde{\gamma}^2 S_{x+\hat{i}} S_{x-\hat{i}}, \quad (\text{V3.61})$$

y, de la ecuación (V3.58), que

$$m (1 + \tilde{\gamma}^2 m^2 - 2\tilde{\gamma}) = \tanh \beta h (1 + \tilde{\gamma}^2 m^2 - 2\tilde{\gamma} m^2) \quad (\text{V3.62})$$

que, para campos pequeños, se reduce a

$$m(1-2\tilde{\gamma}) \simeq \beta h - \tilde{\gamma}^2 m^3 \quad . \quad (V3.63)$$

Esto reproduce cualitativamente el resultado (V3.59) cerca de $\tilde{\gamma}_c = 1/2$, y uno tiene

$$m = (4\beta)^{1/3} h^{1/3} + \mathcal{O}(h) \quad , \quad (V3.64)$$

mientras que da lugar a $m \simeq \beta \cdot h / (1 - 2\tilde{\gamma})$ cuando m es lo suficientemente pequeña ($\tilde{\gamma} < 1/2$). La sección V.4 contiene más consecuencias (generales) de la acción de un campo externo sobre el sistema.

V.4. Algunos teoremas generales.

En esta sección demostramos algunos resultados generales concernientes a la conducta del modelo en el límite de $\Gamma \rightarrow \infty$. En particular, demostramos que el cambio de fase no puede ocurrir para ninguna $c(\underline{s}; \underline{x})$ cuando las interacciones son antiferromagnéticas ($J < 0$), y encontramos las condiciones sobre $c(\underline{s}; \underline{x})$ para que exista un cambio de fase en el caso $d = 1$ ($J > 0$).

V.4.1. Imposibilidad de transición de fase en sistemas anti-ferromagnéticos.

El estudio del caso antiferromagnético ($J < 0$) requiere la consideración de dos subredes microscópicas separadas; sean Z_o^d y Z_e^d de manera que $Z_e^d \cup Z_o^d = Z^d$, $Z_e^d \cap Z_o^d \neq \emptyset$; $\underline{x} \in Z_e^d$ implica que los vecinos próximos de \underline{x} , $\underline{x} \pm \underline{i} \in Z_o^d$, $i=1,2,\dots, d$, y viceversa. Las magnetizaciones relevantes son ahora

$$m_e \equiv \langle S_{\underline{x}} \rangle, \underline{x} \in Z_e^d; \quad m_o \equiv \langle S_{\underline{x}} \rangle, \underline{x} \in Z_o^d \quad (V4.1)$$

Tomemos primero $\underline{x} \in Z_e^d$; de la ecuación (V2.13) se lee

$$m_e F_+(m_o) + F_-(m_o) = 0 \quad (V4.2)$$

donde

$$F_{\pm}(m) \equiv \langle f(\underline{s}) A_{\pm}(\underline{s}) \rangle_m \quad (V4.3)$$

Las dependencias explícitas mostradas en la ecuación (V4.2) son una consecuencia del hecho de que f y A_{\pm} tienen toda su dependencia en \underline{s} a través de $s_{\underline{x}+\underline{i}} + s_{\underline{x}-\underline{i}}$ (como se sigue de las ecuaciones (V2.12) y (V2.10)). Tomemos $\underline{x} \in Z_o^d$; se sigue por el mismo camino que

$$m_o F_+(m_e) + F_-(m_e) = 0 \quad (V4.4)$$

Como era esperado, la paridad de las funciones F_{\pm} bajo la transformación $s_x \longrightarrow -s_x$, o sea $F_+(m) = F_+(-m)$ y $F_-(m) = -F_-(-m)$, hace que ambas, $m_e = m_0$ y $m_e = -m_0$, sean soluciones del sistema (V4.2) + (V4.4).

Después, notamos que $f(\underline{s})$ es definida positiva y escribimos las cantidades A_{\pm} definidas en la ecuación (V2.12) como

$$A_{\pm} = \pm 2 A_0(\underline{s}) \left\{ \frac{\cosh}{\sinh} \right\} \left[\beta J \sum_{i=1}^d (S_{x+i} + S_{x-i}) \right] \quad (\text{V4.5})$$

donde

$$A_0(\underline{s}) \equiv \left\{ \prod_{i=1}^d \cosh [\beta J (S_{x+i} + S_{x-i})] \right\}^{-1}. \quad (\text{V4.6})$$

El hecho de que la función $\cosh(\alpha)$ y $\sinh(\alpha)$ tienen diferente paridad nos permite escribir de la ecuación (V4.2) que

$$m_e \leq \alpha J |K| / |J|, \quad \alpha \geq 1, \quad |K| \geq 0 \quad (\text{V4.7})$$

donde

$$K \equiv \frac{\langle \sinh [\beta |J| \sum_i (S_{x+i} + S_{x-i})] A_0(\underline{s}) f(\underline{s}) \rangle_m}{\langle \cosh [\beta |J| \sum_i (S_{x+i} + S_{x-i})] A_0(\underline{s}) f(\underline{s}) \rangle_m} \quad (\text{V4.8})$$

Esto es, se sigue de la ecuación (V4.7) para interacciones antiferromagnéticas que $m_e \leq -\alpha |K|$ implicando $m_e = 0$ y, por lo tanto, no existe cambio de fase antiferromagnético. La

prueba descansa en el hecho de que la función $\bar{f}(\underline{s})$ definida en la ecuación (V1.3) tiene solo una dependencia par en S_{x+i} , una propiedad que caracteriza las probabilidades de transición más familiares de inversión de espines tales como las descritas en la sección V.3.

V.4.2. Condiciones generales para la existencia de cambios de fase en una dimensión.

Un resultado interesante de la sección V.3 estriba en el hecho de que la existencia de un cambio de fase para $d = 1$ depende crucialmente de la elección de $c(\underline{s}; \underline{x})$. Investigamos aquí algo más este hecho aplicando nuestro formalismo a una probabilidad de transición arbitraria $c(\underline{s}; \underline{x})$. Cuando $d = 1$, uno simplemente tiene de la ecuación (V2.12) que

$$A_+ = 1, \quad A_- = -\frac{1}{2} \gamma [S_{x+1} + S_{x-1}] \quad (V4.9)$$

donde $\gamma \equiv \tanh(2\beta J) > 0$ para interacciones ferromagnéticas, y entonces la ecuación (V2.13) se reduce a

$$m \langle f(\underline{s}) \rangle_m = \frac{1}{2} \gamma \langle f(\underline{s}) [S_{x+1} + S_{x-1}] \rangle_m. \quad (V4.10)$$

Supondremos que

$$f(\underline{s}) = a_1(\gamma) + a_2(\gamma) [S_{x+1} + S_{x-1}] + a_3(\gamma) S_{x+1} S_{x-1} \quad (V4.11)$$

lo cual no es más que considerar una forma más general para $c(\underline{s}; \underline{x})$ en un sistema unidimensional: la ecuación (V4.11) con $a_2 = 0$ representa a la probabilidad de transición de Metropolis (sección V.3.5) y a Glauber modificada (sección V.3.2), mientras que $a_2 = a_3 = 0$ corresponde a Glauber (sección V.3.1) y a Kawasaki (sección V.3.4), y $a_2 \neq 0$ representa los efectos de campos externos en el sistema (sección V.3.6).

La utilización de la ecuación (V4.11) en (V4.10) da lugar a

$$a_3 m^3 + a_2 (2 - \gamma) m^2 + (a_1 - a_1 \gamma - a_3 \gamma) m - a_2 \gamma = 0 \quad (\text{V4.12})$$

donde

$$a_3 \leq a_1, \quad -a_1 \leq a_2 \leq a_1 \quad (\text{V4.13})$$

que está implicado por el hecho de que $f(\underline{s})$ es definida positiva. La primera consecuencia de la ecuación (V4.12) es que, para $a_2 = 0$ (el caso $a_2 \neq 0$ será considerado más adelante), la función $F(m)$ definida en la ecuación (V2.2) se vuelve en general como un producto de m por un polinomio de segundo orden en m , esto es, en ausencia de cualquier campo externo, $m = 0$ es siempre una solución, y es única cuando $a_3 = 0$; para $a_3 \neq 0$, sin embargo, uno tiene que añadir la solución

$$m^2 = \frac{a_1}{a_3} (\gamma - 1) + \gamma \quad (\text{V4.14})$$

Esta será físicamente relevante cuando $0 \leq m^2 \leq 1$: esas cotas dan lugar a $1/2 \leq \gamma \leq 1$ cuando $a_3 > 0$, mientras que dan lugar a condiciones no físicas cuando $a_3 < 0$. Resumiendo, el sistema solo mostrará estados segregados con solución (V4.14) para $1/2 < \gamma < 1$ cuando

$$a_2 = 0, \quad a_1 \geq 0, \quad a_3 > 0 \quad (\text{V4.15})$$

y $m = 0$ como una única solución en cualquier otro caso.

Por otra parte, cuando $a_2 \neq 0$, el caso más sencillo ocurre cuando $a_3 = 0$; uno tiene $a_1 > |a_2|$ y

$$m_{\mp} = \frac{-a_1(1-\gamma)_{\mp} [a_1^2(1-\gamma)^2 + 4a_2^2(2-\gamma)\gamma]^{1/2}}{2a_2(2-\gamma)} \quad (\text{V4.16})$$

donde la solución m_{-} funciona solo para $a_1(\gamma) \leq 2|a_2(\gamma)|$, mientras que la validez de m_{+} no tiene restricción en todo el rango de temperaturas.

V.5. Comparación con los resultados de una simulación por ordenador.

El estudio realizado en las secciones precedentes hace que uno se pregunte sobre la conducta del sistema y de sus estados estacionarios cuando tenemos finitas Γ , o sea $0 < \Gamma < \infty$. En particular debería ser interesante conocer la relación entre la inestabilidad de campo medio macroscópica que ocurre para $\Gamma \rightarrow \infty$ en β_c cuando $J > 0$ y $d \geq 2$ (y para

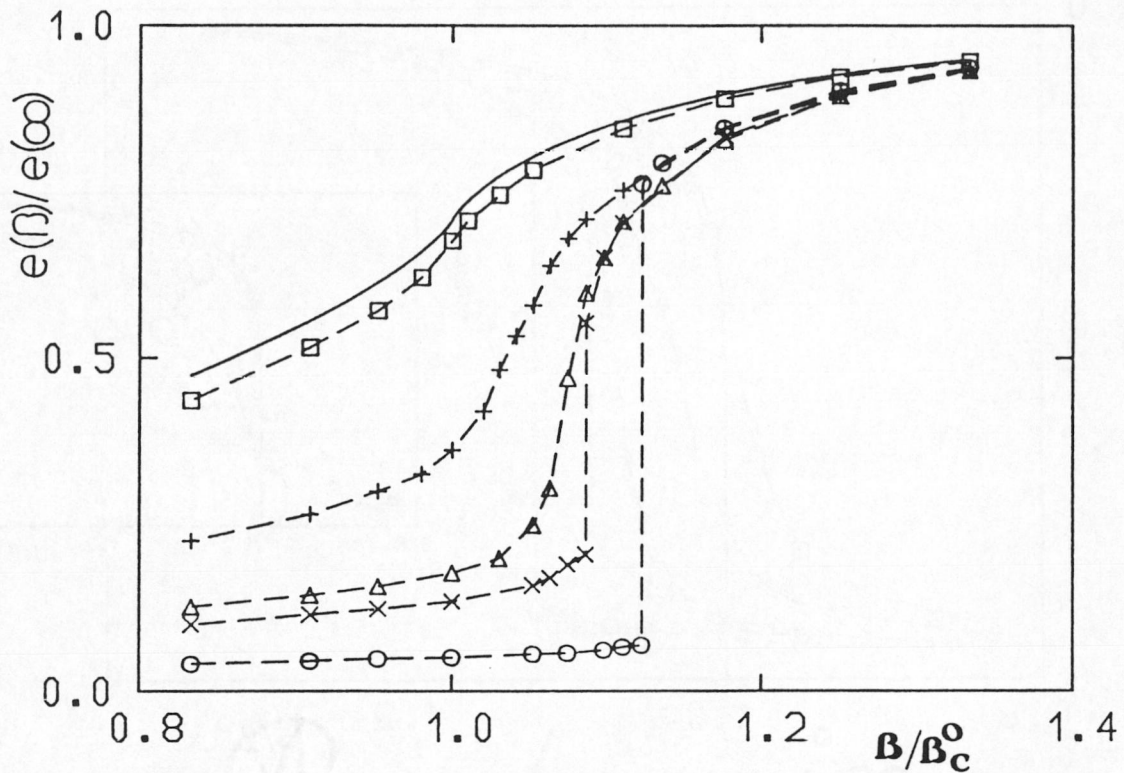


Fig. V1. La energía del sistema, como función de β en unidades del valor crítico de Onsager $\beta_c^0 = 0.440687 \text{ J}^{-1}$, para un sistema bidimensional con interacciones de vecinos próximos ferromagnéticas y valores diferentes de p . La línea continua representa $p = 0$, o sea el equilibrio para el sistema infinito. Los símbolos son para $p = 0.10$ (cuadrados vacíos), 0.60 (+), 0.80 (triángulos), 0.85 (X) y 0.95 (círculos); las líneas discontinuas son guías para los ojos.

algunas probabilidades de transición $c(\underline{s}; \underline{x})$, también para $d = 1$), y la conducta del estado estacionario para Γ fijada. J. González - Miranda y J. Marro han investigado tal relación mediante la simulación en un ordenador de un modelo dinámico semejante al de la sección V.1 para una probabilidad de transición particular $c(\underline{s}; \underline{x})$. El procedimiento es el usual de un experimento de Monte Carlo (Binder, 1976; Mouritsen, 1984), excepto que cada vez que un lugar \underline{x} es seleccionado al azar de una red dada ($d=1,2$), entonces con probabilidad p , $0 < p \leq 1$,

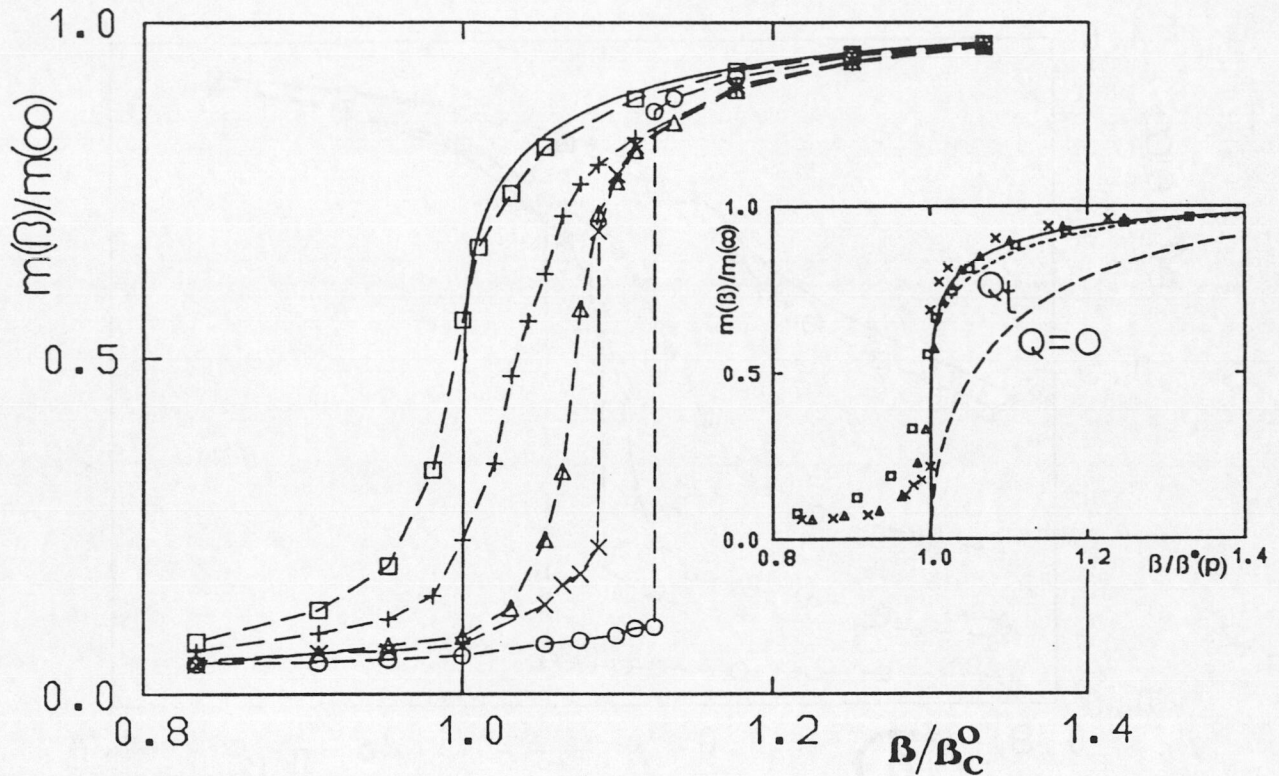


Fig. V2. La magnetización del sistema como una función de β . Mismo sistema y símbolos que los de la Figura V1. El inset compara los datos para $p = 0, 0.10, 0.80$ y 0.85 con los resultados de Dickman (Dickman, 1987) para $Q = 0$ y Q , como es indicado. La variable β en el inset está normalizada a la correspondiente temperatura de transición, $\beta^*(p)$ o $\beta^*(Q)$.

el spin s_x es intercambiado con otro de sus vecinos próximos, como si el sistema estuviera en contacto con un baño térmico a temperatura infinita, y con probabilidad $(1-p)$, s_x es invertido con un probabilidad de transición tipo Metropolis (Metropolis, 1953), como si la temperatura del baño térmico fuera de β^{-1} , o sea

$$C(\underline{s}; \underline{x}) = (1-p) \min [1, \exp(-\beta \Delta U)] \quad , \quad (V5.1)$$

en este último caso.

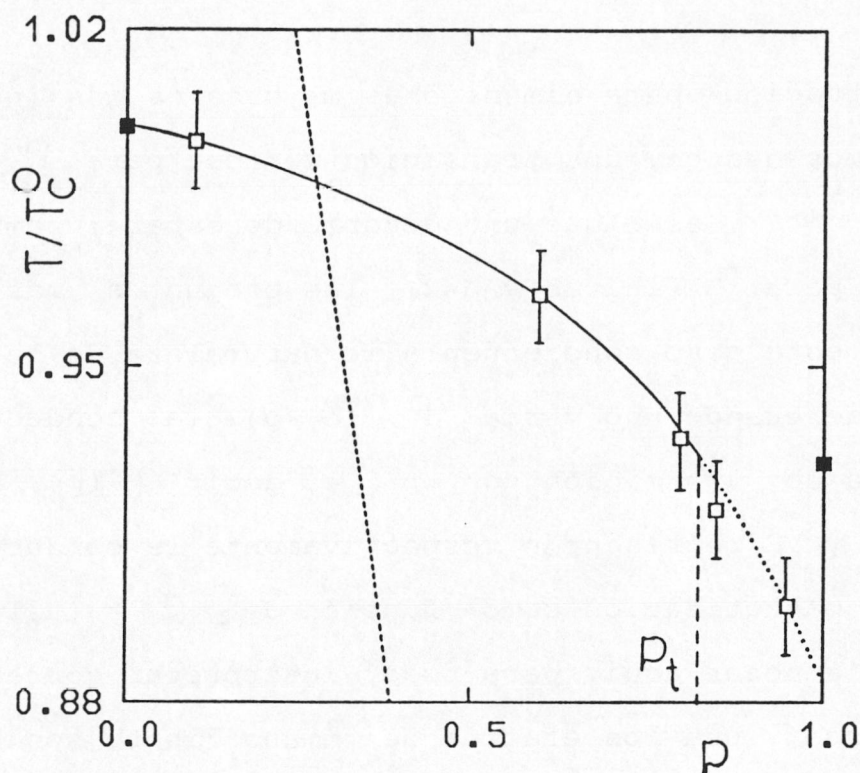


Fig. V3. La temperatura de transición β^* como una función de p para un sistema bidimensional con interacciones entre vecinos próximos ferromagnéticas y probabilidades de transición tipo Metropolis. La línea continua representa una línea de puntos críticos, $\beta_c = \beta^*(p)$, $p < p_t \cong 0.83$ ($\beta_c^0 = \beta^*(0) = 0.440687 \text{ J}^{-1}$, la temperatura crítica de Onsager para el sistema en equilibrio); la línea punteada $\beta^*(p)$, $p > p_t$, corresponde a transiciones de fase de primer orden. Uno tiene $\beta^*(p_t) \cong 0.473 \text{ J}^{-1}$ y $\bar{\beta}^* = \lim_{(p \rightarrow 1)} \beta^*(p) \cong 0.4741 \text{ J}^{-1}$, el valor obtenido exactamente en la sección V.3 para $\Gamma \rightarrow \infty$. La línea discontinua representa la aproximación de Dickman dentro del rango de temperaturas mostradas en la figura.

El sistema unidimensional con interacciones ferromagnéticas entre vecinos próximos ha sido simulado en el caso de 2500 spines y $p = 0, 0.95$. No hay evidencia de una transición de fase bien definida sino una variación de la energía monótona, muy lenta, y de la magnetización, con la temperatura β^{-1} ; ésta es cualitativamente la misma conducta que demostramos en la sección V.3 para el límite $\Gamma \rightarrow \infty$.

La situación para dimensiones mayores es más interesante: conocemos que hay una transición de fase para $\Gamma = 0$ (o $p = 0$) y $\Gamma \rightarrow \infty$, así que uno debería de esperar también una transición para Γ finitas y $d=2$; las preguntas más interesantes en este caso conciernen a la naturaleza de la transición de fase cuando uno varía Γ (ó p), la conducta de la temperatura de transición con p , es decir $\beta_c^*(p)$, etc. Las figuras V1 y V2 representan respectivamente la conducta de la energía y magnetización como función de $\beta = (k_B T)^{-1}$ y p . (Uno debería notar aquí, para poder interpretar correctamente estas figuras, que los efectos de tamaño finito son bastante despreciables para todas las temperaturas en la figura V1); Las figuras V1 y V2 revelan que, incrementando p desde $p = 0$ (el familiar modelo de Ising evolucionando a través de inversiones de espín a una temperatura recíproca finita β) se modifica la temperatura crítica, o sea $\beta_c = \beta_c^*(p)$ crece con p , mientras que la conducta cualitativa es la misma que la de la solución de Onsager hasta $p \cong 0.80$. En particular, el cambio de fase es aparentemente de segundo orden para todas las $p \lesssim 0.80$, y los datos de la magnetización cerca de son consistentes con los valores correspondientes a los exponentes críticos de Onsager ($\beta = 1/8$ independientes de p); en cualquier caso, uno puede descartar el valor clásico (1/2) para el exponente crítico de la magnetización el cual parece caracterizar otros modelos recientes de no-equilibrio (Onuki y Kawasaki, 1981; van Beijeren y Schulman, 1984; Krugg y Lebowitz, 1986); sin embargo veremos después algunos efectos

típicos de campo medio.

La situación mostrada por los datos para $p > 0.85$ es cualitativamente muy diferente de las anteriores. Esto es, observamos la aparición de algunos estados metaestables bien definidos durante la evolución del sistema, y las figuras V1 y V2 revelan discontinuidades claras alrededor de la temperatura de transición $\beta^*(p)$ (que se incrementa con p), ambos hechos indicando que el cambio de fase es de primer orden para $p \gtrsim 0.85$.

Las conclusiones más generales que pueden extraerse de los datos anteriores están resumidas en la figura V3. Esta muestra el diagrama de las fases $\beta^*(p)$ para el modelo bidimensional con interacciones a vecinos próximos y, en particular, un punto tricrítico de no-equilibrio, cuya localización se estima en $p_t = 0.825 \pm 0.01$, que corresponde a una modificación abrupta de segundo a primero en el orden del cambio de fase cuando el proceso de intercambio es lo bastante rápido como para destruir la continuidad usual del orden magnético. Podemos volver a mencionar que los datos de la magnetización para $p < p_t$ son siempre consistentes con los exponentes críticos de equilibrio y que esta consistencia es más definida cuanto más baja es la p . Cuando $p \rightarrow p_t$, β_c crece y se vuelve más difícil el distinguir entre los valores de los exponentes críticos $1/8$ y $1/2$, así que no podemos descartar la posibilidad de tener una conducta crítica clásica cerca de p_t , o sea $m \sim |1 - \beta/\beta_c(p_t)|^{1/2}$.

Los cálculos de ordenador pueden ser comparados con una

solución de campo medio hecha por Dickman (Dickman, 1987) donde la dinámica de inversión de espín está también gobernada por las probabilidades de transición de Metrópolis y por el proceso de intercambio a temperatura infinita que ocurre a una velocidad Q con respecto al anterior mecanismo, o sea, el parámetro Q juega allí el mismo papel que $p/(1-p)$ aquí. Como mostramos en la figura V3 y en el inset de la figura V2, los diagramas correspondientes sólo están de acuerdo de una manera cualitativa; así por ejemplo, $p_t = 0.36$ para el modelo de Dickman, donde como consecuencia de la hipótesis de campo medio, los procesos de intercambios aleatorios actúan más efectivamente a la hora de destruir el orden magnético.

Las comparaciones precisas entre los cálculos de ordenador y los resultados exactos correspondientes de la sección V.3 para $\Gamma \rightarrow \infty$ son curiosas. Encontramos $J\beta^* = 0.971, 0.979$ y 0.990 para $p = 0.80, 0.85$ y 0.95 respectivamente, mientras que el límite de β^* para $\Gamma \rightarrow \infty$, que fue calculado en la sección V.3, es $0.4741 J^{-1}$. Como muestra la figura V3, difícilmente podría interpretarse el hecho de que $\beta^*(p \rightarrow 1) \gg \beta^*(\Gamma \rightarrow \infty)$ como consecuencia de efectos de tamaño finito, barras de error para $\beta^*(p)$, $p \lesssim 1$, o una mala extrapolación. Parece, por el contrario, que el modelo de ordenador para $p \lesssim 1$ no se corresponde precisamente con el modelo descrito en los anteriores apartados para $\Gamma \rightarrow \infty$, debido a que allí había un reescalamiento del tiempo y del espacio, y que el límite $\Gamma \rightarrow \infty$ se corresponde con el límite $p \rightarrow p_t$ en este modelo, o sea $\beta^*(p_t) \cong \beta^*(\Gamma \rightarrow \infty)$.

V.6. Conclusiones.

En este capítulo estudiamos el modelo de Ising de reacción-difusión definido por De Masi, Ferrari y Lebowitz. Para ello, hemos resuelto, para diferentes probabilidades de transición y para cualquier dimensión, la ecuación macroscópica de tipo hidrodinámico hallada por ellos. Hemos observado que las propiedades físicas del sistema dependen fuertemente del tipo de probabilidad de transición que actúa sobre él, así por ejemplo, según sean éstas, hay o no cambio de fase en una dimensión o si hay cambio de fase, es de primero o segundo orden.

Por otra parte, hemos demostrado la no existencia de cambio de fase para interacciones antiferromagnéticas y hemos hallado las condiciones generales que debe de tener una probabilidad de transición para que de lugar a un cambio de fase.

Todos los resultados los hemos comparado con una simulación Monte Carlo.

VI. MODELO DE SUPERCONDUCTOR IONICO.

VI.1. Introducción y definición del modelo.

Este capítulo está dedicado al estudio de un modelo de "sistema difusivo dirigido" que representa bastante bien las propiedades de los llamados conductores iónicos rápidos o superconductores iónicos (SCI).

Los SCI pueden imaginarse como un fluido de un tipo de iones moviéndose a través de una red donde hay otro tipo de iones fijos. Por ejemplo, en el α -AgI, los iones Ag^+ se mueven como un fluido a través de la red de iones fijos I^- . Así pues, estos materiales tienen propiedades intermedias entre líquidos y sólidos, (Dieterich et al., 1980). Por otra parte, se observa experimentalmente, que los SCI muestran ciertos comportamientos de baja dimensionalidad; por ejemplo, la β -eucryptita (LiAlSiO_4) y la Holandita ($\text{K}_{1.54}\text{Mg}_{0.77}\text{Ti}_{7.23}\text{O}_{16}$) muestran una corriente iónica que se realiza preferentemente en canales unidimensionales, la β -alúmina ($\text{Na}_2\text{O} \cdot 11\text{Al}_2\text{O}_3$) y la β'' -alúmina ($\text{Na}_2\text{O} \cdot 0.5\text{Al}_2\text{O}_3$ ó $\text{Na}_2\text{O} \cdot \text{MgO} \cdot 0.5\text{Al}_2\text{O}_3$) presentan una difusión de cationes de tipo bidimensional. Además, los SCI presentan efectos cooperativos muy interesantes como, por ejemplo, cambios de fase desde un estado de baja conductividad a otro de alta conductividad, observando experimentalmente que se pueden clasificar (O'Keefe y Hyde (1976); Boyce y Huberman

(1979)) según el cambio de fase sea de primer orden (como en el AgI) o de segundo orden (como en el AgCrS₂). Si a estas propiedades les añadimos las prometedoras aplicaciones tecnológicas que tienen estos materiales (sus conductividades iónicas por debajo del punto de fusión son del orden de $1\Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$, muy altas en comparación con las de otros sólidos iónicos; por ejemplo, el NaCl a 200°C tiene una conductividad de $10^{-8}\Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$) se entiende que su estudio teórico en profundidad sea muy interesante.

El modelo que utilizamos para simular estos materiales tiene muchas similitudes con el familiar modelo de gas reticular; esto es, suponemos que las partículas (que se interpretarán como iones positivos) se mueven en una red cúbica de dimensión \underline{d} con condiciones de contorno periódicas. En cada nudo de la red definimos una variable de ocupación η_x que puede tener valor 1 si hay ión ó 0 si no lo hay. El hamiltoniano de interacción entre las partículas es tipo Ising, i.e. $H = -4J \sum \eta_x \eta_y$, donde la suma se extiende sólo sobre vecinos próximos. La probabilidad $P_E(\underline{\eta}; t)$ de que en un instante t el sistema tenga una configuración $\underline{\eta}$ cuando está actuando sobre él un campo eléctrico externo E , suponemos que cumple una ecuación maestra:

$$\frac{dP_E(\underline{\eta}; t)}{dt} = \sum_{|\underline{x}-\underline{y}|=1} \left[c_E(\underline{\eta}^{\underline{xy}}; \underline{x}, \underline{y}) P_E(\underline{\eta}^{\underline{xy}}; t) - c_E(\underline{\eta}; \underline{x}, \underline{y}) P_E(\underline{\eta}; t) \right] \quad (\text{VII.1})$$

donde hay que recordar que $c_E(\underline{\eta}; \underline{x}, \underline{y})$ indica la probabilidad

de que ocurra el intercambio de las variables de ocupación de los lugares \underline{x} e \underline{y} de la red por unidad de tiempo. Este modelo reticular involucra las siguientes hipótesis:

1. Las barreras de potencial de la red son lo suficientemente altas como para que el tiempo de permanencia de un ión en un nudo sea mucho más grande que el tiempo de "vuelo" entre nudos. En otro caso, sería necesaria una descripción continua del modelo.
2. Las interacciones reales entre iones, consecuencia de un potencial coulombiano, se aproximan mediante una interacción efectiva de corto alcance, supuestamente consecuencia de un efecto colectivo.
3. El proceso es marcoviano, esto es, suponemos que el sistema no presenta ningún tipo de histéresis o efectos de "memoria".

Teniendo en cuenta estas hipótesis, que ya han sido ampliamente discutidas en la literatura, nuestro modelo quedará perfectamente definido si damos unas probabilidades de transición c_E , adecuadas. Nosotros tomaremos, como es habitual al tratar este modelo (Katz et al., 1983; Marro et al., 1985; Vallés et al., 1987; van Beijeren et al., 1984)

$$c_E(\underline{\eta}; \underline{x}, \underline{y}) = \phi \left(\beta H(\underline{\eta}^{\underline{x}\underline{y}}) - \beta H(\underline{\eta}) - \underline{E} \cdot (\underline{x} - \underline{y})(\eta_{\underline{x}} - \eta_{\underline{y}}) \right), \quad (\text{VI.1.2})$$

donde $\beta = 1/k_B T$ es la temperatura inversa de un baño térmico que se supone actúa sobre el sistema y ϕ es una función que

cumple $\phi(h) = \phi(-h)\exp(-h)$. Elecciones familiares de ϕ son: Metropolis, $\phi(h) = \min(1, \exp(-h))$, Kawasaki, $\phi(h) = (1 + \exp(h))^{-1}$ y van Beijeren-Schulmann (vBS), $\phi(h) = \exp(-h/2)$. Esta familia de probabilidades de transición (VI1.2) tiene interesantes propiedades (Katz et al., 1984) entre las que destacan:

* Cuando $E=0$, recuperamos las probabilidades de transición que describen el estado de equilibrio a temperatura T .

* Utilizadas en la ecuación maestra (VI1.1), dan lugar a que las soluciones estacionarias de ésta, $P_E(\underline{\eta})$, sean invariantes bajo traslaciones y simétricas bajo el intercambio: $E \rightarrow -E$ y $\eta_x \rightarrow 1 - \eta_x, \forall \underline{x}$.

Katz et al. también demuestran que este modelo reticular cumple la fórmula de Kubo para la conductividad y la relación de Einstein para la difusión, y que la probabilidad de una configuración estacionaria obtenida hallando el mínimo de la producción de entropía sólo coincide con la expresión obtenida resolviendo la ecuación maestra en la aproximación lineal en el campo externo.

Modelos similares han sido estudiados anteriormente usando métodos Monte Carlo (Katz et al., 1983; Marro et al., 1985; Vallés et al., 1986, 1987). También han sido resueltos exactamente en ciertas condiciones límite a las que luego haremos referencia (Van Beijeren et al., 1984; Krugg et al., 1986) y analizadas mediante métodos de teoría de campos bajo algunas hipótesis complementarias (Leung et al., 1986; Jansen

et al, 1986).

VI.2. SCI unidimensional.

VI.2.1. Introducción.

Como señalábamos en el apartado VI.1, un modelo unidimensional de SCI no es una mera especulación teórica, sino que existen materiales reales, como la β -eucryptita y la holandita, que presentan conducción iónica en canales unidimensionales. En los últimos años ya han sido realizados algunos estudios unidimensionales relacionados con el presente. Entre ellos cabe destacar: un modelo reticular de partículas que cumplen únicamente el principio de exclusión y que están bajo la acción de un campo eléctrico débil (Richards, 1977); un modelo con imperfecciones colocadas aleatoriamente en la red (Bernasconi et al, 1979); un modelo en el que los "saltos" de las partículas vienen condicionados por la repulsión de sus vecinos (Singer et al., 1980) y un modelo reticular con interacciones entre vecinos próximos que ha sido resuelto exactamente para ciertas probabilidades de transición y campos eléctricos muy débiles (Dieterich et al., 1982). Además de estos modelos, existe una simulación Monte Carlo de un SCI unidimensional (Katz et al., 1983) con la que podremos comparar nuestros resultados de una manera directa. En los siguientes apartados vamos a describir la solución del SCI unidimensional utilizando la cinética de agrupamientos loca-

les introducida en la sección IV.3.2.

VI.2.2. Cinética de agrupamientos locales: mecanismo de intercambio.

En esta sección vamos a desarrollar un método general de solución del tipo "cinética de agrupamientos locales" cuando el modelo evoluciona (como en el SCI) mediante un mecanismo de intercambio de partículas; por el contrario, en la sección IV.3.2 desarrollamos un método similar cuando el modelo evolucionaba como consecuencia de la inversión de espines.

Partiendo de la ecuación maestra (VI1.1), y de manera análoga a la desarrollada en la sección IV.3.2, podemos escribir la ecuación de evolución para una magnitud local A en un sistema homogéneo como:

$$\frac{d\langle A \rangle_t}{dt} = \sum_{\substack{\underline{x}, \underline{z} \in I \\ |\underline{x} - \underline{z}| = 1}} \sum_{\underline{\eta}_q} \Delta A(\underline{\eta}_q; \underline{x}, \underline{z}) c(\underline{\eta}; \underline{x}, \underline{z}) Q(\underline{\eta}; t) + \quad (\text{VI2.1})$$

$$+ \sum_{\substack{\underline{x}, \underline{z} \in S \\ |\underline{x} - \underline{z}| = 1}} \sum_{\underline{\eta}} \Delta A(\underline{\eta}_q; \underline{x}, \underline{z}) c(\underline{\eta}; \underline{x}, \underline{z}) P(\underline{\eta}; t)$$

donde

$$\Delta A(\underline{\eta}_q; \underline{x}, \underline{z}) = A(\underline{\eta}_q^{\underline{x}\underline{z}}) - A(\underline{\eta}_q)$$

$$Q(\underline{\eta}; t) = \sum_{\underline{\eta} - \underline{\eta}_q} P(\underline{\eta}; t) \quad (\text{VI2.2})$$

Recordemos que el dominio local en cuestión se denomina q, y que I indica el conjunto de parejas del dominio cuya probabilidad de transición, $c(\underline{\eta}; \underline{x}, \underline{z})$, depende únicamente de varia-

bles de ocupación pertenecientes al dominio, $\underline{\eta}_q$, mientras que S señala el resto de las parejas del dominio, incluyendo las formadas por un punto del mismo y otro exterior a él. La ecuación exacta (VI2.1) es poco útil en la práctica, entre otras causas debido a la existencia del segundo término que acopla las propiedades locales del dominio con las del resto de sistema. En consecuencia, nuestra primera aproximación consistirá en despreciar este término. Para entender la naturaleza de esta aproximación, escribamos

$$\sum_{\substack{\underline{x}, \underline{z} \in S \\ |\underline{x} - \underline{z}| = 1}} \sum_{\underline{\eta}} \Delta A(\underline{\eta}_q; \underline{x}, \underline{z}) c(\underline{\eta}; \underline{x}, \underline{z}) P(\underline{\eta}; t) \simeq 0. \quad (\text{VI2.3})$$

Cualquier variable "mecánica" local A puede expresarse de la forma:

$$A(\underline{\eta}_q) = a(\underline{\eta}_{\tilde{I}}) + \eta_{\underline{x}} b(\underline{\eta}_{\tilde{I}}) + \eta_{\underline{z}} c(\underline{\eta}_{\tilde{I}}) + \eta_{\underline{x}} \eta_{\underline{z}} d(\underline{\eta}_{\tilde{I}}), \quad \forall \underline{x}, \underline{z}$$

donde $\tilde{I} = q - \{\underline{x}, \underline{z}\}$, luego podemos usar esta expresión en la ecuación (VI2.3) para escribir:

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{\underline{x}, \underline{z} \in S \\ |\underline{x} - \underline{z}| = 1}} \sum_{\underline{\eta}} (\eta_{\underline{z}} - \eta_{\underline{x}}) (b(\underline{\eta}_{\tilde{I}}) - c(\underline{\eta}_{\tilde{I}})) c(\underline{\eta}; \underline{x}, \underline{z}) P(\underline{\eta}; t) = \\ & = \sum_{\substack{\underline{x}, \underline{z} \in S; \\ |\underline{x} - \underline{z}| = 1}} \langle (\eta_{\underline{z}} - \eta_{\underline{x}}) (b(\underline{\eta}_{\tilde{I}}) - c(\underline{\eta}_{\tilde{I}})) c(\underline{\eta}; \underline{x}, \underline{z}) \rangle_t \simeq 0. \end{aligned} \quad (\text{VI2.4})$$

Como esta ecuación debe de cumplirse independientemente de la magnitud local considerada, es condición suficiente que se tenga:

$$\sum_{\substack{\underline{x}, \underline{z} \in S \\ |\underline{x} - \underline{z}| = 1}} j(\underline{\eta}; \underline{x}, \underline{z}) \simeq 0 \quad \forall \underline{\eta} \quad (\text{VI2.5})$$

donde

$$j(\underline{\eta}; \underline{x}, \underline{z}) \equiv (\eta_{\underline{z}} - \eta_{\underline{x}}) c(\underline{\eta}; \underline{x}, \underline{z})$$

es la corriente local entre los puntos \underline{x} y \underline{z} , dada una configuración. Así pues, cuando despreciamos el segundo término de la ecuación (VI2.1), estamos suponiendo que la superficie del dominio está en régimen estacionario con respecto al flujo de partículas entre el exterior y el interior del dominio, esto es, hemos eliminado las fluctuaciones locales de partículas. En conclusión, la ecuación que vamos a utilizar es:

$$\frac{d\langle A \rangle_t}{dt} = \sum_{\underline{x}, \underline{z} \in \Gamma} \sum_{\underline{\eta}_q} \Delta A(\underline{\eta}_q; \underline{x}, \underline{z}) Q(\underline{\eta}_q; t) \quad (\text{VI2.6})$$

que involucra la hipótesis de "campo medio" consistente en despreciar fluctuaciones locales.

Para continuar, necesitamos calcular Q , para lo cual hacemos la aproximación de expresar las correlaciones entre n lugares de la red en función de la densidad media de partículas y de la correlación entre lugares vecinos próximos i.e. en función de $\langle \eta \rangle$ y $\langle \eta \eta \rangle_{nn}$ (para más detalles de esta aproximación, consultar la sección IV.3.2). La única diferencia con la sección IV.3.2 se refiere al tipo de dominio que es necesario considerar; así, por ejemplo, en dos dimensiones tenemos que considerar ahora dominios de la forma:

$$+ \begin{array}{|c|c|} \hline - & - \\ \hline + & - \\ \hline - & + \\ \hline \end{array} +$$

donde $\boxed{+-}$ señala la única pareja perteneciente al interior (I) del dominio. En general, en un sistema d-dimensional, un agrupamiento quedará caracterizado por las dos variables de ocupación del interior, η_1, η_2 y por el número de partículas en el entorno de η_1 y η_2 , n_{+1} y n_{+2} respectivamente. De esta forma, la probabilidad $Q_{\eta_1 \eta_2 n_{+1} n_{+2}}$ de tener un agrupamiento caracterizado por η_1, η_2, n_{+1} y n_{+2} en un instante t podemos escribirla en esta aproximación como:

$$Q_{++n_{+1}n_{+2}}(u) = \binom{2d-1}{n_{+1}} \binom{2d-1}{n_{+2}} \frac{u^{n_{+1}+n_{+2}+1} \left[\frac{1}{2} (1-u-z) \right]^{4d-2-n_{+1}-n_{+2}}}{n^{4d-2}} \quad (\text{VI2.7})$$

$$\begin{aligned} Q_{+-n_{+1}n_{+2}}(u) &= Q_{-+n_{+2}n_{+1}}(u) = \\ &= \binom{2d-1}{n_{+1}} \binom{2d-1}{n_{+2}} \frac{u^{n_{+1}} z^{2d-1-n_{+2}} \left[\frac{1}{2} (1-u-z) \right]^{2d-1-n_{+1}+n_{+2}}}{n^{2d-1} (1-n)^{2d-1}} \end{aligned} \quad (\text{VI2.8})$$

$$Q_{--n_{+1}n_{+2}}(u) = \binom{2d-1}{n_{+1}} \binom{2d-1}{n_{+2}} \frac{z^{4d-n_{+1}-n_{+2}-1} \left[\frac{1}{2} (1-u-z) \right]^{n_{+1}+n_{+2}}}{(1-n)^{4d-2}} \quad (\text{VI2.9})$$

donde hay que recordar que u indica la densidad de parejas de partículas en el sistema, n es la densidad de partículas y $z \equiv 1-2n+u$. Notar que, como el mecanismo dinámico es ahora el intercambio de partículas, la densidad de éstas es constante en todo momento, por lo que n es un parámetro externo que caracteriza al sistema. Para hallar u , utilizamos la ecuación (VI2.6) tomando $\langle A \rangle_t \equiv u$ y sustituyendo Q por sus expresiones (VI2.7)-(VI2.8) y (VI2.9); así nos queda la ecuación de evolución para u :

$$\frac{du}{dt} = 2 \sum_{n_{+1}=0}^{2d-1} \sum_{n_{+2}=0}^{2d-1} (n_{+2} - n_{+1}) C(4J(n_{+1}-n_{+2})) Q_{+-n_{+1}n_{+2}}(u) \quad (\text{VI2.10})$$

donde hemos tomado $H = -4J \sum_{|x-y|=1} \eta_x \eta_y$ como hamiltoniano de interacción y hemos supuesto que la probabilidad de transición depende del incremento de energía en el sistema que ocasiona el intercambio, o sea, $c = c(\Delta E)$ donde $\Delta E = -4J(n_{+1} - n_{+2})(\eta_2 - \eta_1) \equiv -4J\Delta u$. Para estudiar la estabilidad de las soluciones estacionarias nos referimos a la sección IV.3.2.

