



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

PRINCIPIOS VARIACIONALES Y GRUPO DE RENORMALIZACION EN EL ESTUDIO DEL SISTEMA DE PERCOLACION EN UNA DIMENSION

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE: MAESTRO EN CIENCIAS QUIMICAS (FISICOQUIMICA)

P R E S E N T A : ESTELA MAYORAL VILLA





Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

Índice General

Prefacio	iii
Agradecimientos	vii
1 Antecedentes	1
1.1 Introducción	1
1.1.1 Transiciones de Fase y Fenómenos Críticos	1
1.1.2 Longitud de Correación	2
1.2 Transiciones de Fase Continuas y Fenómenos Críticos	3
1.2.1 Parámetro de Orden	8
1.2.2 Exponentes Críticos	9
1.3 Hipótesis de Escalamiento	10
1.3.1 Teoría de Campo Medio de Landau	11
1.3.2 El Concepto de Escalamiento	13
1.3.3 Escalamiento de la Energía Libre	16
1.4 Grupo de Renormalización	18
1.4.1 Renormalización en Espacio Real	19
1.4.2 Renormalizando la Malla	20
1.4.3 Variables de Bloque	21
1.4.4 Renormalización del Hamiltoniano	22
1.4.5 Puntos Fijos	24
1.4.6 El Cálculo de ν	28
1.4.7 Renormalización de B , M , χ y G_c	31
1.4.8 Los Exponentes Críticos en $T = T_c$	34
1.4.9 Los Exponentes Críticos para $T \neq T_c$	36
1.4.10 Las Leyes de Escalamiento	40
1.5 Entropía y Principios Variacionales	43
1.5.1 Principio de Máxima Entropía	43

Prefacio

El objetivo principal de este trabajo de tesis es el planteamiento, estudio y aplicación de un método variacional fundamentado en las características extremales de la entropía, para abordar y resolver problemas donde es posible emplear la teoría de grupo de renormalización (GR) esto es, sistemas donde existe una invariancia ante las transformaciones de escala.

Como es sabido, la teoría de grupo de renormalización ha aclarado muchos misterios en diversos problemas de este tipo, tanto en el campo de dinámica no lineal como en el de transiciones de fase, en temas que van desde congelamiento, ferromagnetismo, vidrios de espín, autoorganización, etc. Sin embargo, y aún cuando el GR ha tenido un gran auge durante los últimos años, (debido no sólo a que ha mostrado ser una herramienta para estudiar exitosamente este tipo de sistemas, sino que además ha originado una nueva forma de pensar acerca de ellos) en muchas ocasiones su uso se ha limitado a una complicada técnica para la solución de muchos problemas específicos.

Así surge el interés de esta investigación, cuyo objetivo radica en tratar de aprovechar la característica de que la entropía es un funcional que alcanza valores extremos, y plantear una posible relación entre estos puntos extremos y los puntos fijos que surgen de la aplicación sucesiva de la transformación de grupo de renormalización a un sistema dado para que, con base en ello, se pueda sugerir de una manera eficaz y sistemática la forma adecuada que deberá presentar la transformación de grupo que ha de ser empleada para estudiar dicho sistema.

Para el desarrollo de este trabajo se escogió el problema de percolación en una dimensión debido a que, además de ser un modelo que ha mostrado tener varias aplicaciones interesantes en el área de la física y de la química, presenta la característica de invariancia ante las transformaciones de escala necesaria para la aplicación del GR. Aunado a esto se encuentra el hecho de que, por ser un fenómeno que ha sido ampliamente estudiado, se conocen

soluciones exactas para ciertas variantes del problema las cuales pueden ser ampliadas y de este modo ayudar de una manera clara a la corroboración de nuestros planteamientos.

En esta investigación se aborda el sistema de percolación en una dimensión incluyendo dos de sus variantes, la de percolación por sitios y la de percolación por enlaces.

Para el caso de percolación por sitios se llevó a cabo el estudio del sistema en una dimensión para el caso general, donde los sitios se encuentran conectados a vecinos n -ésimos (interacción a n -ésimos vecinos). Lo anterior fue hecho retomando y corroborando las expresiones generales reportadas para la probabilidad que describe a este grupo de sistemas y para otras cantidades importantes como energía libre y parámetro de orden. Así mismo se llevó a cabo el cálculo de los exponentes críticos y de la probabilidad crítica de percolación de una manera analítica. Con esto, se establecieron las bases para llevar a cabo el resto del trabajo de investigación.

A partir de estas expresiones y conociendo de una manera exacta algunas cantidades importantes del sistema, se calculó la entropía asociada al sistema, y se planteó la transformación de grupo de renormalización para los sistemas con interacciones a primeros, segundos y terceros vecinos, proponiéndose además la forma general de la transformación para el caso de interacción a n -ésimos vecinos.

Para el caso de percolación por enlaces se llevó a cabo el estudio de dos sistemas con distribuciones de probabilidad distintas asociadas con la presencia de enlaces. Abordamos primero una variante del caso en el que la probabilidad de que exista un enlace decae con una ley de potencia, por lo que la probabilidad tiende asintóticamente a cero cuando $r \rightarrow \infty$ donde r representa la distancia entre dos sitios de la malla, el cual corresponde al caso de interacción a primeros vecinos. La variante introducida corresponde a una trayectoria no crítica donde se presenta una probabilidad truncada, que decae primero como ley de potencia y a partir de cierto valor de r se hace cero. El segundo caso estudiado corresponde a una distribución de probabilidad crítica la cual presenta, para un cierto intervalo de valores de r , un decaimiento arbitrario. Posteriormente a partir de un cierto valor de r un comportamiento de ley de potencia usual. Este caso se estudió mediante la técnica de multiplicadores de Lagrange, encontrándose las condiciones donde la entropía tradicional y generalizada alcanzan sus puntos extremos. Posteriormente se realizó el planteamiento de la transformación de grupo de renormalización, que al ser aplicada permitió la obtención de los puntos fijos

y variables irrelevantes.

Con base en los resultados, se llevó a cabo el análisis de la forma de la función entropía encontrada en cada uno de los sistemas y se obtuvieron sus valores extremos, por otro lado, se identificaron los puntos fijos de la transformación de GR y se estableció la posible conexión entre estas cantidades.

Debido a que en el caso del sistema de percolación por enlaces en una dimensión con interacciones de largo alcance se ha encontrado que bajo ciertas condiciones la entropía presenta un comportamiento no extensivo, se hizo necesario agregar el estudio, para este caso, de la entropía generalizada (conocida como entropía de Tsallis), los resultados y el análisis de estos se presentan también.

En este trabajo de tesis, se incluye primero un capítulo de antecedentes donde se da una introducción breve a algunos conceptos importantes y fundamentos teóricos necesarios para el desarrollo del tema, abordando ideas como fenómeno crítico, hipótesis de escalamiento, grupo de renormalización, principios variacionales de la entropía y entropía generalizada.

En el capítulo tres se hace un planteamiento general del problema introduciendo conceptos y resultados conocidos para el caso de percolación en una dimensión con objeto de establecer las bases para el análisis y desarrollo del problema. Posteriormente se hace una descripción detallada de la técnica a seguir para obtener los resultados planteados en los objetivos.

En el capítulo cuatro se muestran los resultados para el fenómeno de percolación en una dimensión y posteriormente, en el capítulo cinco se presentan las conclusiones generadas del análisis de los resultados alcanzados en el desarrollo del trabajo.

Esta investigación se llevó a cabo en el Instituto de Física de la Universidad Nacional Autónoma de México, bajo la dirección del Dr. Alberto Robledo Nieto a quien deseo agradecer ampliamente su apoyo y guía para la realización de este trabajo.

Agradezco especialmente a la Dra. Carmen Varela Gilabert, por sus valiosos comentarios, observaciones y discusiones. Así mismo a la Dra. Jacqueline Quintana Hinojosa, a la Dra. Eugenia Corvera Poiré, al Dr. Luis Vicente Hinestroza y al Dr. Pablo Padilla Longoria por la minuciosa revisión de este trabajo de tesis.

Finalmente deseo agradecer al CONACyT y a la DGEP por el apoyo económico brindado durante mis estudios de maestría.

Agradecimientos

Desco agradecer especialmente al Dr. Alberto Robledo Nieto por todo el apoyo, las discusiones y enseñanzas que compartió conmigo durante el desarrollo de este trabajo, obviamente sin su ayuda esto no se hubiera realizado. También agradezco a la Dra. Carmen Varea Gilabert por su importante contribución en la parte final de este trabajo de tesis. A la Dra. Jaqueline Quintana Hinojosa , al Dr. Luis Vicente Hinestroza y a la Dra. Eugenia Corvera Poiré por revisar este trabajo. A mis profesores de maestría, en particular a el Dr. Auster Valderrama por todas sus enseñanzas y pláticas. A Enrique Hernández Lemus por toda su ayuda y asesorías.

Agradesco también a todos los que con su compañía me apoyaron durante mi maestría:

A papá y mamá por que esto también es mucho de su esfuerzo, a mis hermanos Margarita, Juan Manuel, Leopoldo, Patricia , por su gran apoyo y cariño. A mis pequeños sobrinos Teresita, Arturo, Braulio y Regina por alegrarme los días. Y por supuesto a mi cuñado Alberto . A mi Rulo por todo lo que hemos compartido y por ser mis mejores momentos. A sus padres Raúl y Rosa María por su ayuda y aprecio. A mis grandes amigos, Rafael, Mayra, Ana Lilia, Dulce, Perla, Victor Hugo, Jorge Tiburcio, José Luis, Rina, Maricela, Marina, Greys, Anel, Raúl S. , etc..., a los de la generación: de abajo... Rodrigo, Luis Alfredo y Julia . Otra vez a Raúl Alejandro Perusquia Flores por que no tengo palabras para agradecerle lo que hemos construido juntos...

...y ya...

Capítulo 1

Antecedentes

1.1 Introducción

En éste capítulo, introduciremos brevemente algunos de los conceptos e ideas importantes para el desarrollo de este trabajo de tesis.

1.1.1 Transiciones de Fase y Fenómenos Críticos

Hablemos primero de qué es una *transición de fase* y cómo se clasifican. La noción más simple de *fase* (que quiere decir “aparición” en griego) puede expresarse de la siguiente manera:

Fase es un estado de la materia que es uniforme en todas partes, tanto en su composición química como en su estado físico.