VI.2.3. Solución del SCI unidimensional.

Consideremos una red unidimensional con condiciones de contorno periódicas, y supongamos que hay algún agente externo que produce un campo eléctrico uniforme, $\underline{E} = E \hat{x}$, donde E es una constante positiva y \hat{x} define la dirección positiva a lo largo de la red. Además, hay un movimiento térmico de las partículas inducido por el contacto con el baño térmico. La competencia entre los tres mecanismos, campo externo, interacciones entre partículas y baño térmico da lugar, en general, a una corriente neta de partículas viajando por el anillo con condiciones límites periódicas a lo largo de la dirección \hat{x} . El baño térmico absorbe el "calor" generado por la corriente, permitiendo eventualmente llegar a un estado estacionario de no-equilibrio.

Nosotros hemos utilizado fundamentalmente dos tipos de dinámica $c = (c_1 + c_2)/2$:

$$a) \quad c_{1,2} = \begin{cases} \exp(-h_{1,2}) & \text{si } h_{1,2} \geq 0 \\ 1 & \text{si } h_{1,2} \leq 0 \end{cases} \quad (\text{VI2.11})$$

$$b) \quad c_{1,2} = 1 / (1 + \exp(h_{1,2})) \quad (\text{VI2.12})$$

donde $h_{12} = \beta \Delta H \mp E$ y ΔH representa el cambio en la energía configuracional del sistema consecuencia del salto propuesto. (Hay otras alternativas para la probabilidad de transición. Por ejemplo la que utilizan Katz et al. (Katz et al., 1984) que es una modificación de la dinámica (VI2.11) con la característica de que cuando el campo eléctrico es infinito, no desaparece la influencia de la temperatura sobre el sistema). La probabilidad de transición total usada por nosotros, c , la hemos construido como una combinación lineal, con iguales probabilidades a priori, de las probabilidades de saltos en las direcciones $\pm \hat{x}$, cada una de éstas con probabilidades $c_{1,2}$ respectivamente, éstas últimas teniendo en cuenta que las transiciones en favor del campo son favorecidas con respecto a las opuestas. Las probabilidades de transición (VI2.11) y (VI2.12), se reducen cuando el campo es cero a las conocidas de Metropolis y Kawasaki. Un estado estacionario a campo eléctrico no nulo, es decir, un estado de no-equilibrio, tiene en general propiedades que dependen de la elección específica de c ; como ya hemos visto en capítulos anteriores. Este es el motivo para considerar aquí aquellas dos; esto es, nos interesa estudiar cómo cambian los resultados al variar la dinámica.

Si ahora incluimos la probabilidad de transición que acabamos de definir en la ecuación (VI2.10) para $d=1$, tenemos:

$$\frac{du}{dt} = \frac{2(n-u)}{n(1-n)} \left[(n-u)^2 c(-\mathcal{J}) - u(1-2n+u)c(\mathcal{J}) \right] \equiv F(u; n, \beta, E, \mathcal{J}) \quad (\text{VI2.13})$$

donde $J > 0$ para interacciones ferromagnéticas y $J < 0$ para las antiferromagnéticas. Los valores de c para cada dinámica son :

a) Metropolis

$$c(4|J) = \begin{cases} \frac{1}{2} [1 + e^{-(E+4\beta|J)}] & , E \geq 4\beta|J \\ e^{-4\beta|J} \cosh E & , E \leq 4\beta|J \end{cases}$$

$$c(-4|J) = \begin{cases} \frac{1}{2} [1 + e^{-(E-4\beta|J)}] & , E \geq 4\beta|J \\ 1 & , E \leq 4\beta|J \end{cases} \quad (\text{VI2.14})$$

b) Kawasaki

$$c(4|J) = \frac{1}{2} \left\{ [1 + e^{4\beta|J-E}]^{-1} + [1 + e^{4\beta|J+E}]^{-1} \right\}$$

$$c(-4|J) = \frac{1}{2} \left\{ [1 + e^{-4\beta|J-E}]^{-1} + [1 + e^{-4\beta|J+E}]^{-1} \right\} \quad (\text{VI2.15})$$

En cualquier caso, la solución general estacionaria es:

$$u_{st} = n + \frac{c(4J) \mp [c(4J)^2 + 4c(4J)n(1-n)[c(-4J) - c(4J)]^{1/2}}{2[c(-4J) - c(4J)]} \quad (\text{VI2.16})$$

donde el doble signo, que proviene de una raíz cuadrada, ha de conservarse hasta estudiar la estabilidad de las soluciones. Uno obtiene inmediatamente las soluciones especiales

$$u_{st} = n, \quad \beta \rightarrow \infty \quad \forall E \text{ finito}, \quad J > 0, \quad (\text{VI2.17})$$

que ocurre para $c(4J)=0$, $c(-4J) \neq 0$ en el caso de cualquiera

de las dos dinámicas, y

$$u_{st} = 0, 2n-1, \quad n \geq \frac{1}{2}, \quad \beta \rightarrow \infty, \quad \forall E \text{ finita } J < 0 \quad (\text{VI2.18})$$

que ocurre para $c(-4J)=0$ y $c(4J) \neq 0$, también para cualquiera de las dinámicas. Otra solución extrema es :

$$u_{st} = n^2 \quad \begin{array}{l} \text{si } \beta \rightarrow 0, \quad \forall E \text{ finita}, \quad \forall J \text{ ó} \\ \text{si } E \rightarrow \infty, \quad \forall J, \quad \forall \beta. \end{array} \quad (\text{VI2.19})$$

que ocurre para $c(4J)=c(-4J) \neq 0$. Observamos que el sistema se descorrelaciona totalmente cuando la temperatura es infinita ($\beta \rightarrow 0$) o bien cuando el campo externo es infinito. Es curioso notar que esta solución límite ocurre para las dos dinámicas, a pesar de que involucran mecanismos microscópicos substancialmente diferentes. Por otra parte, cuando la temperatura es cero ($\beta \rightarrow \infty$) el caso ferromagnético se comporta de forma semejante al caso sin campo, esto es, aparece un cluster único a pesar del campo. Lo mismo pasa con el caso anti-ferromagnético cuando la densidad de partículas es $1/2$; en otro caso su comportamiento depende fuertemente de la densidad de partículas.

La estabilidad de las soluciones, como sabemos (sección IV.3), está íntimamente relacionada con el signo de la derivada $(\partial F / \partial u)_{st}$ donde F viene definida por la ecuación (VI2.13). Aplicando la condición de estabilidad (IV3.54) obtenemos:

$$3 [c(-4J) - c(4J)] (n-u)^2 + c(4J) [n(1+n) - 2u] > 0 \quad (\text{VI2.20})$$

Esto indica que la solución general (VI2.16) con el signo negativo es estable siempre, mientras que con el signo positivo es inestable. Por lo que respecta a las soluciones especiales: (VI2.19) es siempre estable, (VI2.17) tiene una estabilidad crítica (i.e. la expresión en la ecuación (IV3.54) es cero en este caso), las soluciones (VI2.18) tiene regiones de estabilidad, esto es : $u_{st} = 0$ es estable si $n < 1/2$ y $u_{st} = 2n-1$ es estable si $n > 1/2$, mientras que para $n = 1/2$ $u_{st} = 0$ es de estabilidad crítica.

VI.2.3.1. Evolución en el tiempo.

La evolución del sistema en el tiempo está gobernada por la ecuación (VI2.13); cuya solución puede ser explícitamente escrita sin demasiado esfuerzo:

$$\ln \left\{ \frac{[2(c(-4J) - c(4J))(n-u) + c(4J) - \alpha]^{\frac{c(4J)}{\alpha} + 1}}{[2(c(-4J) - c(4J))(n-u) + c(4J) + \alpha]^{\frac{c(4J)}{\alpha} - 1}} \times [2n\nu(n-u)^2 (c(-4J) - c(4J))]^{-1} \right\} = -4t + D \quad (\text{VI2.21})$$

$$\alpha \equiv [c(4J)^2 + 4n\nu c(4J) (c(-4J) - c(4J))]^{1/2}$$

donde D es una constante que depende de las condiciones iniciales. De esta ecuación se deducen soluciones con estructura más sencilla :

$$u = n - \frac{n\nu}{1 - \frac{n^2 - u_0}{n - u_0} \exp[-2c(4J)t]} \quad (\text{VI2.22})$$

donde $u_0 = u(t=0)$, para los casos mostrados en (VI2.19), (i.e. cuando $c(4J) = c(-4J) \neq 0$), y

$$u = n - (n - u_0)(at + 1)^{-1/2}, \quad (\text{VI2.23})$$

donde

$$a \equiv \frac{4(n - u_0)^2}{n\nu} c(-4J)$$

para el caso (VI2.17). Los casos (VI2.18) y la solución general de la ecuación (VI2.13) dan lugar a las soluciones estacionarias (IV2.16) y vienen caracterizadas por un decaimiento más complicado en el tiempo. Observamos el comportamiento típico de decaimiento lento hacia el régimen estacionario cuando nos acercamos a la temperatura "crítica" $T=0$ (correspondiente al "critical slowing down" del equilibrio).

VI.2.3.2. Corriente y conductividad.

El campo eléctrico externo $E \cdot \hat{x}$, actúa sobre los iones e induce, en general, una corriente neta en la dirección \hat{x} que puede ser definida :

$$j(\beta, E, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} (N\Delta t)^{-1} \left[N_{\hat{x}}(t, \Delta t) - N_{-\hat{x}}(t, \Delta t) \right] \quad (\text{VI2.24})$$

donde N representa el número de partículas en el sistema, y $N_{\hat{x}}(t, \Delta t)$ es el número de partículas que saltan a su posición vecina próxima en la dirección \hat{x} (supuesta vacía) entre

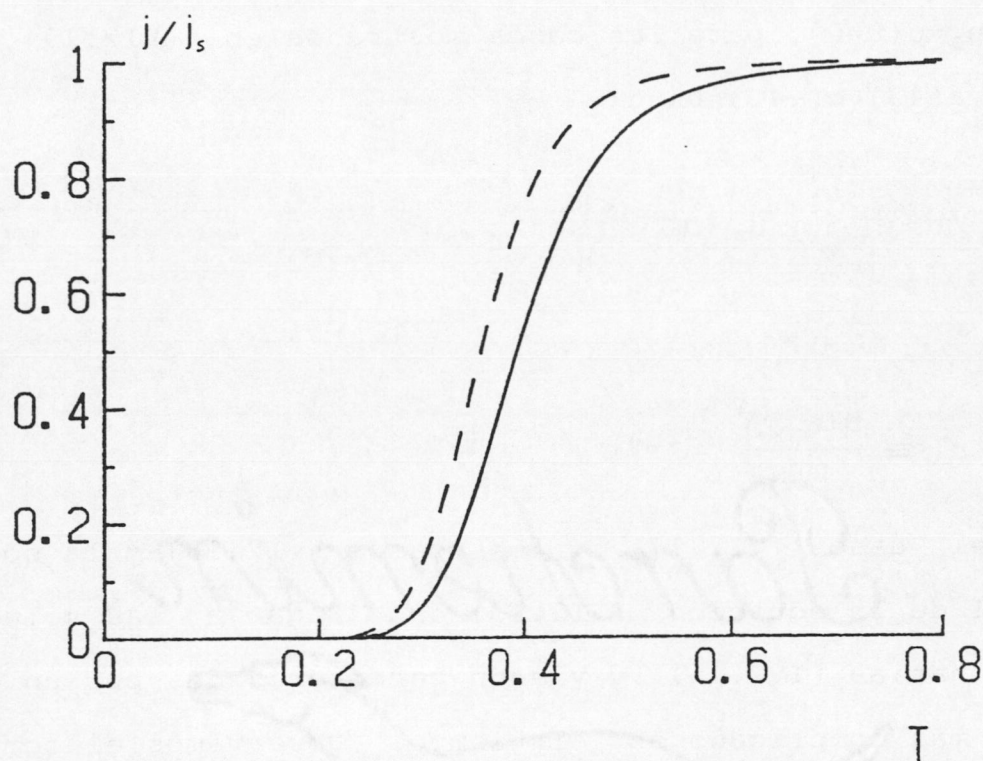


Fig. VI2.1. Corriente en un sistema unidimensional ferromagnético, normalizada respecto de la corriente saturante para campo infinito, en función de la temperatura y para un campo $E=10$. La línea continua corresponde a la densidad 0.5 y la línea a trazos corresponde a la densidad 0.1. La dinámica utilizada es la de Kawasaki.

los instantes t y $t + \Delta t$. Esta ecuación puede ser también escrita en nuestra teoría como:

$$j(\beta, E, t) = \sum_{n_{+1}=0}^1 \sum_{n_{+2}=0}^1 \left[C_1(-4J(n_{+1}-n_{+2})) - C_2(-4J(n_{+1}-n_{+2})) \right] Q_{+-n_{+1}n_{+2}} \quad (\text{VI2.25})$$

donde c_1 y c_2 representan las probabilidades por unidad de tiempo de tener una transiciones en las direcciones \hat{x} y $-\hat{x}$ respectivamente

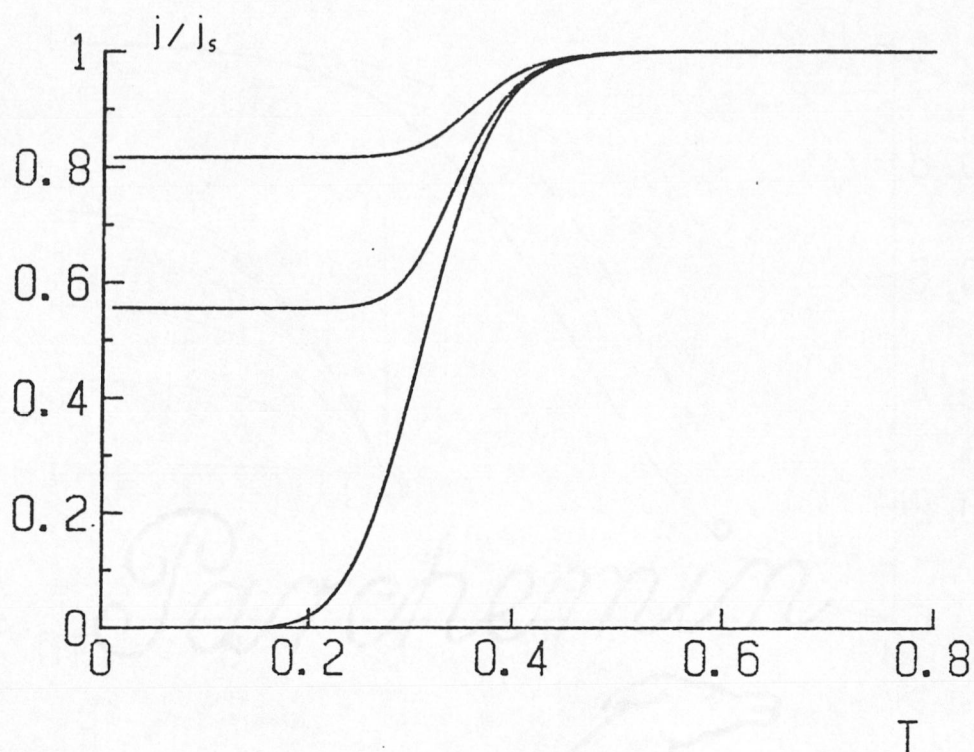


Fig. VI2.2. Igual que la figura VI2.1, pero para un sistema antiferromagnético. Las densidades son, de abajo hacia arriba, 0.5, 0.4 y 0.3.

Por otra parte, la conductividad eléctrica se define como

$$S = \left(\frac{dj_{st}(\beta, E)}{dE} \right)_{E=0} \quad (\text{VI2.26})$$

donde j_{st} es el valor estacionario de $j(t)$.

El cálculo explícito de (VI2.25) produce diferentes conductas para las dos dinámicas utilizadas:

a) Metropolis :

$$j(\beta, E, t) = \frac{(n-u)^2}{n(1-n)} [u+z] [1-e^{-E}] + \frac{(n-u)u(1-2n+u)}{n(1-n)} \times \\ \times [1-e^{-E} e^{-4\beta J}] + \frac{(n-u)^3}{n(1-n)} [1-e^{-E} e^{4\beta J}] , E \geq 4|\beta J| \quad (\text{VI2.27a})$$

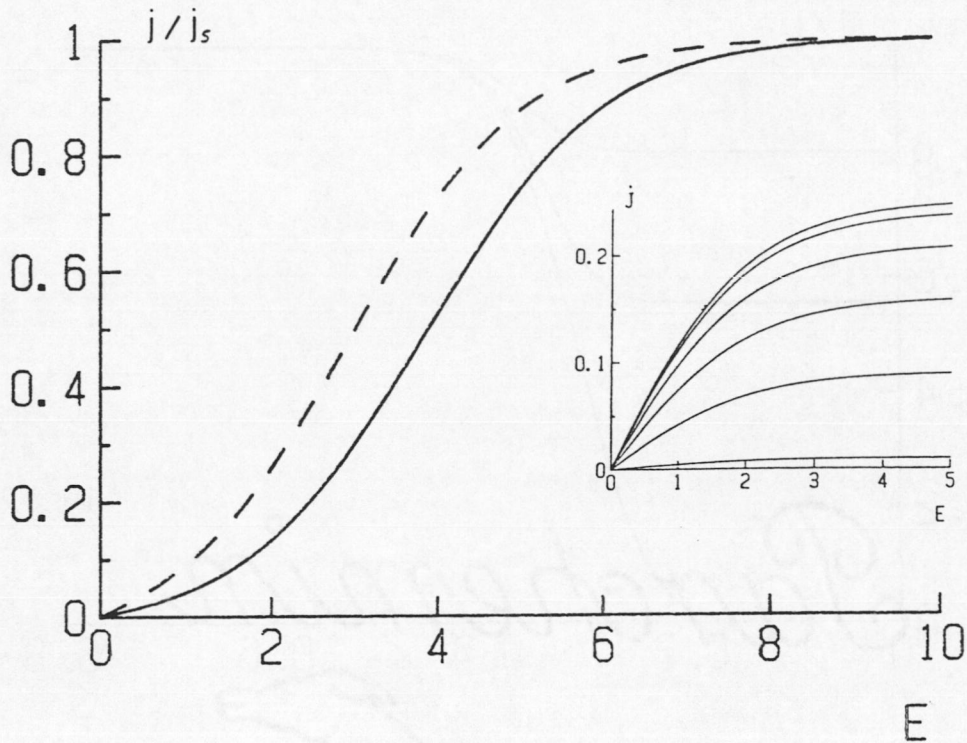


Fig. VI2.3. Corriente, normalizada a la corriente saturante (i.e. campo infinito), en función del campo eléctrico para una temperatura $T=1$ (en unidades $J/k=1$) para un sistema ferromagnético con dinámica de Kawasaki. La línea continua representa la densidad 0.5 y la línea a trazos corresponde a la densidad 0.1. La figura más pequeña representa la corriente en función del campo para temperatura infinita y, de arriba a abajo, para las densidades 0.5, 0.4, 0.3, 0.2 y 0.1.

$$j(\beta, E, t) = \frac{(n-u)^2}{n(1-n)} [u+z] [1-e^{-E}] + \frac{2(n-u)u(1-2n+u)}{n(1-n)} \times e^{-4|\beta|J} \sinh E, \quad E \leq 4\beta J, \quad J > 0 \quad (\text{VI2.27b})$$

$$j(\beta, E, t) = \frac{(n-u)^2}{n(1-n)} [u+z] [1-e^{-E}] + \frac{2(n-u)^3 e^{-4|\beta|J}}{n(1-n)} \times \sinh E, \quad E \leq 4\beta J, \quad J < 0, \quad (\text{VI2.27c})$$

donde hay que recordar que $z=1-2n+u$ y $u=u(t)$. Notar que la derivada de la corriente respecto del campo eléctrico para esta dinámica tiene una discontinuidad en $E = 4\beta J$, debido

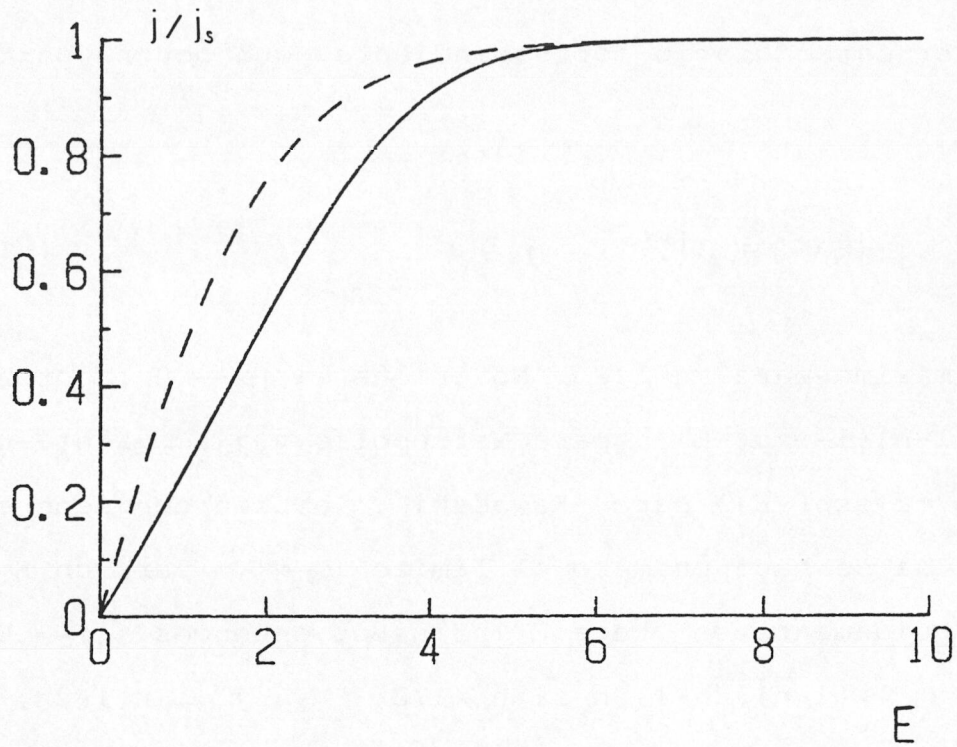


Fig. VI2.4. Igual que la figura VI2.3 pero para un sistema antiferromagnético. La línea continua representa densidad 0.5 y la línea a trazos densidad 0.1. La temperatura, como en la anterior figura, es de $T = 1$ (unidades $J/k=1$).

a la misma definición de la dinámica; si se utilizase la dinámica propuesta por Katz, Lebowitz y Spohn (Katz et al., 1984), no aparecería esta discontinuidad.

b) Kawasaki :

$$j(\beta, E, t) = 2 \mu h E \frac{(n-u)}{n(1-n)} \left\{ \frac{(n-u)(u+z)}{(1+e^{-E})(1+e^E)} + [uz + (n-u)^2] \times \right. \\ \left. \times e^{4\beta|J|} \times [1 + e^{4\beta|J|-E}]^{-1} \times [1 + e^{4\beta|J|+E}]^{-1} \right\} \quad \forall J. \quad (\text{VI2.28})$$

El límite de campo infinito para ambas dinámicas es :

$$j(\beta, \infty, t) = \frac{(n-u)}{n(1-n)} \left\{ (n-u)(u+z) + uz + (n-u)^2 \right\}$$

y el valor estacionario correspondiente, que ocurre para $u_{st} = n^2$, es

$$j_{st}(\beta, \infty) = n(1-n) \quad ; \quad (\text{VI2.29})$$

que es máximo para $n=1/2$. Notar que si $\beta \rightarrow 0$, entonces $j_{st} \rightarrow n(1-n)(1-\exp(-E))$ para Metropolis y $j_{st} \rightarrow n(1-n)(1-\exp(-E))/(1+\exp(-E))$ para Kawasaki. También conviene subrayar que, si se hace primero el límite $\beta \rightarrow \infty$ para un E finito y seguidamente se hace E infinito, entonces $j_{st} \rightarrow 0$ para $J > 0$, $j_{st} \rightarrow (1-n)(2n-1)/n$ si $n \geq 1/2$, y $j_{st} \rightarrow n(1-2n)/(1-n)$ si $n \leq 1/2$ para $J < 0$. En todos los resultados, tanto para Metropolis como para Kawasaki, observamos que el orden al introducir los límites es sumamente importante, lo cual es característico de sistemas fuera del equilibrio. También podemos concluir que, en el caso de sistemas ferromagnéticos en el cero absoluto, no hay campo eléctrico que los mueva, y lo mismo ocurre para sistemas antiferromagnéticos en su densidad crítica $n=1/2$ (aunque no así fuera de ésta).

Podemos hacer unos comentarios acerca de las figuras anteriores. En la figura VI2.1, observamos que para un campo fijo ($E=10$) el comportamiento cualitativo de la corriente para un sistema ferromagnético es independiente de la densidad de partículas (siempre que ésta no sea ni uno ni cero); esto es, a temperaturas bajas, el retículo atrapa a las partículas de tal forma que al campo le resulta muy difícil hacerlas mover; según vamos aumentando la temperatura, la

agitación térmica hace que las partículas estén menos ligadas a la red, de forma que el campo eléctrico es capaz de moverlas y dirigir las mejor, por lo que la corriente aumenta. Así pues, podemos distinguir dos "estados" del sistema, uno en el que se cumple $4/T > E$, que es poco conductor, y otro tal que $4/T < E$, que es gran conductor. El mismo sistema en el caso de interacciones antiferromagnéticas, (Fig.VI2.2), tiene un comportamiento semejante al ferromagnético cuando tiene la densidad crítica pero, cuando tiene una densidad menor, la corriente no va a cero cuando la temperatura va a cero; esto es debido a que, en densidades no críticas, los sistemas antiferromagnéticos son degenerados a temperaturas bajas. Es decir, un estado de mínima energía en ese límite puede estar formado por un cluster único o bien por partículas aisladas distribuidas aleatoriamente por el sistema, lo cual hace que el campo pueda dar lugar a corriente neta (i.e. las partículas no tienden a agruparse como es el caso del sistema ferromagnético, sino que les basta con estar aisladas). Por otra parte el comportamiento de la corriente en función del campo (Fig.VI2.3 y VI2.4) es semejante para el caso ferro y antiferromagnético para cualquier densidad, esto es, para campo cero no hay corriente, mientras que para campos altos la corriente satura rápidamente, esto es importante, puesto que indica que a temperaturas normales para un campo un poco grande, logramos un comportamiento del sistema semejante al que tendría con campo infinito, aunque no podemos olvidar que dado un campo eléctrico finito siempre existe un intervalo de

temperaturas cercanas al cero absoluto en el que esta afirmación no es cierta.

Cuando el campo es muy pequeño, podemos desarrollar las expresiones de j_{st} alrededor de campo cero, obteniendo:

$$j_{st}(\beta, E) = \left\{ \frac{(n-u_{st}^0)^2}{n(1-n)} [u_{st}^0 + z_{st}^0] - 2(n-u_{st}^0) \frac{u_{st}^0 z_{st}^0}{n(1-n)} e^{-4\beta J} \right\} E + \mathcal{O}(E^2) \quad (\text{VI2.30})$$

para Metropolis ferromagnético,

$$j_{st}(\beta, E) = \left\{ \frac{(n-u_{st}^0)^2}{n(1-n)} [u_{st}^0 + z_{st}^0] + \frac{2(n-u_{st}^0)^3}{n(1-n)} e^{-4\beta J} \right\} E + \mathcal{O}(E^2) \quad (\text{VI2.31})$$

para Metropolis antiferromagnético y

$$j_{st}(\beta, E) = \frac{2(n-u_{st}^0)}{n(1-n)} \left\{ \frac{1}{4} (n-u_{st}^0)(u_{st}^0 + z_{st}^0) + [u_{st}^0 z_{st}^0 + (n-u_{st}^0)^2] \times \right. \\ \left. \times e^{4\beta J} \times (1+e^{4\beta J})^{-1} \times (1+e^{4\beta J})^{-1} \right\} E + \mathcal{O}(E^2) \quad (\text{VI2.32})$$

para Kawasaki ferro y antiferromagnético. El superíndice cero indica la solución de u_{st} a campo $E = 0$ que, obviamente, no depende de la dinámica puesto que es la solución del equilibrio. De estas tres ecuaciones se siguen inmediatamente las expresiones para la conductividad eléctrica; así, por ejemplo, para el caso $n=1/2$ y Metropolis ferromagnético queda:

$$S_F^M = [1 + e^{2\beta J}]^{-2}, \quad J > 0, \quad (\text{VI2.33})$$

para Metropolis antiferromagnético:

$$S_A^M = [1 + e^{-2\beta J}]^{-2} \times e^{-2\beta J}, \quad J < 0, \quad (\text{VI2.34})$$

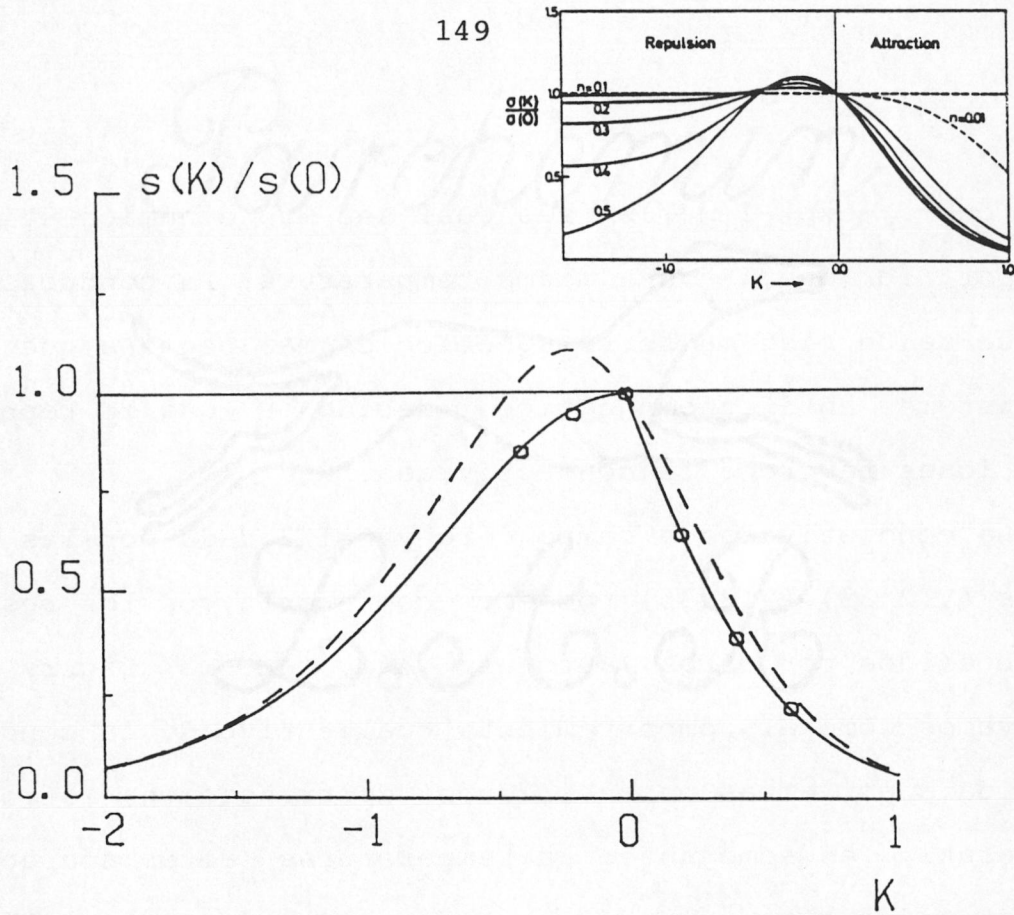


Fig. VI2.5. Conductividades a campo eléctrico cero, normalizadas a su valor a temperatura infinita, en función de $K=J/kT$ donde $J>0$ para el sistema ferromagnético, $J<0$ para el sistema antiferromagnético y T es la temperatura del sistema. La línea continua corresponde a las ecuaciones (VI2.33) y (VI2.34) (dinámica de Metropolis), y la línea a trazos a (VI2.35) y (VI2.36) (dinámica de Kawasaki); en ambos casos, cuando la densidad de iones es $n=1/2$. Los círculos corresponden a los resultados Monte Carlo (Katz et al., 1984) para una dinámica de Metropolis y $n=1/2$. La figura pequeña muestra los resultados exactos obtenidos por Dieterich et al. (Dieterich et al., 1984) para un modelo unidimensional con una probabilidad de transición dada por la ecuación (VI2.37) para diferentes densidades de iones.

para Kawasaki ferromagnético:

$$s_F^K = e^{-4\beta|J|} \left[2(1+e^{-4\beta|J|})(1+e^{-2\beta|J|}) \right]^{-1}, \quad (\text{VI2.35})$$

y para Kawasaki antiferromagnético:

$$s_A^K = e^{-2\beta|J|} \left[2(1+e^{-4\beta|J|})(1+e^{-2\beta|J|}) \right]^{-1}. \quad (\text{VI2.36})$$

Vemos que $s_F = \exp(-2\beta|J|)s_A$ sea cual sea la dinámica utilizada, por lo que, a una misma temperatura, la conductividad térmica de un sistema ferromagnético es más pequeña que la de un sistema antiferromagnético, debido a que la repulsión entre iones favorece la conductividad.

La conductividad a campo cero y $n=1/2$ dada por las ecuaciones (VI2.33)-(VI2.36) podemos compararla con los resultados obtenidos por otros autores. Así, en la figura VI2.5 observamos cómo el comportamiento cualitativo de la conductividad dada por ambas probabilidades de transición, Metropolis y Kawasaki, es semejante: a temperaturas altas aparece una conductividad alta debido a que los iones son "expulsados" de los nudos del retículo a causa de la fuerte agitación térmica, lo que favorece la acción de arrastre del campo, mientras que, a bajas temperaturas, independientemente de si el tipo de interacción es ferro o antiferromagnética, la conductividad disminuye reflejando el hecho de que el sistema tiende a formar agrupaciones, lo que dificulta la conducción iónica. Sin embargo, aparece un curioso fenómeno que diferencia los resultados obtenidos por ambas probabilidades de transición: a temperatura infinita, la derivada de la conductividad es continua al pasar de $J>0$ a $J<0$ para Kawasaki, mientras que no lo es para Metropolis, y no solo eso, sino que en el caso de Kawasaki aparece un máximo en la conductividad para un sistema antiferromagnético y elevadas temperaturas lo cual no ocurre para Metropolis. Estas peculiaridades, reflejan la importancia de la elección de la dinámica

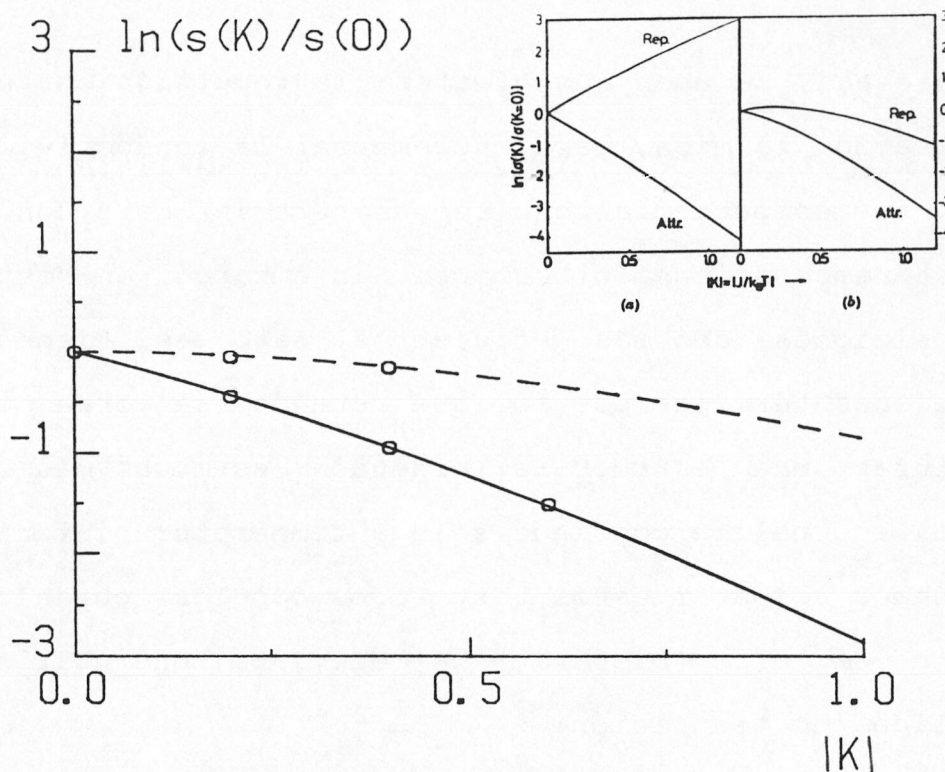


Fig. VI2.6. Logaritmo de las conductividades a campo eléctrico cero, normalizadas a su valor a temperatura infinita, en función de $|K| = |J|/kT$, donde T es la temperatura. El significado de las líneas y símbolos es el mismo que en la figura VI2.5. La figura pequeña muestra los resultados obtenidos en una cadena unidimensional con interacciones entre vecinos próximos y densidad $n=1/2$ en un modelo con probabilidades de transición dadas por Dieterich (Dieterich, 1977) en (a) y por Kikuchi (Kikuchi, 1976) en (b).

cuando describimos un sistema fuera del equilibrio. Así, una posible interpretación de estas diferencias es que Kawasaki, como ya es conocido al usarla en simulaciones Monte Carlo, es una dinámica poco eficiente, esto es, permite muchas transiciones que incrementan la energía del sistema por lo que, en promedio, describe un sistema con fluctuaciones térmicas mayores que la dinámica de Metropolis así, en un sistema antiferromagnético a alta temperatura descrito por la dinámi-

ca de Kawasaki, se unen dos efectos: la repulsión entre iones y la agitación térmica, para incrementar la conductividad con respecto su comportamiento a temperatura infinita donde únicamente tenemos agitación térmica. Sin embargo, en Metropolis las transiciones son más eficientes, esto es, tienen menos fluctuaciones térmicas por lo que cuando se crea a bajas temperaturas una estructura ordenada es mucho más difícil romperla, lo cual se consigue sólo a temperatura infinita.

Podemos comparar estos resultados con los obtenidos por Dieterich et al. (Dieterich et al., 1984) que utilizan una probabilidad de transición:

$$C_E(\underline{n}; l, l+1) = \frac{\alpha}{2} [1 - \eta_l \eta_{l+1}] \times \left[1 - \frac{1}{2} \tanh 2K (\eta_{l-1} \eta_l + \eta_{l+1} \eta_{l+2}) \right] \times \left[1 + \frac{E}{2} (\eta_l - \eta_{l+1}) \right] \quad (\text{VI2.37a})$$

para campos eléctricos débiles. Vemos en este caso (ver la figura pequeña de VI2.5) que el comportamiento cualitativo cuando la densidad de iones es $n=1/2$ es semejante al calculado por nosotros con la dinámica de Kawasaki, esto es, aparece también un máximo en la conductividad a temperatura finita en un sistema antiferromagnético. Además, ellos obtienen

$$\frac{S(K \rightarrow -\infty)}{S(K \rightarrow 0)} = \frac{2n-1}{n^2}, \quad n \geq 1/2 \quad (\text{VI2.37b})$$

lo cual coincide exáctamente con lo que obtenemos nosotros con las dos dinámicas, Metropolis y Kawasaki.

Por otra parte, si comparamos nuestros resultados con

los obtenidos en una simulación Monte Carlo por Katz et al. (Katz et al., 1984) para una probabilidad de transición tipo Metropolis, vemos que coinciden bien, lo que indica que nuestra aproximación es físicamente relevante y logra dar información relevante sobre el sistema. Por último, en la figura VI2.6, comparamos nuestros resultados con los obtenidos por Dieterich y Kikuchi en un modelo de "saltos" estocásticos. Observamos en este caso que los comportamientos cualitativos son semejantes cuando las interacciones son ferromagnéticas, mientras que en las antiferromagnéticas hay diferencias importantes con respecto a los resultados obtenidos por Dieterich (Dieterich, 1979) y no con los de Kikuchi (Kikuchi, 1968), ésto, como el mismo Dieterich comenta, indica la importancia de la dinámica utilizada en la obtención de resultados macroscópicos.

VI.2.3.3. Calor específico.

La energía configuracional del sistema por lugar de la red, tal como viene implicada por el hamiltoniano del gas reticular, es

$$e = -J(1 - 4n + 4u) \quad (\text{VI2.38})$$

donde u puede ser interpretada como un valor estacionario o como una cantidad dependiente del tiempo, ambas obtenidas en los apartados anteriores. A partir de (VI2.38), podemos definir

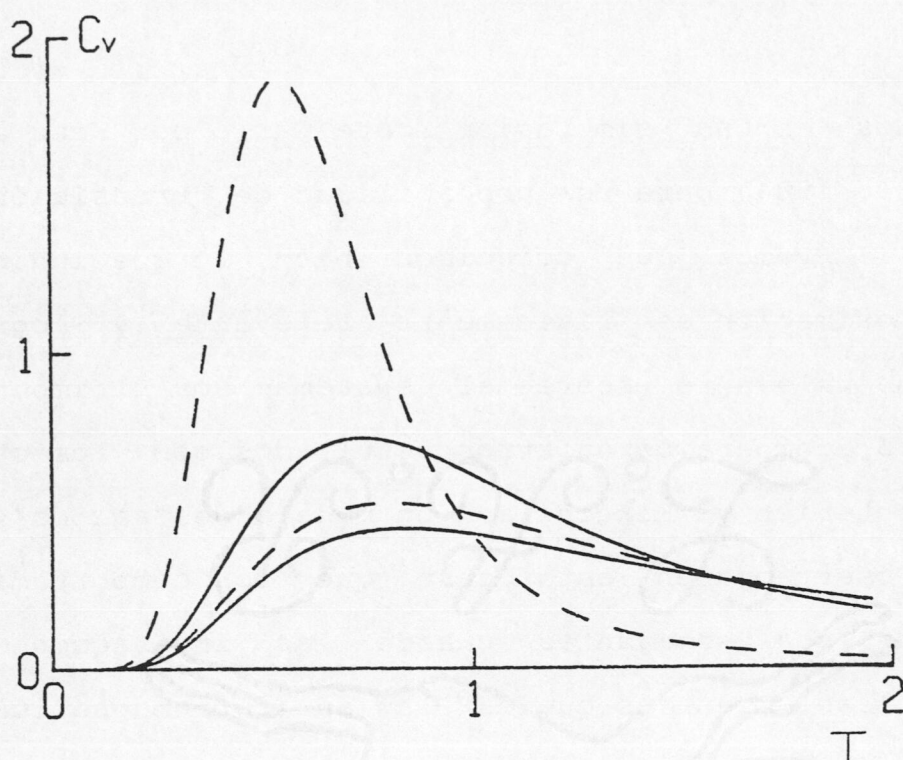


Fig. VI2.7. Calor específico definido según ecuación (VI2.39) en función de la temperatura del sistema para distintos campo eléctricos externos para un sistema ferromagnético bajo una dinámica de Kawasaki. Las curvas de menor a mayor altura del máximo corresponden respectivamente a $E=0, 1, 2, 5$.

un "calor específico" de no-equilibrio como :

$$C \equiv \frac{\partial e}{\partial T} = - \frac{4J}{T^2} \frac{\partial u}{\partial \beta} \quad (\text{VI2.39})$$

Su comportamiento podemos verlo en la figura VI2.7, resultando cualitativamente independiente de si el sistema tiene interacciones ferro o antiferro magnéticas. Observamos en la figura, como aparece un máximo en el calor específico típico de un sistema reticular unidimensional en equilibrio, éste va desplazándose hacia la temperatura cero a la vez que va cre-

ciendo en magnitud según vamos incrementando el campo eléctrico E , obteniendo en el límite de campo infinito una delta de Dirac entrada en $T=0$. La ley que sigue el máximo del calor específico para campos eléctricos suficientemente grandes es $4\beta_m \simeq E$.

Una importante pregunta aquí es si el teorema de fluctuación disipación funciona en este problema de no-equilibrio, e.g. si la cantidad C antes definida está relacionada con la desviación cuadrática media de e . Para ello hemos calculado

$$C_V \equiv \frac{1}{k_B T} \left(\langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2 \right) \quad (\text{VI2.40})$$

donde $\langle . \rangle$ indica el promedio realizado con los pesos dados por (VI2.7), (VI2.8) y (VI2.9). En sistemas en equilibrio, C y C_V coinciden, en nuestro caso observamos que para campos eléctricos distintos de cero C y C_V no son iguales, esto es, no se cumple el teorema de fluctuación-disipación.

VI.3. Estudio del modelo de SCI en dos dimensiones.

VI.3.1. Introducción

Los modelos reticulares de SCI bidimensionales tienen una característica diferencial con respecto a los unidimensionales que es esencial, la aparición de un cambio de fase a una temperatura crítica que depende del campo eléctrico aplicado. Este cambio de fase ha sido detectado y estudiado con detalle en simulaciones Monte Carlo (Katz et al., 1984; Vallés et al., 1986; Marro et al., 1985, 1987) y tiene como características fundamentales:

- * La temperatura crítica, $T_c(E)$, para un sistema con interacciones ferromagnéticas aumenta al aumentar el campo, mientras que para interacciones antiferromagnéticas disminuye al aumentarlo.
- * La fase ordenada es altamente anisotrópica con configuraciones en bandas que son típicas (ver figura VI3.1).
- * Dado un campo eléctrico, la corriente de iones como función de la temperatura tiene una pendiente discontinua en $T_c(E)$.
- * Los exponentes críticos cambian con respecto a los del sistema en el equilibrio ($E=0$).

Algunas de estas características han sido estudiadas teórica-

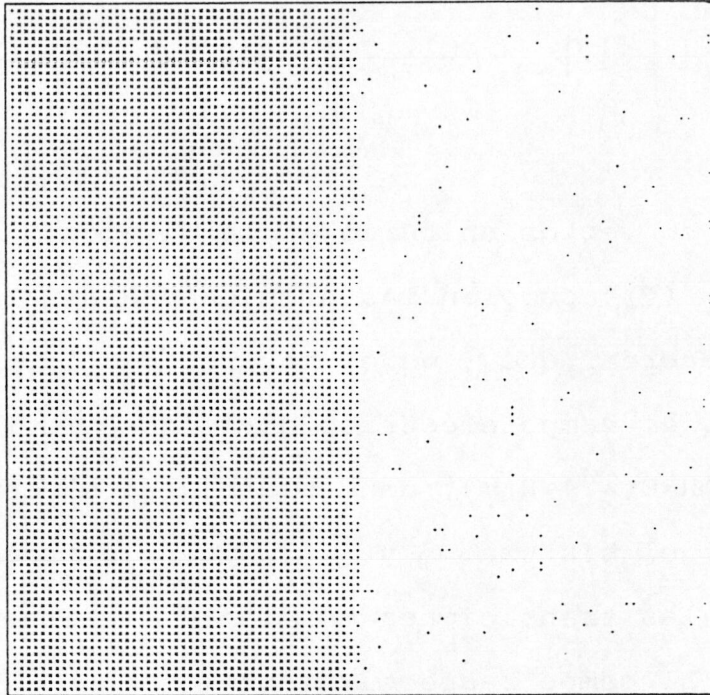


Figura VI3.1. Configuración típica obtenida en simulación Monte Carlo (Vallés et al., 1987) correspondiente a un sistema con $L=100$ y $n=0.5$ para un campo E infinito en la dirección \hat{y} y a una temperatura $T=.80T_c$.

mente en ciertos modelos con probabilidades de transición peculiares (Van Beijeren et al., 1984; Krugg et al., 1986), en algunos modelos continuos utilizando técnicas del grupo de renormalización (Jansen et al., 1986; Leung et al., 1986) y exáctamente en redes muy pequeñas (Zhang, 1987). En esta sección, vamos a intentar dar una descripción global del SCI en dos dimensiones utilizando para ello la cinética de las agrupaciones locales (CAL) descrita en las anteriores secciones, para ello usaremos la probabilidad de transición dada por la ecuación (VI1.2) que en dos dimensiones es:

$$C_E(\underline{\eta}; \underline{x}, \underline{y}) = \begin{cases} \Gamma_{\parallel} \Phi_{\parallel}(\beta \Delta H - \beta E(x_2 - y_2)(\eta_x - \eta_y)) & , \underline{x} - \underline{y} = \pm \underline{e}_2 \\ \Gamma_{\perp} \Phi_{\perp}(\beta \Delta H) & , \underline{x} - \underline{y} = \pm \underline{e}_1 \\ 0 & , \text{de otra forma.} \end{cases} \quad (\text{VI3.1})$$

donde \underline{e}_1 (\underline{e}_2) es un vector unitario en la dirección horizontal (vertical) y Φ_{\perp} (Φ_{\parallel}) cumplen las propiedades señaladas en la sección VI.1. Recordar que β es el inverso de la temperatura ($\beta = 1/kT$), E es el campo eléctrico dirigido a lo largo de la dirección \underline{e}_2 y $\Delta H = H(\underline{\eta}^x) - H(\underline{\eta})$, donde $H(\underline{\eta})$ es el hamiltoniano de interacción del sistema. Γ_{\parallel} y Γ_{\perp} indican la frecuencia con que se realizan las transiciones en las direcciones paralela y perpendicular al campo respectivamente.

VI.3.2. Modelo de SCI de Van Beijeren-Schulmann (VBS) generalizado.

Una primera aproximación teórica relevante al estudio de los SCI en dos dimensiones fue la realizada por Van Beijeren y Schulmann (Van Beijeren et al., 1984) al resolver exactamente el modelo descrito por las probabilidades de transición (VI3.1) en el caso particular de que $\Gamma_{\parallel} / \Gamma_{\perp} \rightarrow \infty$ y $E \rightarrow \infty$, hallando explícitamente la probabilidad de encontrar una configuración arbitraria del sistema en el régimen estacionario. Mas tarde, Krugg, Lebowitz, Spohn y Zhang (KLSZ) (Krugg et al., 1986) estudiaron el mismo modelo mediante otras técnicas ampliando los resultados obtenidos por VBS. Nuestro objetivo en esta sección es generalizar los resultados obte-

nidos por VBS y KLSZ en el caso de campos eléctricos finitos, además de estudiar por primera vez, el límite $\Gamma \equiv \Gamma_{\parallel} / \Gamma_{\perp} \rightarrow 0$, para ello, entre otras, utilizaremos las técnicas generales usadas por KLSZ en su trabajo.

Partimos de la ecuación maestra (VI1.1)

$$\frac{dP_E(\underline{\eta}; t)}{dt} = \sum_{\underline{x}-\underline{y}=\pm e_2} \left[C_{E\parallel}(\underline{\eta}^{\underline{x},\underline{y}}; \underline{x}, \underline{y}) P_E(\underline{\eta}^{\underline{x},\underline{y}}; t) - C_{E\parallel}(\underline{\eta}; \underline{x}, \underline{y}) P_E(\underline{\eta}; t) \right] + \sum_{\underline{x}-\underline{y}=\pm e_1} \left[C_{E\perp}(\underline{\eta}^{\underline{x},\underline{y}}; \underline{x}, \underline{y}) P_E(\underline{\eta}^{\underline{x},\underline{y}}; t) - C_{E\perp}(\underline{\eta}; \underline{x}, \underline{y}) P_E(\underline{\eta}; t) \right], \quad (\text{VI3.2})$$

donde hemos puesto explícitamente la dependencia direccional de las probabilidades de transición (VI3.1). Si ahora tomamos el límite $\Gamma_{\parallel} / \Gamma_{\perp} \rightarrow \infty$, las transiciones en la dirección del campo serán mucho más frecuentes que las que ocurren ortogonales a él, así podemos dividir al sistema en columnas paralelas al campo e interpretar que cuando ocurre un salto de partículas entre columnas vecinas, éstas vuelven rápidamente a un nuevo estado estacionario caracterizado por el número de partículas que en ese momento tiene cada columna. Así pues, en este límite podemos estudiar al sistema en dos escalas temporales diferenciadas, una escala microscópica que cumple:

$$* \quad \frac{dP_E(\underline{\eta}; t)}{dt} = 0 \quad \text{i.e. estacionariedad.}$$

$$* \quad C_{\perp} = 0 \quad \text{i.e. únicamente hay transiciones dentro de las columnas.}$$

o de otra forma

$$* P_E(\underline{\eta}) = \prod_i \tilde{P}_E(\eta_i; n_i; \vec{n}) \quad (\text{VI3.3})$$

$$* \sum_{\substack{\underline{x}-\underline{y}=\pm e_2 \\ \underline{x} \in i}} \left[c_{E_{ii}}(\underline{\eta}^{\underline{x}\underline{y}}; \underline{x}, \underline{y}) \tilde{P}_E(\underline{\eta}_i; n_i; \vec{n}) - c_{E_{ii}}(\underline{\eta}_i; \underline{x}, \underline{y}) \tilde{P}_E(\underline{\eta}_i; n_i; \vec{n}) \right] = 0 \quad (\text{VI3.4})$$

donde $\tilde{P}_E(\underline{\eta}_i; n_i; \vec{n})$ indica la probabilidad de tener una configuración estacionaria $\underline{\eta}_i$ en la columna i con un número n_i de partículas; \vec{n} señala la posible dependencia de esta probabilidad de lo que ocurra en las columnas vecinas. Y una escala macroscópica caracterizada por:

$$* P_E(\underline{\eta}; t) = \bar{P}_E(\vec{n}; t) \prod_i \tilde{P}_E(\eta_i; n_i; \vec{n}) \quad (\text{VI3.5})$$

donde $(\vec{n}) \equiv n_i$ y $\bar{P}_E(\vec{n}; t)$ indica la probabilidad de encontrar, en un instante dado, n_i partículas en la columna i ($i=1, \dots, M$). Utilizando esta ecuación en (VI3.2) obtenemos:

$$\frac{d\bar{P}_E(\vec{n}; t)}{dt} = \sum_{\vec{n}'} \left[c(\vec{n}', \vec{n}) \bar{P}_E(\vec{n}'; t) - c(\vec{n}, \vec{n}') \bar{P}_E(\vec{n}; t) \right] \quad (\text{VI3.6})$$

con

$$c(\vec{n}', \vec{n}) \equiv N \langle \phi_{\perp} (\beta (H(\underline{\eta}^{\underline{x}\underline{y}}) - H(\underline{\eta}))) \rangle (\vec{n}), \underline{x}-\underline{y}=\pm e_2 \quad (\text{VI3.7})$$

donde N es la altura de la columna y $\langle \cdot \rangle (\vec{n})$ es el promedio sobre colectividades realizado con la distribución dada por (VI3.3). Así pues, para hallar la solución general dada por (VI3.5), hemos de resolver dos problemas "unidimensionales": encontrar la distribución estacionaria de una columna, i.e.

resolver la ecuación (VI3.4), y resolver la ecuación maestra de un sistema unidimensional con una probabilidad de transición dada por (VI3.7). Esta simplificación del modelo, lo hace asequible a su estudio teórico sin perder excesiva relevancia física. En las siguientes secciones resolveremos las ecuaciones planteadas.

VI.3.2.1. Resolución de la ecuación maestra (VI3.6) mediante técnicas de Ω -expansion.

Queremos resolver la ecuación maestra (VI3.6) con la probabilidad de transición dada por (VI3.7), para ello observamos que, para grandes N (N es el número de nudos en una columna), las variables naturales asociadas a una columna son sus densidades de partículas, $\rho_j \equiv n_j/N$, por lo que si intercambiamos una partícula entre columnas habrá una variación en la densidad de éstas del orden de $1/N$, luego las fluctuaciones típicas en el sistema serán de ese orden. De esta forma, podemos tomar $1/N$ como un parámetro perturbativo natural del sistema, y utilizarlo para desarrollar la ecuación maestra (VI3.6) en potencias de éste parámetro. Esta técnica para resolver una ecuación maestra se denomina Ω -expansion, donde Ω indica el tamaño del sistema.

Escribimos la ecuación maestra (VI3.6) como:

$$\frac{d\bar{P}(\underline{\psi}; t)}{dt} = \Omega \sum_{\underline{\nu}} \left\{ \omega(\underline{\psi} + \underline{\nu}\epsilon, -\underline{\nu}) \bar{P}(\underline{\psi} + \underline{\nu}\epsilon; t) - \omega(\underline{\psi}, \underline{\nu}) \bar{P}(\underline{\psi}; t) + \omega(\underline{\psi} - \underline{\nu}\epsilon, \underline{\nu}) \bar{P}(\underline{\psi} - \underline{\nu}\epsilon; t) - \omega(\underline{\psi}, \underline{\nu}) \bar{P}(\underline{\psi}; t) \right\} \quad (\text{VI3.8})$$

donde hemos definido $\underline{\varphi} \equiv \underline{n}/\Omega \equiv \epsilon \underline{n}$, $\underline{\nu} \equiv \underline{n}' - \underline{n}$, y además:

$$c(\underline{n}', \underline{n}) = \Omega \omega(\underline{\varphi} + \underline{\nu} \epsilon, -\underline{\nu}) \quad (\text{VI3.9})$$

$$\bar{\bar{P}}(\underline{\varphi}; t) = \bar{P}(\underline{n}; t) \quad (\text{VI3.10})$$

Ahora podemos escribir la ecuación (VI3.8) como:

$$\frac{d\bar{\bar{P}}(\underline{\varphi}; t)}{dt} = \epsilon^{-1} \sum_{\pm \underline{\nu}} \left(e^{-\epsilon \underline{\nu} \cdot \frac{\partial}{\partial \underline{\varphi}}} - 1 \right) \omega(\underline{\varphi}, \underline{\nu}) \bar{\bar{P}}(\underline{\varphi}; t) \quad (\text{VI3.11})$$

donde hemos supuesto que $\omega(\underline{\varphi}, \underline{\nu})$ es una función analítica. Como que $\Omega \rightarrow \infty$ ($\epsilon \rightarrow 0$), podemos desarrollar esta ecuación en potencias de ϵ obteniendo:

$$\frac{d\bar{\bar{P}}(\underline{\varphi}; t)}{dt} = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{\pm \underline{\nu}} \frac{(-1)^m \epsilon^{m-1}}{m!} \left(\underline{\nu} \cdot \frac{\partial}{\partial \underline{\varphi}} \right)^m \omega(\underline{\varphi}, \underline{\nu}) \bar{\bar{P}}(\underline{\varphi}; t) \quad (\text{VI3.12})$$

que podemos escribir como:

$$\frac{d\bar{\bar{P}}(\underline{\varphi}; t)}{dt} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m \epsilon^{m-1}}{m!} \left(\frac{\partial}{\partial \underline{\varphi}} \right)^m \hat{\alpha}_m(\underline{\varphi}) \bar{\bar{P}}(\underline{\varphi}; t) \quad (\text{VI3.13})$$

donde hemos definido el m momento del tensor de "salto":

$$\hat{\alpha}_m(\underline{\varphi}) \equiv \sum_{\pm \underline{\nu}} (\underline{\nu})^m \omega(\underline{\varphi}, \underline{\nu}) \quad (\text{VI3.14})$$

Ahora suponemos que las variables fluctúan alrededor de un valor promedio, o sea,

$$\underline{\varphi}(t) = \underline{\rho}(t) + \epsilon^{1/2} \underline{\xi}(t) \quad (\text{VI3.15})$$

Si ahora definimos

$$\Pi(\underline{\xi}; t) = \bar{\bar{P}}(\underline{\psi}; t) = \bar{P}(\underline{n}; t) \quad (\text{VI3.16})$$

y sabemos que

$$\frac{\partial^m \Pi}{\partial \underline{\xi}^m} = \frac{\partial^m \bar{\bar{P}}(\underline{\psi}; t)}{\partial \underline{\xi}^m} = \left(\frac{\partial \underline{\psi}}{\partial \underline{\xi}} \right)^m \frac{\partial^m \bar{\bar{P}}(\underline{\psi}; t)}{\partial \underline{\psi}^m} = \epsilon^{m/2} \frac{\partial^m \bar{\bar{P}}(\underline{\psi}; t)}{\partial \underline{\psi}^m} \quad (\text{VI3.17})$$

entonces, derivando Π con respecto del tiempo, obtenemos:

$$\frac{d\Pi}{dt} = \frac{d\bar{\bar{P}}}{dt} + \epsilon^{-1/2} \frac{\partial \Pi}{\partial \underline{\xi}} \cdot \frac{d\underline{\rho}}{dt} \quad (\text{VI3.18})$$

y si despejamos el valor $d\bar{\bar{P}}/dt$ de esta ecuación y lo introducimos en la ecuación (VI3.13), nos queda:

$$\begin{aligned} \frac{d\Pi}{dt} - \epsilon^{-1/2} \frac{d\underline{\rho}}{dt} \cdot \frac{\partial \Pi(\underline{\xi}; t)}{\partial \underline{\xi}} &= \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m \epsilon^{m-1}}{m!} \epsilon^{-m/2} \left(\frac{\partial}{\partial \underline{\xi}} \right)^m \hat{\alpha}_m(\underline{\psi}) \bar{\bar{P}}(\underline{\psi}; t) \end{aligned} \quad (\text{VI3.19})$$

donde observamos que aún hemos de hacer explícita la dependencia en ϵ de $\hat{\alpha}_m(\underline{\psi})$, así:

$$\begin{aligned} \frac{d\Pi}{dt} - \epsilon^{-1/2} \frac{d\underline{\rho}}{dt} \cdot \frac{\partial \Pi(\underline{\xi}; t)}{\partial \underline{\xi}} &= \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^m \epsilon^{m+l-1}}{m! l!} \hat{\alpha}_{m,l}(\underline{\rho}) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \underline{\xi}} \right)^m \left(\frac{\underline{\xi}}{\underline{\xi}} \right)^l \Pi(\underline{\xi}; t) \end{aligned} \quad (\text{VI3.20})$$

y hemos utilizado el hecho

$$\hat{\alpha}_m(\underline{\psi}) = \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{\underline{\xi}}{\underline{\xi}} \cdot \frac{\partial}{\partial \underline{\rho}} \right)^l \hat{\alpha}_{m,l}(\underline{\rho}) \frac{1}{l!} \epsilon^{l/2} \quad (\text{VI3.21})$$

con

$$\hat{\alpha}_{m,e}(\rho) \equiv \frac{\partial^e}{\partial \rho^e} \hat{\alpha}_m(\rho) \quad (\text{VI3.22})$$

Así pues, en la ecuación (VI3.20) tenemos ya explícita todas las dependencias en ϵ y por lo tanto, podemos ahora identificar orden a orden los términos de la ecuación (VI3.20). De esta forma, a orden $\epsilon^{-1/2}$ hallamos:

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \hat{\alpha}_{1,0}(\rho) \quad (\text{VI3.23})$$

a orden ϵ^0 ,

$$\begin{aligned} \frac{d\pi(\underline{\xi};t)}{dt} = & -\hat{\alpha}_{1,1}(\rho) \cdot \frac{\partial}{\partial \underline{\xi}} (\underline{\xi} \pi(\underline{\xi};t)) + \\ & + \frac{1}{2} \hat{\alpha}_{2,0}(\rho) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \underline{\xi}} \right)^2 \pi(\underline{\xi};t) , \end{aligned} \quad (\text{VI3.24})$$

donde si definimos $\vec{K}(\rho, \underline{\xi}) \equiv \hat{\alpha}_{1,1}(\rho) \cdot \underline{\xi}$ y $\vec{g} \equiv \hat{\alpha}_{2,0}(\rho)$, podemos escribirla como:

$$\frac{d\pi(\underline{\xi};t)}{dt} = -\frac{\partial}{\partial \underline{\xi}} \cdot \underline{K}(\rho, \underline{\xi}) \pi(\underline{\xi};t) + \frac{1}{2} \vec{g} : \frac{\partial^2}{\partial \underline{\xi} \partial \underline{\xi}} \pi(\underline{\xi};t) \quad (\text{VI3.25})$$

que no es más que una ecuación de Fokker-Planck. Las ecuaciones generales (VI3.23) y (VI3.25) las podemos utilizar, en particular, para describir el SCI si sabemos que:

$$\omega(\rho, \underline{v}) \equiv R(\rho_{i-1}, \rho_i, \rho_{i+1}, \rho_{i+2}) = R_i = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} C(n', n) \quad (\text{VI3.26})$$

$$\omega(\rho, -\vartheta) \equiv \tilde{R}(\rho_{i-1}, \rho_i, \rho_{i+1}, \rho_{i+2}) \equiv \tilde{R}_i = R(\rho_{i+2}, \rho_{i+1}, \rho_i, \rho_{i-1}) \quad (\text{VI3.27})$$

$$\alpha_0(\rho) = \sum_{\pm\vartheta} \omega(\rho, \vartheta) = \sum_{i=1}^M [R_i + \tilde{R}_i] \quad (\text{VI3.28})$$

$$\underline{\alpha}_{1,0}(\rho) = \sum_{\pm\vartheta} \vartheta \omega(\rho, \vartheta) = \sum_{\vartheta} [\vartheta \omega(\rho, \vartheta) - \vartheta \omega(\rho, -\vartheta)] \quad (\text{VI3.29})$$

$$(\alpha_{1,0})_j = \sum_{i=1}^M [(\delta_{j,i+1} - \delta_{j,i}) R_i - (\delta_{j,i+1} - \delta_{j,i}) \tilde{R}_i] \quad (\text{VI3.30})$$

$$\overleftrightarrow{\alpha}_{1,1}(\rho) = \frac{\partial}{\partial \rho} \alpha_{1,0}(\rho) = \sum_{\pm\vartheta} \vartheta \frac{\partial}{\partial \rho} \omega(\rho, \vartheta) \quad (\text{VI3.31})$$

$$(\alpha_{1,1})_{j,k} = \sum_{i=1}^M \left[(\delta_{j,i+1} - \delta_{j,i}) \frac{\partial}{\partial \rho_k} R_i + (\delta_{j,i} - \delta_{j,i+1}) \frac{\partial}{\partial \rho_k} \tilde{R}_i \right] \quad (\text{VI3.32})$$

$$\underline{K} = \underline{\xi} \cdot \frac{\partial}{\partial \rho} \alpha_{1,0}(\rho) = \sum_{\pm\vartheta} \vartheta \left(\underline{\xi} \cdot \frac{\partial}{\partial \rho} \right) \omega(\rho, \vartheta) \quad (\text{VI3.33})$$

$$K_j = \sum_{i,k} \left[(\delta_{j,i+1} - \delta_{j,i}) \xi_k \frac{\partial}{\partial \rho_k} R_i + (\delta_{j,i} - \delta_{j,i+1}) \xi_k \frac{\partial}{\partial \rho_k} \tilde{R}_i \right] \quad (\text{VI3.34})$$

$$\overleftrightarrow{g} = \hat{\alpha}_{2,0}(\rho) = \sum_{\pm\vartheta} \vartheta \vartheta \omega(\rho, \vartheta) \quad (\text{VI3.35})$$

$$g_{jk} = \sum_i \left[(\delta_{j,i+1} - \delta_{j,i}) (\delta_{k,i+1} - \delta_{k,i}) R_i + (\delta_{j,i} - \delta_{j,i+1}) (\delta_{k,i} - \delta_{k,i+1}) \tilde{R}_i \right] \quad (\text{VI3.36})$$

y si ahora definimos $a_i \equiv R_i + \tilde{R}_i$, $J_i \equiv R_i - \tilde{R}_i$, entonces

$$(\alpha_{1,0})_j = R_{j-1} - R_j + \tilde{R}_j - \tilde{R}_{j-1} = -(J_j - J_{j-1}) \quad (\text{VI3.37})$$

$$(\alpha_{1,1})_{j,k} = \frac{\partial}{\partial \rho_k} (R_{j-1} - R_j) + \frac{\partial}{\partial \rho_k} (\tilde{R}_j - \tilde{R}_{j-1}) = -\frac{\partial}{\partial \rho_k} (J_j - J_{j-1}) \equiv L_{jk} \quad (\text{VI3.38})$$

$$K_j = \sum_k L_{jk} \xi_k \quad (\text{VI3.39})$$

$$g_{jk} = \delta_{jk} (a_j + a_{j-1}) - \delta_{j,k+1} a_k - \delta_{k,j+1} a_j \quad (\text{VI3.40})$$

utilizando estas expresiones en las ecuaciones (VI3.23) y (VI3.25), obtenemos

$$\frac{dp_j}{dt} = - (J_j - J_{j-1}) \quad (\text{VI3.41})$$

$$\frac{d\pi(\underline{\xi}; t)}{dt} = - \sum_{ij} L_{ij} \frac{\partial}{\partial \xi_i} \xi_j \pi(\underline{\xi}; t) + \frac{1}{2} \sum_{ij} g_{ij} \frac{\partial^2 \pi(\underline{\xi}; t)}{\partial \xi_i \partial \xi_j} \quad (\text{VI3.42})$$

esta última ecuación es equivalente a decir que ξ_j está controlada por una ecuación de Langevin

$$\frac{d\xi_j}{dt} = \sum_i L_{ji}(\rho) \xi_i + w_j(t) \quad (\text{VI3.43})$$

donde

$$\langle w_i(t) w_j(t') \rangle = \delta(t-t') g_{ij}(\rho) \quad (\text{VI3.44})$$

por lo que w no es más que un ruido gaussiano. En primer lugar buscamos las soluciones de las ecuaciones (VI3.41) y (VI3.43) en el régimen estacionario cuando estamos por encima de la temperatura crítica así, una solución de la ecuación determinista (VI3.41) es:

$$J_i \equiv 0, \quad \rho_i = \rho \quad \forall i \quad (\text{VI3.45})$$

que es invariante traslacional. La solución de la ecuación

(VI3.43) la hallamos trabajando en el espacio de Fourier

$$\hat{\xi}_k(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-ikn} \xi_n(t) \quad (\text{VI3.46})$$

pues entonces la ecuación (VI3.43) se desacopla quedando:

$$\frac{d\hat{\xi}_k(t)}{dt} = \hat{L}(k)\hat{\xi}_k(t) + \hat{W}(k,t) \quad (\text{VI3.47})$$

donde ahora

$$\begin{aligned} \hat{L}(k) &= -R_{23} - (R_{14} - R_{23}) \cos k + R_{14} \cos 2k \\ \hat{g}(k) &= 2D(1 - \cos k) \end{aligned} \quad (\text{VI3.48})$$

$$\langle \hat{W}(k,t) \hat{W}(k',t') \rangle = \delta(k-k') \delta(t-t') \hat{g}(k) \quad (\text{VI3.49})$$

y los coeficientes $D=D(\rho)$ y $R_{ij} = R_{ij}(\rho)$ son:

$$\begin{aligned} D(\rho) &\equiv R(\rho, \rho, \rho, \rho) \\ R_{ij}(\rho) &= \left(\frac{\partial R}{\partial x_i} - \frac{\partial R}{\partial x_j} \right)_{x=\rho}, \quad i, j = 1, 2, 3, 4 \end{aligned} \quad (\text{VI3.50})$$

De estas ecuaciones podemos sacar mucha información física relevante así, por ejemplo, la función de estructura es:

$$S(k) = \sum_n e^{ink} G(n) \quad ; \quad \langle \xi_i \xi_j \rangle = G(i-j) \quad (\text{VI3.51})$$

que no es más que

$$S(k) = \frac{-\hat{g}(k)}{2\hat{L}(k)} = \frac{D}{R_{23} + R_{14}(1 + 2\cos k)} \quad (\text{VI3.52})$$

de esta expresión podemos hallar la temperatura crítica del modelo a partir de la divergencia de la función de estructura cuando $k=0(\pi)$ para interacciones ferromagnéticas (antiferromagnéticas), por lo que las condiciones de criticalidad son:

$$R_{23} + 3R_{14} = 0 \quad \text{si } J > 0 \quad (\text{VI3.53})$$

$$R_{23} - R_{14} = 0 \quad \text{si } J < 0 \quad (\text{VI3.54})$$

Por otra parte, también podemos calcular la función de correlación (Krugg et al., 1986) que es

$$C(l) = \langle \xi_0 \xi_l \rangle = \frac{D}{2 [(R_{23} + |R_{14}|)(R_{23} + 3R_{14})]^{1/2}} e^{-|\ln(a - \sqrt{a^2 - 1})| |l|} \quad (\text{VI3.55})$$

donde

$$a(T) \equiv \frac{R_{23} + R_{14}}{2|R_{14}|} \quad (\text{VI3.56})$$

En cualquier caso, vemos que toda la información del modelo depende del cálculo de R (i.e. c). Por otra parte, podíamos intentar hallar soluciones de esas ecuaciones por debajo de la temperatura crítica, pero este método (Ω -expansion) se puede demostrar que no sirve cuando las soluciones no tienden a un único punto fijo cuando el tiempo tiende a infinito, como es éste nuestro caso, esta técnica de resolución no nos servirá pues, para estudiar el comportamiento del modelo a bajas temperaturas y por consiguiente para conocer su curva

de coexistencia. El desarrollo teórico explícito realizado en esta sección es original de Joel L. Lebowitz (Lebowitz, 1986).

VI.3.2.2. Cálculo de la probabilidad de transición dada por la ecuación (VI3.7).

Una vez resuelta la ecuación maestra en general, hemos de calcular la probabilidad de transición (VI3.7), i.e.

$$\frac{1}{N} c(\vec{n}', \vec{n}) = \langle \phi(\beta(H(\underline{\eta}^{\prime}) - H(\underline{\eta}))) \rangle \quad (\text{VI3.57})$$

explícitamente. Para ello nos fijamos en los intercambios producidos entre las columnas \underline{i} e $\underline{i+1}$, así tenemos que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} c(\vec{n}', \vec{n}) \equiv R(\rho_{i-1}, \rho_i, \rho_{i+1}, \rho_{i+2}) = \sum_{\underline{\eta}} \prod_{\kappa} \tilde{P}(\underline{\eta}_{\kappa}, \rho_{\kappa}; \vec{\rho}) \phi(\beta \Delta H(\underline{\eta}_i)) \quad (\text{VI3.58})$$

como $\Delta H(\underline{\eta}_i)$ depende de variables de ocupación pertenecientes a las columnas $\underline{i-1}, \underline{i}, \underline{i+1}, \underline{i+2}$; entonces

$$R(\rho_{i-1}, \rho_i, \rho_{i+1}, \rho_{i+2}) = \sum_{\underline{\eta}_{i-1}} \sum_{\underline{\eta}_i} \sum_{\underline{\eta}_{i+1}} \sum_{\underline{\eta}_{i+2}} \tilde{P}(\underline{\eta}_{i-1}; \rho_{i-1}; \vec{\rho}) \times \\ \times \tilde{P}(\underline{\eta}_i; \rho_i; \vec{\rho}) \times \tilde{P}(\underline{\eta}_{i+1}; \rho_{i+1}; \vec{\rho}) \times \tilde{P}(\underline{\eta}_{i+2}; \rho_{i+2}; \vec{\rho}) \phi(\beta \Delta H(\underline{\eta}_i)) \quad (\text{VI3.59})$$

y además, ΔH sólo dependerá de variables de ocupación que sean vecinas próximas de la pareja a intercambiar, así podemos realizar parte de los sumatorios, quedando:

$$R_i = \sum_{\eta_{i-1,0}} \sum'_{\eta_{i,0}} \sum'_{\eta_{i+1,0}} \sum_{\eta_{i+2,0}} \tilde{P}_1(\eta_{i-1,0}; \rho_{i-1}; \vec{\rho}) \tilde{P}_3(\eta_{i,0}=1, \eta_{i,1}, \eta_{i,-1}; \rho_i; \vec{\rho}) \times \tilde{P}_3(\eta_{i+1,0}=0, \eta_{i+1,1}, \eta_{i+1,-1}; \rho_{i+1}; \vec{\rho}) \tilde{P}_1(\eta_{i+2,0}; \rho_{i+2}; \vec{\rho}) \Phi(\beta \Delta H(\underline{\eta}_i)) \quad (\text{VI3.60})$$

donde \tilde{p}_k indica la probabilidad de encontrar una agrupación dada de variables de ocupación, $\sum'_{\eta_{i,0}}$ indica una suma para $\eta_{i,1}$ y $\eta_{i,-1}$ o sea, los vecinos próximos a $\eta_{i,0}$ que pertenecen a la columna \underline{i} . Notar que hemos fijado $\eta_{i,0}=1$ y $\eta_{i+1,0}=0$ puesto que queremos conocer la probabilidad de transición "promedio" entre las columnas \underline{i} e $\underline{i+1}$. Como suponemos homogeneidad en el interior de las columnas, entonces:

$$\tilde{P}_1(\eta_{i-1,0}; \rho_{i-1}; \vec{\rho}) = \begin{cases} \rho_{i-1} & \text{si } \eta_{i-1,0} = 1 \\ 1 - \rho_{i-1} & \text{si } \eta_{i-1,0} = 0 \end{cases} \quad (\text{VI3.61})$$

Así pues, nos falta conocer únicamente \tilde{p}_3 para lo cual utilizaremos la cinética de agrupamientos locales (CAL), en ese contexto podemos escribir

$$\begin{aligned} \tilde{P}_3(\eta_{i,0}=1, \eta_{i,1}, \eta_{i,-1}; \rho_i; \vec{\rho}) &= \rho_i \frac{u_i^{\eta_{i,1}}}{\rho_i} \times \frac{(\rho_i - u_i)^{1-\eta_{i,1}}}{\rho_i} \times \frac{u_i^{\eta_{i,-1}} (\rho_i - u_i)^{1-\eta_{i,-1}}}{\rho_i^2} = \\ &= \frac{u_i^{\eta_{i,1} + \eta_{i,-1}} (\rho_i - u_i)^{2-\eta_{i,1}-\eta_{i,-1}}}{\rho_i^3} \\ \tilde{P}_3(\eta_{i+1,0}=1, \eta_{i+1,1}, \eta_{i+1,-1}; \rho_{i+1}; \vec{\rho}) &= \frac{z_{i+1}^{2-\eta_{i+1,1}-\eta_{i+1,-1}} (\rho_{i+1} - u_{i+1})^{\eta_{i+1,1} + \eta_{i+1,-1}}}{(1-\rho_i)^3} \quad (\text{VI3.62}) \end{aligned}$$

donde u_i indica la densidad de parejas de partículas y z_i la densidad de parejas de huecos en la columna \underline{i} . De esta forma queda

$$R_i = \sum_{\eta_{i-1,0}} \sum'_{\eta_{i,0}} \sum_{\eta_{i+1,0}} \sum_{\eta_{i+2,0}} (\rho_{i-1})^{\eta_{i-1,0}} (1-\rho_{i-1})^{1-\eta_{i-1,0}} \frac{u_i^{\eta_{i+1}+\eta_{i-1}} (\rho_i - u_i)^{2-\eta_{i+1}-\eta_{i-1}}}{\rho_i^3} \cdot \frac{z_{i+1}^{2-\eta_{i+1,1}-\eta_{i+1,-1}} (\rho_{i+1} - u_{i+1})^{\eta_{i+1,1}+\eta_{i+1,-1}}}{(1-\rho_{i+1})^3} (\rho_{i+2})^{\eta_{i+2,0}} (1-\rho_{i+2})^{1-\eta_{i+2,0}} \Phi(\Delta H) \quad (\text{VI3.63})$$

donde

$$\Delta H = -4J \left[\eta_{i+1,1} + \eta_{i+1,-1} + \eta_{i+2,0} - \eta_{i,1} - \eta_{i-1,0} - \eta_{i-1} \right] \quad (\text{VI3.64})$$

Si realizamos las sumas en la ecuación (VI3.63) obtenemos

$$R_i = \left\{ \left[\rho_{i-1} \Phi(0) + v_{i-1} \Phi(-4J) \right] \times \left[u_i^2 (\rho_{i+1} - u_{i+1})^2 \rho_{i+2} + 4(\rho_i - u_i) u_i z_{i+1} (\rho_{i+1} - u_{i+1}) \rho_{i+2} + 2(\rho_i - u_i) u_i (\rho_{i+1} - u_{i+1})^2 v_{i+2} + 2(\rho_i - u_i)^2 z_{i+1} (\rho_{i+1} - u_{i+1}) v_{i+2} + (\rho_i - u_i)^2 z_{i+1}^2 \rho_{i+2} \right] + \left[\rho_{i-1} \Phi(4J) + v_{i-1} \Phi(0) \right] \times \left[2u_i^2 z_{i+1} (\rho_{i+1} - u_{i+1}) \rho_{i+2} + u_i^2 (\rho_{i+1} - u_{i+1})^2 v_{i+2} + 4(\rho_i - u_i) u_i z_{i+1} (\rho_{i+1} - u_{i+1}) v_{i+2} + 2(\rho_i - u_i) u_i z_{i+1}^2 \rho_{i+2} + (\rho_i - u_i)^2 z_{i+1}^2 v_{i+2} \right] + \left[\rho_{i-1} \Phi(8J) + v_{i-1} \Phi(4J) \right] \times \left[2u_i^2 z_{i+1} (\rho_{i+1} - u_{i+1}) v_{i+2} + u_i^2 z_{i+1}^2 \rho_{i+2} + 2(\rho_i - u_i) u_i z_{i+1}^2 v_{i+2} \right] + \left[\rho_{i-1} \Phi(12J) + v_{i-1} \Phi(8J) \right] \times \left[u_i^2 z_{i+1}^2 v_{i+2} + \left[\rho_{i-1} \Phi(-4J) + v_{i-1} \Phi(-8J) \right] \times \left[2(\rho_i - u_i) u_i (\rho_{i+1} - u_{i+1})^2 \rho_{i+2} + 2(\rho_i - u_i)^2 z_{i+1} (\rho_{i+1} - u_{i+1}) \rho_{i+2} + (\rho_i - u_i)^2 (\rho_{i+1} - u_{i+1})^2 v_{i+2} \right] + \left[\rho_{i-1} \Phi(-8J) + v_{i-1} \Phi(-12J) \right] \times \left[(\rho_i - u_i)^2 (\rho_{i+1} - u_{i+1})^2 \rho_{i+2} \right] \right\} \frac{1}{\rho_i v_{i+2}} \quad (\text{VI3.65})$$

donde $v_i \equiv 1 - \rho_i$. Así pues, R_i quedará totalmente determinada si conocemos u_j ($\forall j$) o sea, si resolvemos la ecuación (VI3.4) que nos da el comportamiento estacionario de una columna en la aproximación CAL. Este comportamiento dependerá, en general, de lo que ocurra en las columnas vecinas a causa de la interacción existente entre las partículas, por lo que hemos de hallar el régimen estacionario de una columna que interacciona con un "decorado" de columnas vecinas que no

están correlacionadas con ella. Teniendo en cuenta esto, podemos construir una ecuación de evolución semejante a la de un SCI unidimensional (ver ecuación (VI2.13)).

Sean tres columnas vecinas entre si: 1, 2 y 3, en régimen estacionario y cada una de ellas caracterizada por su densidad de partículas ρ_i y su densidad de parejas de partículas u_i ($i=1,2,3$), éstas últimas incógnitas. La probabilidad de tener una configuración

$$\begin{array}{ccc|ccc} & \eta_1 & \eta_2 & & & \\ \hline \eta_3 & 1 & 0 & \eta_4 & & \\ \hline & \eta_5 & \eta_6 & & & \\ \hline & & & & & \end{array} \begin{array}{l} \text{columna 1} \\ \text{columna 2} \\ \text{columna 3} \end{array}$$

viene dada en CAL por

$$Q_{10}(\eta_i (i=1, \dots, 6)) = (\rho_2 - u_2) \frac{u_2^{\eta_3}}{\rho_2} (\rho_2 - u_2)^{1-\eta_3} \cdot \frac{z_2^{1-\eta_4} (\rho_2 - u_2)^{\eta_4}}{(1-\rho_2)} \cdot q_1(\eta_1, \eta_2) q_3(\eta_5, \eta_6) \quad (\text{VI3.66})$$

donde

$$q_i(\eta_1, \eta_2) = \begin{cases} u_i & \text{si } \eta_1 = \eta_2 = 1 \\ \rho_i - u_i & \text{si } \eta_1 = 1, \eta_2 = 0 \text{ ó } \eta_1 = 0, \eta_2 = 1 \\ z_i & \text{si } \eta_1 = \eta_2 = 0 \end{cases} \quad (\text{VI3.67})$$

por lo que la ecuación (VI2.10) en este caso es:

$$\frac{du_2}{dt} = \sum_{\eta_3} \sum_{\eta_2} \sum_{\eta_3} \sum_{\eta_4} \sum_{\eta_5} \sum_{\eta_6} (\eta_4 - \eta_3) \phi_c(\Delta H) Q_{10}(\eta_i (i=1, \dots, 6)) \quad (\text{VI3.68})$$

y

$$\Delta H = -4J(\eta_2 + \eta_4 + \eta_6 - \eta_1 - \eta_3 - \eta_5) \quad (\text{VI3.69})$$

donde Φ_c indica la probabilidad de transición que actúa en el interior de una columna. Si realizamos las sumas explícitamente obtenemos para el régimen estacionario:

$$\begin{aligned}
 & [P_1 \Phi_c(-4J) - P_2 \Phi_c(4J)] [u_1 u_3 + z_1 u_3 + 2(\rho_1 - u_1)(\rho_3 - u_3) + u_1 z_3 + z_1 z_3] + \\
 & + [P_3 \Phi_c(-8J) - P_2 \Phi_c(8J)] [(\rho_1 - u_1) u_3 + u_1 (\rho_3 - u_3) + z_1 (\rho_3 - u_3) + (\rho_1 - u_1) z_3] + \\
 & + [P_1 \Phi_c(-12J) - P_2 \Phi_c(12J)] (\rho_1 - u_1)(\rho_3 - u_3) + [P_1 \Phi_c(0) - P_2 \Phi_c(0)] \times \\
 & \times [(\rho_1 - u_1) u_3 + u_1 (\rho_3 - u_3) + (\rho_3 - u_3) z_1 + (\rho_1 - u_1) z_3] + \\
 & + [P_1 \Phi_c(4J) - P_2 \Phi_c(-4J)] (\rho_1 - u_1)(\rho_3 - u_3) = 0
 \end{aligned} \tag{VI3.70}$$

donde

$$P_1 \equiv (\rho_2 - u_2)^2, \quad P_2 \equiv \rho_2 z_2 \tag{VI3.71}$$

Notar que para hallar u_2 , necesitamos conocer u_3 y u_1 , pero éstas son solución de una ecuación semejante a (VI3.70) pero dependientes de u_4 y u_0 . Por lo tanto, para hallar u_i ($i=1, \dots, M$), hemos de resolver M ecuaciones no-lineales iguales a (VI3.70) acopladas.