Ahora bien, cuando nos referimos a una transición de fase, entendemos simplemente que un cierto sistema termodinámico sufre un cambio de un estado uniforme a otro distinto.

La primera clasificación de transiciones de fase fue sugerida por Ehrenfest [5], [4]. De acuerdo a ésta, una *transición de fase de primer orden* es aquella en que la función molar de Gibbs, g , es continua pero sus derivadas como entropía $(\partial g / \partial T)_{P,T} = -s$, volumen $(\partial g / \partial P)_{T,T} = v$ o magnetización $(\partial g / \partial H)_{T,T} = m$ son discontinuas. Así pues, en lo que sigue, al hablar de transición de fase de primer orden nos referiremos a aquellas que presentan discontinuidades en las derivadas de primer orden de la energía libre y las llamaremos *discontinuas*. Por lo tanto habrá discontinuidad en s , v y m y, por lo general, se genera calor latente.

Análogamente una *transición de fase de segundo orden o continua* es una en la que g y sus primeras derivadas son continuas pero sus segundas derivadas son discontinuas. Similarmente una transición de orden superior puede ser definida por esta generalización. Nosotros nos referiremos en general a las transiciones de fase continuas como aquellas que presentan discontinuidades en las derivadas de orden superior a uno y presentan continuidad en las derivadas de la energía libre. De acuerdo a esto es claro que habrá continuidad en s , v y m a través del punto de transición y por lo general no se generará calor latente.

Los fenómenos que se presentan en este tipo de transiciones usualmente se denominan como *fenómenos críticos*.

1.1.2 Longitud de Correlación

Otro concepto importante que hay que poner en claro es lo que se conoce como *longitud de correlación*. A continuación se presenta una manera sencilla e ilustrativa de entender este concepto.

Supongamos que tomamos un pedazo de algún material y medimos algunas de sus propiedades macroscópicas, por ejemplo su densidad, compresibilidad o magnetización. Ahora dividámoslo en piezas mas pequeñas dejando sus variables externas, como presión y temperatura, constantes. Las propiedades macroscópicas de cada pedazo tendrán que ser las mismas que las de la pieza de material completa.

Lo mismo ocurrirá si repetimos el proceso varias veces hasta que, eventualmente, después de varias iteraciones, algo diferente debe suceder, pues sabemos que la materia esta hecha de átomos y moléculas cuyas propiedades individuales son diferentes de las del material que éstas constituyen.

La longitud de escala a la cual las propiedades del material original empiezan a cambiar significativamente con respecto a las de los pequeños pedazos se conoce como *longitud de correlación* del material y se denota generalmente como ξ_c .

En otras palabras, la longitud de correlación es la distancia a la que las fluctuaciones de los grados de libertad microscópicas se encuentran significativamente correlacionadas unas con otras.

Las fluctuaciones en dos sitios del material mas allá de esta longitud de correlación se encuentran prácticamente desconectadas y por tanto, no hay diferencias apreciables en las propiedades macroscópicas del material si se han separado completamente los pedazos a una distancia mayor que aquella.

Usualmente la longitud de correlación es del orden de algunos espacios interatómicos, sin embargo, el valor real de la longitud de correlación depende de las condiciones externas que determinan el estado del sistema, tales como temperatura y presión.

1.2 Transiciones de Fase Continuas y Fenómenos Críticos

El término *fenómenos críticos* se refiere a las propiedades termodinámicas de los sistemas cerca de la temperatura crítica T_c de una transición de fase de segundo orden [13]. Existe una gran cantidad de sistemas que exhiben transiciones de fase de segundo orden. En este tipo de transiciones el sistema se aproxima, continuamente a un estado en el que las correlaciones de escala se vuelven infinitas. La explicación siguiente ayudará a dejar mas claro esta idea.

Existen básicamente dos posibles formas en las que puede ocurrir una transición de fase [7]. En el primer escenario, los dos o mas estados presentes coexisten también en el punto crítico, aún cuando son distintos entre si pues tienen propiedades macroscópicas diferentes. Sin embargo, ligeramente alejados del punto crítico, existe una fase única cuyas propiedades se encuentran conectadas de una forma continua a una de las fases coexistentes en el punto crítico. Esperamos entonces, encontrar una discontinuidad en el comportamiento de varias propiedades termodinámicas al encontrarnos en el punto crítico y pasar de una fase estable a otra. Como se ha dicho estas transiciones son llamadas *discontinuas* o de *primer orden*. La longitud de correlación de tales transiciones de primer orden es finita. Un ejemplo bien conocido de este tipo de transición de fase es la fusión de un sólido tridimensional [7].

La otra forma en que puede ocurrir la transición, es mediante una transición *continua* o de *segundo orden* donde la longitud de correlación se hace infinita. Las fluctuaciones se encuentran correlacionadas sobre todas las escalas de distancia lo que fuerza al sistema a ser una fase crítica única. En una transición continua las dos o más fases de cada lado del punto crítico deben de ser idénticas conforme estas se aproximan. No sólo la longitud de correlación diverge en un modo continuo conforme nos aproximamos al punto crítico, si no que también las diferencias en varias cantidades termodinámicas de las fases, como la diferencia de densidades entre las fases o la magnetización, se

van a cero uniformemente.

Un ejemplo de una transición de fase continua puede observarse en la conversión del hierro de su forma paramagnética (cuando no hay magnetización) a su forma ferromagnética (cuando el material se encuentra magnetizado) [14]. La temperatura a la cual se presenta esta transición se conoce como temperatura de Curie T_c . En un ferromagneto, hay dos parámetros externos que pueden ser variados: la temperatura y el campo magnético aplicado H . En el caso más simple, la magnetización local se encuentra restringida a estar paralela o antiparalela con un eje particular. El diagrama de fase es sencillo y se presenta en la figura 1.1. Todas las cantidades termodinámicas son funciones analíticas de T y H excepto sobre la línea de $H = 0, T \leq T_c$. A través de la línea $T < T_c$, la magnetización M , como función de H es discontinua, teniendo la forma que se ilustra en la figura 1.2. Esta discontinuidad es característica de una transición de primer orden, con una longitud de correlación finita. Cuando T se aproxima al punto de Curie T_c , por debajo, la discontinuidad se aproxima a cero y la longitud de correlación en la transición diverge. El punto $H = 0, T = T_c$ es un ejemplo de *punto crítico dual*, en el que la transición de fase se hace continua. Cuando $T < T_c$, los dos límites $H \rightarrow 0+$ y $H \rightarrow 0-$ dan diferentes valores posibles de $\pm M_0$ para la magnetización.Cuál escoja cada sistema depende de su historia previa. Este es un ejemplo de *ruptura de simetría espontánea* [7]. La magnetización M , cuyo valor mide la cantidad de orden magnético en el material es llamada *parámetro de orden* de esta transición.

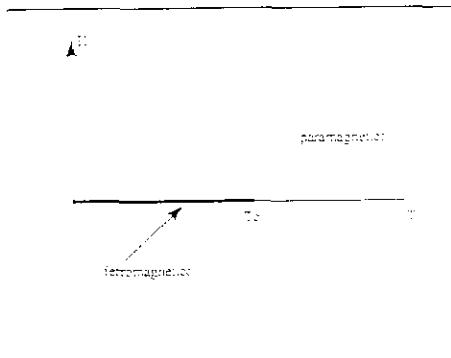


Figura 1.1: Diagrama de fase del magnet.

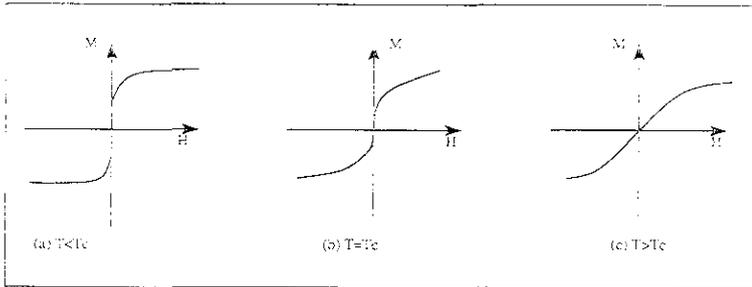


Figura 1.2: Magnetización versus campo aplicado para varias temperaturas

En $T > T_c$ el hierro es paramagnético, esto es, el material no está magnetizado si no se aplica un campo magnético. Al aplicar un campo magnético H el momento magnético del material por unidad de volumen m es proporcional al campo aplicado: $m \simeq \mu H$ donde μ es una constante positiva. En el estado ferromagnético ($T < T_c$), el material está magnetizado aún cuando no se esté aplicando campo magnético alguno. Cuando se aplica un campo magnético H esta magnetización se alinea con el campo. Consecuentemente m no presenta una relación lineal con respecto a H . Como se muestra en la figura 1.3, la magnitud de la magnetización $m_0(T)$ en $H = 0$ se hace cero cuando uno se aproxima a T_c . Entonces cuando se calienta la muestra de hierro a través de T_c a campo cero no sucede nada espectacular a partir de T_c . La magnetización del hierro, decrece poco a poco (de una forma continua) cuando nos acercamos a T_c , y se hace cero justo en este valor y para temperaturas mayores de T_c . Lo que cambia discontinuamente en T_c es la rapidez de cambio de m_0 . Esta es la esencia de una transición de fase continua: las propiedades del sistema no cambian discontinuamente en T_c lo que cambia discontinuamente es al menos, una de sus rapideces de cambio.

En contraste, cuando el agua se congela, hay un cambio abrupto en las propiedades del sistema y no únicamente en sus rapideces de cambio, por ejemplo en su densidad ρ y en su calor específico c_v .

A pesar de que los cambios de fase del H_2O son generalmente de primer orden, hay una circunstancia especial en la cual la transición del agua líquida a vapor es continua. Esto ocurre en lo que se conoce como punto crítico de la transición. El paso de un gas a su fase líquida o viceversa, se puede estudiar de una manera ilustrativa en los diagramas de fase como los que se muestran

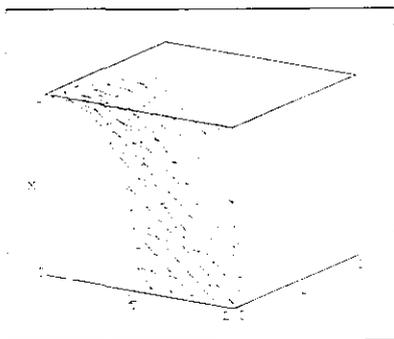


Figura 1.3: Gráfica de la ecuación de Langeritz-Weiss, ecuación de estado para un sistema magnético con una transición de segundo orden a campo cero ($H = 0$).

en las figuras 1.4 y 1.5.