Podemos obtener ahora la solución particular dada por VBS y KLSZ esto es, tomamos $\Phi_c \equiv \Phi_{||}$ de la ecuación (VI3.1) cuando $E \rightarrow \infty$, lo que es equivalente a tomar $\Phi_c = \text{cte}$. En este caso, la solución del sistema de ecuaciones (VI3.70) es trivial:

$$u_i = \rho_i^2, \quad i = 1, \dots, M \tag{VI3.72}$$

O sea, el campo eléctrico infinito rompe tanto las correlaciones en el interior de una columna como las correlaciones locales entre columnas, como veremos, a pesar de esto, hay un fenómeno cooperativo global en el sistema. Además, en este caso, utilizando (VI3.72), podemos hallar R dada por la ecuación (VI3.65), obteniendo

$$R_i = \rho_i v_{i+1} [\rho_{i-1} \eta^{-1} + v_{i-1} \eta] \times [\rho_{i+2} \eta + v_{i+2} \eta^{-1}] \times \\ \times [\rho_i^2 \eta^{-2} + 2\rho_i v_i + v_i^2 \eta^2] \times [\eta^2 \rho_{i+1}^2 + 2\rho_{i+1} v_{i+1} + v_{i+1}^2 \eta^2] \quad (\text{VI3.73})$$

donde hemos utilizado la ϕ definida por VBS ($\phi = \exp(-h/2)$), y ahora $\eta = \exp(\beta J)$. Este resultado fue el obtenido originalmente por VBS (Van Beijeren et al., 1984).

Como nos interesa obtener información física del modelo para la solución homogénea correspondiente al sistema a una temperatura superior a la crítica (ver ecuaciones (VI3.52)-(VI3.56)), necesitamos conocer $u(\rho)$, $R(\rho, \rho, \rho, \rho)$ y $(\partial R_i / \partial x_j)_{x=\rho}$, veamos como calculamos cada una de ellas.

La densidad de parejas de partículas en el interior de una columna, $u(\rho)$, la hallamos resolviendo (VI3.70), teniendo en cuenta que, como nos encontramos en la fase homogénea, se cumple que $\rho_i = \rho$, $u_i = u \forall i$ y por lo tanto $u(\rho)$ es solución de una ecuación implícita que resolvemos numéricamente.

Conociendo $u(\rho)$, el cálculo de $R(\rho, \rho, \rho, \rho)$ es trivial utilizando (VI3.65) y extrayendo toda su dependencia en los subíndices.

Es algo más laborioso calcular las derivadas de R , así notar en la ecuación (VI3.65) que $R \equiv R(\rho_1, \rho_2, \rho_3, \rho_4) = f(\rho_1, \rho_2, \rho_3, \rho_4, u_2, u_3)$, donde u_i es solución de un conjunto de ecuaciones acopladas (VI3.70) o sea, $G(\rho_{i-1}, u_{i-1}, \rho_i, u_i, \rho_{i+1}, u_{i+1}) = 0 \quad \forall i$. Así

$$\left(\frac{\partial R}{\partial \rho_i}\right)_{\rho_j=\rho} = \left(\frac{\partial f}{\partial \rho_i}\right)_{\rho_j=\rho} + \left(\frac{\partial f}{\partial u_2}\right)_\rho \left(\frac{\partial u_2}{\partial \rho_i}\right)_\rho + \left(\frac{\partial f}{\partial u_3}\right)_\rho \left(\frac{\partial u_3}{\partial \rho_i}\right)_\rho \quad i=1,2,3,4 \quad (\text{VI3.74})$$

Hallar las derivadas explícitas de f con respecto ρ_i y u_i no es problema, la dificultad está en el cálculo de las derivadas de u con respecto ρ . Para calcularlas hemos de derivar implícitamente las M ecuaciones G con respecto a ρ_i para la solución homogénea, de esta forma tenemos

$$a_1 \delta_{n-1,i} + a_2 \delta_{n,i} + a_3 \delta_{n+1,i} + b_1 u_{n-1,i} + b_2 u_{n,i} + b_3 u_{n+1,i} = 0 \quad \forall n \quad (\text{VI3.75})$$

donde

$$\begin{aligned} a_1 &\equiv \left(\frac{\partial G}{\partial \rho_{n-1}}\right)_\rho, & a_2 &\equiv \left(\frac{\partial G}{\partial \rho_n}\right)_\rho, & a_3 &\equiv \left(\frac{\partial G}{\partial \rho_{n+1}}\right)_\rho \\ b_1 &\equiv \left(\frac{\partial G}{\partial u_{n-1}}\right)_\rho, & b_2 &\equiv \left(\frac{\partial G}{\partial u_n}\right)_\rho, & b_3 &\equiv \left(\frac{\partial G}{\partial u_{n+1}}\right)_\rho \end{aligned} \quad (\text{VI3.76})$$

y $u_{n,i}$ no es más que la derivada de u_n respecto de ρ_i . Observar que a_j y b_j no dependen de subíndices puesto que la función G es independiente de la columna estudiada. La ecuación (VI3.76) da lugar a un sistema de ecuaciones recurrentes para el cálculo de las derivadas de u_i en el caso de una densidad constante en la red, dicha ecuación la podemos descomponer:

$$b_3 u_{n-1,i} + b_2 u_{n,i} + b_3 u_{n+1,i} = 0 \quad \text{si } n > i+1 \quad (\text{VI3.77})$$

$$a_1 + b_1 u_{i,i} + b_2 u_{i+1,i} + b_3 u_{i+2,i} = 0 \quad \text{si } n = i+1 \quad (\text{VI3.78})$$

$$a_2 + b_1 u_{i-1,i} + b_2 u_{i,i} + b_3 u_{i+1,i} = 0 \quad \text{si } n = i \quad (\text{VI3.79})$$

$$a_3 + b_1 u_{i-2,i} + b_2 u_{i-1,i} + b_3 u_{i,i} = 0 \quad \text{si } n = i-1 \quad (\text{VI3.80})$$

$$b_1 u_{n-1,i} + b_2 u_{n,i} + b_3 u_{n+1,i} = 0 \quad \text{si } n < i-1 \quad (\text{VI3.81})$$

Solucionamos en primer lugar el sistema de ecuaciones dado por (VI3.77), para ello definimos $\bar{u}_k = u_{n,i}$ con $k = n-i-1, k=1, 2, 3, \dots$, quedando la ecuación más sencilla

$$b_3 \bar{u}_{k-1} + b_2 \bar{u}_k + b_3 \bar{u}_{k+1} = 0 \quad (\text{VI3.82})$$

con las condiciones de contorno: $\bar{u}_0 = u_{i+1,i}$ y $\bar{u}_\infty = 0$. Esta ecuación la resolvemos utilizando métodos estándar, para ello resolvemos la ecuación indicial asociada:

$$b_3 s^2 + b_2 s + b_1 = 0 \quad (\text{VI3.83})$$

que tiene dos soluciones de las que sólo una cumple las condiciones de contorno adecuadas, por lo que la solución general del conjunto de ecuaciones (VI3.77) es

$$u_{n,i} = u_{i+1,i} S_1^{n-i-1}, \quad n = i+2, i+3, \dots \quad (\text{VI3.84})$$

donde s_1 es la solución de la ecuación (VI3.83) que cumple $0 < s_1 < 1$. La misma técnica puede ser utilizada para resolver el conjunto de ecuaciones (VI3.81), obteniendo:

$$u_{n,i} = u_{i-1,i} s_2^{i-1-n}, \quad n = i-2, i-3, \dots \quad (\text{VI3.85})$$

donde ahora s_2 es la solución de la ecuación indicial $b_1 s^2 + b_2 s + b_3 = 0$ que cumple $0 < s_2 < 1$. De las ecuaciones (VI3.84) y (VI3.85) podemos obtener, en particular, los valores de $u_{i+2,i}$ y $u_{i-2,i}$, los cuales introducimos en las ecuaciones (VI3.78)-(VI3.80) obteniendo un sistema de tres ecuaciones con tres incógnitas fácilmente resoluble, cuyas soluciones son:

$$u_{i,i} = \frac{-2a_1^2 - a_2(b_2 - a_1 s)}{b_2(b_2 - a_1 s) - 2a_1^2} \quad (\text{VI3.86})$$

$$u_{i+1,i} = u_{i-1,i} = -a_1 \frac{1 - u_{i,i}}{b_2 - a_1 s} \quad (\text{VI3.87})$$

$$u_{i+2,i} = u_{i-2,i} = -a_1 \frac{(1 - u_{i,i})s}{b_2 - a_1 s} \quad (\text{VI3.88})$$

donde hemos usado el hecho de que en nuestro caso se cumple que $a_3 = a_1$, $b_1 = b_3 = -a_1$ y $s_1 = s_2 = s$. De esta forma quedan determinadas las derivadas de R , por lo que podemos entonces calcular fácilmente R_{23} y R_{14} , que no son más que

$$R_{14} \equiv \left(\frac{\partial R}{\partial p_1} \right)_p - \left(\frac{\partial R}{\partial p_4} \right)_p = \frac{\partial f}{\partial p_3} + \frac{\partial f}{\partial u_2} u_{i,i+1} + \frac{\partial f}{\partial u_3} u_{i,i-2} - \frac{\partial f}{\partial p_4} - \frac{\partial f}{\partial u_2} u_{i,i+2} - \frac{\partial f}{\partial u_3} u_{i,i+1} \quad (\text{VI3.89})$$

$$R_{23} \equiv \left(\frac{\partial R}{\partial p_2} \right)_p - \left(\frac{\partial R}{\partial p_3} \right)_p = \frac{\partial f}{\partial p_2} + \frac{\partial f}{\partial u_2} u_{i,i} + \frac{\partial f}{\partial u_3} u_{i,i-1} - \frac{\partial f}{\partial p_3} - \frac{\partial f}{\partial u_2} u_{i,i+1} - \frac{\partial f}{\partial u_3} u_{i,i} \quad (\text{VI3.90})$$

Estas son las expresiones que nos faltaban para estudiar completamente el modelo. A causa del tamaño y complejidad de las expresiones, hemos tenido que calcularlas explícitamente utilizando un programa de manejo de expresiones algebraicas (REDUCE).

Con estas expresiones, podemos resolver cualquier tipo de modelo en esta aproximación en particular, si tomamos en la ecuación (VI3.70) $\phi_c = \phi_{||}$ (ver ecuación (VI3.1)) y en la ecuación (VI3.65) $\phi = \phi_{\perp}$, describiremos un sistema que para $E \rightarrow \infty$ será idéntico al estudiado pro VBS y KLSZ, i.e. $\Gamma \rightarrow \infty$. Si tomamos $\phi_c = \phi_{\perp}$ y $\phi = \phi_{||}$, entonces describiremos al límite aún no estudiado de $\Gamma \rightarrow 0$. De cualquier forma, el estudio deberá de realizarse numéricamente a causa del tamaño de las expresiones resultantes.

VI.3.2.3. Resultados.

Una vez obtenidas todas las ecuaciones necesarias para la descripción del sistema, podemos comenzar a obtener información de él. En particular, nos centraremos en el comportamiento que tiene la temperatura crítica en función del campo eléctrico aplicado, de la densidad de partículas y del tipo de interacciones, puesto que otras propiedades macroscópicas como son la energía, el parámetro de orden de corto alcance,, las comentaremos cuando estudiemos el sistema bidimensional en general. Para estudiar el comportamiento de la temperatura crítica, hemos de resolver las ecuaciones

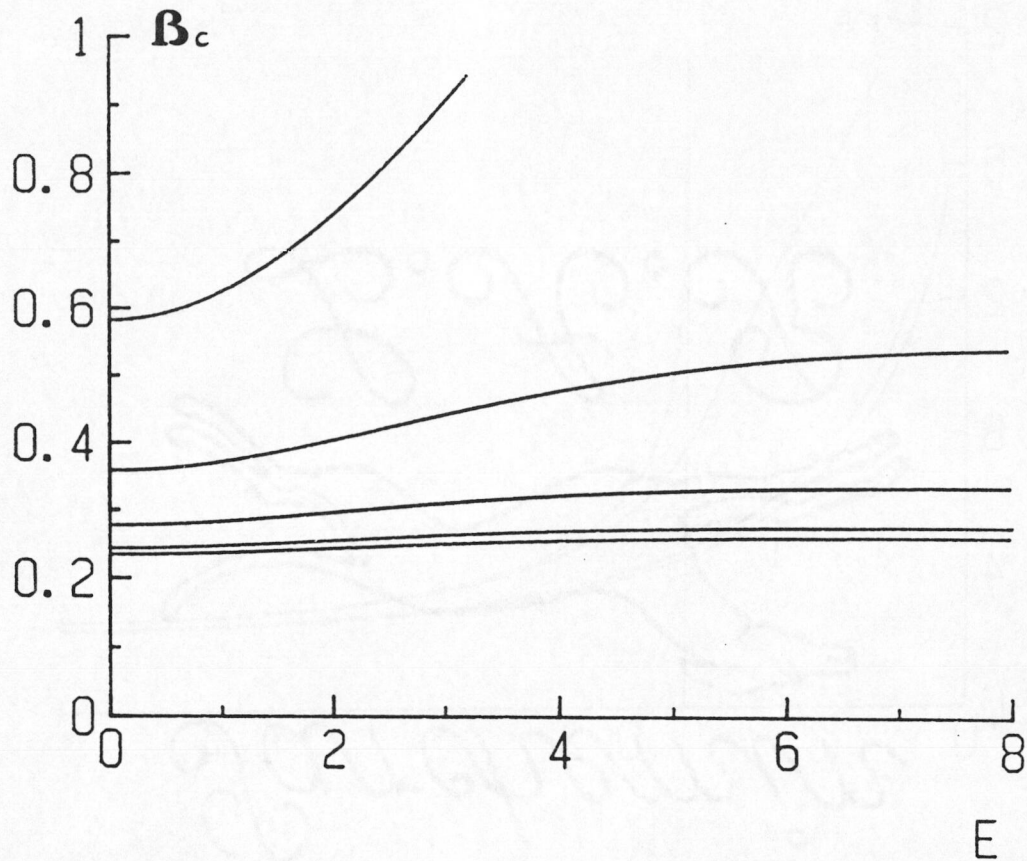


Figura VI3.2. El inverso de la temperatura crítica, $\beta_c = 1/kT_c$, en función del campo externo aplicado para un sistema ferromagnético. $\Gamma \equiv \Gamma_{\parallel} / \Gamma_{\perp} \rightarrow \infty$ y densidades, de arriba hacia abajo, de 0.1, 0.2, 0.3, 0.4 y 0.5.

(VI3.53) y (VI3.54), esto lo haremos en particular para la probabilidad de transición de Kawasaki (ver ecuación (VI2.12)). Recordar que estudiaremos los casos de $\Gamma = \frac{\Gamma_{\parallel}}{\Gamma_{\perp}} \rightarrow \infty$ y $\Gamma \rightarrow 0$.

En la figura VI3.2 observamos el comportamiento del inverso de la temperatura crítica, $\beta_c = 1/kT_c$, en función del campo externo aplicado para un sistema ferromagnético y $\Gamma \rightarrow \infty$. El comportamiento cuantitativo es el mismo para densidades comprendidas entre $\rho = 0.152$ y 0.5 esto es, una zona de leve aumento de la temperatura crítica para campos comprendidos aproximadamente entre 0 y 1, una zona de disminución acusada de T_c para campos entre 1 y 5 y a partir de ese valor, una

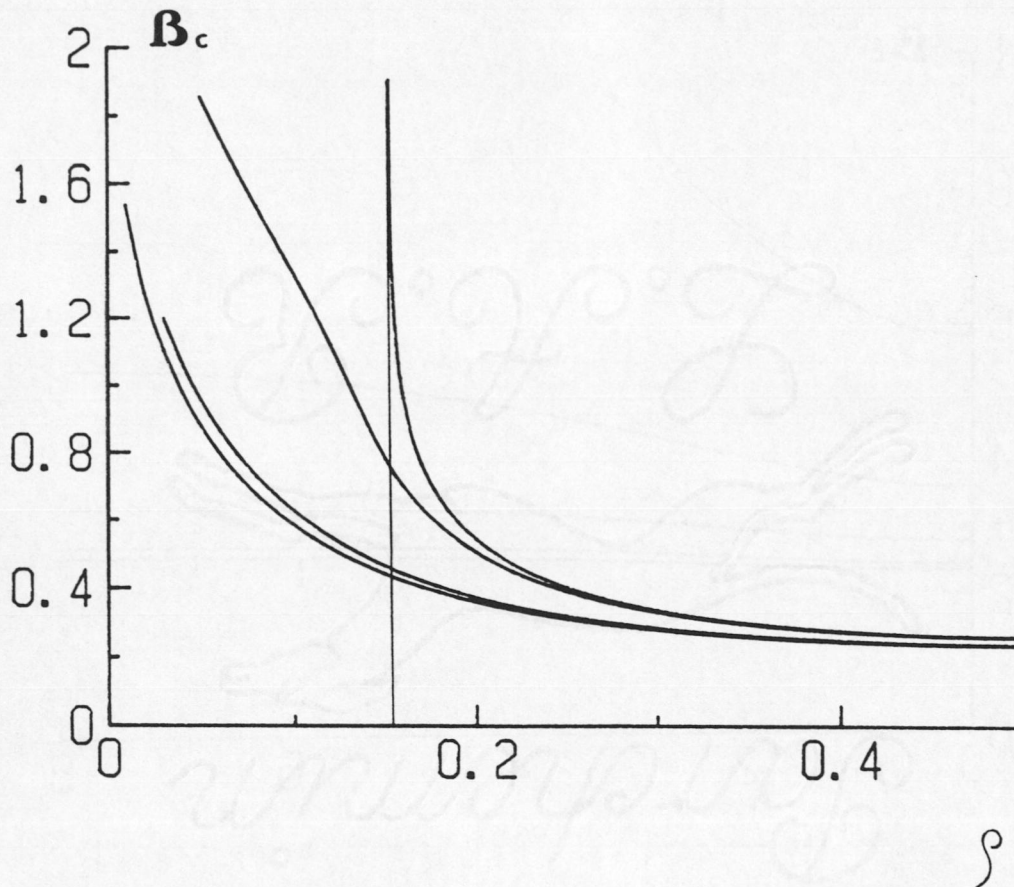


Figura VI3.3. El inverso de la temperatura crítica en función de la densidad de partículas de un sistema con interacciones ferromagnéticas, para $\Gamma \rightarrow \infty$ y diversos valores del campo eléctrico externo aplicado, de arriba hacia abajo, $E = \infty, 5, 1, 0$.

tendencia asintótica hacia un valor finito constante diferente de cero. Estas características globales se acusan más en tanto la densidad se va haciendo más pequeña, a la vez que la temperatura crítica para cualquier campo va disminuyendo con ella. A partir de la densidad crítica $\rho_c \approx 0.152$, la temperatura crítica del sistema disminuye monótonamente hacia el valor de cero según vamos incrementando el campo, alcanzándolo para campo infinito. Así pues, el límite de campo infinito para sistemas con densidades menores que la crítica hace que se pierda el cambio de fase. Este comportamiento peculiar ya fue intuido por Van Beijeren en una comunicación privada (Van

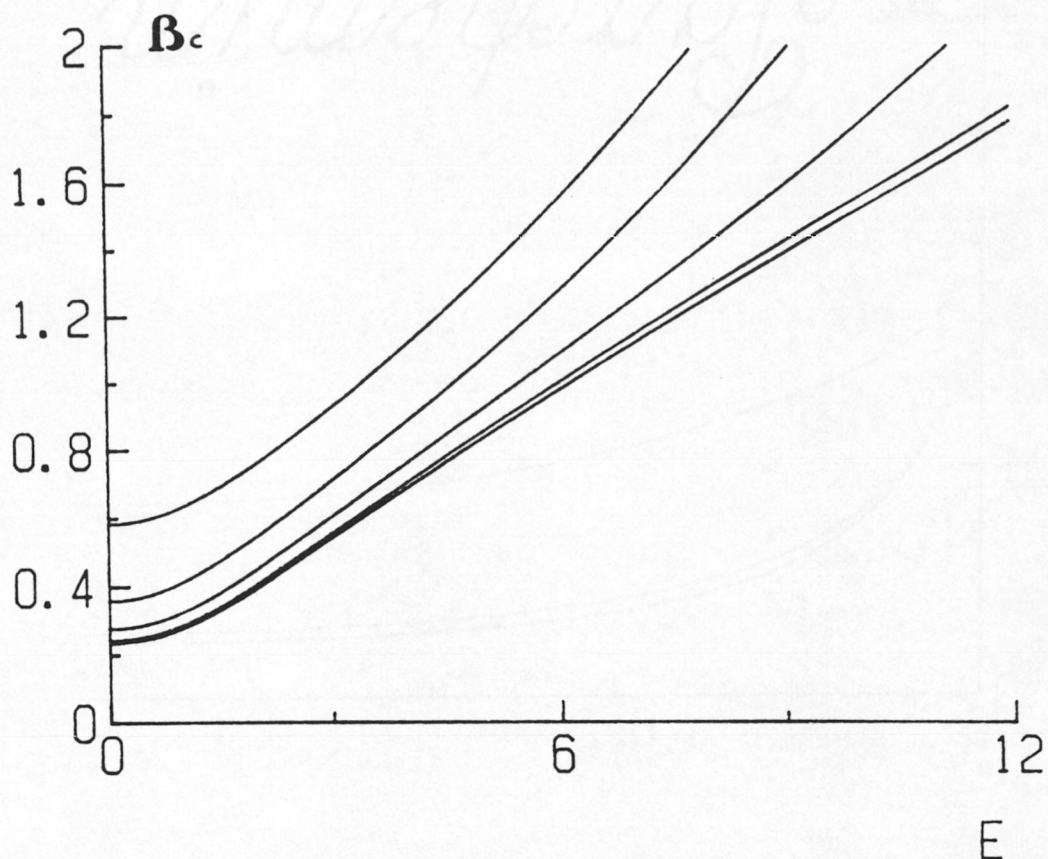


Figura VI3.4. El inverso de la temperatura crítica en función del campo externo aplicado de un sistema con interacciones ferromagnéticas, $\Gamma \rightarrow 0$, para densidades de partículas, de arriba hacia abajo: 0.1, 0.2, 0.3, 0.4 y 0.5.

Beijeren, 1984) a J. Marro y fue hallado explícitamente por KLSZ. Estos hechos quedan mejor reflejados en la figura VI3.3 donde se muestra el comportamiento de la temperatura crítica en función de la densidad para diversos campos externos, se ve claramente el comportamiento singular del sistema para campo eléctrico infinito solamente y el valor de la densidad crítica. En la Tabla VII se dan los valores numéricos obtenidos de la temperatura crítica para algunas densidades en límites extremos para el valor del campo externo, así como la ecuación de las asíntotas de la temperatura crítica en función del campo para sistemas con densidades por debajo de β_c . Notar que se cumple que $T_c(\Gamma \rightarrow \infty, E \rightarrow \infty) < T_c(\Gamma \rightarrow \infty, E \rightarrow 0)$

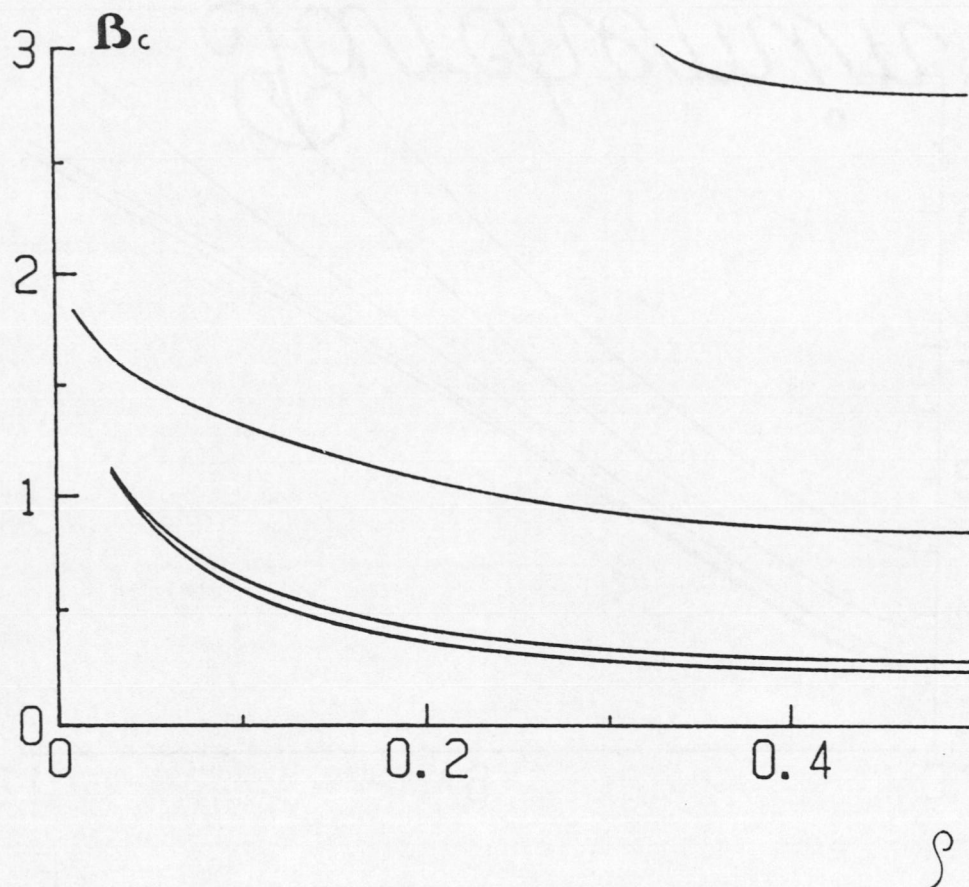


Figura VI3.5. Inverso de la temperatura crítica en función de la densidad para un sistema con interacciones ferromagnéticas para $\Gamma \rightarrow 0$ y diversos valores del campo externo aplicado, de arriba hacia abajo, $E = \infty, 5, 1$ y 0 .

lo cual es natural puesto que el campo reduce las correlaciones y por lo tanto las fluctuaciones en el punto crítico.

Si el comportamiento de la temperatura crítica cuando $\Gamma \rightarrow \infty$ es curioso, más lo es cuando hacemos el límite $\Gamma \rightarrow 0$ en un sistema con interacciones ferromagnéticas. Las figuras VI3.4 y VI3.5 nos muestran el comportamiento del inverso de la temperatura crítica en función del campo y de la densidad respectivamente. En este caso vemos que no existe una densidad crítica y el comportamiento global es similar sea cual sea la densidad esto es, una disminución monótona de la temperatura crítica según vamos aumentando el campo externo hasta llegar a la temperatura crítica de cero cuando el campo

ρ	$T_c(E=\infty)$ (1), (3)	$T_c(E=0)$ (1), (2)	$T_c(E=0)$ (3)	a (4)	b (4)	a (2)	b (2)
.1	0	1.719	0	-.001	.256	0	.252
.2	1.847	2.792	0	-	-	.002	.227
.3	3.000	3.610	1.399	-	-	.005	.182
.4	3.648	4.110	2.732	-	-	-.002	.149
.5	3.861	4.277	3.090	-	-	-.002	.147

Tabla VII. (1) $\Gamma \rightarrow \infty$ e interacciones ferromagnéticas, (2) $\Gamma \rightarrow 0$ e interacciones ferromagnéticas y (3) $\Gamma \rightarrow \infty$ con interacciones ferromagnéticas en la dirección ortogonal al campo y antiferromagnéticas en la paralela. ρ representa la densidad global de partículas del sistema, $T_c(E=\tilde{E})$ la temperatura crítica del sistema cuando el campo externo aplicado es \tilde{E} , a y b son los parámetros que determinan las asíntotas del comportamiento del inverso de la temperatura crítica cuando el campo eléctrico es lo suficientemente grande, o sea, $T_c^{-1} = a + bE$, $E \rightarrow \infty$.

eléctrico es infinito. Notamos, sin embargo, un cambio de concavidad para los sistemas con densidades altas para un campo eléctrico del orden de 5, con respecto de los sistemas con densidades bajas; esto creemos que es reflejo de que para $E \rightarrow 0$ las descripciones que obtenemos para $\Gamma \rightarrow \infty$ y $\Gamma \rightarrow 0$ deben de coincidir y por lo tanto, para campos eléctricos pequeños, aún debemos de notar manifestaciones de las propiedades observadas para $\Gamma \rightarrow \infty$. Las asíntotas observadas en la figura VI3.4 están reflejadas en la tabla VI.1 donde observamos como las pendientes disminuyen según va aumentando la densidad aunque no es posible ajustar esta disminución ni lineal ni parabólicamente. También observamos como lo ordenada en el origen es bastante pequeña. Esto resultados son coherentes con la idea de que para campo infinito y $\Gamma \rightarrow 0$ lo que tenemos son cadenas independientes en régimen estacionario con respecto a una probabilidad de transición del equili-

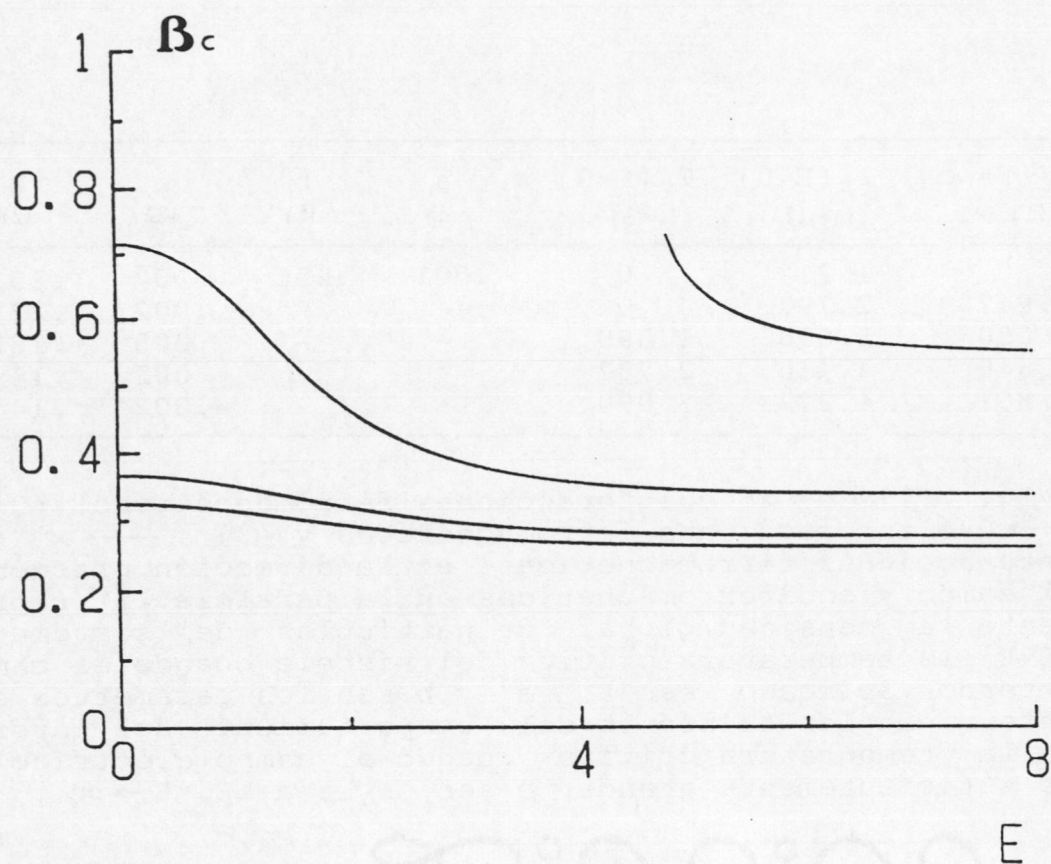


Figura VI3.6. El inverso de la temperatura crítica en función del campo externo aplicado para un sistema con interacciones antiferromagnéticas en la dirección del campo y ferromagnéticas en la perpendicular cuando $\Gamma \rightarrow \infty$ para diversas densidades globales, de arriba a abajo, $\rho = 0.2, 0.3, 0.4$ y 0.5 .

brio entre las cuales hay un intercambio de partículas de forma aleatoria e independiente de la temperatura del sistema, por lo que, si esperábamos "a priori" una segregación de fases, ésta sería claramente inestable y tendería a destruirse a causa de esa corriente transversal a la hipotética interfase. Por último, señalar, que para un sistema antiferromagnético en ambos límites, $\Gamma \rightarrow 0$ y $\Gamma \rightarrow \infty$, y para todos los valores de la densidad y campo externo, no hay cambio de fase. Tampoco lo hay en un sistema con interacciones ferromagnéticas en la dirección del campo y antiferromagnéticas en la ortogonal para $\Gamma \rightarrow \infty$. Todo ello ya fue notado por KLSZ

para campo infinito, pero ahora se puede generalizar para cualquier campo. Sin embargo, si hay un cambio de fase en un sistema con interacciones antiferromagnéticas en la dirección del campo y ferromagnéticas en la ortogonal a él para $\Gamma \rightarrow \infty$. Vemos en la figura VI3.6 el comportamiento del inverso de la temperatura crítica en función del campo externo aplicado. Ahora la temperatura crítica, para densidades comprendidas entre 0.3 y 0.5 crece monótonamente según vamos aumentando el campo hasta llegar a un valor estacionario para campo infinito. El que la temperatura crítica aumente nos da a entender que al sistema le es mucho más difícil mantener un orden antiferromagnético que un desorden como el que ocasiona un campo infinito, incluso más, para densidades por debajo de 0.2 (inclusive) no hay cambio de fase para un campo eléctrico igual a cero y por debajo de la densidad crítica, $\beta_c \cong 0.152$, ni siquiera hay un cambio de fase para campo infinito.

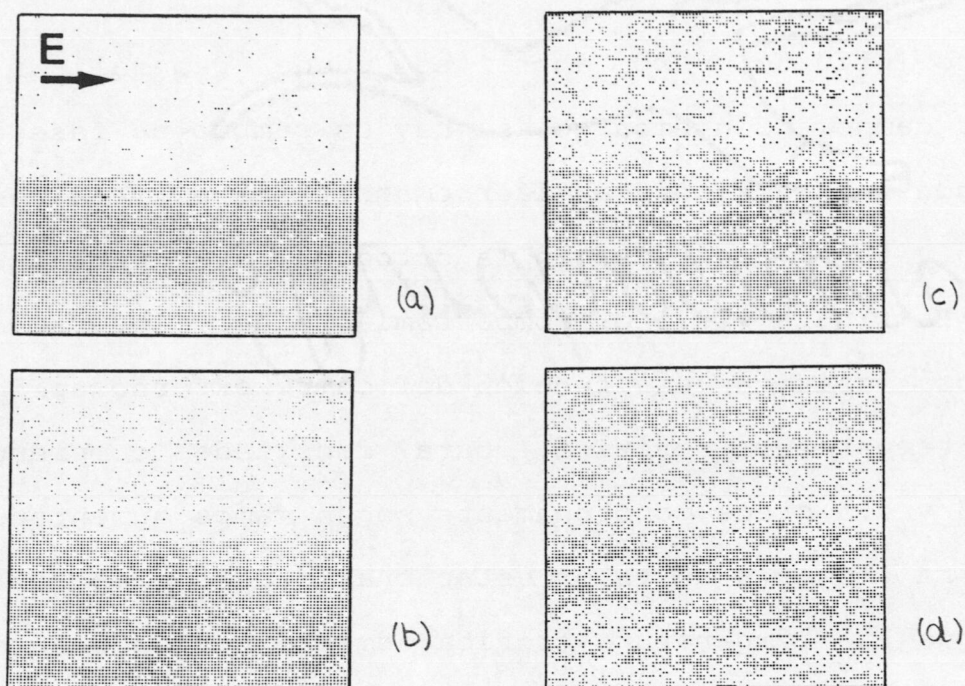


Figura VI3.7. Configuraciones típicas de un sistema con $L=100$ y $n=0.5$ en el estado estacionario para (a) $T=0.8T_c$, (b) $T=1.2T_c$, (c) $T=1.3T_c$, (d) $T=1.45T_c$.

VI.3.3. Modelo de SCI generalizado.

Una vez resuelto, en la anterior sección, el modelo bidimensional de SCI en un caso particular, vamos a resolver este modelo de forma más general, esto es, para un campo eléctrico y un $\Gamma \equiv \Gamma_{||} / \Gamma_{\perp}$ ($p \equiv 1/(1+\Gamma)$) cualesquiera ($J > 0$), utilizando para ello el método de la cinética de los agrupamientos locales (CAL) antes descrito.

Comenzamos estableciendo un modelo generalizado basado en el comportamiento cualitativo observado en las simulaciones Monte Carlo de Vallés y Marro (Vallés et al., 1986, 1987;

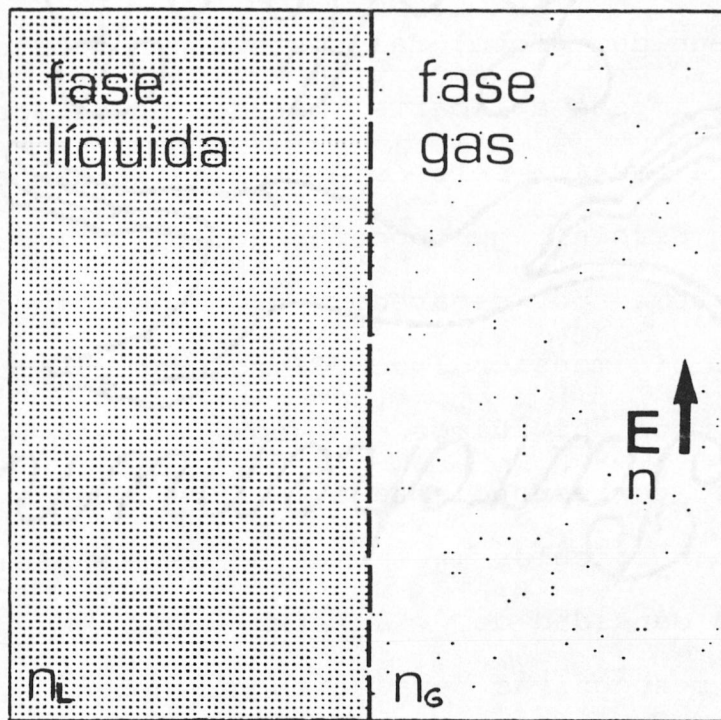


Figura VI3.8. Dibujo esquemático del modelo SCI bidimensional. E es el campo eléctrico aplicado, n , n_L y n_G son las densidades (de partículas) global, de la fase líquida y de la fase gas, respectivamente.

Marro et al., 1987). Estas simulaciones siempre revelan (ver Figura VI3.7) que las configuraciones estacionarias por debajo de una cierta temperatura crítica $T_c(E \rightarrow \infty)$ están formadas por dos fases, claramente diferenciadas, que coexisten: una fase rica en partículas, que llamamos fase líquida y otra pobre en partículas, que llamamos fase gas. Ambas fases son aparentemente homogéneas y separadas entre sí por medio de una interfase muy bien definida, especialmente a bajas temperaturas, que es paralela a la dirección del campo eléctrico aplicado. Esta segregación de fases desaparece por encima de T_c , apareciendo entonces una única fase homogénea.

La inhomogeneidad global del sistema por debajo de $T_c(E \rightarrow \infty)$, nos impide aplicar el método CAL directamente al modelo, pues esta técnica sólo está bien definida para sistemas homogéneos, pero sí que podemos aplicarla a cada una de las fases del sistema por separado. Así pues, supongamos un modelo reticular bidimensional de SCI con una densidad global de partículas n , que dividimos en dos partes (ver Figura VI3.8): una parte correspondiente a la fase líquida que tiene una densidad de partículas n_L y otra correspondiente a la fase gas con una densidad de n_G . Estas fases quedan caracterizadas por sus respectivas densidades que deben de cumplir:

$$a) \quad 1 \geq n_L(T, E) \geq n_G(T, E) \geq 0, \quad \forall T, E \quad (\text{VI3.86}')$$

$$b) \quad n_L(T=0, E) = 1; \quad n_G(T=0, E) = 0, \quad \forall E \quad (\text{VI3.87}')$$

$$c) \quad n_L(T, E) = n_G(T, E) = n, \quad \forall E, \quad T > T_c(E) \quad (\text{VI3.88}')$$

$$d) \quad n n_L(T, E) + (1-n) n_G(T, E) = n, \quad \forall T, E \quad (\text{VI3.89}')$$

Notar que la última propiedad es de carácter puramente geométrico. Establecemos ahora las siguientes hipótesis:

1. Cada una de las fases es siempre homogénea. Esto implica fundamentalmente dos cosas:

a) El perfil de la densidad de partículas en la interfase no es una función continua en la posición, sino que la densidad cambia bruscamente (de n_L a n_G o viceversa)

al atravesar la interfase.

b) Cuando una partícula pasa de una de las fases a la otra, el sistema adquiere inmediatamente el estado estacionario correspondiente al nuevo valor de la densidad.

2. Entre ambas fases existen corrientes de partículas que dependen unicamente de las características globales de las fases.

La primera hipótesis nos permite aplicar el método CAL a cada una de las fases por separado, y con la segunda relacionaremos ambas fases entre sí. Así, pues, primero resolveremos, en general un sistema homogéneo anisotrópico con el método CAL, solución que luego aplicaremos a cada fase por separado, y luego conectaremos matemáticamente las dos fases.

Sea un sistema con una densidad n_I de partículas y con probabilidades de transición para cada una de las direcciones principales de la red: $c_{\hat{x}}$ y $c_{\hat{y}}$ (es decir, consideramos un sistema anisotrópico). En estas condiciones, las variables naturales que describen el sistema en el método CAL son la densidad de parejas de partículas en las direcciones \hat{x} e \hat{y} ($u_{\hat{x}}$ y $u_{\hat{y}}$ respectivamente), de modo que hemos de construir ecuaciones de evolución para ambas variables de manera semejante a la realizada para el caso homogéneo (ver ecuación (VI2.10)); de esta forma obtenemos:

$$\frac{du_{\hat{x}}}{dt} = \sum_{n_{+1}=0}^2 \sum_{n_{+2}=0}^2 \sum_{\bar{n}_1=0}^1 \sum_{\bar{n}_2=0}^1 \left[(\bar{n}_2 - \bar{n}_1) c_{\hat{x}}(\Delta E) Q_{+-n_{+1}n_{+2}\bar{n}_1\bar{n}_2}^{\hat{x}}(u_{\hat{x}}, u_{\hat{y}}) + \right. \\ \left. + (n_{+2} - n_{+1}) c_{\hat{y}}(\Delta E) Q_{+-n_{+1}n_{+2}\bar{n}_1\bar{n}_2}^{\hat{y}}(u_{\hat{x}}, u_{\hat{y}}) \right] \quad (\text{VI3.90'})$$

$$\frac{du_{\hat{y}}}{dt} = \sum_{n_{+2}=0}^2 \sum_{n_{+1}=0}^2 \sum_{\bar{n}_1=0}^1 \sum_{\bar{n}_2=0}^1 \left[(\bar{n}_2 - \bar{n}_1) c_{\hat{y}}(\Delta E) Q_{+-n_{+1}n_{+2}\bar{n}_1\bar{n}_2}^{\hat{y}}(u_{\hat{x}}, u_{\hat{y}}) + \right. \\ \left. + (n_{+2} - n_{+1}) c_{\hat{x}}(\Delta E) Q_{+-n_{+1}n_{+2}\bar{n}_1\bar{n}_2}^{\hat{x}}(u_{\hat{x}}, u_{\hat{y}}) \right] \quad (\text{VI3.91})$$

donde

$$\Delta E = 4J(n_{+1} + \bar{n}_1 - n_{+2} - \bar{n}_2) \quad (\text{VI3.92})$$

$$Q_{+-n_{+1}n_{+2}\bar{n}_1\bar{n}_2}^{\hat{x}}(u_{\hat{x}}, u_{\hat{y}}) = \binom{2}{n_{+1}} \binom{2}{n_{+2}} \frac{1}{n_{\text{I}}^3} \frac{1}{(1-n_{\text{I}})^3} u_{\hat{x}}^{\bar{n}_1} z_{\hat{x}}^{1-\bar{n}_2} \times \\ \times \left[\frac{1}{2}(1-u_{\hat{x}}-z_{\hat{x}}) \right]^{2-\bar{n}_1+\bar{n}_2} u_{\hat{y}}^{n_{+1}} z_{\hat{y}}^{2-n_{+2}} \left[\frac{1}{2}(1-u_{\hat{y}}-z_{\hat{y}}) \right]^{2-n_{+1}+n_{+2}} \quad (\text{VI3.93})$$

y se cumplen las relaciones:

$$Q_{-+n_{+2}n_{+1}\bar{n}_2\bar{n}_1}^{\hat{x}}(u_{\hat{x}}, u_{\hat{y}}) = Q_{+-n_{+1}n_{+2}\bar{n}_1\bar{n}_2}^{\hat{x}}(u_{\hat{x}}, u_{\hat{y}}) \quad (\text{VI3.94})$$

$$Q_{+-n_{+1}n_{+2}\bar{n}_1\bar{n}_2}^{\hat{y}}(u_{\hat{x}}, u_{\hat{y}}) = Q_{+-n_{+1}n_{+2}\bar{n}_1\bar{n}_2}^{\hat{x}}(u_{\hat{y}}, u_{\hat{x}}) \quad (\text{VI3.95})$$

$$z_{\hat{x}}(\hat{y}) = 1 - 2n_{\text{I}} + u_{\hat{x}}(\hat{y}) \quad (\text{VI3.96})$$

Con estas ecuaciones, (VI3.90)-(VI3.95), logramos describir un sistema homogéneo anisotrópico; en particular, podemos estudiar las fase líquida y gaseosa sustituyendo en las ecuaciones n_{I} por n_{L} ó n_{G} , y $u_{\hat{x}}(\hat{y})$ por $u_{\text{L}\hat{x}}(\hat{y})$ ó $u_{\text{G}\hat{x}}(\hat{y})$.

Así pues, sólo queda relacionar ambas fases. Esto lo conseguimos construyendo una ecuación de flujo

$$\frac{dn_{\text{L}}}{dt} = j_{\text{G} \rightarrow \text{L}} - j_{\text{L} \rightarrow \text{G}} \quad (\text{VI3.97})$$

Esto es, en la unidad de tiempo, el incremento en la densidad de partículas de la fase líquida es la diferencia entre el número de partículas que pasan de la fase gas a la fase líquida, $j_{G \rightarrow L}$, menos las que lo hacen en sentido contrario, $j_{L \rightarrow G}$. La ecuación (VI3.97) constituye, en esta aproximación, el efecto de la interfase sobre el sistema. Utilizando la segunda hipótesis antes señalada, tomamos:

$$j_{L \rightarrow G} = \bar{Q}_{LG} c_{\hat{x}}(\bar{\Delta E}) \quad , \quad (\text{VI3.98})$$

esto es, el número de partículas que pasan de la fase líquida a la fase gas por unidad de tiempo es igual a la probabilidad de que ocurra una configuración local promedio de la interfase líquido-gas, multiplicada por la probabilidad de transición por unidad de tiempo, $c_{\hat{x}}$, de que ocurra un intercambio de partículas entre las fases. Nosotros suponemos que una configuración local promedio de la interfase es:

$$\begin{array}{ccc|cc} L & x & & o & G \\ x & \eta_1 & & \eta_2 & o \\ \eta_L & x & & o & \eta_G \end{array}$$

donde tomamos que el número de partículas que rodea a η_1 y η_2 es $3n_L$ y $3n_G$ respectivamente, y $\eta_1 = 1$, $\eta_2 = 0$ cuando calculamos $j_{L \rightarrow G}$, mientras que $\eta_1 = 0$, $\eta_2 = 1$ cuando calculamos $j_{G \rightarrow L}$. De esta forma, utilizando las hipótesis del método CAL, podemos escribir:

$$\begin{aligned} \bar{Q}_{LG} = & \frac{1}{n_L^2} \frac{1}{(1-n_G)^2} (u_L \hat{x})^{n_L} (u_L \hat{y})^{2n_L} \left[\frac{1}{2} (1-2n_L + u_L \hat{x}) \right]^{1-n_L} \left[\frac{1}{2} (1-2n_L + u_L \hat{y}) \right]^{2(1-n_L)} \\ & \times (z_G \hat{x})^{1-n_G} \left[\frac{1}{2} (1-2n_G + u_G \hat{x}) \right]^{1-n_G} (z_G \hat{y})^{2(1-n_G)} \left[\frac{1}{2} (1-2n_G + u_G \hat{y}) \right]^{2(1-n_G)} \quad (\text{VI3.99}) \end{aligned}$$

$$\overline{\Delta E} = -12J [n_G - n_L] \quad (\text{VI3.100})$$

Estas ecuaciones definen perfectamente la evolución de la densidad (VI3.97), que, junto con las ecuaciones (VI3.91) y (VI3.92), nos dan la descripción global del sistema.

Lo único que nos falta es elegir las probabilidades de transición; para poder comparar con los resultados de previas simulaciones Monte Carlo (Marro et al., 1985; Vallés et al., 1986, 1987; Marro et al., 1987), utilizaremos la probabilidad de transición de Metropolis; esto es:

$$C_{ij} = \frac{1-P}{2} [\Phi_{i1} + \Phi_{i2}] \quad (\text{VI3.101})$$

donde

$$\Phi_{i\frac{1}{2}}(\Delta H) = \begin{cases} \exp(-\beta\Delta H \pm E) & \text{si } \beta\Delta H \mp E \geq 0 \\ 1 & \text{si } \beta\Delta H \mp E \leq 0 \end{cases} \quad (\text{VI3.102})$$

y

$$C_{\hat{x}} = P \cdot \begin{cases} \exp(-\beta\Delta H) & \text{si } \Delta H \geq 0 \\ 1 & \text{si } \Delta H \leq 0 \end{cases} \quad (\text{VI3.103})$$

Resolveremos las ecuaciones anteriores numéricamente para dos densidades globales relevantes, $n=0.5$ y $n=.1$.

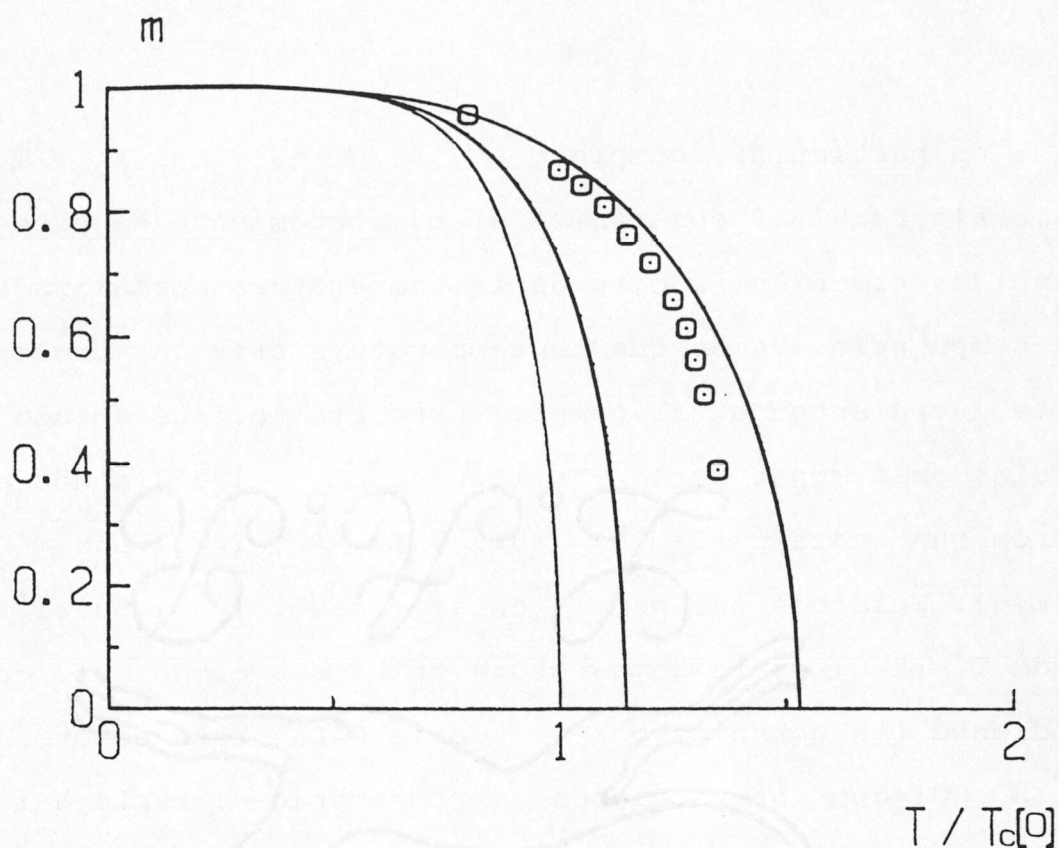


Figura VI3.9. Parámetro de orden de un SCI bidimensional en función de la temperatura normalizada a la del campo nulo. Las líneas continuas representan las soluciones dadas por el método CAL (ver texto) para campos eléctricos, de izquierda a derecha, $E=0, 1, \infty$, y $p=(1+\Gamma)^{-1} = 0.5$. Los símbolos son los resultados Monte Carlo de un análisis de tamaño finito (Vallés et al., 1987) para $E=\infty$, $n=0.5$ y $p=0.5$.

VI.3.3.1. Densidad $n=0.5$.

VI.3.3.1.1. Parámetro de orden. Temperatura crítica.

La densidad de partículas en la fase líquida, n_L , y la densidad de partículas en la fase gaseosa, n_G , satisfacen las ecuaciones (VI3.86')-(VI3.89'), esto es, $n_L = 1$, $n_G = 0$ si $T=0$ y $n_L = n_G = n$ si $T > T_c$; un parámetro de orden natural que permite caracterizar el cambio de fase del sistema es $m = n_L -$

n_c ; en particular, cumple $m \rightarrow 1$ si $T \rightarrow 0$ y $m=0$ si $T > T_c$.

En la figura VI3.9 observamos el comportamiento de este parámetro de orden en función de la temperatura normalizada a la del campo nulo. Vemos que la temperatura crítica crece según vamos incrementando el campo. Este efecto, fue notado ya en simulaciones Monte Carlo (Vallés et al., 1987) donde encontraron que para $p=(1+\Gamma)^{-4} = 0.5$ y $E = \infty$, $T_c = 1.355 \pm 0.003 T_c(E=0)$. Nosotros obtenemos en ese caso: $T_c = 1.530 T_c^*(E=0)$, donde $T_c^*(E=0)$ es la temperatura crítica a campo nulo correspondiente (la obtenida por la teoría CAL). Este efecto, típico en SCI con interacciones ferromagnéticas, refleja la competición entre dos tendencias opuestas en las correlaciones que caracterizan el comportamiento crítico del sistema, esto es:

- a) El campo eléctrico produce franjas en el sistema, luego incrementa las correlaciones globales del sistema lo que implica un incremento en la temperatura crítica debido a este efecto.
- b) El campo tiende a "romper" las correlaciones locales en el interior de las franjas. Este efecto hace disminuir la temperatura crítica.

En nuestro caso, es claro que el efecto global ocasionado por a), domina al sistema con interacciones ferromagnéticas, mientras que con interacciones antiferromagnéticas, intuimos que el efecto b) será el más relevante, pues tiende a destruir de una forma efectiva el orden local.

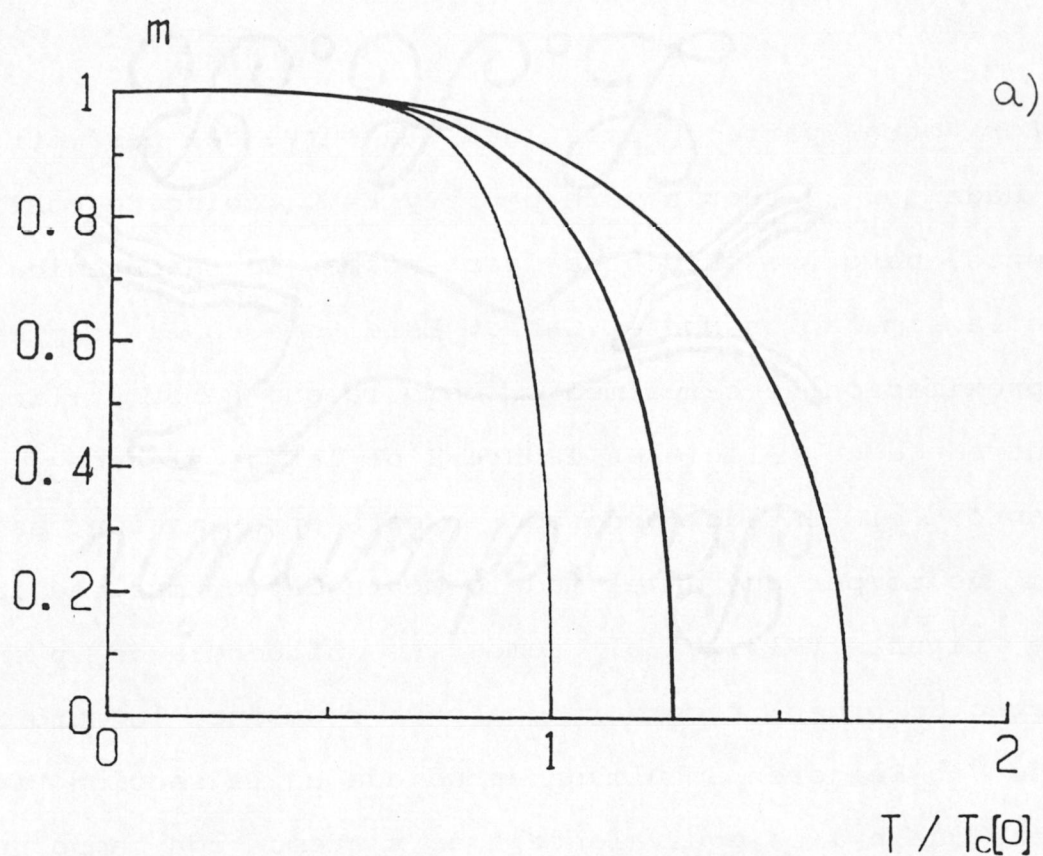
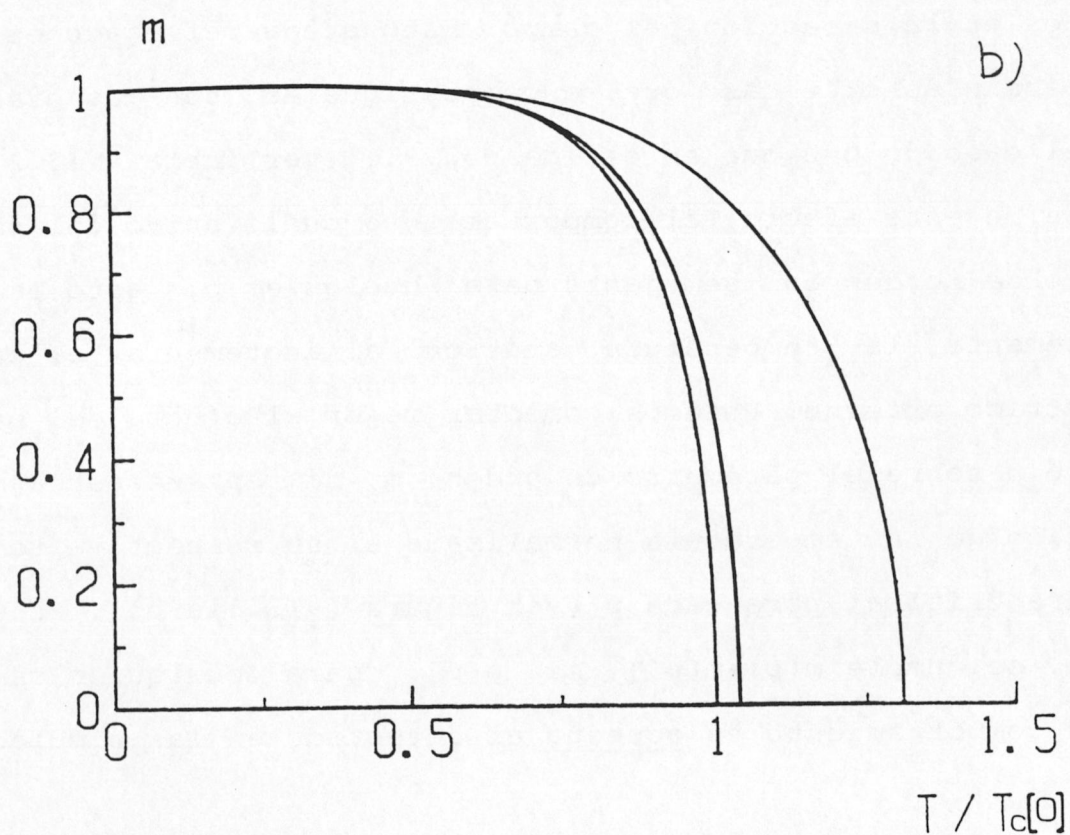


Figura VI3.10. Parámetro de orden en función de la temperatura crítica normalizada a la de campo nulo para un sistema con densidad global de partículas $n=0.5$ y campos eléctricos, de izquierda a derecha, $E=0,1$ y ∞ . a) $p=0$ y b) $p=0.9$.



Por otra parte, vemos que la curva del parámetro de orden dada por la teoría para $p=0.5$ y $E=\infty$ coincide cualitativamente, pero se encuentra por encima de la obtenida mediante la simulación Monte Carlo. Este efecto es típico de una aproximación de campo medio, como la que hemos utilizado, que introduce correlaciones espúreas de largo alcance y, por lo tanto, el estado ordenado en esta aproximación, es más difícil de romper que en el modelo Monte Carlo, más realista. En las figuras (VI3.10a,b) vemos la influencia de p en el parámetro de orden; recordar que $p=0$ reproduce la aproximación de Van Beijeren-Schulmann estudiada en la sección VI.3.2 mientras que $p=1$ es equivalente a un sistema con campo nulo. Observamos que el parámetro de orden es mucho más sensible al campo eléctrico cuanto más pequeña es p , lo cual es normal puesto que es entonces cuando son más numerosas las transiciones en la dirección del campo. Esto queda reflejado en las temperaturas críticas que, a campos iguales, son más grandes en el caso de $p=0$ que en el de $p=0.9$, (ver Tabla VI3.2). A parte de este efecto, el comportamiento cualitativo del parámetro de orden es semejante para cualquier p , esto es, se incrementa la temperatura crítica al incrementar el campo eléctrico externo. Podemos comentar mejor el efecto del parámetro p sobre el parámetro de orden, m , si representamos m en función de la temperatura normalizada a su respectiva temperatura crítica para cada p (ver figura (VI3.11a,b)). En este caso, se cumple $m(p) > m(p')$ si $p < p'$, para cualquier campo; este comportamiento es opuesto al detectado en las simulacio-

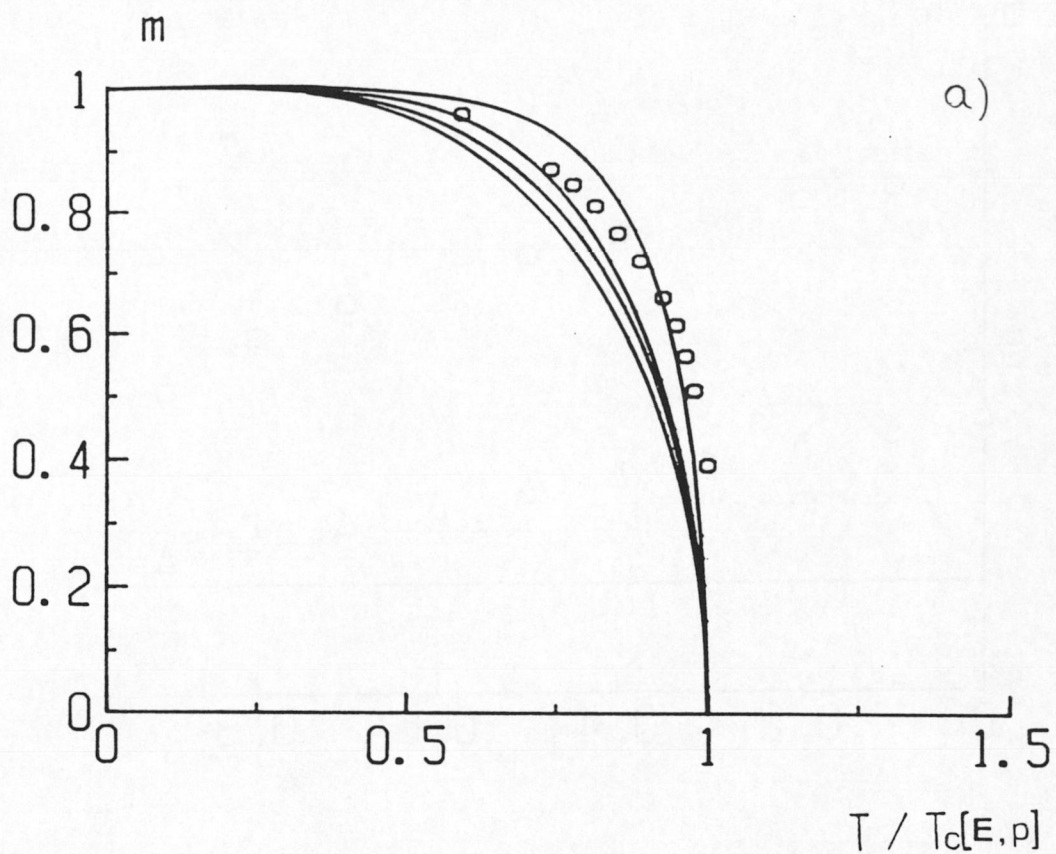
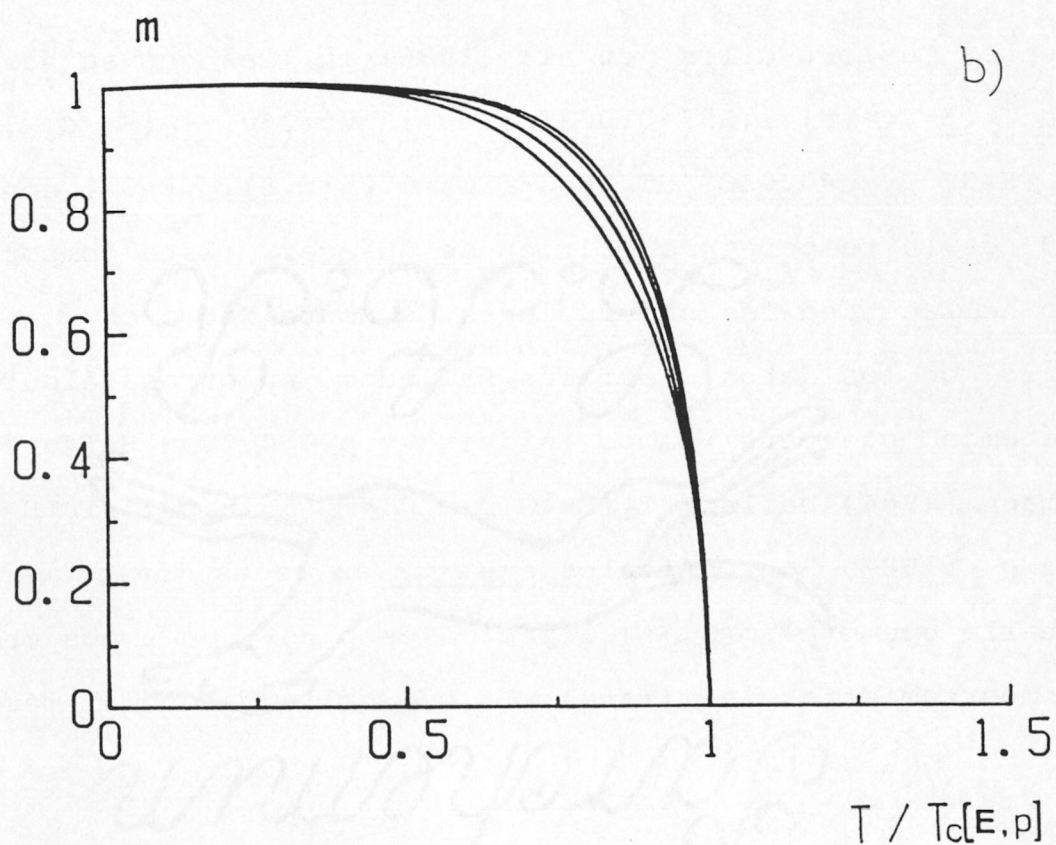


Figura VI3.11. Parámetro de orden en función de la temperatura normalizada a su temperatura crítica $T_c(E,p)$, para un sistema con $n=0.5$ y, de izquierda a derecha, $p=1, 0.9, 0.5$ y 0 . a) $E = \infty$, b) $E=1$. Los círculos son resultados Monte Carlo para $n=0.5$ y $p=0.5$ (Vallés et al., 1987).



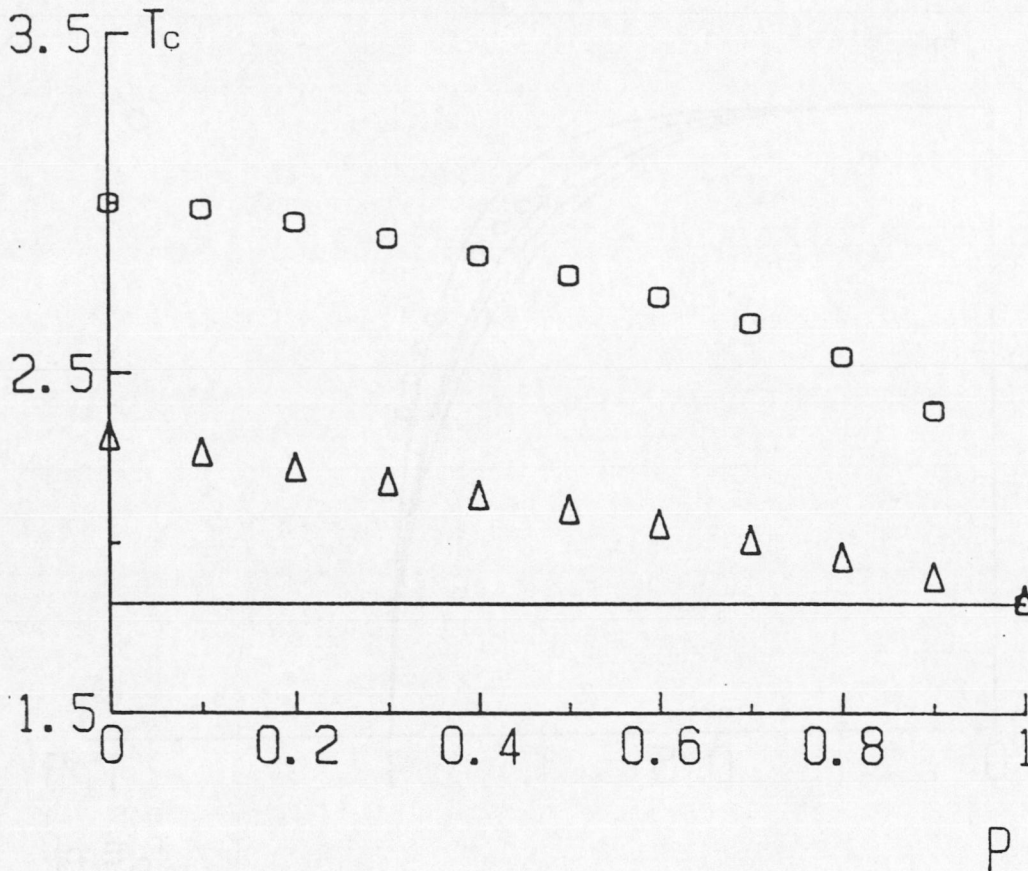


Figura VI3.10. Temperatura crítica en función de p para diversos valores del campo eléctrico: $E=0$ (línea continua), $1(\Delta)$ y ∞ (o), según los valores dados por la tabla VI3.2.

nes Monte Carlo (Vallés et al, 1986) en las que se halla: $p=0.5$, $T_c(E=\infty, p)=1.355 \pm 0.003 T_c(E=0)$; $p=0.167$, $T_c(E=\infty, p)=1.18 T_c(E=0)$ y $p=0.048$, $T_c(E=\infty, p)=1.05 \pm 0.01 T_c(E=0)$, donde $T_c(E=0)$ es la temperatura crítica de Onsager. Este comportamiento hallado en las simulaciones de Monte Carlo es contradictorio con los datos teóricos hallados en otros cálculos. Así sabemos que para campo infinito y $p \rightarrow 0$, Van Beijeren y Schulmann (1984) hallan: $T_c(E=\infty, p \rightarrow 0) > T_c(E=\infty, p=1) = T_c(E=0)$; y Zhang (1987) en cálculos exáctos en redes muy pequeñas, 4×4 , halla que $m(p) > m(p')$ si $p < p'$, esto es, en ambos casos son comportamientos similares al que hallamos con el método

$p \backslash E$	0	1	4	∞
0	1.821	2.302	2.988	3.000
.1	1.821	2.254	2.954	2.981
.2	1.821	2.209	2.910	2.942
.3	1.821	2.167	2.859	2.894
.4	1.821	2.126	2.805	2.843
.5	1.821	2.085	2.746	2.786
.6	1.821	2.041	2.679	2.723
.7	1.821	1.995	2.599	2.647
.8	1.821	1.944	2.492	2.547
.9	1.821	1.887	2.323	2.388
1.	1.821	1.821	1.821	1.821

Tabla VI3.2. Temperaturas críticas, $T_c(E,p)$, para un SCI bidimensional con densidad global de partículas $n=0.5$ obtenidas mediante el método CAL (ver texto).

CAL. Intuitivamente, esperamos que, al disminuir p , la participación del campo sea más importante en la dinámica del sistema y, por lo tanto, un decrecimiento en p debe ser equivalente a un incremento en el campo, lo que implica un aumento en la temperatura crítica. Por lo tanto, los resultados teóricos son coherentes con este argumento, mientras que la simulación Monte Carlo no lo es. Esta divergencia podría solucionarse realizando un análisis de tamaño finito en un sistema con $p=0$ y $E=0$, pues es posible que se trate únicamente de un problema de tamaño de las redes utilizadas en la simulación. De hecho, los efectos de tamaño finito detectado por Marro y Vallés (1987) en este modelo son muy importantes. También es posible que se trate de un efecto de la aproximación de campo medio (tanto nuestra teoría como la de Van Beijeren y Schulmann (1984)), así como otras aproximaciones que han aparecido recientemente en la literatura, son de

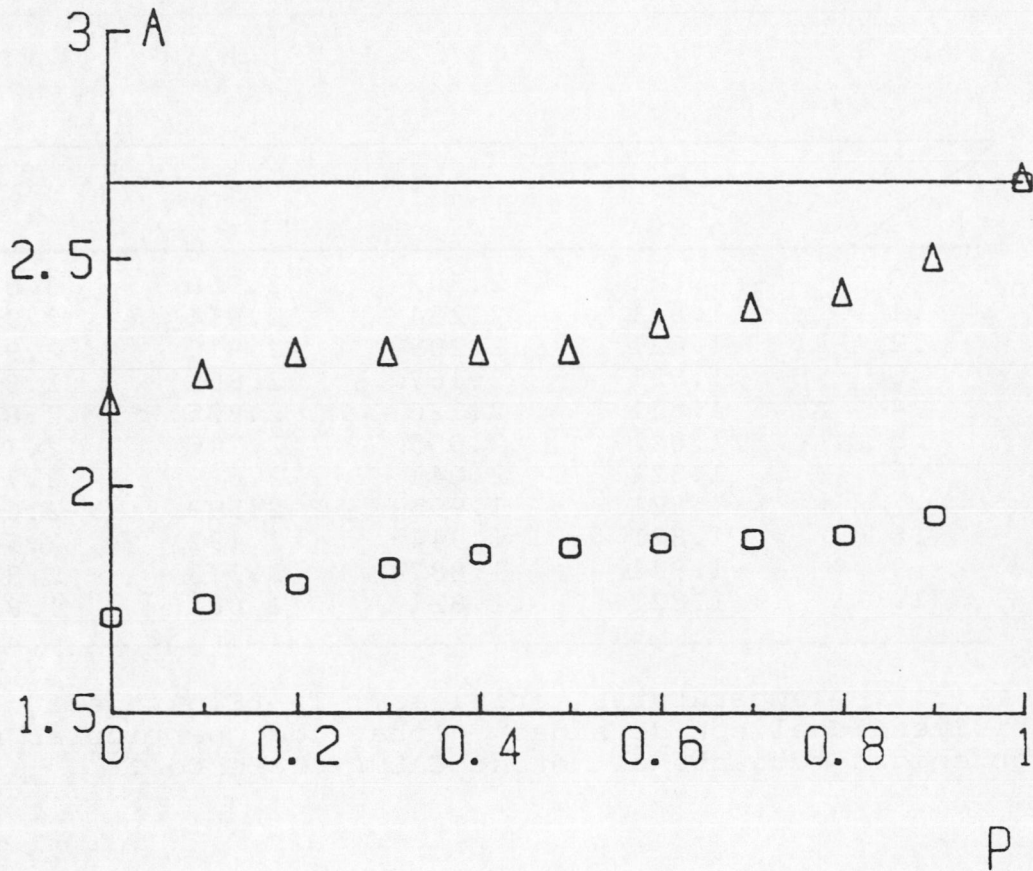


Figura VI3.11. Amplitud del parámetro de orden, A , cerca de la temperatura crítica: $m \sim A(1-T/T_c)^{1/2}$ en función de p . Los símbolos tienen igual significado que los de la figura VI3.10.

campo medio) que, por lo tanto, no se manifestaría en la simulación Monte Carlo. Las temperaturas críticas, $T_c(E,p)$, halladas por el método CAL están reflejadas en la figura VI3.10 y sus valores numéricos en la Tabla VI3.2.

El comportamiento crítico del parámetro de orden en nuestra teoría es, en efecto, clásico, esto es, $m \sim A(1-T/T_c)^{1/2}$, por la propia naturaleza de la aproximación realizada. El comportamiento de la amplitud termodinámica, A , en función del campo eléctrico y p , queda reflejado en la figura VI3.11 y sus valores en la tabla VI3.3. Observamos que el tamaño de la zona crítica, dado un campo, aumenta al aumentar p y, dada una p , disminuye al aumentar E .

$\begin{matrix} E \\ p \end{matrix}$	0	1	4	∞
0	2.668	2.178	1.712	1.710
.1	2.668	2.237	1.753	1.739
.2	2.668	2.285	1.796	1.783
.3	2.668	2.286	1.831	1.819
.4	2.668	2.288	1.857	1.849
.5	2.668	2.289	1.881	1.863
.6	2.668	2.345	1.897	1.874
.7	2.668	2.381	1.911	1.882
.8	2.668	2.413	1.937	1.891
.9	2.668	2.491	2.009	1.934
1.	2.668	2.668	2.668	2.668

Tabla VI3.3. Valores de la amplitud del parámetro de orden, A, cerca de la temperatura crítica: $m \sim A(1-T/T_c)^{1/2}$, para valores de E y p.

VI.3.3.1.2. Energía.

La energía configuracional del sistema reticular viene dada por

$$E_F = -4JN_{++} \quad (\text{VI3.104})$$

donde N_{++} es el número total de parejas de partículas en el sistema. De esta forma, la densidad de energía por pareja de nudos es

$$e = -4Ju \quad (\text{VI3.105})$$

donde u es la densidad de parejas de partículas. Como en nuestro sistema tenemos dos fases, podemos escribir para el caso de $n=0.5$ que $u = (u_L + u_G)/2$, donde $u_{L(G)}$ es la densidad de

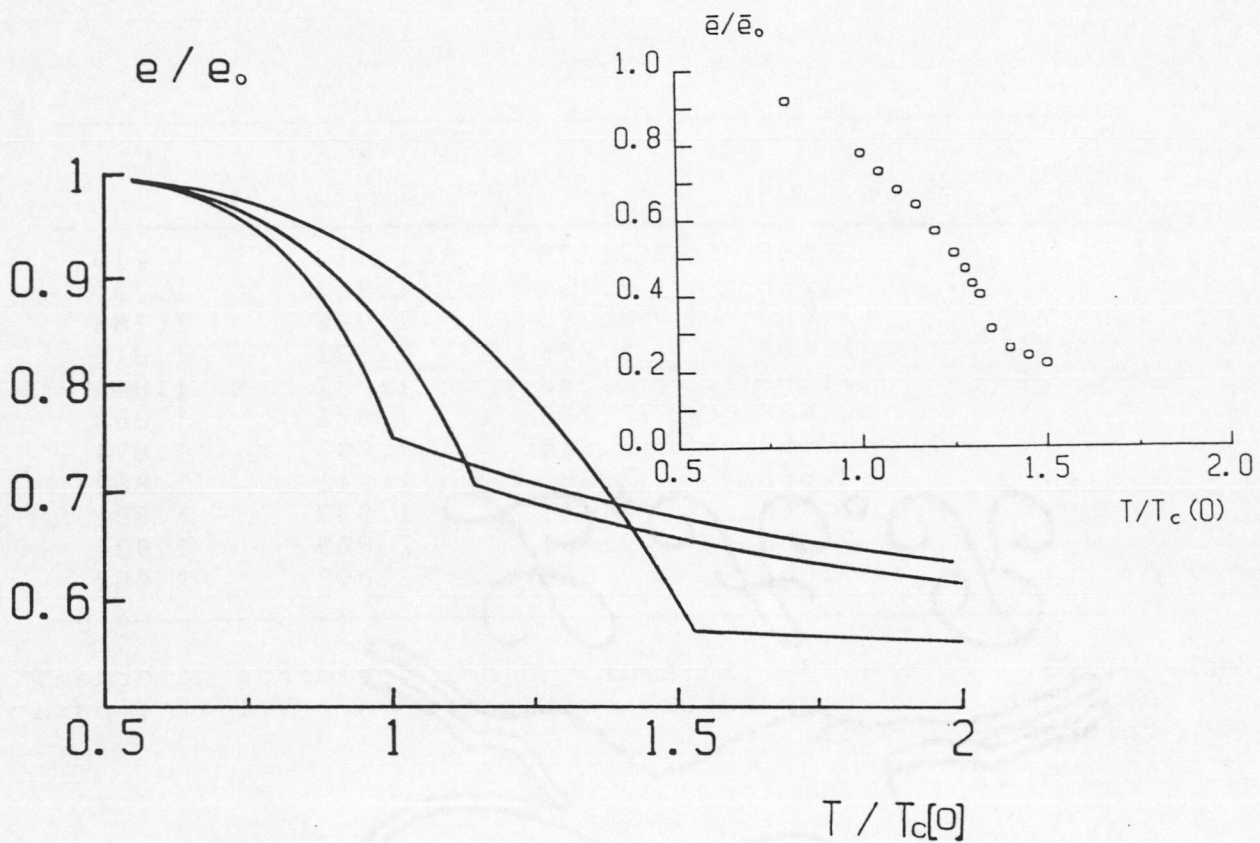


Figura VI3.12. Densidad de energía definida según la ecuación (VI3.106) en función de la temperatura normalizada a su valor a campo nulo, para un sistema con $p=0.5$ y campos, de izquierda a derecha, $E=0,1$ y ∞ . La figura pequeña representa los resultados Monte Carlo de un análisis de tamaño finito (Vallés et al., 1987) para $p=0.5$ y $E=\infty$. Notar que en este caso $\bar{e}/\bar{e}_0=1-4n+2e/e_0$, con $n=0.5$ y e/e_0 definida por la ecuación (VI3.106).

parejas de partículas en la fase líquida (gaseosa). Así:

$$\frac{e}{e_0} = u_L + u_G \quad (\text{VI3.106})$$

donde $e_0 \equiv -2J$. Las variables u_L y u_G las hallamos al resolver las ecuaciones (VI3.90) y (VI3.91) de manera que

$$u_{L(G)} = \frac{1}{2} (u_{L(G)\hat{x}} + u_{L(G)\hat{y}}) \quad (\text{VI3.107})$$

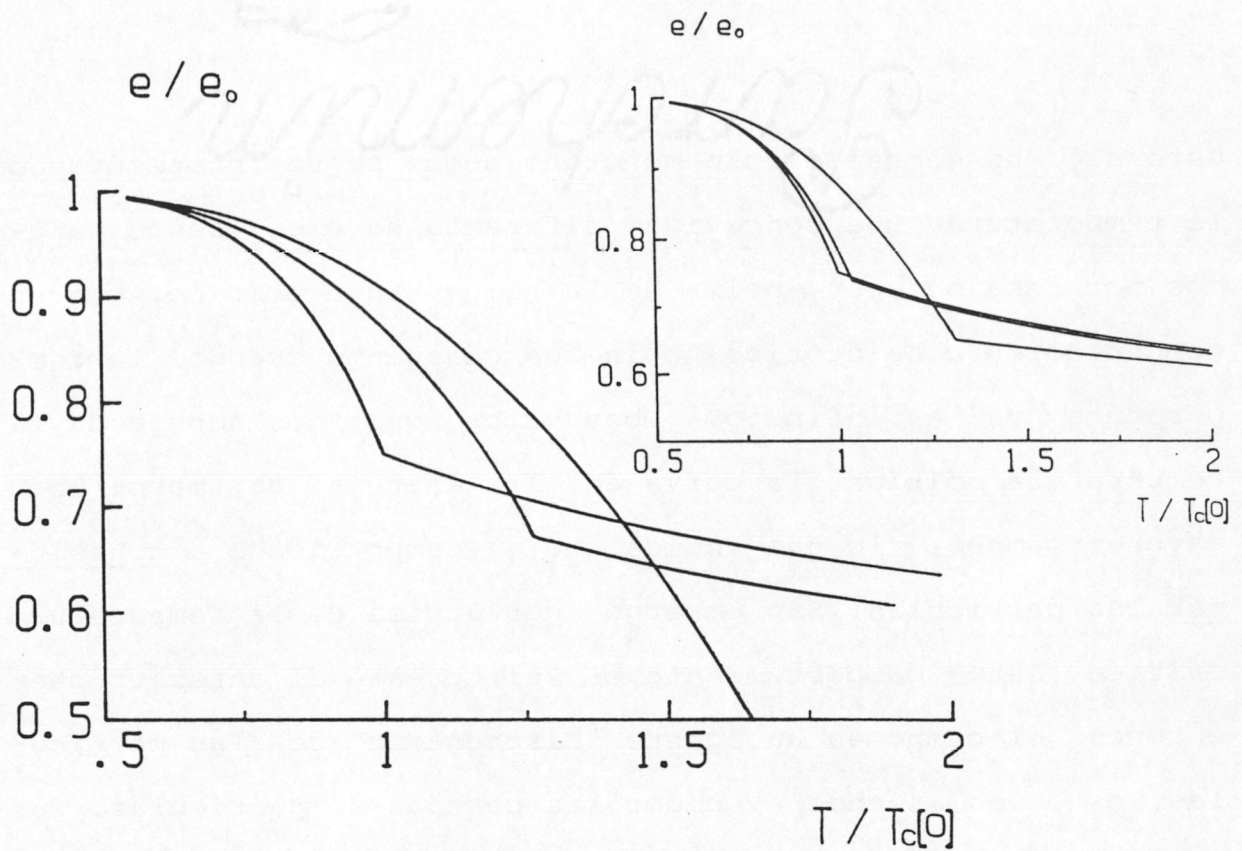


Figura VI3.13. Densidad de energía definida según la ecuación (VI3.106) en función de la temperatura normalizada a su valor a campo nulo para un sistema con $p=0$ y campos, de izquierda a derecha, $E=0, 1$ y ∞ . La figura pequeña es lo mismo que la grande pero para $p=0.9$.