En el diagrama 1.5 se muestra que para isotermas con temperaturas menores a la temperatura crítica T_c hay coexistencia de fases. Todas las isotermas a medida que se aproximan a esta temperatura tienen una porción horizontal cada vez menor dentro de la región heterogénea hasta reducirse a un punto en $T = T_c$. El punto crítico T_c marca el final de la coexistencia líquido-gas. En las isotermas con $T > T_c$ el fluido sólo existe en una fase homogénea, en particular uno puede convertir una cantidad de agua líquida a vapor sin que hierva lo cual se representa en la figura 1.4 con la curva punteada [25].

El hecho que muchos grados de libertad se encuentren fuertemente correlacionados hace que el estudio de las transiciones de fase continuas sea intrínsecamente difícil. Por su naturaleza estos fenómenos no pueden ser tratados por los métodos perturbativos normales. Ha sido sólo en los últimos veintidós años aproximadamente que se han desarrollado métodos analíticos para abordar tales problemas. Estos métodos constituyen, en conjunto, una nueva forma de pensar y estudiar este tipo de sistemas la cual se conoce como grupo de renormalización [7], [11].

Sin embargo, a pesar de que los sistemas con longitudes de correlación

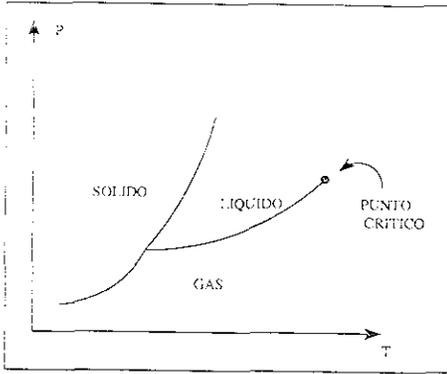


Figura 1.4: Diagrama de fase de una sustancia típica

grandes pueden parecer muy complejos, también exhiben una gran simplificación. Una de estas sorprendentes simplificaciones es lo que se conoce como el fenómeno de *universalidad*. Muchas propiedades de los sistemas cerca de una transición de fase continua, son independientes de los detalles microscópicos de las interacciones entre los átomos individuales y las moléculas. Es más, estos caen en un número relativamente pequeño de diferentes clases. Este fenómeno encuentra una explicación simple y natural dentro del marco de trabajo del grupo de renormalización como veremos adelante. Típicamente cerca del punto crítico, la longitud de correlación y las otras propiedades termodinámicas, exhiben una dependencia de ley de potencia con respecto a los parámetros especificados por su cercanía al punto crítico. Estas potencias o *exponentes críticos* son meramente números, usualmente no son enteros ni números racionales simples. Cuando los exponentes que presenta un cierto conjunto de sistemas son iguales, se dice que todos estos corresponden a la misma clase de universalidad. Uno de los objetivos de las nuevas teorías es explicar por qué ocurren dichas potencias no triviales y predecir sus valores.

La ocurrencia en el comportamiento de ley de potencia de las ecuaciones que describen el sistema es síntoma de las leyes de *escalamiento* y serán discutidas en detalle en las siguientes secciones.

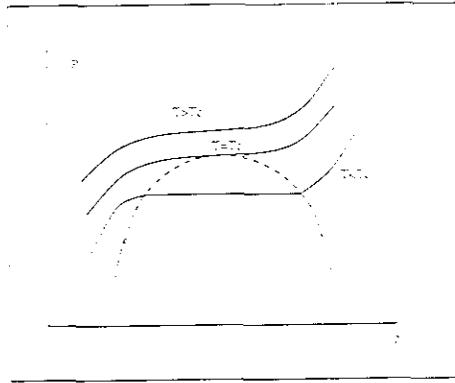


Figura 1.5: Isotermas cerca del punto crítico de la transición líquido-gas. La línea punteada representa la curva de coexistencia.

1.2.1 Parámetro de Orden

En una transición de fase a menudo se presenta un cambio de la simetría entre las dos fases existentes.

Supongamos un sistema ferromagnético antes del punto de Curie o punto crítico. Las dos fases de ambos lados de la temperatura crítica tienen diferentes simetrías espaciales. Por encima de la temperatura crítica, donde no hay magnetización, el sistema es rotacionalmente invariante, mientras que por debajo de la temperatura crítica cuando ocurre la magnetización espontánea, el vector magnetización define una dirección de preferencia en el espacio, destruyendo la invariancia rotacional. Dado que la simetría se encuentra presente o ausente, las dos fases deben describirse con diferentes funciones de variables termodinámicas, las cuales no pueden ser continuas analíticamente a través del punto crítico.

Debido a esta diferencia en la simetría, es necesario un parámetro extra para describir la termodinámica de la fase de baja temperatura. Este parámetro extra es llamado *parámetro de orden*, y lo denotaremos por M y es, usualmente, una variable termodinámica extensiva accesible a medidas.

En el caso del ferromagneto el parámetro de orden es la magnetización, mientras que en el caso de la transición líquido-gas es la diferencia entre las densidades de las dos fases.

En otras palabras el parámetro de orden nos indica que tan distinta es una fase de la otra y por tanto se va a cero al acercarse al punto crítico donde la diferencia entre fases no existe.

La idea básica para el desarrollo siguiente es que, cerca del punto crítico, el parámetro de orden es la única cantidad termodinámica importante.

1.2.2 Exponentes Críticos

Los *exponentes críticos* definen el tipo de las singularidades de varias cantidades medibles en el punto crítico, estos son comunmente denotados por: $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \eta, \nu$.

Representemos la temperatura crítica por T_c e introduzcamos la cantidad:

$$t \equiv \frac{T - T_c}{T_c}. \quad (1.1)$$

Ahora supongamos que, en el límite $t \rightarrow 0$, algunas cantidades termodinámicas pueden ser descompuestas en una parte "regular", la cual permanece finita (pero no necesariamente continua) mas una parte "singular" que puede ser divergente o tener derivadas que divergen. Se supone que la parte singular es proporcional a alguna potencia de t , generalmente fraccional, y con base en ésto, los primeros exponentes críticos se definen como sigue:

$$\text{capacidad calorífica} \quad C \sim |t|^{-\alpha}, \quad (1.2)$$

$$\text{parámetro de orden} \quad M \sim |t|^\beta, \quad (1.3)$$

$$\text{susceptibilidad} \quad \chi \sim |t|^{-\gamma}, \quad (1.4)$$

$$\text{ecuación de estado } t = 0 \quad \mathcal{M} \sim H^{1/\delta}, \quad (1.5)$$

donde \sim significa que "tiene una parte singular proporcional a". Dado que las primeras tres relaciones se refieren a una transición de fase, se tiene que $H = 0$, mientras que en la última ecuación $H \neq 0$. Los últimos dos exponentes se encuentran relacionados con la *función de correlación*, la cual se define como [13]:

$$\Gamma(r) \equiv \langle m(r)m(0) \rangle - \langle m(r) \rangle \langle m(0) \rangle \quad (1.6)$$

donde $\langle \dots \rangle$ denota promedio del ensamble. m es la densidad del parámetro de orden M que puede ser escrito como:

$$M = \left\langle \int d^d x m(x) \right\rangle. \quad (1.7)$$

Además de las cantidades termodinámicas, la función de correlación contiene información importante acerca de la transición de fase.

Ahora bien, si suponemos que la función de correlación presenta la forma de Ornstein-Zernike [13]:

$$\Gamma(r) \sim r^{-\nu} \exp\left\langle \frac{-r}{\xi} \right\rangle \quad (1.8)$$

cuando $t \rightarrow 0$, entonces ν y ξ se definen como:

$$\text{longitud de correlación} \quad \xi = t^{-\nu} \quad (1.9)$$

$$\text{ley de decaimiento a } t = 0 \quad \nu = d - 2 - \epsilon \quad (1.10)$$

donde d es la dimensión del sistema.

La importancia de los exponentes críticos se encuentra en su universalidad. Como los resultados de los experimentos y simulaciones han mostrado, una gran cantidad de sistemas diferentes, cuyas temperaturas críticas difieren en órdenes de magnitud, comparten aproximadamente los mismos valores de sus exponentes críticos.

Sólo dos de los seis exponentes críticos definidos anteriormente son independientes debido a que éstos obedecen las *relaciones de escalamiento*.

1.3 Hipótesis de Escalamiento

Como su nombre lo indica, la hipótesis de escalamiento tiene que ver con cómo varias cantidades se modifican ante el cambio de escala de cierta longitud. Se pueden derivar leyes de escalamiento importantes referentes a las funciones termalíticas a partir de la simple (pero fuerte) suposición de que, cerca del punto crítico, la longitud de correlación ξ es la única longitud característica del sistema, en términos de la cual todas las demás longitudes del sistema deben de ser medidas. Lo anterior es conocido como la *hipótesis de escalamiento*.

La idea de escalamiento fue concebida inicialmente por Wilson [2], [11], [13], [14], y consiste en escribir la parte asintótica o singular de la energía

libre y de la ecuación de estado como una función homogénea. De las leyes que rigen las relaciones homogéneas se pueden derivar las llamadas leyes de escalamiento o relaciones entre los exponentes:

$$\text{Fisher} \quad \gamma = -\nu(2 - \eta), \quad (1.11)$$

$$\text{Rushbrooke} \quad \alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (1.12)$$

$$\text{Widom} \quad \gamma = -\beta(\delta - 1), \quad (1.13)$$

$$\text{Josephson} \quad \nu d = 2 - \alpha. \quad (1.14)$$

Para explicar de un manera más clara cómo emerge esta hipótesis de escalamiento, es necesario explicar antes algunos conceptos como la *teoría de campo medio de Landau*.

1.3.1 Teoría de Campo Medio de Landau

Las teorías fenomenológicas más simples en este contexto se derivan de la *teoría de campo medio*: esta fué desarrollada con una gran elegancia por Landau y ahora, frecuentemente se hace referencia a ella con su nombre [13], [7].

La teoría consiste primeramente, en identificar el parámetro de orden M (físicamente es posible pero a menudo sólo de una manera abstracta) y entonces desarrollar la energía libre en series de Taylor de potencias del parámetro de orden. Tomaremos el caso del magneto ya que presenta una gran simplificación debido a su simetría. El desarrollo en series de potencias de M de la energía $A(T, M)$ resulta:

$$A(T, M) = A_0(T) + A_2(T)M^2 + A_4(T)M^4 + \dots \quad (1.15)$$

ya que, por simetría de $M \rightarrow -M$ no deben existir potencias impares de M . A altas temperaturas, este desarrollo puede ser justificado para todos los modelos razonables con bases completamente rigurosas, sin embargo cuando nos acercamos a T_c esta aproximación puede ser inadecuada. Diferenciando dos veces con respecto a M uno obtiene, por definición, el inverso de la susceptibilidad, la cual a campo cero por encima de T_c se encuentra dada por:

$$\chi^{-1} = 2A_2'(T) \quad \text{para} \quad T > T_c, \quad (H, M = 0). \quad (1.16)$$

Lo que sigue es suponer que los coeficientes A_i pueden ser desarrollados también en potencias de $t = (T - T_c)$, entonces podemos escribir:

$$\chi^{-1} = 2A_{20} - 2A_{21}t - O(t^2). \quad (1.17)$$

Cuando $T \rightarrow T_c^-$, la susceptibilidad, por definición de T_c tiende a infinito, entonces $\chi^{-1} \rightarrow 0$ cuando $t \rightarrow 0^+$ y por tanto $A_{20} = 0$. El comportamiento predicho para χ cerca de T_c es entonces:

$$\chi \approx \frac{C}{t} \quad \text{para} \quad t \rightarrow 0^+, \quad H, M = 0. \quad (1.18)$$

Esto corresponde a $\nu = 1$, lo cual no concuerda con el verdadero valor de ν . El hecho de que se presente este error se debe a que se hizo la suposición injustificada de que $A(T, M)$ puede ser desarrollada en series de potencias cerca del punto crítico.

A pesar de que esta aproximación es incorrecta, continuemos explorando sus consecuencias considerando el efecto del término de cuarto orden en M , cuyo coeficiente es:

$$A_4 T = A_{41} - O(t) = \frac{1}{4}a - O(t), \quad (1.19)$$

donde el reemplazo de A_{41} por $a/4$ es meramente por conveniencia, ya que de esta manera al obtener H por diferenciación de A con respecto a M se eliminan los coeficientes. Supongamos que $a > 0$ para asegurarnos de la estabilidad termodinámica. Examinemos ahora la ecuación de estado, la cual es la relación entre T, H y M cerca de T_c . Esta es obtenida diferenciando A con respecto a M y se ve fácilmente que tiene la forma:

$$H \approx M(a - 2M^2), \quad (1.20)$$

donde hemos puesto $2A_{21} = a$, entonces $A_2 T \approx a/2$. Estableciendo $H = 0$, obtenemos la isoterma crítica como $H \sim M^3$ y por tanto la predicción errónea de $\beta = 3$. Para $T < T_c$ y $H \rightarrow 0^+$ se obtienen las tres raíces:

$$M = 0 \quad (1.21)$$

$$M = \pm M_2(T) \approx \pm B t^{1/2} \quad (1.22)$$

con $B = \frac{1}{2} a^{1/2}$.

La primera raíz tiene una energía libre mayor que las otras dos por lo que no presenta interés físico. Las otras dos raíces proveen dos estados equivalentes de equilibrio de magnetización espontánea. Estas predicen un valor clásico erróneo de $\beta = 1/2$.

1.3.2 El Concepto de Escalamiento

Existen varias formas de llevar a cabo las correcciones deseadas a la teoría de Landau. Una de las primeras aproximaciones (y de las más directas), fué hecha por Widom y se presenta a continuación [10]. Consideremos el exponente β , el valor clásico incorrecto de $1/2$ se obtiene por la presencia del término M^2 en (1.20), tratemos entonces de corregir la teoría reemplazando M^2 por $M^{2/\beta}$. β es ahora un parámetro libre que puede ser fijado por el experimento. Si esto fuera todo, la ecuación de estado entonces resultaría:

$$H \approx M(ct + uM^{1/\beta}), \quad (1.23)$$

con lo que se obtendría correctamente la magnetización espontánea por debajo de T_c . Parecería ser, que uno podría tratar de obtener el exponente de la susceptibilidad γ , simplemente reemplazando t en (1.20) por t^β . Para $T > T_c$, se sigue que $H \approx cMt^\beta$ y entonces $\chi = t^{-\beta}$ como se desea. Si esta modificación se aplica a valores negativos de t , entonces t debe de ser reemplazado por $|t|$. Esto sin embargo conduce a un problema, dado que origina un comportamiento no analítico en la ecuación de estado de la isoterma crítica $t = 0$. Lo anterior tiene por consecuencia un problema sin sentido físico dado que, de hecho, se encuentra que la ecuación de estado no presenta singularidades al cruzar las isotermas críticas. Un problema similar se obtiene a partir de (1.23) para valores pequeños de M , por encima de T_c , donde el desarrollo en series no debe de ser válido a menos que $1/\beta$ sea un entero par.

Para solucionar este problema reescribamos (1.23). Dividiéndola entre $c t^{3/2}$ obtenemos la forma equivalente:

$$D \frac{H}{t^{3/2}} = \left(\frac{M}{D t^{1/\beta}} \right) \left(\pm 1 + \left(\frac{M}{B t^{1/\beta}} \right)^{1/\beta} \right), \quad (1.24)$$

donde hemos reemplazado $3/2$ por Δ mientras que B y D se encuentran relacionadas simplemente con las constantes originales c y u . Sin embargo en este momento uno puede hacer a Δ una variable y tratarla como un

segundo exponente independiente, así, éste puede ser ajustado para obtener χ correctamente.

Ahora bien, si la magnetización espontánea varía como t^{β} , entonces la cantidad $M/B t^{\beta}$ puede ser vista como una magnetización reescalada por la magnetización espontánea, $M_0(T)$. Similarmente, en el lado izquierdo de la ecuación (1.24), tenemos el campo magnético H escalado por una potencia característica de la temperatura $t^{-\Delta}$. A continuación, notamos que la ecuación de estado es una expresión que relaciona M/T y H por lo que podemos expresarla como $M = \mathcal{M}(T, H)$.

La sugerencia original de Widom fué que, cuando $T \rightarrow T_c$, y además M y H se hacen pequeños, la ecuación de estado general se simplifica si M es reemplazada por una magnetización escalada, por ejemplo $M/B t^{\beta}$. El caso especial de (1.20), que involucra la teoría clásica, posiblemente se obtiene asintóticamente de la ecuación verdadera en la región crítica.

Más específicamente, la naturaleza de la simplificación propuesta es que, en la región crítica, la ecuación de estado se reduce de una función $\mathcal{M}(T, H)$ de dos variables, a una función de una sola variable, pero que relaciona las dos variables escaladas juntas. En otras palabras, hicimos el postulado de escalamiento:

$$\frac{M}{t^{\beta}} = BW \left(D \frac{H}{t^{\Delta}} \right), \quad (1.25)$$

donde W es alguna función suficientemente general de un solo argumento. De hecho la función de escalamiento completa $W(y)$ es también universal, entonces podemos suponer que β y Δ sean exponentes universales aún cuando sus valores puedan diferir de sus contrapartes clásicas.

Por otro lado los parámetros B y D , como T_c por sí misma, deben reflejar los detalles particulares del ferromagneto y nos referimos a ellos como amplitudes no universales. El exponente Δ es a menudo llamado *exponente de escalamiento*.

Examinemos ahora las implicaciones del argumento anterior. La susceptibilidad para $T > T_c$ y $H \rightarrow 0$ está dada por:

$$\chi \propto \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_{T, H=0} \approx t^{\beta-\Delta} B D W'(0), \quad (1.26)$$

donde $W'(0)$ es algún número. Dado que, por definición, tenemos que $\chi \sim t^{-\gamma}$, vemos que:

$$\Delta = \beta + \gamma \quad (1.27)$$

esto muestra que Δ debe de ser escogida para darnos el valor correcto de γ lo cual no nos muestra nada nuevo.

Para encontrar un resultado nuevo veamos la isoterma crítica, $T = T_c$ para la cual debemos estudiar el límite $t \rightarrow 0$. En éste, el campo magnético escalado evidentemente diverge, dado que:

$$y = D \frac{H}{|t|^\Delta} \rightarrow \infty \quad \text{cuando } t \rightarrow 0 \quad (1.28)$$

Supongamos ahora que $W(y)$ también varía con alguna potencia cuando se hace grande, esto es, supongamos que:

$$W(y) \approx W_\infty y^\lambda \quad \text{cuando } y \rightarrow \infty \quad (1.29)$$

donde W_∞ y λ son constantes. Se sigue que:

$$M \approx |t|^\delta D^\lambda B W_\infty \frac{H^\lambda}{t^{\lambda\Delta}}. \quad (1.30)$$

Cuando $t \rightarrow 0$ la variable temperatura puede eliminarse de la expresión dado que M se vuelve una función sólo de H , consecuentemente podemos pedir que $\lambda\Delta = \beta$ lo cual fija el exponente λ como:

$$\lambda = \frac{\beta}{\Delta}. \quad (1.31)$$

Entonces en realidad λ no puede ser escogida libremente. Mas aún, de (1.30) vemos que $M \sim H^\lambda$. Sin embargo, por definición tenemos que $M \sim H^{1/\delta}$ para $T = T_c$. Entonces concluimos que $\delta = 1/\lambda$ y:

$$\delta = \frac{\Delta}{\beta} = 1 + \frac{\gamma}{\beta} \quad (1.32)$$

Esta última ecuación relaciona los exponentes β , γ y δ y es conocida como relación de Widom.