Por otra parte, podemos definir la densidad de energía para cada fase a partir de la ecuación (VI3.107), así:

$$\frac{e_{L(G)}}{e_0} \equiv u_{L(G)} \quad (\text{VI3.108})$$

Notar, en cualquier caso, que $u_L \rightarrow 1$, $u_G \rightarrow 0$, $e/e_0 \rightarrow 1$ cuando $T \rightarrow 0$ y $u_L, u_G \rightarrow 1/4$, $e/e_0 \rightarrow 1/2$ cuando $T \rightarrow \infty$.

En la figura VI3.12 vemos la densidad de energía normalizada, e/e_0 , para el caso de $p=0.5$ y diferentes campos externos. El comportamiento cualitativo de e/e_0 es idéntico al observado en la simulación Monte Carlo (Vallés et al., 1987),

esto es, un decrecimiento monótono según se va incrementando la temperatura, una concavidad diferente de e/e_0 según estemos por debajo o por encima de la temperatura crítica, con un comportamiento asintótico hacia una constante cuando la temperatura va a infinito. Observamos que, por debajo de la temperatura crítica, la curva de la energía es mayor para mayores campos, lo que indica que el campo tiende a cohesio-
nar las partículas. Sin embargo, por encima de la temperatura crítica, este comportamiento es el opuesto al anterior pues entonces el campo es un agente "disgregador" de las partículas, esto es, tiende a romper las parejas de partículas. Por último, notar que $e(T=T_c)/e_0$ disminuye al aumentar E .

En la figura VI3.13 vemos el efecto que tiene p en la energía para varios campos. Al igual que ocurría en el caso de la magnetización, la energía es tanto más sensible al campo cuanto más pequeña es p , sin embargo, el comportamiento cualitativo global de e/e_0 es el mismo sea cual sea p . Por otra parte, un hecho curioso aparece en el caso de $E \rightarrow \infty$ y $p = 0$, en el que, por encima de la temperatura crítica, la energía es constante e independiente de la temperatura. Este fenómeno ya fue observado en el modelo de Van Beijeren-Schulmann, por KLSZ y es un efecto típico de la interfase. Por encima de T_c , al no haber interfase, cuando $p \rightarrow 0$ y $E \rightarrow \infty$, toda la dependencia de las probabilidades de transición en la temperatura es eliminada, mientras que por debajo de T_c , en ese límite, queda siempre la dependencia en la temperatura de las corrientes entre las fases, esto es, el efecto de la

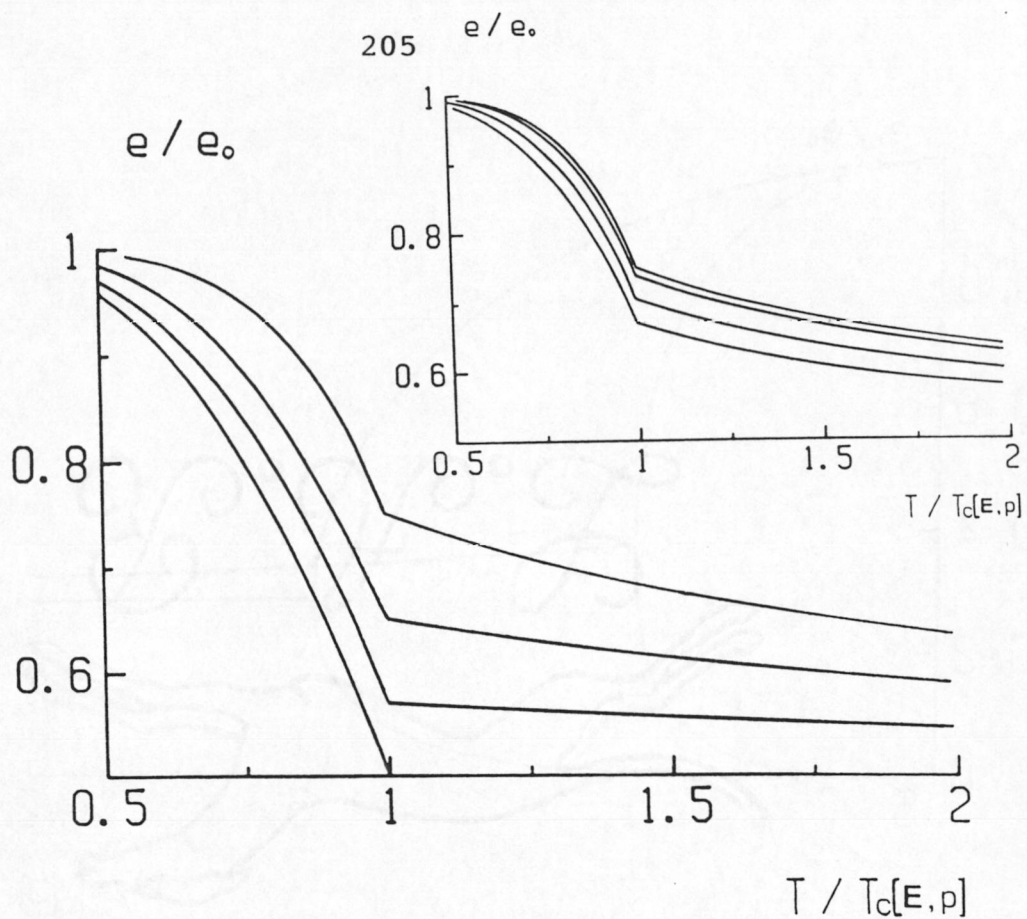


Figura VI3.14. Densidad de energía en función de la temperatura normalizada a su respectiva temperatura crítica para $E=\infty$ y, de izquierda a derecha, $p=0, 0.5, 0.9$ y 1 (equilibrio). La figura pequeña representa lo mismo que la grande pero para $E=1$.

interfase. Este hecho refleja la importancia de la interfase en el comportamiento cualitativo de un sistema.

El efecto de p sobre la energía queda muy bien reflejado en la figura VI3.14. Así, fijado el campo eléctrico, observamos como $e(T=T_c)/e_0$ crece al crecer p , y $e(p) > e(p')$ cuando $p > p'$, cuando normalizamos la temperatura a la temperatura crítica correspondiente en cada caso.

Por último, en la figura VI3.15 vemos el comportamiento de la energía de cada fase en función de la temperatura para $p=0.5$ y campos $E=0$ y ∞ . Notamos que, por debajo de T_c , todas las partículas se encuentran acumuladas en la fase

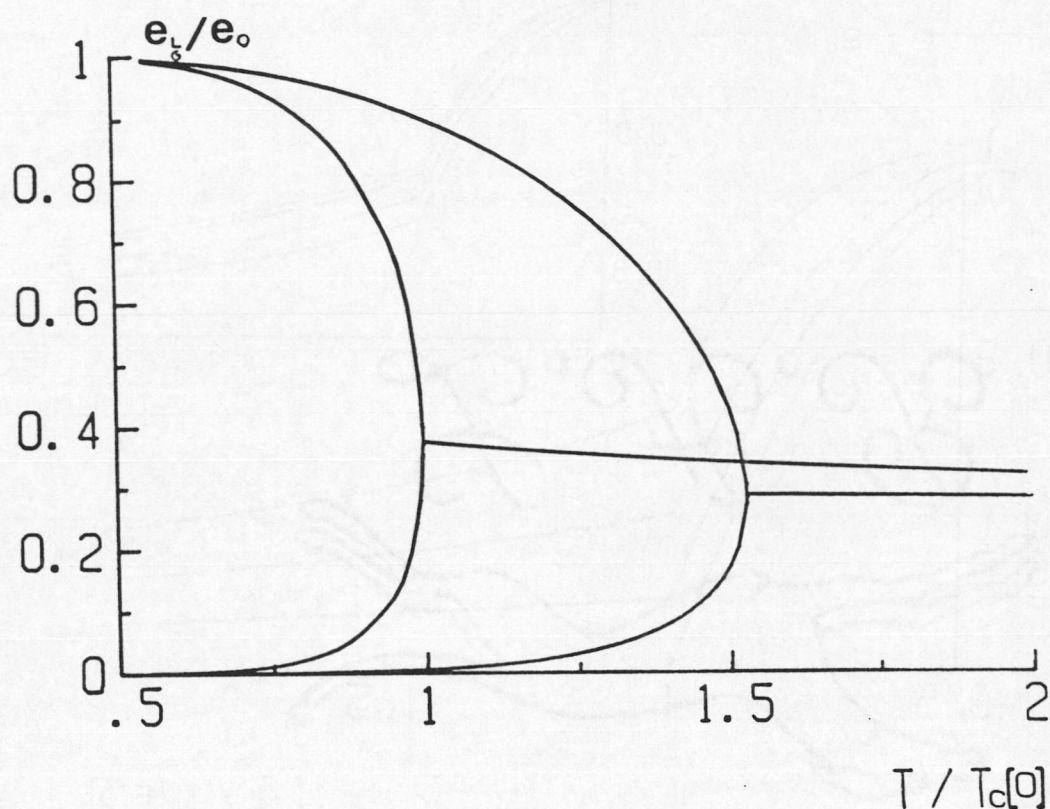


Figura VI3.15. Densidades de energía en la fase líquida y gaseosa según la ecuación (VI3.108) en función de la temperatura normalizada a la temperatura crítica a campo nulo para $p=0.5$ y, de izquierda a derecha, $E=0$ y ∞ .

líquida; al aumentar la temperatura, las partículas van pasando de la fase líquida a la gaseosa hasta que, a la temperatura crítica, ambas fases son indistinguibles e idénticas físicamente. El campo eléctrico hace que la estructura ordenada de las fases se conserve a temperaturas más altas, además de dar mayor importancia energéticamente a la fase líquida que a la gaseosa, de acuerdo con lo observado en las simulaciones Monte Carlo.

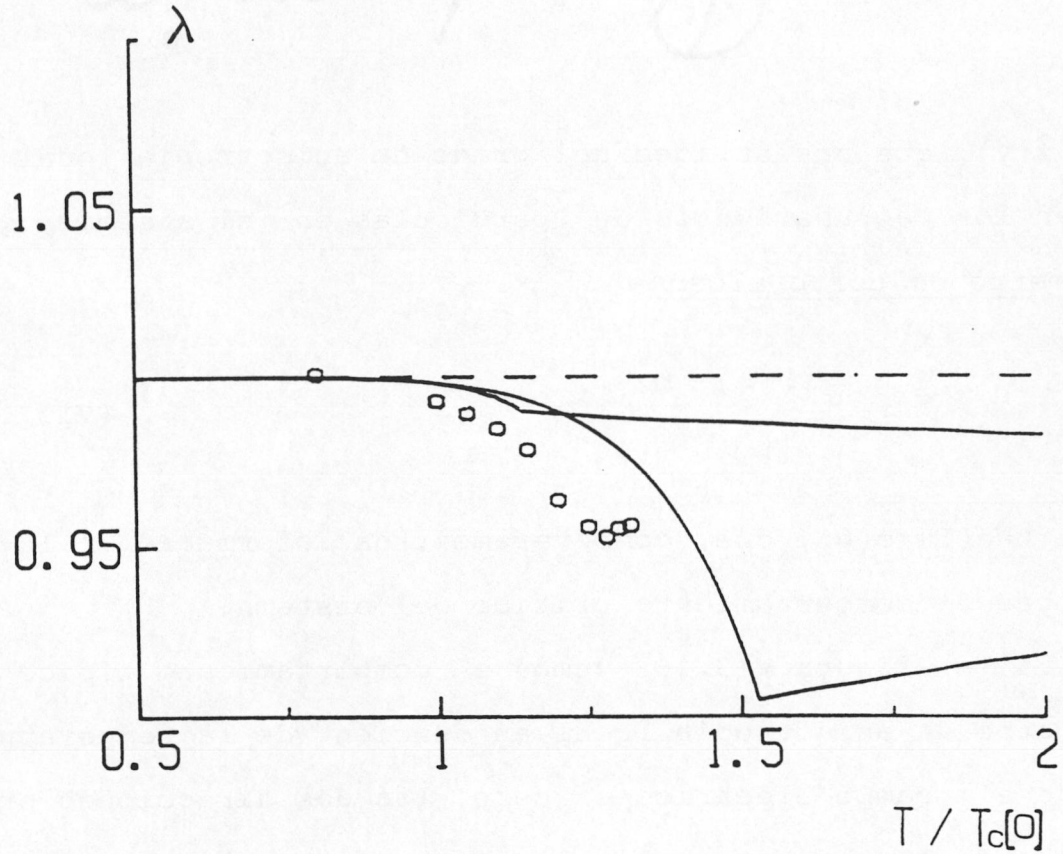


Figura VI3.16. Parámetro de anisotropía en función de la temperatura normalizada a la temperatura crítica a campo nulo, para un sistema con $p=0.5$. Las líneas continuas son, de arriba hacia abajo, para $E=1$ y ∞ . La línea a trazos corresponde a $\lambda=1$. Los círculos son resultados Monte Carlo de un análisis de tamaño finito para $E \rightarrow \infty$.

VI.3.3.1.3. Parámetro de anisotropía local y parámetro de corto alcance.

Podemos definir dos parámetros que dan una información interesante sobre el comportamiento global del sistema: el parámetro de anisotropía local:

$$\lambda \equiv \frac{N_{++\hat{x}}}{N_{++\hat{y}}} \quad (\text{VI3.109})$$

donde $N_{++\hat{x}}(\eta)$ es el número de parejas de partículas en la direc-

ción $\hat{x}(\hat{y})$, que nos da idea del grado de anisotropía local que tienen los agrupamientos de partículas en el sistema, y el parámetro de corto alcance, σ ,

$$\sigma = \frac{\frac{1}{4}(1+u)^2 - m^2}{(1-u)^2} \quad (\text{VI3.110})$$

donde $u=e(T)/e(0)$, que, como veremos, da información relevante sobre el comportamiento crítico del sistema.

En la figura VI3.16 vemos el comportamiento típico del parámetro de anisotropía local en función de la temperatura. Cuando el campo eléctrico es cero, las dos direcciones principales de la red son equivalentes y, por lo tanto, para cualquier temperatura es $\lambda = 1$, indicando isotropía en las agrupaciones de partículas. Sin embargo, cuando un campo eléctrico actúa, los agrupamientos de partículas tienden a deformarse en la dirección del campo, produciendo una disminución de λ tanto más acusada cuanto más intenso es el campo. Por otra parte, distinguimos dos comportamientos en λ según la temperatura sea mayor o menor que T_c . Así, por debajo de T_c , observamos un decrecimiento monótono de λ con la temperatura, sea cual sea el campo aplicado; este comportamiento, lo podemos explicar si tenemos en cuenta que, a temperatura cero, todas las partículas se encuentran agrupadas en la fase líquida y, por lo tanto, el sistema es localmente isotrópico; al ir aumentando la temperatura, las partículas tienen mayor movilidad y pueden ser arrastradas por el campo, de modo que las partículas que componen un agrupamiento tienden a moverse

preferentemente en la dirección del campo, deformando el agrupamiento y dando lugar a la anisotropía observada que es tanto más importante cuanto mayor sea la temperatura. Cuando la temperatura es superior a la crítica, aparece un comportamiento diferenciado según sea el valor del campo. Así, para campo infinito, observamos cómo al aumentar la temperatura, va disminuyendo la anisotropía, esto es, una vez alcanzado el máximo de anisotropía en la fase ordenada a la temperatura crítica, al pasar a la fase homogénea, la temperatura tiende a hacer isótropo al sistema, mientras que para un campo igual a uno, al aumentar la temperatura aumenta la anisotropía. Esto indica que, cuando el campo es infinito, por encima de la temperatura crítica, los agrupamientos de partículas son menos estables frente a las fluctuaciones térmicas que cuando el campo es 1 y, por lo tanto, tienden a romperse más fácilmente. De cualquier forma, en ambos casos, para temperaturas suficientemente grandes, se llega a un comportamiento asintótico del parámetro de anisotropía local hacia un valor constante, tanto menor cuanto mayor es el campo eléctrico aplicado. Este comportamiento asintótico ha sido detectado en una simulación Monte Carlo para un sistema tridimensional (Vallés, comunicación privada).

El parámetro de orden de corto alcance es muy útil para estudiar el comportamiento crítico de un sistema (Labarta, Marro, Garrido y Toral, 1988) y, entre otras propiedades, no diverge en la temperatura crítica y tiene un comportamiento cualitativo distinto según sean los exponentes críticos del

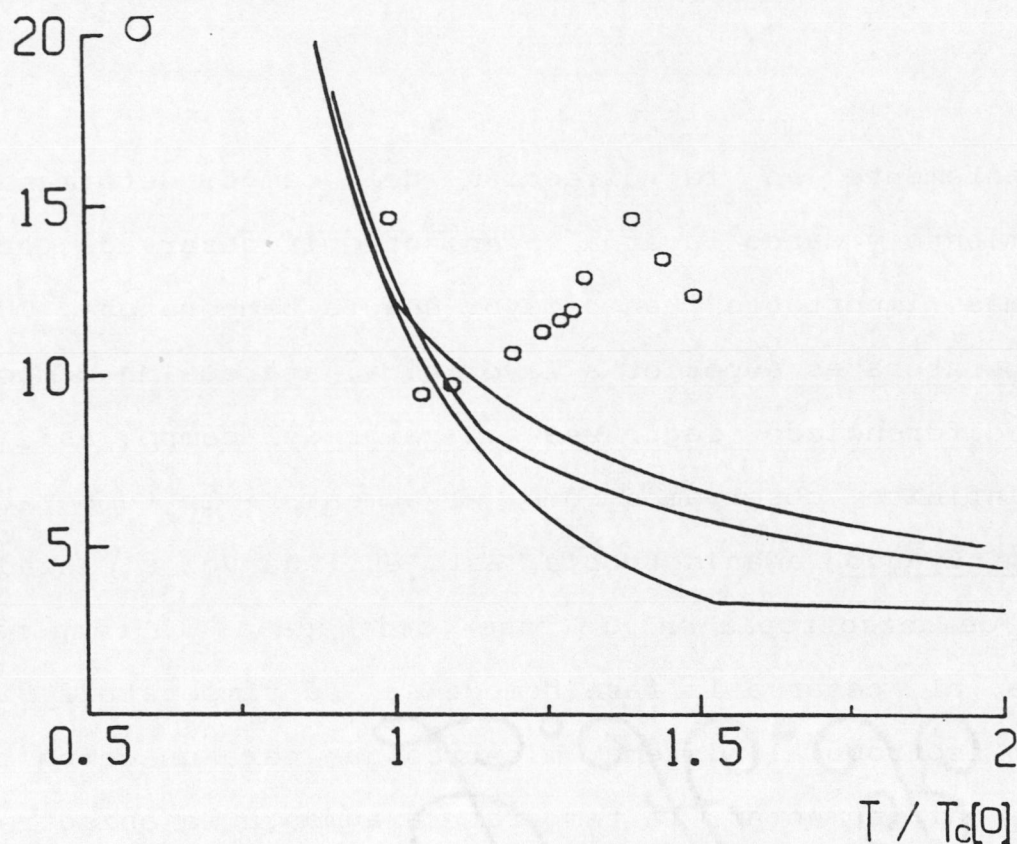


Figura VI3.17. Parámetro de corto alcance en función de la temperatura normalizada a la temperatura crítica de campo nulo, para un sistema con $p=0.5$. Las líneas continuas son, de arriba hacia abajo, $E=0,1$ y ∞ . Los círculos son resultados Monte Carlo de un análisis de tamaño finito para $E \rightarrow \infty$.

sistema; así, cuando un sistema está caracterizado por exponentes clásicos ($\beta=1/2, \alpha=0$), este parámetro es monótonamente decreciente para todo el rango de temperaturas, mientras que, cuando los exponentes no son clásicos, se caracteriza por tener un "pico" perfectamente definido cuyo máximo está centrado en el valor de la temperatura crítica. Estos comportamientos quedan perfectamente reflejados en la figura VI3.17, donde vemos cómo los resultados teóricos reflejan que la aproximación utilizada es de campo medio, mientras que los resultados Monte Carlo nos indican un comportamiento crítico

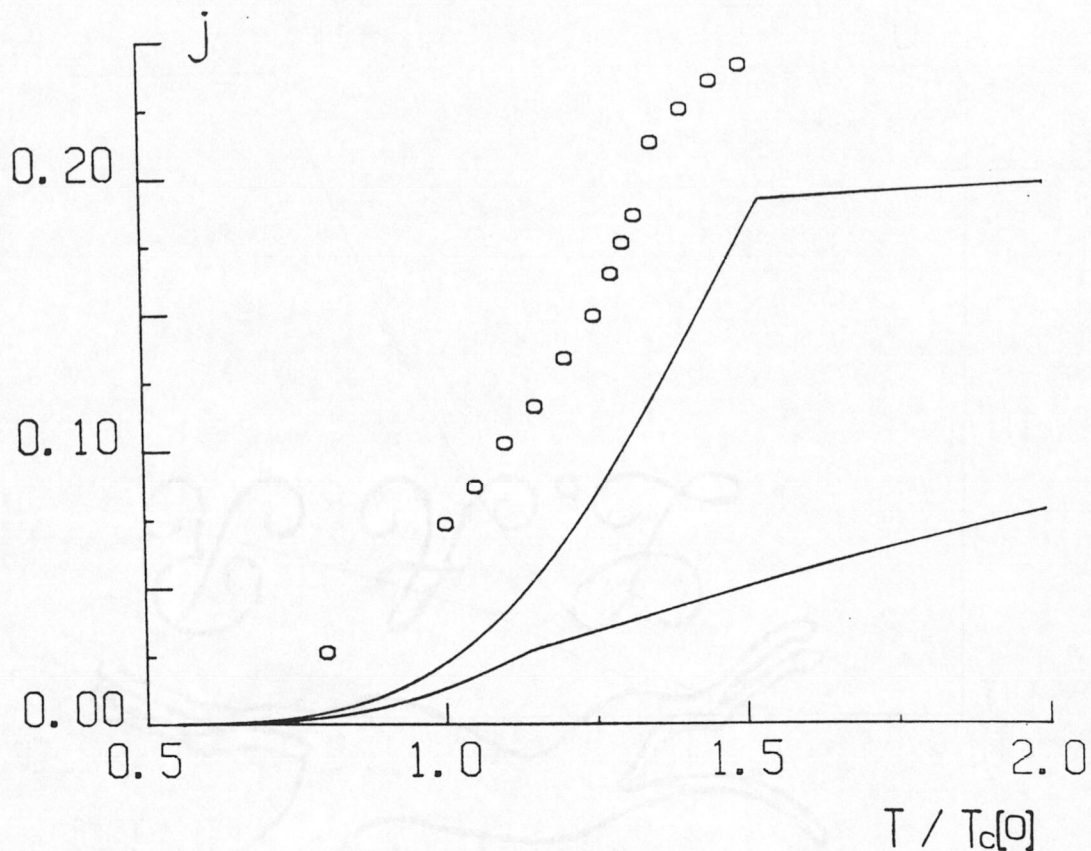


Figura VI3.18. Corriente de partículas en función de la temperatura normalizada a la temperatura crítica a campo cero para $p=0.5$; las líneas continuas corresponden, de arriba hacia abajo, para campo $E = \infty$ y 1. Los símbolos son resultados Monte Carlo de un análisis de tamaño finito para $E \rightarrow \infty$.

no clásico.

VI3.3.1.4. Corrientes.

La corriente de partículas en un sistema bidimensional puede ser definida de igual forma que en el caso unidimensional, esto es, por medio de la ecuación (VI2.24). En la figura VI3.18 observamos el comportamiento de la corriente en función de la temperatura para $p=0.5$ y distintos campos eléctricos. Vemos cómo el comportamiento cualitativo es semejante al

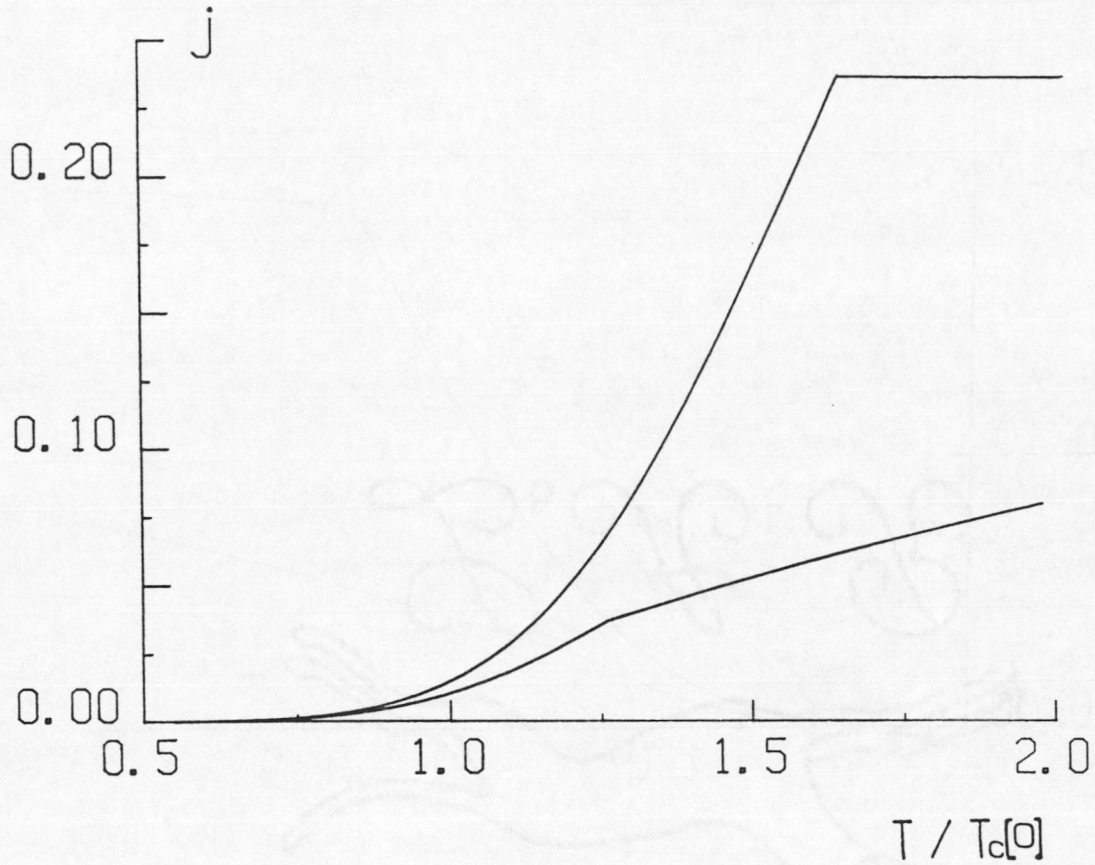


Figura VI3.19. Corriente de partículas en función de la temperatura normalizada a la temperatura crítica a campo nulo para un sistema con $p=0$ y, de arriba hacia abajo, campos infinito y uno.

que observamos en la corriente de un sistema unidimensional (ver figura VI2.1). Esto es, a temperatura cero no aparece corriente de partículas debido a que el retículo inmoviliza las partículas; según aumentamos la temperatura, las partículas son capaces de adquirir energía térmica suficiente como para abandonar los nudos de la red, pudiendo entonces ser arrastradas por el campo eléctrico externo. Cuando la temperatura es lo suficientemente alta, la energía suministrada por el campo supera a la máxima energía de ligadura de la red y, por lo tanto, las partículas son arrastradas fácilmente por el campo; a partir de ese momento, la acción de la tempe-

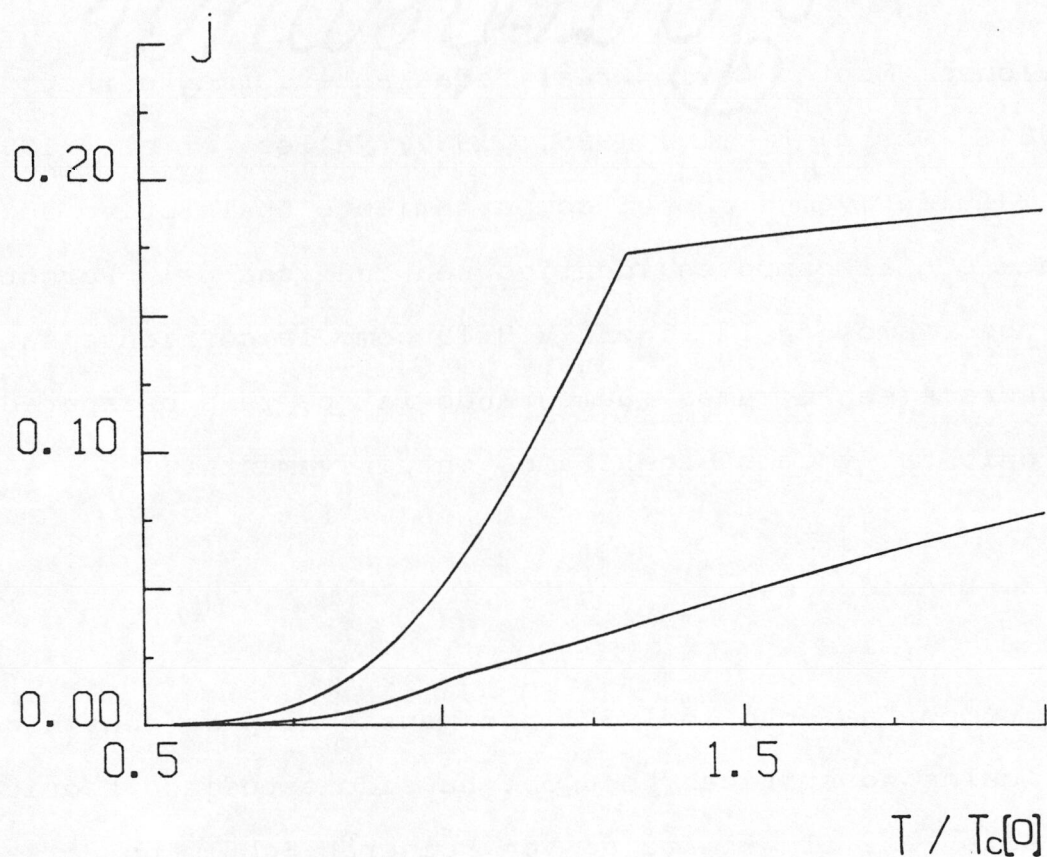


Figura VI3.19'. Igual que la figura VI3.19 pero para $p=0.9$.

ratura sobre la corriente es pequeña, obteniendo a temperaturas altas una corriente máxima denominada corriente saturante cuya magnitud depende fundamentalmente de la intensidad del campo aplicado, siendo máxima cuando el campo es infinito y nula cuando es cero. Sin embargo, el comportamiento de la corriente de este sistema bidimensional tiene una característica que lo distingue del unidimensional. La pendiente de la corriente tiene ahora un punto de discontinuidad cuando la temperatura es igual a T_c ; esta propiedad es característica de los SCI en dos o más dimensiones y ya fue observada en las

simulaciones Monte Carlo realizadas anteriormente (Katz et al., 1984; Marro et al., 1985, 1987; Vallés et al., 1986, 1987). También vemos que el comportamiento cualitativo de la corriente con el campo es idéntico sea cual sea $p \neq 1$. Por otra parte, observamos en la figura VI3.19 cómo la corriente saturante decrece según vamos aumentando la p , para desaparecer cuando $p=1$, tal y como esperábamos intuitivamente.

VI.3.3.2. Densidad $n=0.1$.

El comportamiento del SCI bidimensional para densidades de partículas no críticas ($n \neq 0.5$), ha sido estudiado teóricamente sólo en el límite de Van Beijeren-Schulmann, o sea, $p=0$, (Van Beijeren et al, 1984; Krugg et al., 1986) y en simulación Monte Carlo cuando $p=0.5$ (Marro et al., 1987). En general, se observa (en la simulación Monte Carlo) que, para densidades superiores a 0.35 aproximadamente, el cambio de fase es de segundo orden, mientras que para densidades inferiores a 0.2 (aproximadamente) aparece un comportamiento discontinuo en el cambio de fase o sea, éste es de primer orden. Como veremos, los resultados obtenidos por nuestra teoría para densidad 0.1, son coherentes con las observaciones Monte Carlo; esto es, aparece un cambio de fase de primer orden pero, a parte de esto, las magnitudes macroscópicas tienen un comportamiento semejante respecto p y E que en el caso $n=0.5$.

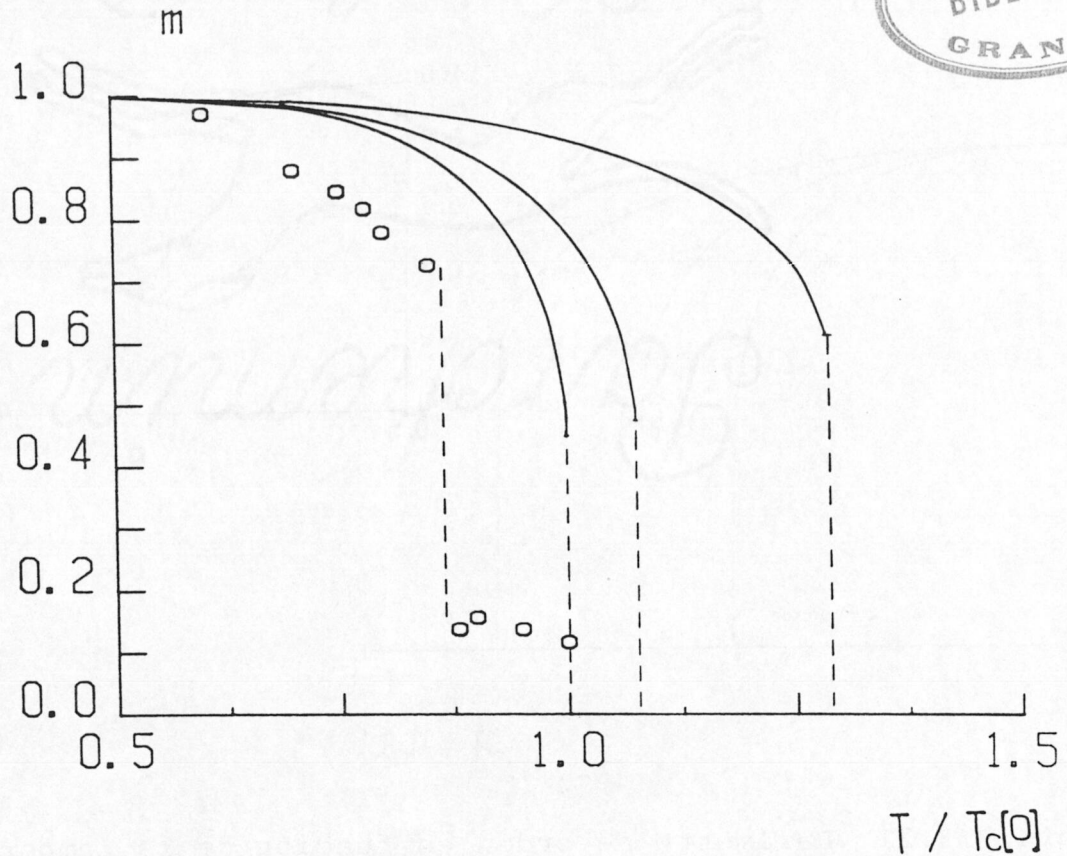


Figura VI3.20. Parámetro de orden en función de la temperatura normalizada a la temperatura crítica a campo nulo, para un sistema con $p=0.5$ y, de izquierda a derecha, campos $E=0,1$ y ∞ . Los círculos corresponden a resultados Monte Carlo en redes de tamaño 50×50 para $E=\infty$, (Marro et al., 1987).

VI.3.3.2.1. Parámetro de orden. Temperatura crítica.

El parámetro de orden refleja claramente que el cambio de fase es de primer orden, esto es, decrece monótonamente con la temperatura desde su valor máximo ($m=1$) cuando la temperatura es cero, hasta llegar a un valor mínimo no nulo ($m=m_c$) a la temperatura crítica; para temperaturas superiores a la crítica su valor es igual a cero. Este comportamiento cualitativo global es idéntico sea cual sea el valor de p y E . Por otra parte, detectamos en general que se cumple

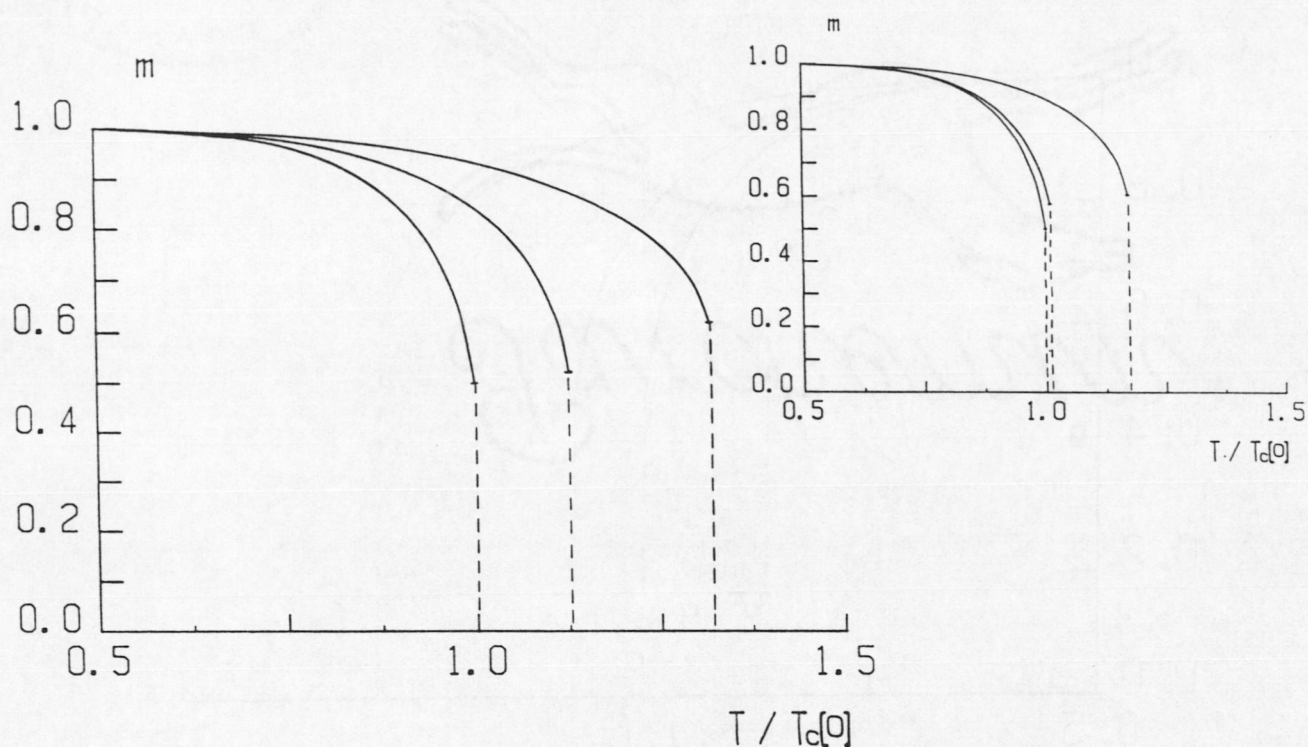


Figura VI3.21. Parámetro de orden en función de la temperatura normalizada a la temperatura crítica a campo nulo, para un sistema con $p=0$ y, de izquierda a derecha, campos $E=0, 1$ y ∞ . La figura pequeña es igual a la grande pero cuando $p=0.9$.

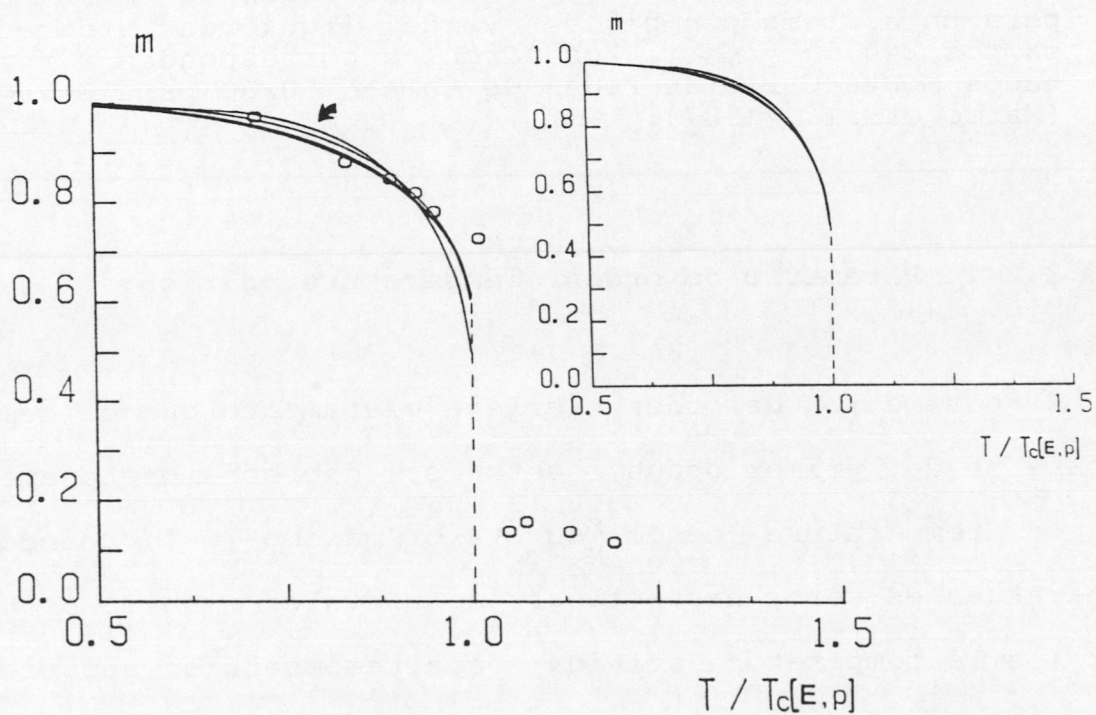


Figura VI3.22. Parámetro de orden en función de la temperatura normalizada a la respectiva temperatura crítica para $E=\infty$ y, de arriba hacia abajo en el punto señalado por la flecha, para $p=1, 0.9, 0.5$ y 0 . La figura pequeña es lo mismo que la grande pero para $E=1$.

p	E	0	1	∞
0		1.453	1.635	1.915
.1		1.453	1.620	1.915
.2		1.453	1.605	1.910
.3		1.453	1.590	1.900
.4		1.453	1.575	1.885
.5		1.453	1.560	1.865
.6		1.453	1.540	1.845
.7		1.453	1.520	1.815
.8		1.453	1.500	1.770
.9		1.453	1.475	1.700
1.		1.453	1.453	1.453

Tabla VI3.4. Temperaturas críticas, $T_c(E,p)$, para un SCI bidimensional con densidad global de partículas, $n=0.1$, obtenidas mediante la CAL. Los valores tienen un error de ± 0.005 .

n	$T_c(E=\infty, p=0.5)/T_c(E=0)$
0.5	1.355 \pm 0.003
0.35	1.32 \pm 0.02
0.20	1.16 \pm 0.02
0.10	0.84 \pm 0.04
0.075	0.67 \pm 0.13
0.05	0.37 \pm 0.18

Tabla VI3.5. Temperaturas críticas normalizadas a la temperatura crítica a campo cero para varias densidades de partículas obtenidas en una simulación Monte Carlo en redes de tamaño 50x50 (Marro et al., 1987).

$m_c(p,E) > m_c(p',E')$ si $p > p'$ y/o $E > E'$, esto es, la fase ordenada es más sensible a la temperatura cuanto menor es el campo eléctrico aplicado, pero es más difícil de romper. En las figuras VI3.20, VI3.21 y VI3.22 vemos el comportamiento de m para diferentes campos aplicados y distintas p ; sirven los mismos comentarios que hicimos en la sección VI3.3.1.1. Observamos que el comportamiento cualitativo es muy semejante

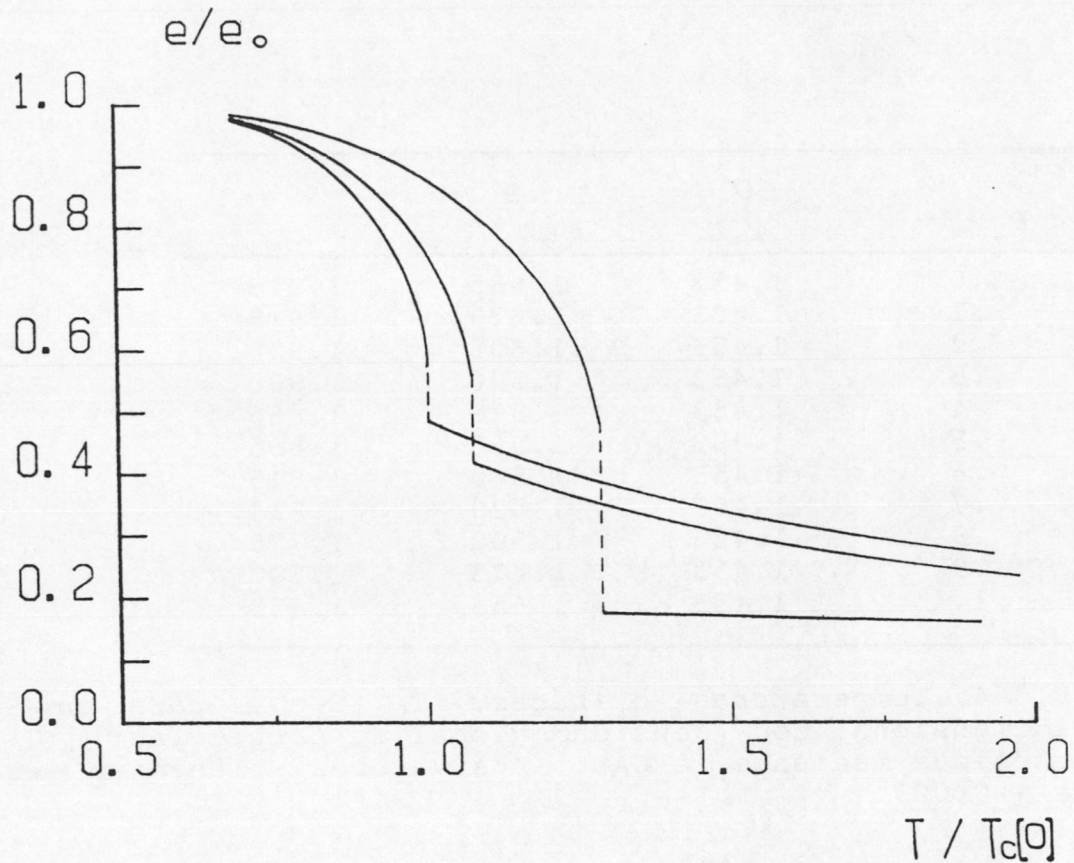


Figura VI3.23. Densidad de energía normalizada a la energía a temperatura cero en función de la temperatura normalizada a la temperatura crítica a campo cero.

al obtenido por la simulación de Monte Carlo para redes de 50×50 y campo infinito (Marro et al., 1987). El comportamiento de la temperatura crítica es idéntico al observado para $n=0.5$, esto es, $T_c(E,p) > T_c(E',p')$ si $E > E'$ y/o $p < p'$. Por otra parte, vemos que $T_c(E,p)_{n=0.5} > T_c(E,p)_{n=0.1} \forall E,p$ lo que ya fue observado en una simulación Monte Carlo para $E = \infty$ y $p=0.5$ (ver Tabla VI3.5) (Marro et al., 1987).

VI.3.3.2.2. Energía.

Para elegir correctamente la densidad de energía en sistemas con densidades no críticas, hemos de generalizar la

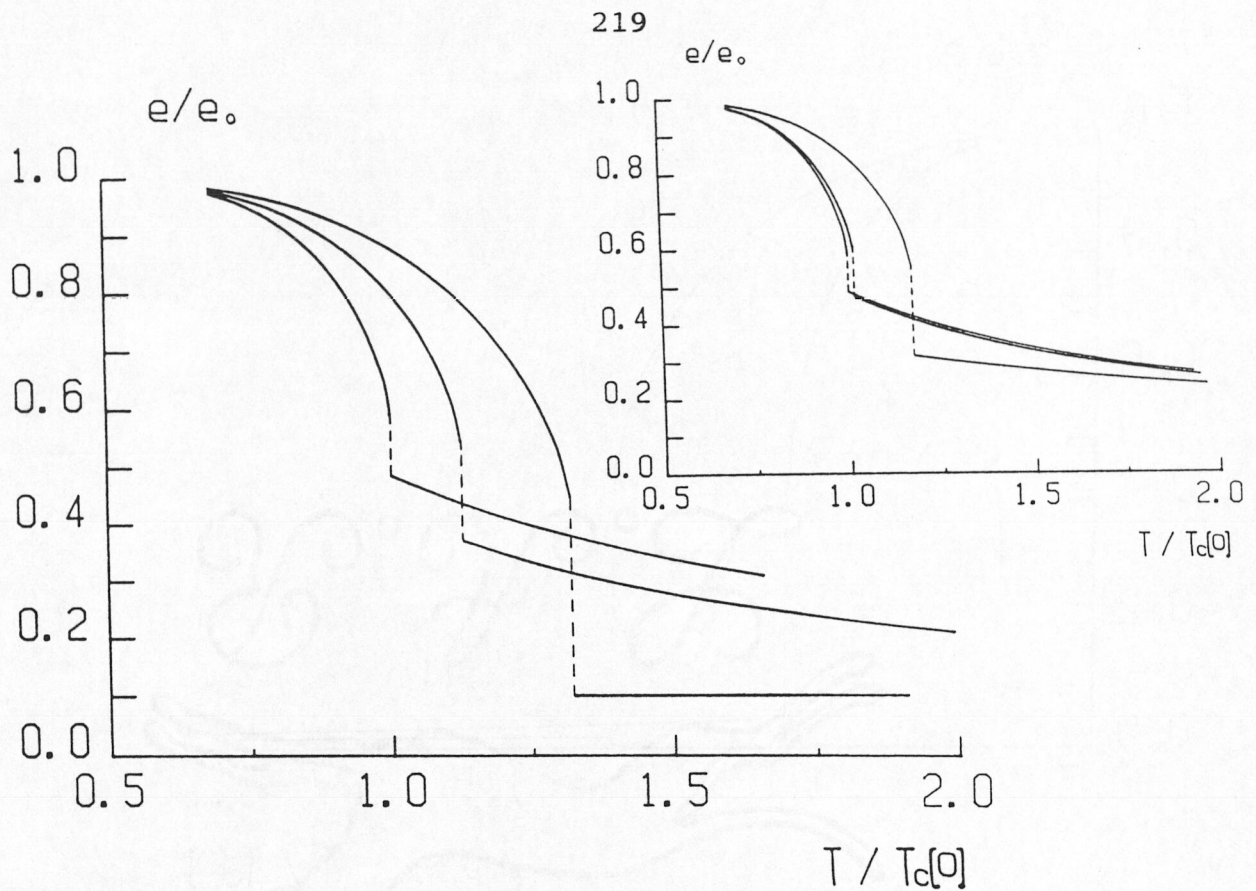


Figura VI3.24. Igual que la figura VI3.23 pero para $p=0$. La figura pequeña es para el caso $p=0.9$.

ecuación (VI3.106); esto es fácil si notamos que la densidad global de parejas de partículas es: $u = nu_L + (1-n)u_G$ donde u_L y u_G están definidas por (VI3.107). Entonces, de la misma forma que obtuvimos (VI3.106), tenemos ahora:

$$\frac{e}{e_0} = u_L + \frac{1-n}{n} u_G \quad (\text{VI3.111})$$

Notar que si $T \rightarrow 0$, $e/e_0 \rightarrow 1$ y si $T \rightarrow \infty$ $e/e_0 \rightarrow n$. Al igual que en el caso del parámetro de orden, observamos un comportamiento crítico similar al de $n=0.5$, salvo por la aparición del cambio de fase de primer orden. En este caso, se cumple también que el valor de la energía cuando vamos

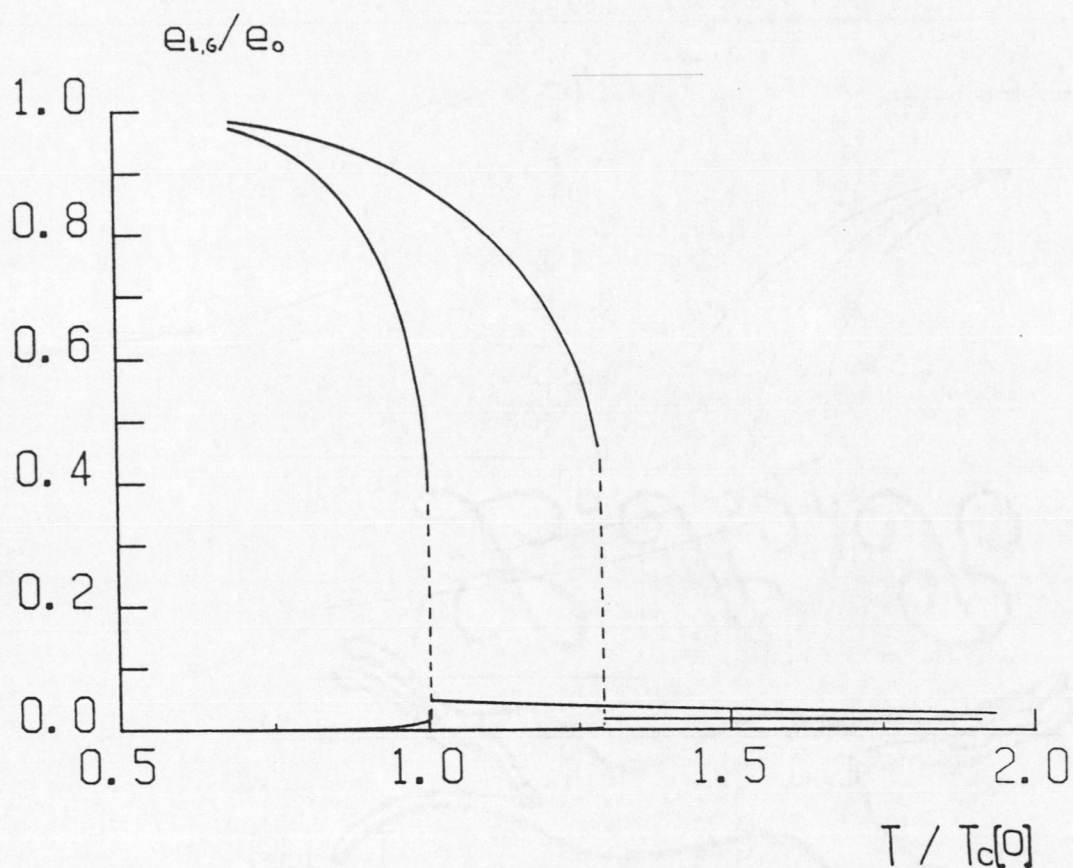


Figura VI3.25. Densidad de energía de la fase líquida y gaseosa normalizada a la densidad a temperatura nula en función de la temperatura normalizada a la temperatura crítica para campo nulo. $p=0.5$ y, de izquierda a derecha, $E=0$ y ∞ .

hacia la temperatura crítica por la derecha (izquierda), $e_c^{+(-)}$ cumple que $e_c^+(p,E) < e_c^+(p',E')$ y $e_c^-(p,E) > e_c^-(p',E')$ si $p > p'$ y/o $E > E'$. Además notamos que la diferencia, $e_c^- - e_c^+$, aumenta según se incrementa el campo. Vemos en la figura VI3.25 el efecto del cambio de fase de primer orden. Así, a temperaturas inferiores a la crítica, casi todas las partículas se concentran en la fase líquida que es muy energética; al superar la temperatura crítica, la fase líquida desaparece "bruscamente" apareciendo una fase homogénea muy poco energética, siendo absorbida la energía residual por el retículo.

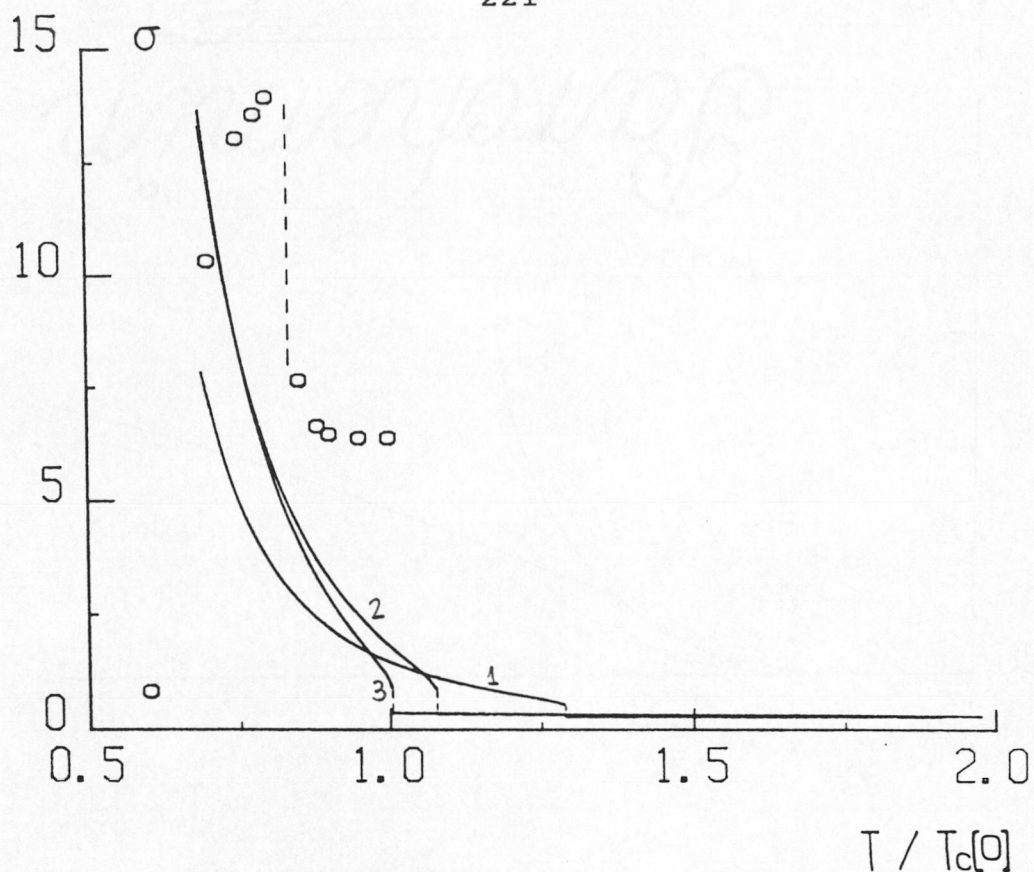


Figura VI3.26. Parámetro de orden de corto alcance en función de la temperatura normalizada a la temperatura crítica a campo nulo, $p=0.5$, 1: $E = \infty$, 2: $E=1$, 3: $E=0$. Los símbolos corresponden a los resultados Monte Carlo obtenidos a $E = \infty$ en una red 50×50 (Marro et al., 1987).

VI.3.3.2.3. Parámetro de orden de corto alcance y corrientes.

Observamos en la figura VI3.26 el comportamiento del parámetro de orden de corto alcance. Al igual que ocurre en el caso de $n=0.5$, vemos como este parámetro nos dice que la teoría que hemos usado es de tipo campo medio al estar caracterizado por un decrecimiento monótono con la temperatura. Los resultados Monte Carlo señalan, sin embargo, la aparición de un "pico" centrado en la temperatura crítica, lo que nos vuelve a dar idea de un comportamiento crítico real diferenciado.

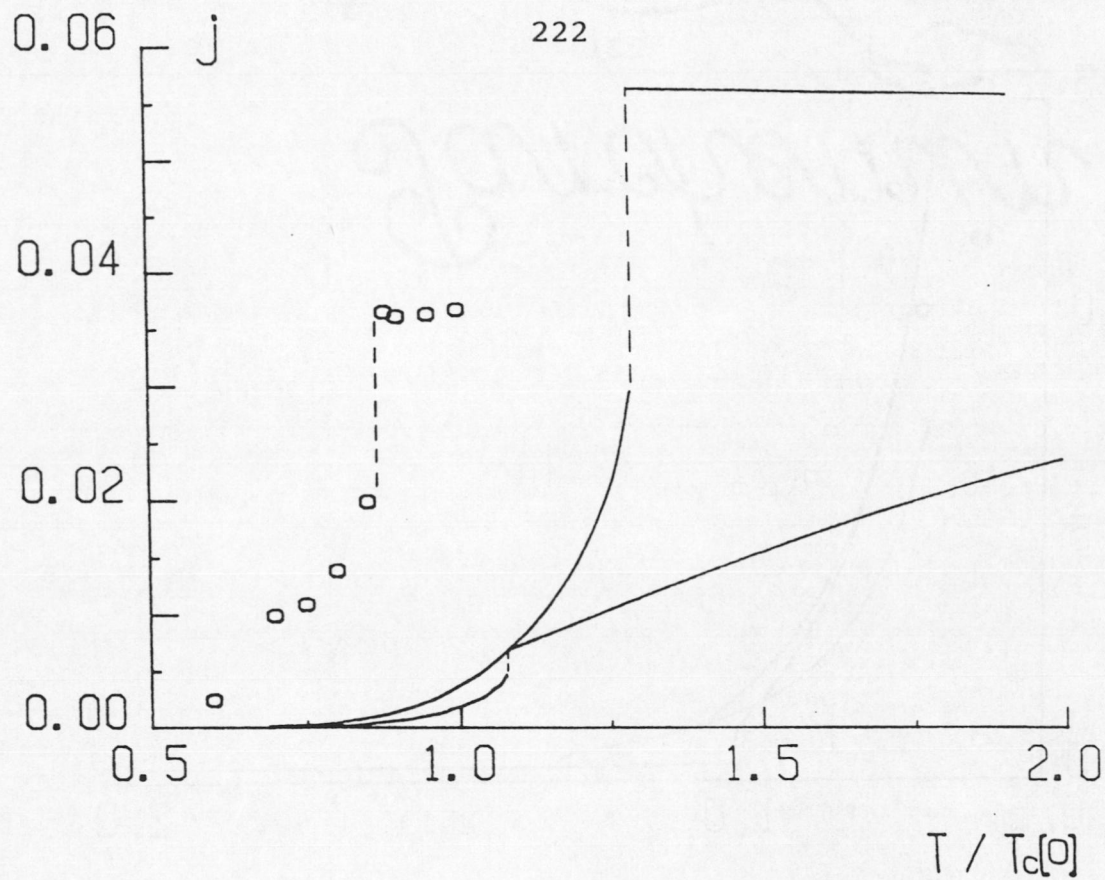


Figura VI3.27. Corriente de partículas en función de la temperatura normalizada a la temperatura crítica a campo nulo, para $p=0.5$ y, de arriba hacia abajo, $E = \infty$ y 1. Los círculos son resultados Monte Carlo para $E = \infty$ y redes de tamaño 50×50 (Marro et al., 1987).

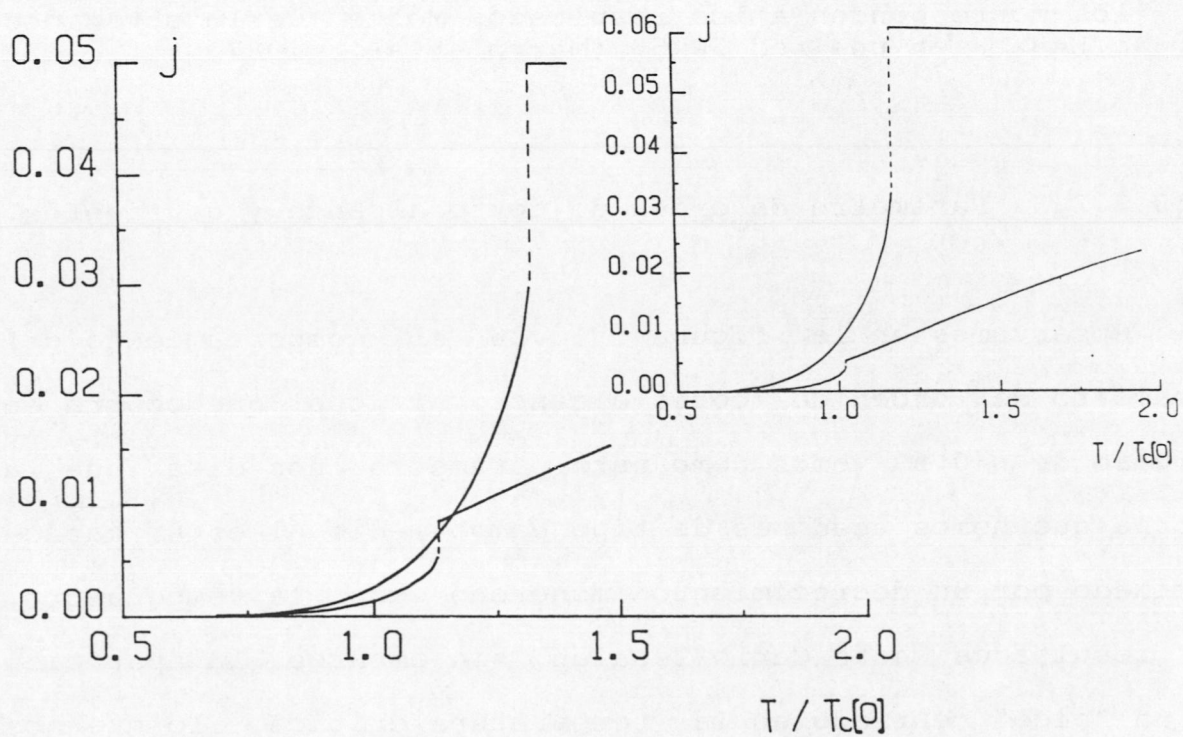


Figura VI3.28. Igual que la figura VI3.27 pero para $p=0$. La figura pequeña es para $p=0.9$.

En la corriente de partículas, la característica más sobresaliente que encontramos para esta densidad, es el decrecimiento monótono y suave de ésta con la temperatura cuando estamos por encima de la temperatura crítica. Por otra parte, las demás características son idénticas a las comentadas en el caso de $n=0.5$ y, por lo tanto, referimos al lector a los comentarios realizados en ese caso.

VI.3.3.3. Metaestabilidad: algunos comentarios.

En la sección VI.3.3 hemos resuelto el modelo bidimensional del SCI utilizando el método CAL. Para ello, nos hemos basado en la aparición de una franja de partículas por debajo de la temperatura crítica. Sin embargo, podíamos haber planteado y resuelto el modelo para el caso más general en que apareciesen en el sistema un número superior de franjas de partículas, veamos que ocurriría en ese caso.

Supongamos un sistema de tamaño $L \times N$ en régimen estacionario con densidad $n=0.5$ que, a temperaturas suficientemente bajas, tiene f franjas idénticas de partículas, cada una con anchura l (ver figura VI3.29). Según el método CAL, la energía total del sistema es:

$$E = -4JN \left[l \sum_{i=1}^f u_i - a(T) \sum_{i=1}^f [(1-n'_{i-1}) + (1-n'_{i+1})] + l \sum_{i=1}^f u_i' \right] \quad (\text{VI3.112})$$

con $a(T) \gg 0$, $a(T \rightarrow \infty) = 1$, donde los dos primeros términos representan la energía de las franjas y el tercero la energía

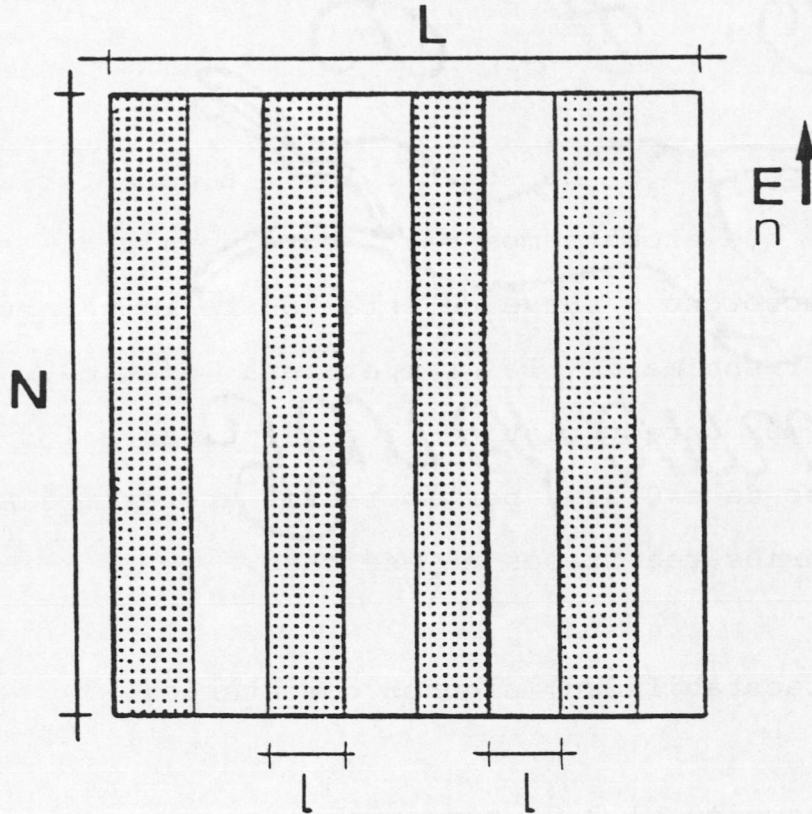


Figura VI3.29. Figura esquemática de un SCI bidimensional en el que aparecen franjas idénticas de tamaño l a temperaturas suficientemente bajas.

de la fase gaseosa. De esta forma, la energía por nudo de la red la podemos escribir como

$$\begin{aligned}
 e &\equiv \frac{E}{2Nef} \approx -4J \left[\frac{1}{2f} \sum_{i=1}^f u_i - \frac{2a(\tau)}{L} f(2-2\bar{n}_G) + \frac{1}{2f} \sum_{i=1}^f u_i \right] = \\
 &= -4J(\bar{u}_L + \bar{u}_G) + 16Ja(\tau)(1-\bar{n}_G) \frac{f}{L} \quad (\text{VI3.113})
 \end{aligned}$$

donde $\bar{n}_G \equiv \sum_{i=1}^f n_i' / f$ y $\bar{u}_{L(G)} = \sum_{i=1}^f u_i^{(l)} / 2f$. Si suponemos que, en una escala de tiempos adecuada, el sistema parece que se encuentra en un estado estacionario, entonces \bar{n}_G , \bar{u}_L y \bar{u}_G no varían apreciablemente en el tiempo y por lo tanto solamente existen fluctuaciones alrededor de estos valores promedios. Si las fluctuaciones son lo suficientemente intensas, enton-

ces aparece un mecanismo de evolución del sistema compatible con la estacionariedad de \bar{n}_G, \bar{u}_L y \bar{u}_G , esto es, la fusión de las franjas, así podemos escribir a partir de la ecuación (VI3.113) una ecuación de evolución para la energía:

$$\frac{\delta e}{\delta t} = 16Ja(T)(1-\bar{n}_G) \frac{1}{L} \frac{\delta f}{\delta t} \quad (\text{VI3.114})$$

Como el sistema tiende siempre a un estado de mínima energía compatible con las ligaduras que tiene, de la ecuación (VI3.114) concluimos que el número de franjas, f , disminuirá con el tiempo hasta llegar al caso límite de tener una sola franja siendo entonces el sistema realmente estacionario con respecto a todos los mecanismos de evolución que actúan sobre el sistema. De esta forma, los estados con franjas los podemos considerar como estados metaestables del sistema. Este fenómeno fue detectado en simulaciones Monte Carlo (Vallés et al., 1987; Marro et al., 1987) observando que el tiempo de relajación de estos estados metaestables era muy grande y, por lo tanto, macroscópicamente podían ser relevantes.

VI.4. Conclusiones.

En este último capítulo de la tesis, hemos resuelto un modelo de superconductor iónico (SCI) en una y dos dimensiones. Para ello, hemos desarrollado la técnica de la Cinética de los Agrupamientos Locales (CAL) para un mecanismo de intercambio de espines.

En una dimensión hemos descrito completamente el modelo de SCI para interacciones ferromagnéticas y antiferromagnéticas, así hemos estudiado su dinámica, régimen estacionario y estabilidad, además, hemos calculado la corriente de iones, conductividad, energía y calor específico, todo ello para cualquier densidad de iones, temperatura y magnitud del campo eléctrico aplicado, obteniendo, en cualquier caso, resultados comparables perfectamente con simulaciones de Monte Carlo realizadas con anterioridad.

Previamente a la resolución general del modelo de SCI bidimensional, hemos resuelto éste en un límite particular, esto es, cuando la dinámica que actúa en una de las direcciones principales de la red es infinitamente más rápida que la que actúa en la otra dirección. Este límite, para el caso de campo eléctrico infinito fue resuelto, por una parte, por Van Beijeren y Schulmann, y por otra, por Krugg, Lebowitz, Spohn y Zhang. Nosotros lo hemos resuelto cuando actúa cualquier campo eléctrico, utilizando la técnica de la expansión de la ecuación maestra en el tamaño del sistema, recuperando los resultados ya hallados para campo infinito. Así, hemos estudiado, por ejemplo, el comportamiento de la temperatura crítica en función de la densidad de iones, el campo eléctrico aplicado y el tipo de interacción que utilizamos en cada dirección principal de la red.

Para resolver el SCI en dos dimensiones de una forma general, hemos tenido que ampliar la técnica CAL para poder aplicarla a sistemas anisotrópicos y no homogéneos. En el

modelo hemos estudiado en función del campo eléctrico externo, densidad de iones y temperatura: el parámetro de orden, el comportamiento crítico del sistema, la energía, el parámetro de orden de corto alcance, el parámetro de anisotropía local y la corriente de iones. Hemos obtenido una descripción completa del SCI que coincide y amplía, en gran medida, los resultados obtenidos previamente por las simulaciones Monte Carlo realizadas hasta el momento.

APENDICE I: Un nuevo modelo anisotrópico para situaciones de equilibrio que puede resolverse exáctamente en presencia de un campo externo arbitrario.

I.1. Introducción.

Muchos fenómenos macroscópicos de equilibrio, tales como los cambios de fase, pueden ser estudiados explícitamente, en principio, mediante la aplicación de la teoría de las colectividades de Gibbs a modelos simplificados con un hamiltoniano microscópico dado. En la práctica, sin embargo, es muy limitado el número de modelos matemáticamente bien definidos que, simultáneamente, tienen cierta relevancia física y pueden ser resueltos exáctamente. Los modelos reticulares son, en algún sentido, los más interesantes en física; actualmente capturan muchas de las características físicas esenciales de los fenómenos cooperativos de equilibrio y, en particular, se sabe hoy día que son muy relevantes en relación con muchos cambios de fase tal como se presentan en la naturaleza (ver por ejemplo Thompson, 1972). En cualquier caso, los modelos reticulares tipo Ising tienen soluciones exactas sencillas sólo excepcionalmente; las excepciones se limitan prácticamente a la celebrada solución de Onsager (1944) del modelo de Ising bi-dimensional con interacciones de vecinos próximos en campo magnético nulo, y algunas soluciones tipo campo medio, como las de Bragg-Williams ("campo coherente") y Bethe-Peierls ("cuasi-química") (ver por ejemplo, Smart 1966, Pathria 1977, Ziman 1979). Todavía más, se sabe que los mode-

los de campo medio, como los últimos citados, fallan al intentar reproducir la conducta correcta cerca de la temperatura crítica o el comportamiento de las ondas de spin a bajas temperaturas, y sólo consiguen una concordancia semi-cuantitativa con la realidad en el mejor de los casos; esto es debido a que involucran un tratamiento efectivo promedio de las interacciones entre espines y, como consecuencia, no tienen bien en cuenta las correlaciones de corto alcance, simetrías y la dimensionalidad del sistema. Así pues, parece interesante considerar otras variaciones del modelo de Ising que puedan resolverse exáctamente y que contengan interacciones más realistas en algún sentido.

Este apéndice está dedicado principalmente al estudio de un modelo tipo Ising en dos dimensiones con interacciones entre vecinos próximos a lo largo de una de las direcciones principales de la red y un acoplamiento tipo campo medio (coherente) a lo largo de la otra. El modelo puede ser resuelto exáctamente, aun en el límite termodinámico, cuando un campo magnético externo está presente; por ejemplo, usando el método de matrices de transferencia (Kramers y Wannier 1941; ver también, Thompson 1972, Pathria 1977). Este estudio permite ilustrar algunos aspectos interesantes tales como los efectos de la anisotropía (en dos sentidos: diferentes magnitudes de las interacciones y coexistencia entre interacciones ferro y antiferromagnéticas) o para clarificar de alguna forma el rango de validez de la clase de universalidad clásica. De hecho, nuestro modelo está todavía caracterizado por

exponentes críticos clásicos para cualquier relación Γ entre las magnitudes de las interacciones a lo largo de las dos direcciones principales de la red. Desde un punto de vista más práctico, el modelo es también interesante porque muestra una conducta más realista cerca de la temperatura crítica que la de los modelos de campo medio standard cuando Γ es usado como un parámetro ajustable. También es posible que el presente modelo permita describir algunos fenómenos cooperativos anisotrópicos en superficies. Pero, lo que es más importante para los propósitos de esta memoria, el modelo es muy conveniente para ser usado como un estado de referencia en el estudio de las propiedades de estados de no-equilibrio en modelos tipo Ising como los del capítulo II. De hecho, los resultados de éste apéndice son usados en el capítulo III.

En éste apéndice, como una extensión del modelo anterior, también consideramos el caso de un modelo de Ising multidimensional con acoplamientos de campo coherente a lo largo de cada una de las direcciones principales de la red, una situación que parece en principio más interesante que la estándar de campo medio dado que permite considerar explícitas la dimensión del espacio, anisotropías, etc...

I.2. Interacciones entre vecinos próximos y campo coherente.

Consideramos primero un sistema definido a través del Hamiltoniano

$$H = - \sum_{i,j=1}^{N,M} \left[J_x s_{ij} (s_{i-1,j} + s_{i+1,j}) + J_y s_{ij} m_i \right] \quad (\text{AI2.1})$$

donde se supone que hay una variable de espín $s_{ij} = \pm 1$ en cada lugar de la red ($i=1, \dots, N; j=1, \dots, M$), los índices i y j describen respectivamente las direcciones \hat{x} e \hat{y} que corresponden a los dos ejes principales de la red con energías de intercambio J_x y J_y , ambas constantes positivas, y

$$m_i = M^{-1} \sum_{j=1}^M \langle s_{ij} \rangle \quad (\text{AI2.2})$$

donde el paréntesis representa el promedio canónico. Queda así definido un modelo de Ising ferromagnético bidimensional con interacciones anisotrópicas tales que hay un acoplamiento entre vecinos próximos a lo largo de \hat{x} y un campo coherente (o campo medio de Bragg-Williams) a lo largo del eje \hat{y} . Considerar separadamente el caso antiferromagnético (ver sección I.3) y nos limitamos aquí a $J_x, J_y > 0$.

Como estudiamos un sistema en equilibrio, utilizamos la teoría de las colectividades de Gibbs y en particular la colectividad canónica para describir el sistema, para ello sólo necesitamos conocer la función de partición

$$Z = \sum_{\underline{s}} e^{-\beta H(\underline{s})} \quad (\text{AI2.3})$$

donde la suma se extiende sobre todas las configuraciones de espines del sistema y $\beta = 1/kT$ es el inverso de la temperatu-

ra. Utilizando en esta ecuación el hamiltoniano definido por la ecuación (AI2.1), podemos escribirla:

$$Z = \prod_{j=1}^M Z_j \tag{AI2.4}$$

con

$$Z_j = \sum_{s_{1j}} \sum_{s_{2j}} \dots \sum_{s_{Nj}} L(s_{1j}, s_{2j}) L(s_{2j}, s_{3j}) \dots L(s_{Nj}, s_{1j}) \tag{AI2.5}$$

donde

$$L(\sigma, \sigma') \equiv \exp \left[2\beta J_x \sigma \sigma' + (\beta J_y / 2) m (\sigma + \sigma') \right] \tag{AI2.6}$$

y hemos supuesto condiciones de contorno periódicas, es decir, $s_{N+1,j} = s_{1,j}$ para todas las j . Así pues, uno puede definir la matriz de transferencia (Kramers y Wannier, 1941) $\underline{L}_{\underline{m}}$ con los elementos dados por (AI2.6); esto es,

$$\underline{L}_{\underline{m}} = \begin{pmatrix} \exp(2\beta J_x + \beta J_y m) & \exp(-2\beta J_x) \\ \exp(-2\beta J_x) & \exp(2\beta J_x - \beta J_y m) \end{pmatrix}, \tag{AI2.7}$$

y se tiene

$$Z_j = \text{Tr}(\underline{L}_{\underline{m}}^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N \tag{AI2.8}$$

donde λ_1 y λ_2 representan los valores propios de $\underline{L}_{\underline{m}}$, $\lambda_1 > \lambda_2$. Utilizando esta expresión en la ecuación (AI2.4) se sigue que

$$Z = \prod_{j=1}^M \lambda_j^N \left[1 + (\lambda_2 / \lambda_1)^N \right] \quad (\text{AI2.9})$$

y, consecuentemente, la densidad de energía libre cuando $N, M \rightarrow \infty$ es

$$a = -\beta^{-1} \ln \lambda_1 \quad (\text{AI2.10})$$

En definitiva, sólo el valor propio más grande, λ_1 , es relevante para hacer termodinámica. λ_1 se obtiene resolviendo la ecuación de valores propios $\text{Det}(\underline{L} - \lambda) = 0$; así obtenemos

$$\lambda_1 = e^{2\beta J_x} \cosh(\beta J_y m) + \left[e^{4\beta J_x} \sinh^2(\beta J_y m) + e^{-4\beta J_x} \right]^{1/2} \quad (\text{AI2.11})$$

Si queremos introducir la acción de un campo magnético externo h , hemos de incluir en el hamiltoniano (AI2.1) un término extra, $-h \sum_{ij} s_{ij}$, que en la práctica implica únicamente hacer la sustitución $J_y m \rightarrow J_y m + h$ en la ecuación (AI2.11), esto es, se tiene

$$\lambda_1 = e^{2\beta J_x} \cosh(\beta(J_y m + h)) + \left[e^{4\beta J_x} \cosh^2[\beta(J_y m + h)] + e^{-4\beta J_x} \right]^{1/2} \quad (\text{AI2.12})$$

A partir de la fórmula (AI2.10) podemos obtener la magnetización media por espín:

$$\begin{aligned} m(h, T) &= -\partial a / \partial h = \beta^{-1} (\partial \ln \lambda_1 / \partial h) = \\ &= \alpha(h, T) \left[\alpha(h, T)^2 + \exp(-4\beta J_x) \right]^{-1/2} \end{aligned} \quad (\text{AI2.13a})$$

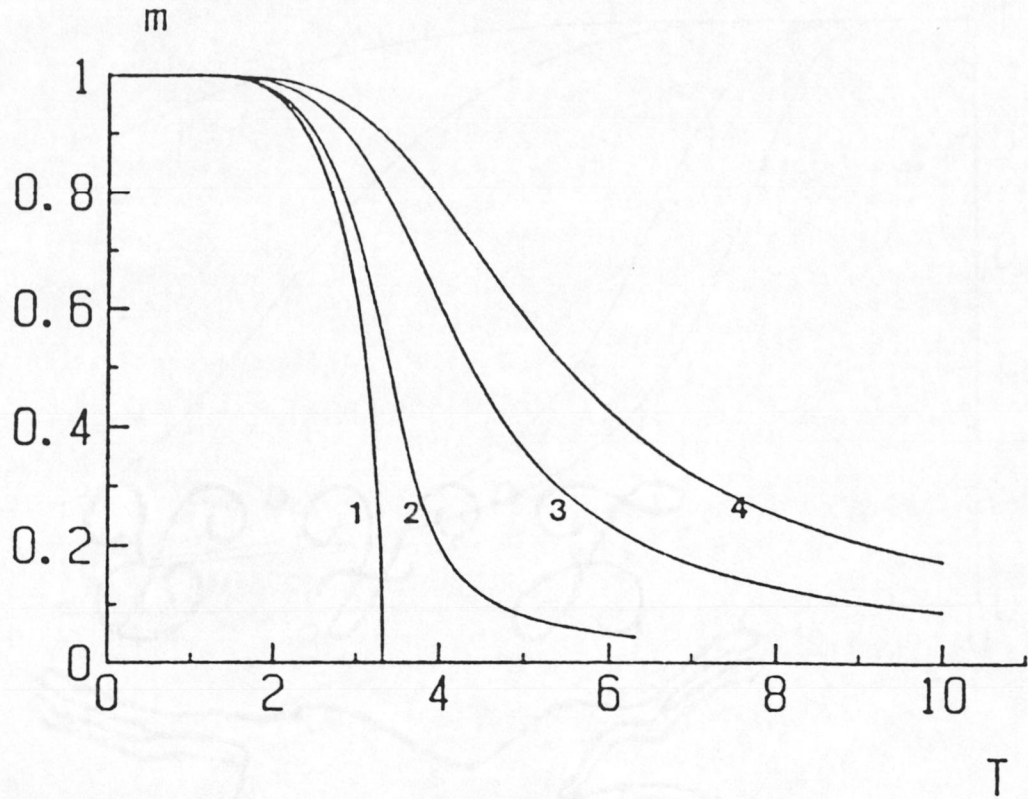


Fig. A11. La magnetización, dada por la ecuación (A12.13), dibujada respecto de la temperatura para $J_y = J_x$ y diferentes valores del campo, $h = 0$ (curva 1), 0.1 (curva 2), 0.5 (curva 3) y 1 (curva 4).

con

$$\alpha(h, T) = e^{2\beta J_x} \sinh[\beta(J_y m + h)] \quad (\text{A12.13b})$$

Notamos que el caso $J_y = 0$ ($J_x \neq 0$) corresponde al familiar modelo de Ising unidimensional con interacciones entre vecinos próximos (ver por ejemplo Thompson 1972) donde, para campo magnético cero, $h=0$, la magnetización espontánea es cero para cualquier temperatura finita diferente de cero. Por otra parte, cuando $J_x = 0$ ($J_y \neq 0$) obtenemos el modelo de Ising unidimensional bajo una hipótesis de campo medio (Thompson, 1972). Más interesante, por lo tanto, es el caso

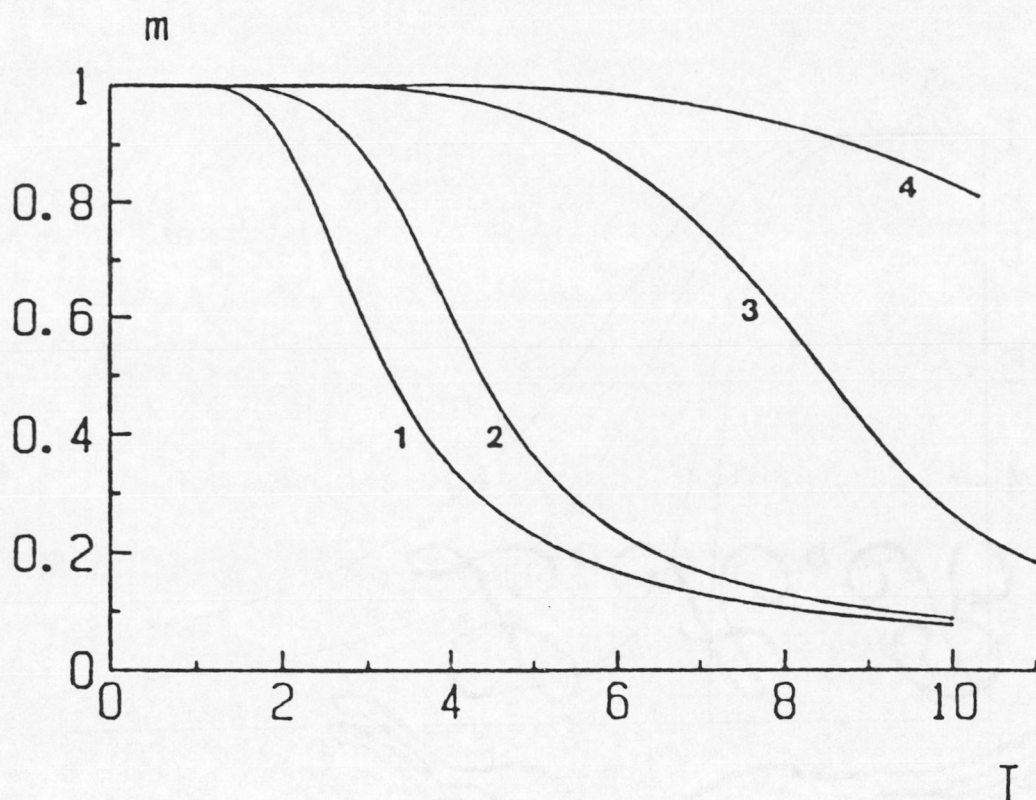


Fig. AI2. Igual que la figura AI1, pero para $h = 0.5$ y diferentes valores de J_y/J_x : $J_y/J_x = 0.1$ (curva 1), 1 (curva 2), 5 (curva 3) y 10 (curva 4).