De una manera similar integrando M :

$$M = - \left(\frac{\partial F}{\partial H} \right)_T$$

obtenemos la energía libre $F(T, H)$ para, posteriormente por diferenciación con respecto a T obtener la expresión para la entropía y calor específico [10], y de ésta la relación:

$$\alpha + 2\beta - \gamma = 2. \quad (1.33)$$

1.3.3 Escalamiento de la Energía Libre

Consideremos nuevamente el caso del magneto. En la región crítica la energía libre $F(T, H)$ tendrá una parte singular que describe el comportamiento crítico. Sea ΔF la desviación de la energía libre de su valor en el punto crítico sustrayendo las contribuciones no singulares. Definimos la energía libre reducida o normalizada [10] como:

$$f_{sing} = \frac{-\Delta F}{k_B T V}. \quad (1.34)$$

Si integramos $M(T, H)$ con respecto a H esto lleva a la obtención de la energía libre la cual puede ser escalada de la misma manera que en las secciones anteriores. Alternativamente, podemos introducir los postulados de escalamiento directamente para la energía libre. De esta forma el escalamiento se puede expresar como:

$$f_{sing}(T, H) \approx A_1 t^{2-\alpha} Y \left(D \frac{H}{t^\Delta} \right), \quad \text{cuando } t, H \rightarrow 0, \quad (1.35)$$

donde A_1 y D son amplitudes de escalamiento no universales que dependen de los detalles del sistema. A_1 establece la escala de la energía libre, mientras que D establece la escala del campo magnético. Como antes, aparecen dos exponentes universales α y Δ . La razón de escribir el exponente de la temperatura en 1.35 como $2 - \alpha$ es obtener el coeficiente del calor específico correctamente. Establezcamos $H = 0$ y normalicemos la función de escalamiento con $Y(0) = 1$, lo cual se puede hacer por la presencia de A_1 . Recordando que la entropía está dada por:

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{H=c}$$

se sigue que la parte singular de ésta varía como:

$$\frac{\Delta S T}{k_B} \propto \frac{\partial f}{\partial t} \approx A_1 t^{2-\alpha}, \quad (H=0) \quad (1.36)$$

La energía interna se comporta de manera similar. El calor específico entonces sigue la relación:

$$\frac{C(T)}{V} = \frac{T}{V} \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right) \propto \left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \right) \approx A_2 t^{-\alpha}. \quad (1.37)$$

En esta expresión A_1 y A_2 son amplitudes proporcionales a A_0 .

La ecuación de estado $\bar{M} = \mathcal{M}(T, H)$ es obtenida por la diferenciación de F con respecto a H . Esto lleva a:

$$\bar{M} = - \left(\frac{\partial F}{\partial H} \right)_T \propto \left(\frac{\partial f}{\partial H} \right) \approx A_0 D |t|^{2-\alpha-\Delta} Y' \left(D \frac{H}{|t|^\Delta} \right). \quad (1.38)$$

La razón de llamar exponente de escalamiento a Δ se debe a lo siguiente: cada diferenciación sucesiva de \bar{M} con respecto a H , para obtener $\chi_1 = (\partial \bar{M} / \partial H)$, $\chi_2 = (\partial \chi_1 / \partial H)$ etc, cambia el exponente de $|t|$ por el decremento constante Δ . Para $T < T_c$ y $H \rightarrow 0$ la función de escalamiento Y' se aproxima a un valor constante diferente de cero y entonces, como antes, $M_0(T) \approx B t^{2-\alpha-\Delta}$. Pero dado que, por definición $M_0(T) \sim |t|^\beta$, se sigue que:

$$\beta = 2 - \alpha - \Delta \quad (1.39)$$

Adoptando $(M/|t|^\beta)$ como la magnetización escalada, vemos de la ecuación (1.38) que ésta es una función sólo del campo magnético escalado, $Y' \propto H/|t|^\Delta$ recapturando el postulado de escalamiento original.

Para escoger la isoterma crítica hagamos $t \rightarrow 0$ y, de manera consistente con el argumento usado previamente, supongamos que $Y(y) \approx y^{\lambda-1}$ cuando $Y \rightarrow \infty$. El escoger $\lambda = \beta/\Delta$ asegura que $|t|$ se cancele cuando $t \rightarrow 0$ de esta forma obtenemos:

$$\bar{M} \sim t^\beta \left(\frac{H}{|t|^\Delta} \right)^{\frac{\beta}{\Delta}} \sim H^{\frac{\beta}{\Delta}} \quad (1.40)$$

Pero dado que $\bar{M} \sim H^{\frac{\beta}{\Delta}}$ concluimos:

$$\Delta = \beta \delta \quad (1.41)$$

como se había establecido anteriormente.

Finalmente la susceptibilidad esta dada por $\chi_T = (\partial M / \partial H)_p$ y para la susceptibilidad reducida por debajo de T_c obtenemos:

$$\chi \propto T \left(\frac{\partial^2 f}{\partial H^2} \right) \approx A_c D^{2\beta - \alpha - 2\Delta} \approx C T^{-\gamma} \quad (1.42)$$

entonces obtenemos la relación de escalamiento:

$$\gamma = -2 - \alpha - 2\Delta. \quad (1.43)$$

Combinando las ecuaciones (1.36) - (1.41) - (1.43) se establecen las relaciones de escalamiento:

$$\alpha - 2\beta - \gamma = 2. \quad (1.44)$$

$$\alpha - \beta(\gamma + \delta) = 2. \quad (1.45)$$

$$\Delta = \beta - \alpha = \gamma\delta. \quad (1.46)$$

Los valores clásicos de los exponentes $\alpha = 0$, $\beta = \frac{1}{2}$, $\gamma = 1$ y $\delta = 2$ satisfacen estas relaciones.

1.4 Grupo de Renormalización

A continuación se introducen los conceptos básicos de la aproximación moderna al estudio del comportamiento del equilibrio crítico, convencionalmente establecido en lo que se conoce como *grupo de renormalización* (GR).

Todo estudio de grupo de renormalización tiene en común la idea de reexpresar los parámetros que definen a un problema en términos de algún otro conjunto de parámetros, quizá más simple, mientras permanezcan sin cambiar aquellos aspectos físicos del problema que sean de interés. Esto puede suceder a través de algún tipo de "granulamiento-grueso" (coarse-graining) de los grados de libertad de corto alcance, como en el problema de fenómeno crítico, donde la física de largas distancias es la de interés. Existen esencialmente dos formas del grupo de renormalización. Una que corresponde al mapeo exacto entre Hamiltonianos, que conduce a un Hamiltoniano con un menor número de grados de libertad. Cabe mencionar que, en el sentido estricto, este conjunto de transformaciones entre los parámetros de los Hamiltonianos es sólo un semigrupo por que las transformaciones carecen de inversa. La otra forma del grupo de renormalización, se encuentra en el contexto de teoría de

campos y se basa en la idea de reparametrización. Cualquiera que sea la motivación, todos estos métodos terminan con las ecuaciones matemáticas que describe el *flujo del grupo de renormalización* en algún espacio de parámetros complicado. Es el estudio de estos flujos y lo que éstos nos dicen acerca del fenómeno físico la esencia del grupo de renormalización. El ejemplo mas ilustrativo donde el aspecto general del grupo de renormalización aparece directamente, es la renormalización en el *espacio real* aplicado a sistemas de espines en una malla. Debido a lo anterior emplearemos este ejemplo para explicar el método, a pesar de que los resultados en espacio real son difíciles de controlar en cuanto a su aspecto cuantitativo, debido a que no hay realmente un parámetro pequeño en torno al cual realizar los desarrollos. Sin embargo este hecho no debilita las poderosas implicaciones de escalamiento y universalidad que se obtienen como propiedades generales, y son estos resultados en los que nos concentraremos.

1.4.1 Renormalización en Espacio Real

A principios de los años setentas, todo cálculo para obtener los exponentes críticos era realizado mediante alguno de los siguientes tres métodos: *i)* resolviendo el sistema de manera exacta, a partir de sus propiedades termodinámicas y examinando su comportamiento en el régimen crítico, *ii)* por medio de simulaciones numéricas del sistema, o bien *iii)* por extrapolación de soluciones aproximadas, las cuales eran inválidas en la vecindad de la transición de fase.

En 1966 Kadanoff presentó un artículo [16] donde se exponía una forma de cálculo simple para el régimen crítico de donde podían ser extraídos los exponentes críticos sin trabajar con la función de partición del sistema. Sin embargo las ideas de Kadanoff, a pesar de ser de una gran intuición física en cuanto al comportamiento de los sistemas en sus condiciones críticas, carecían del rigor matemático necesario para ser establecidas de una forma general.

En 1974, Wilson y colaboradores, presentaron un argumento mas cuantitativo, introduciendo las llamadas técnicas de Grupo de Renormalización. Actualmente, éstas técnicas se dividen, a grosso modo, en dos clases. Una se refiere a aquellas que se desarrollaron estableciendo una analogía entre la mecánica estadística y las teorías de campo cuánticas, y son denotadas como técnicas de **campo teórico** o del **espacio- k** . Mientras que la otra es mas simple y cercana en esencia a las ideas originales de Kadanoff y se denomina **renormalización en espacio real**. El término 'espacio real' se refiere al

hecho de que éstas técnicas involucran cantidades dependientes de la posición en un espacio ordinario. Las técnicas de campo teórico, son más simples cuando las ecuaciones son escritas en términos de cantidades espaciales por transformadas de Fourier, por lo que son llamadas en "espacio- k ".

1.4.2 Renormalizando la Malla

La técnica de renormalización en espacio real, sólo es aplicable a sistemas basados en una malla. Mas aún, la malla debe de ser regular en muchos sentidos: debe tener una simetría de escalamiento discreta. Para entender qué quiere decir esto, tomemos una malla y dividamos los sitios de ésta en bloques. Ahora reemplacemos cada conjunto de sitios o bloque, por un solo sitio, que puede ocupar la posición de uno de los sitios o la de toda el área de sitios. La malla tiene una simetría de escalamiento discreta si podemos obtener una nueva malla con exactamente la misma forma que la malla original, excepto por un incremento en el tamaño que dependerá del parámetro de malla a , entonces $a \rightarrow a' \equiv ba$. En el proceso de renormalizar la malla necesitamos ahora reducir todas las dimensiones en la nueva malla por un factor de b , terminando finalmente con una nueva malla con exactamente el mismo tamaño que la original.

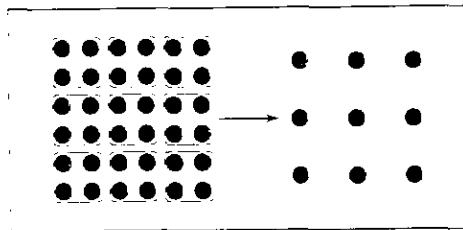


Figura 1.6: Renormalización de una malla cuadrada

Si agrupamos los sitios en bloques que contienen p sitios en p^d celdas, entonces la malla renormalizada contendrá menos sitios que la malla original por un factor de p . Esto será importante cuando redefinamos las cantidades de sitio promedio. Debido a que hemos escalado toda nuestra malla por un factor de b su volumen debe de haber disminuido en un valor de b^d donde d es el número de dimensiones espaciales. Entonces, si los sitios en la malla renormalizada se encuentran arreglados en exactamente la misma forma que

aquellos de la malla original, su número debe de haberse reducido por un factor de $p = b^d$.