$J_x \neq 0$, $J_y \neq 0$. La correspondiente magnetización espontánea por spin, m_0 , que es solución de la ecuación (AI2.13) para $h = 0$, puede probarse que tiene valores límites $m_0 \rightarrow 1$ cuando $T \rightarrow 0$, $m_0 \rightarrow 0$ cuando $T \rightarrow \infty$, y por consiguiente, existe cambio de fase para todos los valores finitos de J_y/J_x . Las figuras AI1-AI3 nos muestran la conducta de m_0 y m como función de T , h y J_y/J_x . En particular la figura AI3 muestra la influencia del parámetro de anisotropía $\Gamma \equiv J_y/J_x$ en la magnetización espontánea; esta figura nos sugiere, en particular, el uso de Γ como un parámetro ajustable. Así, cuando $\Gamma \rightarrow \infty$ (ver figura AI4) m_0 tiende hacia el comportamiento típico de la teoría de Bragg-Williams, mientras que, para

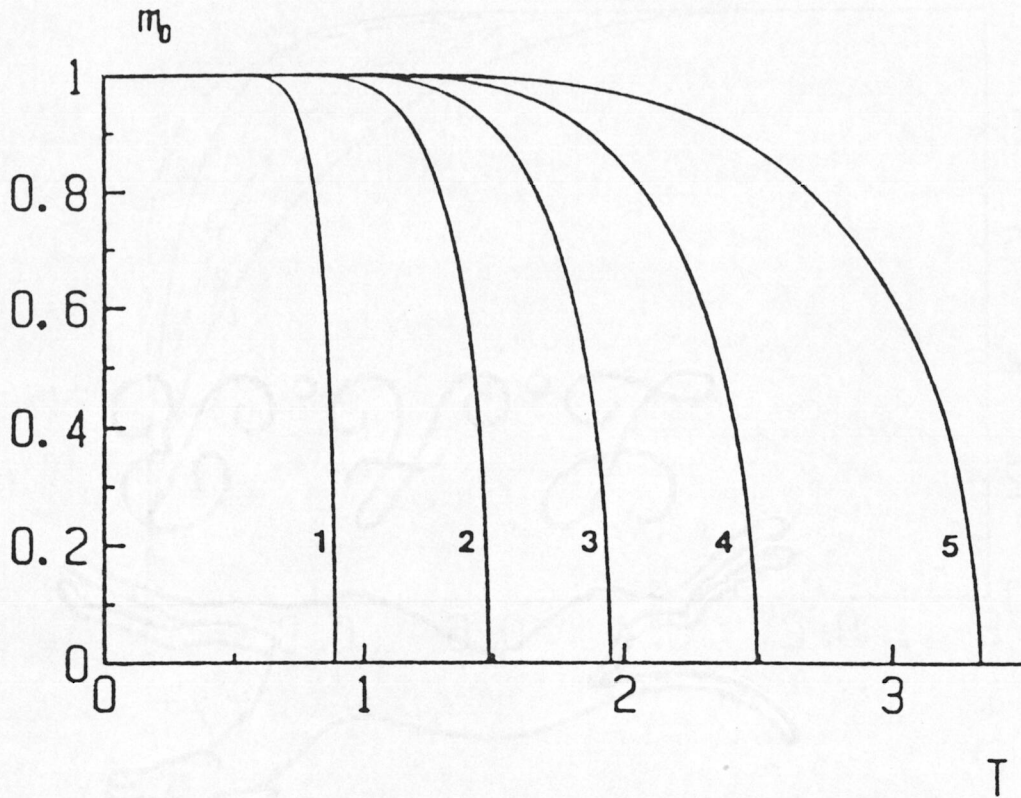


Fig. AI3. La magnetización espontánea, ecuación (AI2.12), para $h = 0$ dibujada en función de la temperatura para valores decrecientes del parámetro de anisotropía : $J_y/J_x = 0.01$ (curva 1), 0.1 (curva 2), 0.25 (curva 3), 0.5 (curva 4) y 1 (curva 5).

valores más pequeños de Γ , la conducta de nuestro modelo cerca de T_c puede aproximarse a la solución de Onsager del modelo de Ising bidimensional isotrópico. La influencia de un campo magnético externo en m se muestra en las figuras AI1 y AI2.

La temperatura crítica se sigue de la ecuación (AI2.13) para $h = 0$ cuando $m_0 \rightarrow 0$; obtenemos:

$$KT_c = J_y \exp(4J_x/KT_c) \quad (\text{AI2.14})$$

La conducta de $T_c = T_c(\Gamma)$ se muestra en la figura AI5. Obser-

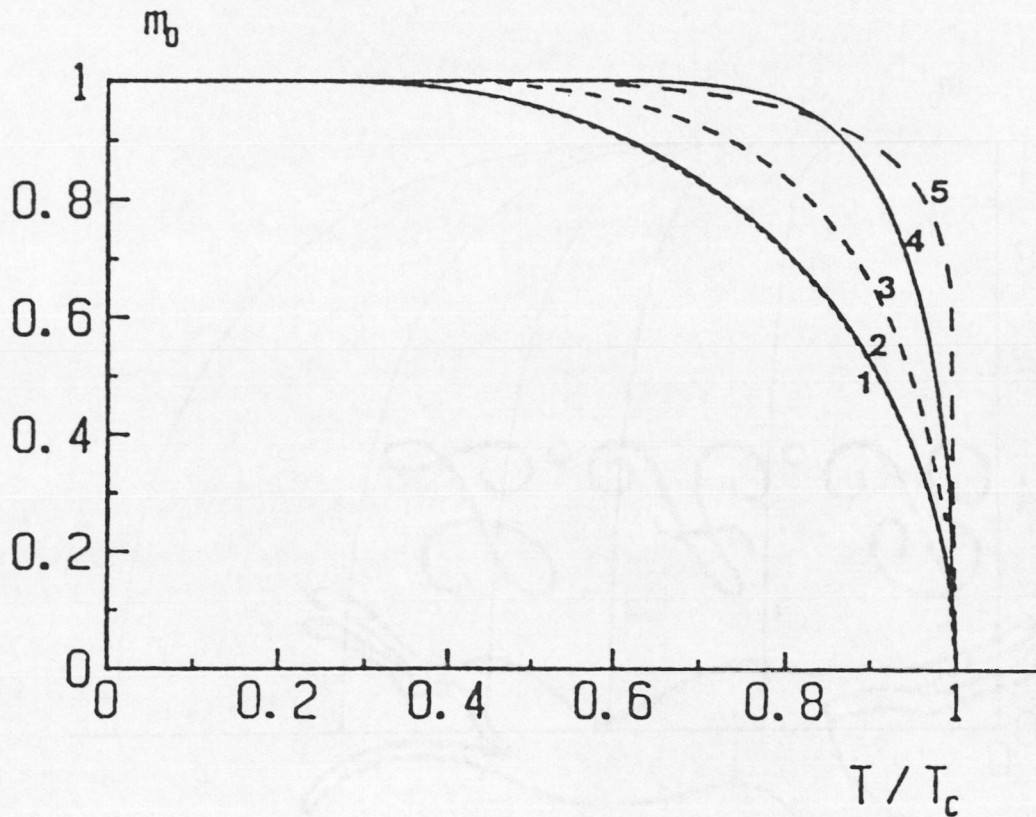


Fig. AI4. La magnetización espontánea dibujada en función de la temperatura, normalizada a la correspondiente temperatura crítica, para diferentes modelos : curva 1 (Bragg-Williams), curva 2 (nuestro modelo para $J_y/J_x = 20$), curva 3 (Bethe-Peierls), curva 4 (nuestro modelo para $J_y/J_x = 0.01$, curva 5 (Onsager). Notar que las curvas 1 (curva discontinua) y 2 (curva continua) son casi indistinguibles.

vamos la existencia de un comportamiento lineal cuando $\Gamma > 3$.

El exponente crítico β de la magnetización espontánea, definido :

$$m_0 \sim B_0 (-\epsilon)^\beta \left[1 + B(-\epsilon)^\theta + \dots \right], \quad T \rightarrow T_c^- \quad (\text{AI2.15})$$

donde $\theta > 0$ y $\epsilon \equiv T/T_c - 1$, puede verse que vale $1/2$, y que

$$B_0^2 = 2(1 + 4J_x \beta_c) / \beta_c^2 J_y^2 \left[\exp(8\beta_c J_x) - 1/3 \right]. \quad (\text{AI2.16})$$

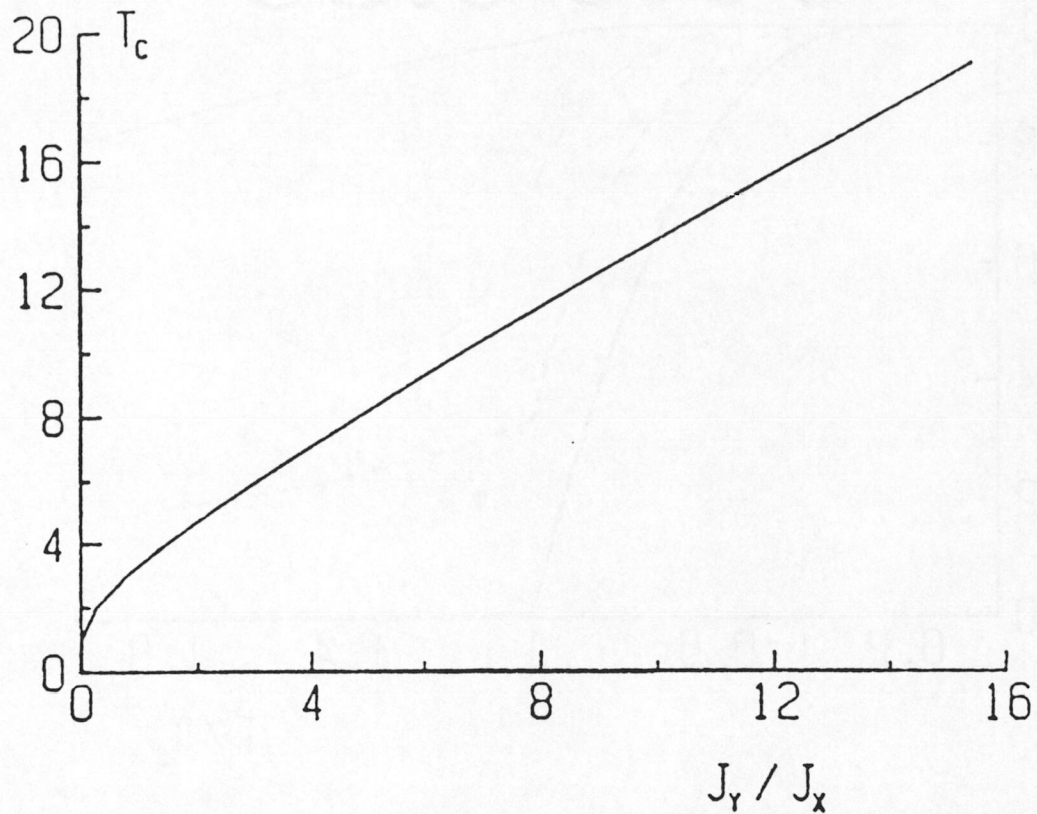


Fig. AI5. Dependencia de la temperatura crítica T_c en la relación J_y/J_x , de acuerdo con la ecuación (AI2.14).

Este hecho indica un comportamiento crítico clásico de este modelo (un hecho que era ya obvio de la observación de la figura AI4 para Γ grande) para todos los valores finitos de Γ . Este comportamiento clásico se confirma al calcular otros exponentes críticos; por ejemplo, el exponente que caracteriza a la isoterma crítica, δ , definido

$$h \sim D|m|^\delta, \quad T = T_c, \quad (\text{AI2.17})$$

se sigue después de algo de álgebra que es $\delta = 3$, y

$$D = J_y (3 + \beta_c^2 J_y^2) / 6; \quad (\text{AI2.18})$$

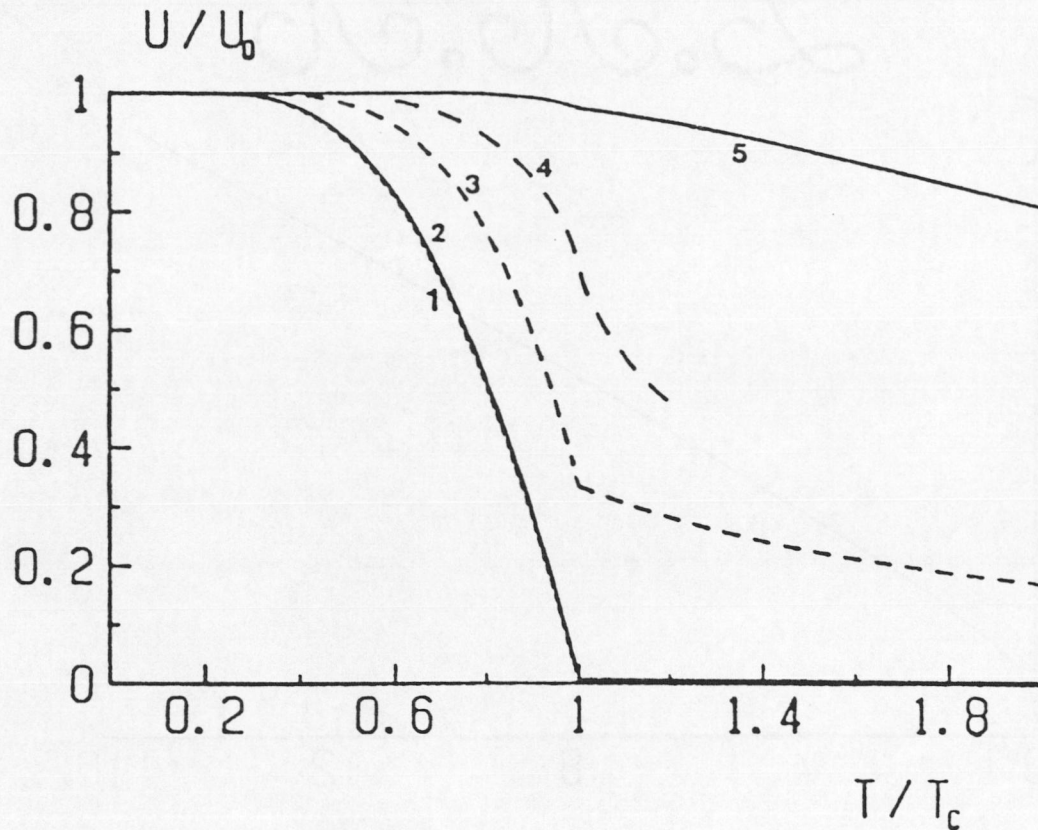


Fig. AI6. La energía por espín, normalizada a su valor a temperatura cero, dibujada en función de la temperatura, normalizada a su temperatura crítica correspondiente, para los mismos modelos que en la figura AI4.

notar que hay una dependencia oculta en J_x a través de β_c .

La densidad de energía, por otra parte, está dada por

$$\langle e \rangle = -\partial \ln \lambda_1 / \partial \beta \quad (\text{AI2.19})$$

Así, para $T > T_c$ y $h = 0$ obtenemos:

$$\langle e \rangle = -2J_x \tanh(2\beta J_x) \quad , \quad T > T_c \quad , \quad (\text{AI2.20})$$

y

$$C_V = \frac{\partial \langle e \rangle}{\partial T} = \frac{4J_x^2}{KT^2} \text{sech}^2(2\beta J_x) \quad , \quad T > T_c \quad , \quad (\text{AI2.21})$$

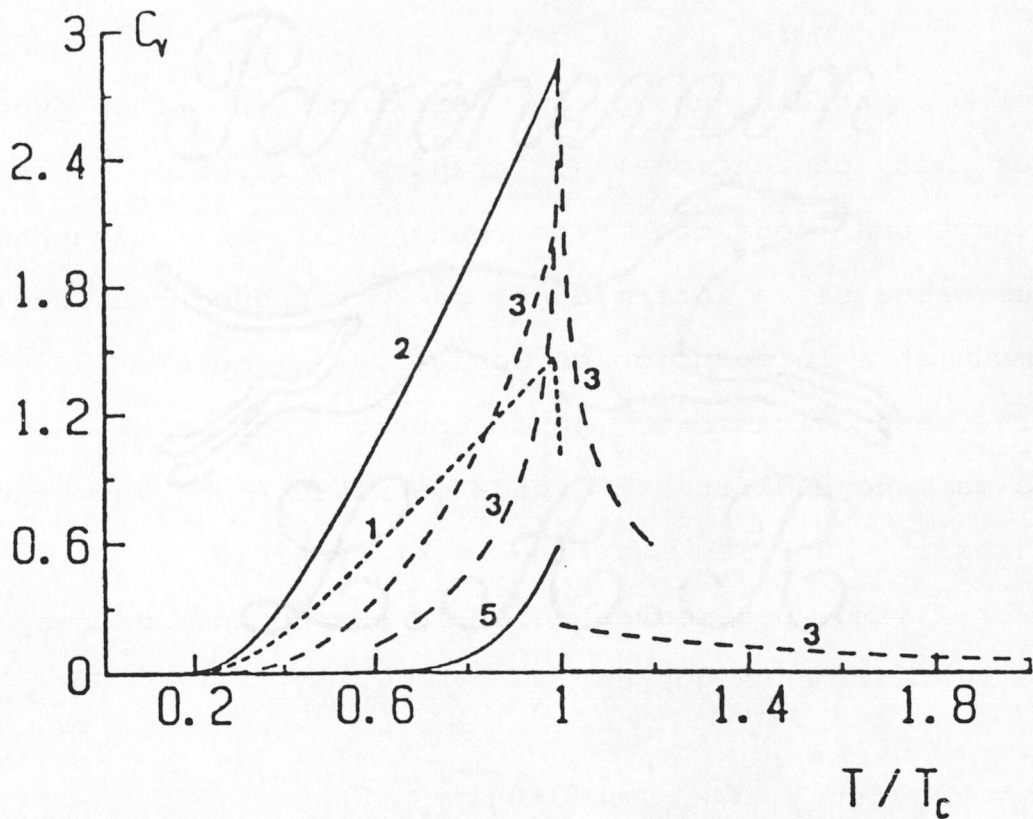


Fig. AI7. El calor específico a campo cero dibujado en función de la temperatura, normalizada respecto a la temperatura crítica correspondiente, para los mismos modelos que en la figura AI4. Notar que el eje vertical esta en unidades absolutas.

Lo cual era ya esperado puesto que el Hamiltoniano (AI2.1) se reduce, para $T > T_c$ ($m_0 = 0$), al del caso unidimensional. Por el contrario, las expresiones correspondientes para $T < T_c$ son menos triviales. Así, uno obtiene para $T < T_c$:

$$\langle e \rangle = -2J_x m \operatorname{ctanh}(\beta J_y m) - J_y m^2 + 4J_x m^2 \cosh(4\beta J_x) e^{-4\beta J_x} \times \left\{ \sinh(\beta J_y m) \left[m \cosh(\beta J_y m) + \sinh(\beta J_y m) \right] \right\}^{-1} \quad (\text{AI2.22})$$

coincidiendo con (AI2.20) en $T=T_c$. Las figuras AI6 y AI7 ilustran la conducta de la energía y del calor específico respectivamente. Otra vez, se observa que, usando Γ como

parámetro ajustable uno puede aproximarse a la conducta de modelos más convencionales: grandes valores de Γ conducen otra vez a una conducta tipo Bragg-Williams, mientras que valores pequeños e intermedios de Γ pueden reproducir aproximadamente la solución de Onsager y el modelo de Bethe-Peierls respectivamente; por supuesto, un valor dado de Γ afecta de manera diferente a cada magnitud (como se sigue de los casos $\Gamma = 0.01$ en las figuras AI4 y AI6).

Por último, podemos estudiar la susceptibilidad magnética; se ve fácilmente que es

$$\chi = \beta m (1-m^2) \left[\tanh \left\{ \beta (J_v m + h) \right\} - \beta J_v m \right]^{-1} \quad (\text{AI2.23})$$

y que su conducta crítica está caracterizada por el exponente crítico $\gamma = 1$.

I.3. Interacciones antiferromagnéticas.

El modelo definido en la sección I.2. puede ser estudiado también en el caso $J_x < 0$. Sin embargo, el parámetro de orden local m_i necesita entonces un tratamiento específico. Así pues, escribimos en lugar de las ecuaciones (AI2.5) y (AI2.6) :

$$Z_j = \sum_{\{s_{ij}\}} L^{(1)}(s_{1j}, s_{2j}) L^{(2)}(s_{2j}, s_{3j}) \dots \dots \dots L^{(N)}(s_{Nj}, s_{1j}) \quad (\text{AI3.1})$$

y

$$L^{(i)}(\sigma, \sigma') = \exp \left\{ 2\beta J_x \sigma \sigma' + (\beta J_y / 2) [\sigma m_i + \sigma' m_{i+1}] \right\} \quad (\text{AI3.2})$$

donde ahora $m_i = m_o$ para todas las i impares y $m_i = m_e$ para todas las i pares. Esto es, uno tiene ahora dos tipos de matrices de transferencia:

$$L_{m_o(e)} = \begin{pmatrix} \exp(2\beta J_x + M^+) & \exp(-2\beta J_x + M^-) \\ \exp(-2\beta J_x - M^-) & \exp(2\beta J_x - M^+) \end{pmatrix} \quad (\text{AI3.3})$$

donde $M^+ \equiv (\beta J_y / 2)(m_o + m_e)$, $M^- \equiv (\beta J_y / 2)(m_o - m_e)$, y la ecuación (AI3.1) se convierte en:

$$Z_j = \text{Tr} \left[\left(\underset{m_o}{L_o} \underset{m_e}{L_e} \right)^{N/2} \right] \quad (\text{AI3.4})$$

Al igual que en la anterior sección, la densidad de energía libre en el límite termodinámico es

$$a = -(2\beta)^{-1} \ln \lambda'_j \quad (\text{AI3.5})$$

donde λ'_j representa el valor propio más grande de la matriz $\underset{m_o}{L_o} \underset{m_e}{L_e}$, esto es

$$\lambda'_j = e^{4\beta J_x} \cosh[\beta J_y (m_o + m_e)] + e^{-4\beta J_x} \cosh[\beta J_y (m_o - m_e)] + g(J_x, J_y, m_o, m_e)^{1/2} \quad (\text{AI3.6})$$

donde

$$g(J_x, J_y, m_o, m_e) = e^{8\beta J_x} \sinh^2[\beta J_y (m_o + m_e)] + e^{-8\beta J_x} \sinh^2[\beta J_y (m_o - m_e)] + \cosh(2\beta J_y m_o) + \cosh(2\beta J_y m_e) + 2 \quad ; \quad (\text{AI3.7})$$

Uno puede convencerse de que la expresión más general (AI3.6) se reduce a la (AI2.10) cuando $m_0 = m_e$ (el caso considerado en la sección I.2).

Supondremos en lo que queda de sección que $J_x < 0$, $J_x = -|J_x|$; la conducta del sistema puede entonces ser descrita usando los parámetros de orden par e impar para campo igual a cero,

$$m_0(e) = (\beta J_y)^{-1} \frac{\partial \ln \lambda_1'}{\partial m_0(e)} \quad (\text{AI3.8})$$

respectivamente. Utilizando la ecuación (AI3.6) en (AI3.8), obtenemos

$$m_0(e) = \left\{ e^{-4\beta|J_x|} \sinh [\beta J_y (m_0 + m_e)] + e^{4\beta|J_x|} \times \sinh [\beta J_y (m_0 - m_e)] \right\} g(-|J_x|, J_y, m_0, m_e)^{-1/2} \quad (\text{AI3.9})$$

Como era esperado, uno obtiene la misma temperatura crítica T_c que en el caso ferromagnético, y las conductas límites $m_0 \rightarrow 1$ y $m_e \rightarrow -1$ cuando $T \rightarrow 0$ para Γ finita, y $m_0 \rightarrow 0$, $m_e \rightarrow 0$ cuando $\Gamma \rightarrow 0$. Se ve fácilmente de la ecuación (AI3.9) que $m_0 = -m_e$ lo cual corresponde en general a un cierto comportamiento antiferromagnético caracterizado por la existencia de órdenes diferentes entre columnas verticales consecutivas.

I.4. Sistema multidimensional en la aproximación de campo coherente.

Un caso sencillo del modelo estudiado en la sección I.2 se corresponde con el Hamiltoniano:

$$H = - \sum_{ij} (J_x s_{ij} \tilde{m}_j + J_y s_{ij} m_i) \quad (\text{AI4.1})$$

donde

$$m_i = N^{-1} \sum_j \langle s_{ij} \rangle, \quad \tilde{m}_j = N^{-1} \sum_i \langle s_{ij} \rangle \quad (\text{AI4.2})$$

Esto equivale a suponer un acoplamiento de campo coherente a lo largo de los ejes \hat{x} e \hat{y} . Como antes, uno obtiene inmediatamente las condiciones:

$$m_i = (N\beta J_y)^{-1} \frac{\partial \ln Z}{\partial m_i}, \quad \tilde{m}_j = (N\beta J_x)^{-1} \frac{\partial \ln Z}{\partial \tilde{m}_j}, \quad (\text{AI4.3})$$

la función de partición:

$$Z = \prod_{ij} \{ 2 \cosh [\beta (J_x \tilde{m}_j + J_y m_i)] \} \quad (\text{AI4.4})$$

y, consecuentemente,

$$m_i = N^{-1} \sum_j \tanh [\beta (J_x \tilde{m}_j + J_y m_i)] \quad , \quad (\text{AI4.5})$$

$$m_j = N^{-1} \sum_i \tanh [\beta (J_x \tilde{m}_j + J_y m_i)] \quad , \quad (\text{AI4.6})$$

La densidad de energía libre viene dada entonces por:

$$\alpha = -(\beta N^2)^{-1} \ln Z = -(\beta N^2)^{-1} \sum_{ij} \ln \left[2 \cosh [\beta (J_x \tilde{m}_j + J_y m_i)] \right] . \quad (\text{AI4.7})$$

Como era esperado, cuando uno hace $\Gamma = 0$, el sistema se reduce a una colección de sistemas unidimensionales con magnetizaciones dadas por

$$\tilde{m}_j = \tanh (\beta J_x \tilde{m}_j) \quad (\text{AI4.8})$$

y

$$m_i = N^{-1} \sum_j \tilde{m}_j \quad (\text{AI4.9})$$

mientras que si suponemos homogeneidad en el sentido de que $m_i = m$, $\tilde{m}_j = m$, $\tilde{m} = m$, obtenemos

$$m = \tanh [\beta (J_x + J_y) m] \quad (\text{AI4.10})$$

que no es más que el familiar resultado de campo medio.

Se sigue una situación más interesante si estudiamos una familia de soluciones:

$$m^{(1)} = m_1 = m_3 = \dots \quad , \quad m^{(2)} = m_2 = m_4 = \dots \quad ; \quad (\text{AI4.11})$$

suponiendo ahora que $\tilde{m}_j = m$ para toda j , obtenemos

$$\tilde{m} = (m^{(1)} + m^{(2)}) / 2 \quad , \quad (\text{AI4.12})$$

donde

$$m^{(i)} = \tanh [\beta (J_x \tilde{m} + J_y m^{(i)})] \quad , \quad i=1,2 \quad (\text{AI4.13})$$

El caso $\tilde{m} = 0$ corresponde a una cierta estructura antiferromagnética $m^{(1)} = -m^{(2)}$, y el caso $\tilde{m} = m$ da lugar a $m^{(1)} = m^{(2)} = m$; si sabemos que la energía interna viene dada por

$$\langle e \rangle = -J_x N^{-1} \sum_j \tilde{m}_j^2 - J_y N^{-1} \sum_i m_i^2 \quad (\text{AI4.14})$$

en un caso general, entonces obtenemos para los dos casos anteriores: $\langle e \rangle = -J_y m^{(1)2}$ y $\langle e \rangle = -(J_x + J_y) m^2$, respectivamente. Por otra parte, se puede demostrar que la densidad de energía libre es más grande para esta estructura antiferromagnética que para la ferromagnética, luego esa solución será, todo lo más, metaestable.

El modelo también presenta soluciones correspondientes a las condiciones

$$\begin{aligned} m^{(1)} &= m_i = m_{i+r} = m_{i+2r} = \dots \\ m^{(2)} &= m_{i+1} = m_{i+r+1} = \dots \\ &\vdots \\ m^{(r)} &= m_{i+r-1} = \dots \end{aligned} \quad (\text{AI4.15})$$

donde obtenemos

$$m^{(i)} = N^{-1} \sum_j \tanh [\beta (J_x \tilde{m}_j + J_y m^{(i)})] \quad (\text{AI4.16})$$

y

$$\tilde{m}_j = r^{-1} \sum_{k=1}^r m^{(k)} ; \quad (\text{AI4.17})$$

entonces $\tilde{m} = 0$ implica $\sum_k m^{(k)} = 0$ y, por lo tanto, $m^{(i)} = 0$ es la única solución cuando r es impar, mientras que para r par podemos tener ciertas estructuras antiferromagnéticas con periodicidad r . La correspondiente densidad de energía libre,

$$a = -kT \ln 2 + r^{-1} \sum_{r'=1}^r \ln \left\{ \cosh \left[\beta (J_x \tilde{m} + J_y m^{(r')}) \right] \right\} ; \quad (\text{AI4.18})$$

es tal que, $\partial a / \partial \tilde{m} = 0$ y $\partial^2 a / \partial \tilde{m}^2 > 0$ y por lo tanto las soluciones son estables localmente.

Finalmente, parece interesante notar que el modelo definido a través del Hamiltoniano (AI4.1) puede fácilmente ser generalizado a espacios d -dimensionales; en este caso el Hamiltoniano generalizado es

$$H = - \sum_{\alpha=1}^d \sum_{i_1=1}^N \dots \sum_{i_d=1}^N J_{\alpha} S_{i_1 \dots i_d} m_{i_{\alpha}} \quad (\text{AI4.19})$$

con

$$m_{i_{\alpha}} = N^{-(d-1)} \sum_{i_1} \dots \sum_{i_{\alpha-1}} \sum_{i_{\alpha+1}} \dots \sum_{i_d} \langle S_{i_1 \dots i_d} \rangle ; \quad (\text{AI4.20})$$

La energía interna es

$$\langle e \rangle = -N^{-1} \sum_{\alpha=1}^d J_{\alpha} \sum_{i_{\alpha}} m_{i_{\alpha}}^2 ; \quad (\text{AI4.21})$$

la función de partición es

$$Z = \prod_{i_1} \dots \prod_{i_d} \left\{ 2 \cosh \left[\beta \sum_{\alpha=1}^d J_{\alpha} m_{i_{\alpha}} \right] \right\}, \quad (\text{AI4.22})$$

y la magnetización local es

$$m_{i_{\alpha'}} = N^{-(d-1)} \sum_{i_1} \dots \sum_{i_d} \tanh \left(\beta \sum_{\alpha=1}^d J_{\alpha} m_{i_{\alpha}} \right) \quad (\text{AI4.23})$$

donde la suma sobre $i_{\alpha'}$ ha sido eliminada, y $\alpha' = 1, \dots, d$. Las soluciones específicas en este caso pueden ser investigadas como en los anteriores casos.

REFERENCIAS

- Bates J.B., Wang J. y Dubney N.J. "Solid electrolytes: the beta aluminas". *Physics Today*, July 1982, p.46
- Bausch R., Janssen H.K. y Wagner H. "Renormalised Field Theory of Critical Dynamics". *Z. Phys.* B24 113-127 (1976).
- Bernasconi J., Beyeler H.U., Sträsler S. y Alexander S. "Anomalous Frequency-Dependent Conductivity in Disordered One-Dimensional Systems". *Phys. Rev. Lett.* 42 819-822 (1979).
- Binder K. in Phase Transitions and Critical Phenomena vol 5b., C.Domb and M.S. Green eds., Academic Press, London 1976.
- Boldrighini C., De Masi A., Pellegrinotti A. y Presutti E. "Collective Phenomena in Interacting Particle Systems". Preprint.
- Boyce J.B. y Huberman A.B. *Phys. Reports* 51, 527 (1980).
- Brüesch P., Hibma T. y Bührer W. "Dynamics of ions of two dimensional superionic conductor AgCrS". *Phys. Rev. B* 27 5052-5061 (1983).
- De Groot S.R. y Mazur P. Nonequilibrium Thermodynamics Dover, New York 1984.
- De Masi A., Ferrari P.A. y Lebowitz J.L. "Rigorous Derivation of Reaction Diffusion Equations with Fluctuations". *Phys. Rev. Lett.* 55 1947-1949 (1985).

- De Masi A., Presutti E. y Vares E. "Escape from the Unstable Equilibrium in a Random Process with Infinitely Many Interacting Particles". J. of Stat. Phys. 44 645-696 (1986).
- De Masi A., Ferrari P.A. y Lebowitz J.L. "Reaction Diffusion Equations for Interacting Particle Systems". J. Stat. Phys. 44 589-644 (1986).
- De Masi A., Presutti E. y Scacciatelli E. "The Weakly Asymmetric Simple Exclusion Process". Carr Reports in Mathematical Physics. February 1987, 4187.
- Dickman R. "Kinetics Phase Transitions and Tricritical Point in an Ising Model with Competing Dynamics". Phys. Lett. A.
- Dickman R. "Kinetic Phase Transitions in a surface reaction model: mean field theory". Phys. Rev. A 34 4246 (1986).
- Dieterich W., Peschel I. y Schneider W.R. "Hopping Conductivity of Interacting Particles". Comm. on Phys. 2 175-179 (1977).
- Dieterich W., Fulde P. y Peschel I. "Theoretical models for superionic conductors". Adv. in Phys. 29 527-605 (1980).
- Garrido P.L. y Marro J. "Exactly soluble Ising models with anisotropic interactions and arbitrary external magnetic field". J. of Physics A 20 1829-1838 (1987).
- Garrido P.L. y Marro J. "Ising Models with Anisotropic Interactions : Stationary Nonequilibrium States with a Non-uniform Temperature Profile". Physica A 144 , 585-603 (1987).

- Garrido P.L. y Marro J. "Stationary nonequilibrium states in the Ising model with locally competing temperatures". J. of Stat. Phys. 49 551-568 (1987).
- Glauber R.J. "Time-Dependent Statistics of the Ising Model". J. of Mathematical Phys. 4 294-307 (1963).
- Gawedzki K. y Kupiainen A. preprint.
- Geller S. ed. Solid Electrolytes. Springer-Verlag, Berlin 1977.
- González-Miranda J., Garrido P.L., Marro J. y Lebowitz J.L. "Nonequilibrium Phase Diagram of Ising Model with Competing Dynamics". Phys. Rev. Lett. 59 1934-1937 (1987).
- Gurevich Y.Y. y Kharkats Y. Physics Reports 139 201 (1986).
- Jansen H.K. "On a Lagrangean for Classical Field Dynamics and Renormalization Group Calculations of Dynamical Critical Properties". Z. Phys. B23 377-380 (1976).
- Jansen H.K. y Schmittmann, B. "Field Theory of Critical Behavior in Driven Diffusive Systems". Z. Phys B 64 , 503-514 (1986).
- Katz S., Lebowitz J.L. y Spohn H. "Phase Transitions in Stationary Nonequilibrium States of Model Lattice Systems". Phys. Rev. B 28 1655-1658 (1983).
- Katz S., Lebowitz J.L. y Spohn H. "Nonequilibrium Steady States of Stochastic Lattice Gas Models of Fast Ionic Conductors". J. of Stat. Phys. 34 497-537 (1984).
- Kawasaki K. in Phase Transitions and Critical Phenomena vol. 2., C. Domb y M.S. Green eds. Academic Press, London 1972, pp. 443-501.

- Kikuchi R. "A theory of cooperative Phenomena". Phys. Rev. 81, 988 (1951).
- Kramers H.A. and Wannier G.H. Phys.Rev.. 60 252-263 (1941).
- Krugg J. , Lebowitz J.L., Spohn H. y Zhang M.Q. "The Fast Rate Limit of Driven Diffusive Systems". J. of Stat. Phys. 44 , 535-565 (1986).
- Labarta A, Marro J., Garrido P.L. y Toral R. "Finite-size behavior of short-ranged order". Preprint.
- Lebowitz J.L. Privates notes (1985).
- Lebowitz J.L. "Microscopic Origin of Hydrodynamic Equations: Derivation and Consequences . Talk 16th. IUPAP Conference on Statistical Mechanics 1986, also in Physica 140A 232 (1986).
- Leung K. y Cardy J.L. "Field Theory of Critical Behavior in a Driven Diffusive System". J. Stat. Phys. 44 567-588 (1986).
- Liggett T.M. Interacting Particle Systems . Springer-Verlag, Berlin 1985.
- Mahan G.D. y Roth W.L. eds. Superionic Conductors .Plenum Press. New York. 1976.
- Marro J., Lebowitz J.L., Spohn H. y Kalos M. "Nonequilibrium Phase Transition in Stochastic Lattice Gasses: Simulation of a Three Dimensional System . J. of Stat. Phys. 38 725-733 (1985).
- Marro J., Vallés J.L. y González-Miranda J.M. "Critical behavior in nonequilibrium Phase Transitions". Phys. Rev. B 35 3372 (1987).

- Marro J. y Vallés J.L. "Nonequilibrium Discontinuous Phase Transitions in a Fast Ionic Conductor Model: Coexistence and spinodal lines". J. of Stat. Phys. 49 121-137 (1987).
- Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller A.H. y Teller E. "Equation of State Calculations by Fast Computing Machines". J. of Chemical Physics 21 1087-1092 (1953).
- Mouritsen O.G. Computer Studies of Phase Transitions and Critical Phenomena . Springer-Verlag, Berlin 1984.
- Murch G.E. y Thorn R.J. "Computer simulations of Ionic conductivity. Application to -alumina". Philosophical Magazine 36 529-539 (1977).
- Onsager L. Phys.Rev. 65 117 (1944).
- Olson M.A. y Adelman S.A. "Dynamics of Superionic conduction: a generalized Langevin Equation Study of Mobile Cation Channeling and activated barrier crossing in -AgI". Preprint 1985.
- Onuki A. y Kawasaki K. "Nonequilibrium Steady State of Critical Fluids Under Shear Flow: A Renormalization Group Approach" . Annals of Phys. 121 , 456-528 (1979).
- Onuki A., Yamazaki K., Kawasaki K. "Light Scattering by Critical Fluids Under Shear Flow". Ann. of Phys. 131 217-242 (1981).
- Onuki A. "Turbulent Critical Binary Mixtures". Phys. Lett. 101A 286-290 (1984).
- Pathria R.K. Statistical Mechanics . Pergamon, Oxford 1977.

- Richards P.M. "Theory of One-Dimensional Hopping Conductivity and Diffusion". Phys. Rev. B 16 1393-1409 (1977).
- Richards P.M. "Hopping Conductivity in a Quasi-One-Dimensional Lattice Gas With Three Dimensional Ordering". Phys. Rev. B 18 945-954 (1978).
- Salamon M.B. ed. Physics of Superionics Conductors . Springer-Verlag. Berlin 1979.
- Sato H. y Kikuchi R. "Cation Diffusion and Conductivity in Solid Electrolytes. I". J. of Chem. Phys. 55 677-702 (1971).
- Sato H. y Kikuchi R. "Cation Diffusion and Conductivity in Solid Electrolytes. II. Mathematical Analyses". J. of Chemical Physics 55 702-715 (1971).
- Singer H. y Peschel I. "Influence of Interactions on the Hopping Conductivity of Classical Particles". Z.Physick B 39 333-338 (1980).
- Smart J.S. Effective Field Theories of Magnetism . Saunders, Philadelphia 1966.
- Stanley H.E. Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena . Clarendon Press, Oxford 1971.
- Thompson C.J. Mathematical Statistical Mechanics . Princeton Univ. Press, Princeton, N.Y. 1972.
- Vallés J.L. y Marro J. "Nonequilibrium Phase Transitions in Stochastic Lattice Systems: Influence of the Hopping Rates". J. of Stat. Phys. 43 441-461 (1986).

- Vallés J.L. y Marro J. "Nonequilibrium Second Order Phase Transitions in Stochastic Lattice Systems: A Finite Size Scaling Analysis in Two Dimensions" . J. of Stat. Phys. 49 89-119 (1987).
- Van Beijeren H. y Schulman L.S. "Phase Transitions in Lattice Gas Models Far from Equilibrium". Phys. Rev. Lett. 53 806-809 (1984).
- Van Beijeren. Private communication. 1983.
- Zhang M.Q. "Exact results on the steady state of a hopping model". Phys. Rev. A 35 2266-2275 (1987).
- Ziff R.M., Gulari E. y Barshad Y. "Kinetic Phase Transitions in an Irreversible Surface-Reaction Model". Phys. Rev B 56 2553- 2556 (1986).
- Ziman J.M. Models of Disorder . Cambridge Univ. Press, Cambridge 1979.