La malla mas común que presenta simetría de escalamiento discreta, es la malla cuadrada. En la figura 1.6 se muestra la renormalización de la malla cuadrada en dos dimensiones. En este caso $b = 2$ y el número de sitios de la malla final tiene un cuarto de la cantidad de sitios de la malla original.

1.4.3 Variables de Bloque

Ahora supongamos un modelo en el que tenemos ciertas variables a las que llamaremos espines, definidas en cada sitio de nuestra malla. Por simplicidad enfocaremos nuestra discusión a modelos en los que tenemos sólo un espín escalar s_i en cada sitio i . Ahora renormalizamos la malla. Para cada bloque k , definimos una nueva variable $\sigma_k^{(1)}$ que es alguna función f de los espines del bloque. A las variables $\sigma_k^{(1)}$ las llamaremos *variables de bloque*. Si S_k denota el conjunto de sitios en el bloque k -ésimo, entonces escribimos:

$$\sigma_k^{(1)} = f(\{s_i\}), \quad \text{donde } i \in S_k. \quad (1.47)$$

La naturaleza recursiva de esta definición, (el hecho de que para definir variables $\sigma_i^{(n+1)}$ sólo necesitemos las variables $\sigma_i^{(n)}$ y no las variables $s_i \equiv \sigma_i^{(0)}$) es crucial en nuestra idea de renormalización. Como un ejemplo, una definición simple de las variables de bloque es la *definición lineal*:

$$\sigma_k^{(n+1)} = A^{(n)} \sum_{i \in S_k} \sigma_i^{(n)}, \quad (1.48)$$

donde $A^{(n)}$ es la constante de renormalización. Existen otras formas de llevar a cabo la asignación de las variables de bloque a partir de las variables originales. Una de ellas es conocida como *regla de la mayoría*, y consiste en asignar a la nueva variable de bloque el valor que tiene el mayor número de los sitios del bloque inicial. Así, si en nuestro bloque la mayoría de los sitios tiene un valor de espín de, digamos, -1 el valor de la variable de bloque tendrá este valor.

Otra forma común de definir $\sigma_k^{(n+1)}$ es establecer su valor como el valor de alguna de las variables $\sigma_i^{(n)}$ en el bloque.

$$\sigma_k^{(n+1)} = \sigma_i^{(n)}, \quad \text{donde } i \in S_k. \quad (1.49)$$

Esta definición de σ_k^n recibe el nombre de *decimación*. La variable σ_j^n cuyo valor se asigna a la variable de bloque σ_k^{n+1} se escoge aleatoriamente n veces, suele escogerse el valor que tiene el espín situado en la esquina superior derecha del bloque en una malla cuadrada.

Existen muchas otras formas de definir las variables de bloque sin embargo, evidentemente, toda definición que se proponga deberá ser coherente con el problema que estamos tratando. Otra restricción importante es que el conjunto de estados disponibles para cada una de las nuevas variables, deberá ser el mismo que el disponible para las variables originales.

1.4.4 Renormalización del Hamiltoniano

Si $P(\{s_i\})$ es la probabilidad de que los espines en nuestro modelo tomen algún conjunto de valores particular $\{s_i\}$ entonces podemos definir el *Hamiltoniano efectivo* para nuestro modelo por la ecuación:

$$P(\{s_i\}) = \frac{\exp[-\mathcal{H}(\{s_i\})]}{Z} \quad (1.50)$$

El Hamiltoniano efectivo dependerá, en general, de la temperatura y de la selección de parámetros tales como interacción espín-espín. Ahora tenemos que establecer cuál es la distribución de probabilidad correspondiente $P^n(\{\sigma_i^n\})$ para las variables de bloque. Debido a que, de la ecuación (1.48), sabemos cómo han sido definidas las variables σ_i^{n+1} en términos de σ_j^n , podemos obtener la distribución de probabilidad $P^{n+1}(\{\sigma_i^{n+1}\})$ de las variables de bloque en el estado $(n+1)$ de la renormalización, a partir tan sólo del conocimiento de $P^n(\{\sigma_j^n\})$. Esto es, nosotros simplemente sumamos sobre las probabilidades de todas las configuraciones $\{\sigma_j^n\}$ consistentes con la configuración $\{\sigma_i^{n+1}\}$ de las variables de bloque.

Dada tal distribución de probabilidad, podemos definir el Hamiltoniano efectivo del sistema después de n -iteraciones de la transformación de renormalización en analogía con la ecuación (1.50):

$$P^n(\{\sigma_i^n\}) = \frac{\exp[-\mathcal{H}^n(\{\sigma_i^n\})]}{Z^n} \quad (1.51)$$

donde

$$Z^n \equiv \sum_{\{\sigma_j^n\}} \exp[-\mathcal{H}^n(\{\sigma_j^n\})] \quad (1.52)$$

Esto desplaza el valor de \mathcal{H} por una constante aditiva. Nosotros fijamos esta constante mediante una condición de normalización específica sobre $\mathcal{H}^{(n)}$ por ejemplo:

$$\mathcal{H}^{(n)}(\{\sigma_i^{(n)}\})|_{\sigma_i^{(n)}=0} = 0. \quad (1.53)$$

Son posibles muchas otras condiciones; sin embargo ésta es particularmente conveniente para realizar el cálculo de la energía libre, pero otras pueden ser adecuadas para el cálculo de algún otro sistema. Con $\mathcal{H}^{(n)}$ definido de esta forma, es claro que el valor esperado de alguna función X de variables $\sigma_i^{(n+1)}$ llevará al mismo valor, cuando nosotros la evaluemos empleando $\mathcal{H}^{(n+1)}$ o $\mathcal{H}^{(n)}$. Esto es, si evaluamos la cantidad:

$$\langle X \rangle = \frac{1}{Z^{(n+1)}} \sum_{\{\sigma^{(n+1)}\}} X(\{\sigma_i^{(n+1)}\}) \exp[-\mathcal{H}^{(n+1)}(\{\sigma_i^{(n+1)}\})], \quad (1.54)$$

Obtendremos el mismo resultado que si evaluamos:

$$\langle X \rangle = \frac{1}{Z^{(n)}} \sum_{\{\sigma^{(n)}\}} X(\{\sigma_i^{(n)}\}) \exp[-\mathcal{H}^{(n)}(\{\sigma_i^{(n)}\})], \quad (1.55)$$

Entonces cuando escribamos el valor de espectación no habrá necesidad de especificar qué Hamiltoniano efectivo estamos empleando, ya que todos los valores de espectación son equivalentes.

Cuando realizamos un cálculo de renormalización en espacio real, imponemos una condición mas al Hamiltoniano efectivo $\mathcal{H}^{(n+1)}$: estipulamos que debe de tomar la misma forma funcional que $\mathcal{H}^{(n)}$, entonces el modelo es exactamente el mismo en cada estado excepto por un cambio en los parámetros que parecen en el Hamiltoniano efectivo. Esta condición es, en la mayoría de los casos, imposible de cumplir, y lo mejor que podemos hacer es aproximar el verdadero Hamiltoniano efectivo renormalizado $\mathcal{H}^{(n+1)}$, como lo definimos anteriormente con una función de la misma forma que $\mathcal{H}^{(n)}$. Al hacer esto, escogemos los parámetros que aparecen en la función para hacer la aproximación lo mas exacta posible, pero un grado de aproximación es inevitable. La renormalización del Hamiltoniano, es una operación que toma a $\mathcal{H}^{(n)}$ y lo mapa en $\mathcal{H}^{(n+1)}$:

$$\mathcal{H}^{(n+1)} = \mathcal{Q}(\mathcal{H}^{(n)}). \quad (1.56)$$

El único efecto de la transformación \mathcal{Q} es que los valores de los parámetros que aparece en \mathcal{H} cambian. Los nuevos valores de los parámetros dependen

sólo de los valores anteriores, y de nada más, a pesar de que a veces esta dependencia puede ser alguna complicada función no lineal.

La ecuación (1.56) puede generar un poco de confusión, ya que ésta relaciona las funciones $\mathcal{H}(\{\sigma_i\})$ antes y después de la renormalización, pero lo que cambia de un estado a otro es el valor de los parámetros. Por ello es conveniente usar otra notación. Supongamos que llamamos a los parámetros del Hamiltoniano efectivo H_1, H_2, H_3, \dots . Entonces podemos escribirlos como las componentes de un vector \mathbf{H} , y escribir la renormalización como alguna operación (quizá no lineal) de \mathbf{R} , actuando sobre este vector, de tal forma que:

$$\mathbf{H}^{n+1} = \mathbf{R}(\mathbf{H}^n) \quad (1.57)$$

$$\text{o} \quad \mathbf{H}' = \mathbf{R}(\mathbf{H}). \quad (1.58)$$

En lo que sigue nos referiremos a \mathbf{H} como Hamiltoniano efectivo. A veces es adecuado pensar en un espacio de Hamiltonianos, esto es, un espacio finito dimensional en el que un punto con vector de posición \mathbf{H} representa el Hamiltoniano efectivo con los valores correspondientes de los parámetros H_i , los cuales juegan al papel de las coordenadas en este espacio. Nuestra transformación de renormalización \mathbf{R} nos mueve en este espacio en saltos discretos. Si comenzamos en algún punto inicial \mathbf{H}^0 e iteramos la ecuación (1.57) avanzamos en pasos a través de alguna trayectoria en nuestro espacio. Este movimiento puede ser esquematizado por medio de diagramas como el de la figura 1.7 en donde, por claridad, los pasos sucesivos se han unido y se ha trazado una curva. En cada paso los valores de los parámetros que aparecen en el Hamiltoniano efectivo son reemplazados por unos nuevos, que calculamos a partir de los valores anteriores mediante la ecuación (1.57).

1.4.5 Puntos Fijos

En general, habrá puntos fijos en nuestro espacio. Un punto \mathbf{H}^* , es un punto que es mapeado en él mismo por la transformación \mathbf{R} :

$$\mathbf{H} = \mathbf{R}(\mathbf{H}). \quad (1.59)$$

Podemos clasificar los puntos fijos como *atractivos*, *repulsivos* o *neutros*. Un punto fijo atractivo es uno hacia el cual tienden todos los Hamiltonianos efectivos situados en su vecindad cuando se aplica la transformación de grupo de renormalización. Un punto fijo repulsivo, es uno hacia el cual no tiende

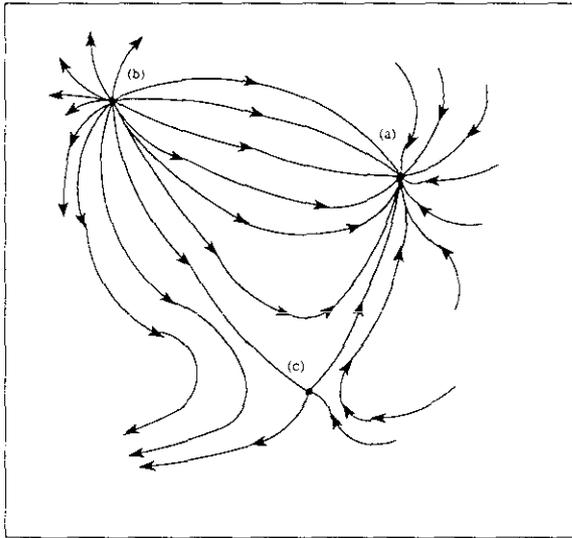


Figura 1.7: Ilustración de las líneas de flujo para los tres tipos de puntos fijos. (a) Punto fijo atractivo, (b) punto fijo repulsivo, (c) punto fijo mixto

ninguno de los Hamiltonianos efectivos cercanos a éste al cabo de varias iteraciones. Un punto fijo mixto, no es ni atractivo ni repulsivo, si no que algunos Hamiltonianos efectivos cercanos a éste tienden hacia él en una dirección a partir de las sucesivas iteraciones, mientras que otros Hamiltonianos en su vecindad se alejarán de él en otra dirección. La figura 1.7 muestra las trayectorias de los Hamiltonianos efectivos en la vecindad de los tres tipos de puntos fijos en un espacio de Hamiltonianos bidimensional.

Podemos determinar la naturaleza de los puntos fijos en un sistema dado como sigue. Primero resolvemos la ecuación (1.59) para encontrar los puntos estacionarios. Entonces suponemos que estamos interesados en explorar la naturaleza del punto fijo en $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0$. Escribimos el efecto de \mathbf{R} en el Hamiltoniano efectivo cercano a \mathbf{H}_0 como:

$$\mathbf{H}_0 + \delta\mathbf{H}' = \mathbf{R}(\mathbf{H}_0 + \delta\mathbf{H}) = \mathbf{R}(\mathbf{H}_0) + \mathbf{M}\delta\mathbf{H} + O(\delta\mathbf{H}^2), \quad (1.60)$$

donde hemos desarrollado a \mathbf{R} en series de potencias en torno de \mathbf{H}_0 . \mathbf{M} es

una matriz ordinaria cuyos elementos están dados por:

$$M_{ij} = \frac{\partial R_{ij}(\mathbf{H})}{\partial H_j} \quad \text{H. H.} \quad (1.61)$$

debido a que \mathbf{H}_2 es un punto estacionario de \mathbf{R} concluimos que:

$$\delta\mathbf{H} = \mathbf{M}\delta\mathbf{H} - \mathcal{O}(\delta\mathbf{H}^2) \quad (1.62)$$

Entonces cuando nos movemos infinitesimalmente cerca del punto fijo \mathbf{H}_2 , nuestra trayectoria está dada completamente por una matriz, o bien, por sus eigenvalores y eigenvectores. Si \mathbf{M} tiene un eigenvalor $\lambda_A > 1$, el punto fijo será *repulsivo* en la dirección del eigenvector correspondiente, en este caso se dice que las variables asociadas a éste punto son *relevantes*, ya que al realizar las iteraciones sucesivas éstas nos alejan del punto fijo. Y similarmente, si éste tiene un eigenvalor $\lambda_A < 1$, el punto fijo será *atractivo* en la dirección correspondiente, en este caso las variables asociadas a λ_A serán *irrelevantes* ya que las iteraciones sucesivas llevan su valor a cero, dirigiéndonos hacia el punto fijo. Si el eigenvalor es exactamente igual a 1, el punto fijo se dice que es *marginal* en la dirección del correspondiente eigenvector. En éste caso, necesitamos considerar el siguiente término en el desarrollo de Taylor de la transformación de renormalización con objeto de decidir la verdadera naturaleza del punto fijo. Entonces, para identificar si \mathbf{H}_2 es atractivo, repulsivo o mixto, necesitamos tan sólo resolver para los eigenvalores de \mathbf{M} .

Para algún sistema en el que se presenta una transición de fase simple, las identidades de dos de los puntos fijos son claras. Uno el *punto fijo de alta temperatura*, es el Hamiltoniano efectivo para el sistema cuando $T \rightarrow \infty$. En este caso todas nuestras variables adquieren valores aleatorios y no están correlacionadas. Cuando nosotros dividimos en bloques al sistema, las variables de bloque tendrán valores aleatorios y seguirán sin correlación, por lo que su distribución de probabilidades no cambiará. Entonces el Hamiltoniano efectivo se conserva igual ante la transformación y por tanto estamos en un punto fijo. Otro punto fijo es el *punto fijo de baja temperatura*, que es el Hamiltoniano efectivo para el sistema cuando $T \rightarrow 0$. En este caso el sistema está en su estado basal, en el que hay un completo orden. Cuando formamos bloques, las nuevas variables de bloque también se encuentran ordenadas y entonces el Hamiltoniano efectivo no cambia al realizar la transformación, por lo que nos encontramos en un punto fijo.

Estos dos puntos fijos son atractivos. Ahora bien, las Hamiltonianos efectivos que fluyen hacia el punto fijo de alta temperatura y aquellas que fluyen

hacia el de baja temperatura, deben estar separados por alguna superficie que cruza nuestro espacio de Hamiltonianos, y la llamaremos *superficie crítica*. Cada punto de esta superficie crítica corresponde a un Hamiltoniano efectivo que se encuentra en la temperatura crítica adecuada con los valores de los otros parámetros en ese punto. Uno debe de ser cuidadoso en no considerar esta superficie crítica como una isoterma $T = T_c$. En general, la temperatura crítica será diferente en los diferentes puntos de la superficie crítica.

Ahora imaginemos lo que pasa si escogemos un punto sobre la superficie crítica como nuestro Hamiltoniano inicial e iteramos la ecuación (1.57). Ninguno de los argumentos explicados anteriormente se aplica en este caso, ya que \mathbf{H} no tiende hacia el punto fijo de alta temperatura ni al de baja temperatura, si no que permanece sobre la superficie crítica. Con esta restricción aun tenemos varias posibilidades:

1. \mathbf{H} tiende al límite \mathbf{H}^* cuando $n \rightarrow \infty$;
2. \mathbf{H} se va a infinito cuando $n \rightarrow \infty$;
3. \mathbf{H} cae en un círculo cerrado de valores moviéndose alrededor de éstos sin tender nunca a un límite;
4. \mathbf{H} se mueve caóticamente sobre la superficie crítica sin nunca alcanzar un límite.

Las últimas dos posibilidades ocurren en los casos de *dinámica crítica* usando renormalización en espacio real, pero en nuestro caso no consideraremos este tipo de sistemas. Para los sistemas en equilibrio, que son los que estamos considerando aquí, el comportamiento de los sistemas siempre cae en uno de los dos primeros casos anteriores. Estos dos casos, sin embargo, no son muy distintos el uno del otro, ambos tienen un punto fijo que es atractivo sólo que en el segundo caso éste es el ∞ . Escogiendo un nuevo sistema de coordenadas para nuestro espacio de Hamiltonianos o cambiando los parámetros que aparecen en la definición de las variables de bloque, podemos siempre hacer el punto fijo finito (por ejemplo podemos simplemente invertir la coordenada o las coordenadas que miden nuestro progreso a través de la superficie crítica). Entonces tendremos identificado un nuevo punto fijo sobre la superficie crítica en \mathbf{H}^* . Este es el *punto fijo crítico*, el cual es atractivo en la superficie crítica. Fuera de ésta, sabemos que todos los Hamiltonianos efectivos son atraídos hacia los puntos fijos de alta o de baja temperatura.

Por lo tanto podemos concluir que el punto fijo crítico es un punto fijo mixto: repulsivo a lo largo de la trayectoria fuera de la superficie crítica y atractivo a lo largo de las trayectorias sobre la superficie crítica. La matriz M correspondiente a éste punto tiene sólo un eigenvalor que es mayor que uno. El punto fijo crítico es por mucho el más interesante de los puntos fijos ya que sus propiedades nos hablan directamente del comportamiento crítico del sistema.

1.4.6 El Cálculo de ν

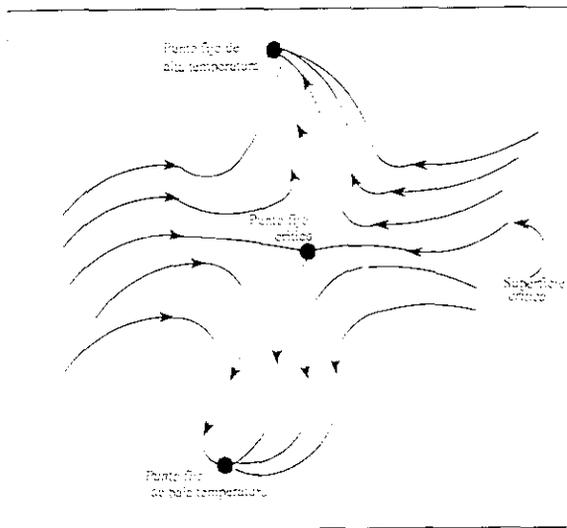


Figura 1.8: Porción del espacio de Hamiltonianos mostrando los puntos fijos de alta y de baja temperatura, y el punto fijo crítico.

Pléjmonos en la figura, o imaginemos qué pasaría si tomamos un Hamiltoniano inicial, y variamos la temperatura mientras mantenemos constante todos los otros parámetros. Esto nos hace movernos a lo largo de una línea, usualmente llamada trayectoria física, la cual se irá acercando a T_c , y en un momento dado, la pasará, atravesando así la superficie crítica. Si tomamos alguno de estos Hamiltonianos iniciales con una temperatura sólo fraccionaria-

riamente por debajo de T_c y a campo externo cero, e iteramos la ecuación (1.57), nuestro Hamiltoniano efectivo pasará a lo largo de una trayectoria que se acerca mucho a la trayectoria crítica, permaneciendo cierto tiempo cerca del punto fijo (donde, como \mathbf{H} es muy cercano a \mathbf{H}^* , es afectado muy poco por \mathbf{R}), y entonces, eventualmente, se aleja de la superficie crítica y se dirige hacia el punto fijo de alta temperatura. Nos podemos ahora preguntar: ¿En qué momento se aleja de la superficie crítica? Hay dos respuestas a esta pregunta. Una es simplemente una respuesta física: cuando nos aproximamos a la temperatura crítica, la longitud de correlación diverge y entonces el régimen cercano a la superficie crítica es uno en el que la longitud de correlación es grande en comparación con el parámetro de malla. El régimen fuera del punto fijo de alta temperatura es, por otro lado, uno en el que las variables de sitio son aleatorias y no se encuentran correlacionadas. En otras palabras, la longitud de correlación es muy pequeña en comparación con el parámetro de malla. El paso entre estos dos regímenes, el punto de retorno de la trayectoria, es donde la longitud de correlación y el parámetro de malla son, a groso modo, del mismo tamaño. Sabemos que si dividimos la malla en bloques de tamaño b la longitud de correlación de la nueva malla guardará una relación con la de la malla original de acuerdo a:

$$\xi' = \frac{\xi}{b}, \quad (1.63)$$

y la longitud de correlación después de n iteraciones de la transformación renormalización será:

$$\xi^{(n)} = \frac{\xi}{b^n}. \quad (1.64)$$

Entonces podemos escribir la condición para el punto de retorno como

$$\frac{\xi}{ab^n} = u, \quad (1.65)$$

donde a es el parámetro de malla y u es un número del orden de la unidad. Sin embargo hay otra forma de ver este problema: que es una respuesta matemática a la pregunta formulada inicialmente. Por simplicidad consideremos nuevamente un sistema con un espacio de Hamiltonianos de dos dimensiones. Supongamos entonces que hemos encontrado el punto fijo crítico y desarrollemos en series la transformación \mathbf{R} como hicimos anteriormente con objeto de encontrar la matriz \mathbf{M} . Dado que el punto fijo crítico es un punto mixto, uno de los eigenvalores de \mathbf{M} que denotaremos por λ_R debe de ser

supongamos que respetamos esta regla, debe entonces aparecer en \mathcal{H}^{n-1} un término $B^{n-1} \sum_i \sigma_i^{n-1}$, el cual usando la ecuación (1.72), podemos escribir como:

$$B^{n-1} \sum_i \sigma_i^{n-1} = \frac{B^{n-1}}{b^{2n}} \sum_i \sigma_i^n. \quad (1.73)$$

Comparando éste con el término correspondiente en \mathcal{H}^n podemos concluir que obtendremos la distribución de probabilidad correcta para las variables de bloque si establecemos:

$$B^{n-1} = b^{2n} B^{-1}. \quad (1.74)$$

Entonces si nosotros ponemos el campo magnético externo diferente de cero, simplemente incrementamos en uno la dimensión de nuestro espacio de Hamiltonianos, y adicionamos un *eigenvalor magnético* λ_B a la matriz \mathbf{M} que toma el valor:

$$\lambda_B = b^{2n}. \quad (1.75)$$

que es siempre mayor que uno. Cabe notar que el *eigenvalor* correspondiente con éste *eigenvalor*, que se encuentra en la dirección B de nuestro espacio de Hamiltonianos, no se 'mezcla' con los otros *eigenvalores*. En otras palabras, durante la renormalización los nuevos valores del campo magnético dependen sólo de los viejos y no de otros parámetros como temperatura. Este resultado de que el campo magnético renormalizado es independiente de todos los otros parámetros en \mathcal{H}^n , es un ejemplo particular de un resultado más general: los parámetros pares e impares no se 'mezclan' cuando renormalizamos. Por un *parámetro impar*, nos referimos a uno que al multiplicar alguna función de las variables de bloque cambia de signo si nosotros cambiamos el signo de cada variable, tal como la suma $\sum_i \sigma_i^n$ multiplicado por B anteriormente. Un *parámetro par*, por otro lado, es una combinación multiplicativa de variables de bloque que no cambia de signo en esta forma. Como se mostrará más adelante, el exponente ν está relacionado con ω_p por:

$$\nu = d + 2 - 2d\omega_p. \quad (1.76)$$

Si empleamos (1.75) para eliminar $d\omega_p$ de esta expresión obtenemos:

$$\nu = d + 2 - 2 \frac{\log \lambda_B}{\log b}. \quad (1.77)$$

donde λ_B es ahora específicamente el *eigenvalor* de \mathbf{M} en \mathcal{H}^1 .

con

$$\nu = \frac{\log b}{\log \lambda_R}. \quad (1.71)$$

La ecuación (1.70) muestra que ν es el exponente crítico que gobierna la divergencia de la longitud de correlación con la temperatura cuando ésta se aproxima a T_c .

1.4.7 Renormalización de B , M , χ y G_c

Hasta el momento, todos nuestros resultados han sido muy generales. No se ha supuesto ninguna forma particular para la definición de las variables de bloque y, en teoría, nuestros resultados para ν se aplican para cualquier sistema en donde se definan variables de bloque. El cálculo de los cinco exponentes críticos restantes, sin embargo, depende de los detalles de cómo son definidas las variables de bloque por lo que, para hacer el desarrollo siguiente, habrá que escoger alguna forma particular para éstas. La forma que usaremos para ilustrar lo que sigue es la definición lineal dada por la ecuación (1.48).

Una vez escogida la definición de las variables de bloque por medio de (1.48), tenemos que fijar el valor de la constante $A^{(n)}$. Es conveniente escribir la constante de normalización en términos de una nueva variable ω como $A^{(n)} = b^{-d\omega}$ entonces:

$$\sigma_k^{(n+1)} = \frac{1}{b^{d\omega}} \sum_{i \in S_k} \sigma_i^{(n)}. \quad (1.72)$$

La cantidad ω varía con la temperatura y con los otros parámetros del problema. El valor de ω de mayor interés será el valor que ésta adquiere en el punto fijo crítico y que denotaremos por ω_c .

Campo Externo Diferente de Cero

Hasta ahora hemos sólomente discutido el sistema en campo externo B igual a cero. Cuando B es diferente de cero, nuestro espacio de Hamiltonianos efectivos es una dimensión mas grande, hay un eje extra marcando los valores posibles del campo externo y aparece un término adicional $B^{(n)} \sum_i \sigma_i^{(n+1)}$ en el Hamiltoniano efectivo \mathcal{H} . Recordemos que habíamos pedido a nuestro Hamiltoniano efectivo renormalizado que adquiriera exactamente la misma forma funcional que el original, permitiendo cambios sólo en los valores de los parámetros que aparecen en éste (los componentes del vector \mathbf{H}). Ahora

mayor que la unidad (repulsivo), y otro λ_A debe de ser menor que la unidad (atractivo). También encontramos los eigenvectores normalizados correspondientes, \mathbf{H}_R y \mathbf{H}_A . Ahora, si tomamos el Hamiltoniano efectivo muy cercano al punto fijo crítico podemos expresar su diferencia con \mathbf{H}^* como una combinación lineal $\mathbf{H} - \mathbf{H}^* = x_A \mathbf{H}_A + x_R \mathbf{H}_R$ de los dos eigenvectores. Entonces, tanto como \mathbf{H} permanezca en la vecindad de \mathbf{H}^* , podemos escribir su valor después de m iteraciones de la ecuación (1.57) como:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}^* + x_A \lambda_A^m \mathbf{H}_A + x_R \lambda_R^m \mathbf{H}_R. \quad (1.66)$$

Si nuestro Hamiltoniano inicial no está en la vecindad inmediata de \mathbf{H}^* , si no en cualquier otro punto muy cercano a la superficie crítica, entonces tendremos que iterar nuestra transformación de renormalización un cierto número de veces r , digamos, para llevar a \mathbf{H} a la región donde la ecuación (1.66) es válida. En este caso $m = n - r$ (siendo n el número total de iteraciones) y sustituyendo ésto en la ecuación (1.66) obtenemos:

$$\mathbf{H}^{(n)} = \mathbf{H}^* + x_A \lambda_A^{(n-r)} \mathbf{H}_A + x_R \lambda_R^{(n-r)} \mathbf{H}_R. \quad (1.67)$$

Conforme acercamos nuestra temperatura inicial T a la T_c dejando todos los otros parámetros constantes, x_R se hace menor y menor, hasta que, exactamente en $T = T_c$ se hace cero resultando que $\mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H}^*$ cuando $n \rightarrow \infty$. Entonces estamos en la posibilidad de realizar un desarrollo de Taylor de x_R alrededor de T_c , y esta siempre será una buena aproximación para escribir $x_R = y_R(T - T_c)$ para T suficientemente cercana a T_c . Por otro lado, x_A es independiente de $T - T_c$ en este límite entonces obtenemos:

$$\mathbf{H}^{(n)} = \mathbf{H}^* + x_A \lambda_A^{(n-r)} \mathbf{H}_A + y_R (T - T_c) \lambda_R^{(n-r)} \mathbf{H}_R. \quad (1.68)$$

El punto de retorno, donde la trayectoria de \mathbf{H} se aleja de la superficie crítica y se dirige hacia el punto fijo de alta temperatura, está entonces dado por una expresión de la forma:

$$y_R |T - T_c| \lambda_R^{(n-r)} = v, \quad (1.69)$$

donde v es otro número del orden de la unidad. Eliminando n de esta ecuación y la ecuación (1.65) obtenemos:

$$\xi = au \left(\frac{v \lambda_R^r}{y_R} \right)^{\nu} |T - T_c|^{-\nu}. \quad (1.70)$$

La renormalización de M , χ y G_c

Hemos visto como la longitud de correlación ξ cambia cuando renormalizamos la malla. ésta tiene dimensiones de longitud y entonces debe de escalar, como todas las otras longitudes del sistema, por un factor de b :

$$\xi^{(n+1)} = \frac{\xi^{(n)}}{b}. \quad (1.78)$$

Conociendo cómo las variables de bloque $\sigma_i^{(n+1)}$ están relacionadas con $\sigma_i^{(n)}$, podemos también deducir qué pasa con muchas de las otras variables de interés físico. Comencemos definiendo la magnetización después de n renormalizaciones de la malla:

$$m^{(n)} = \langle \sigma_k^{(n)} \rangle, \quad (1.79)$$

donde, suponiendo que tenemos un sistema translacionalmente invariante, podemos evaluar el promedio térmico de algún sitio k . Ahora usando la ecuación (1.72) podemos escribir:

$$m^{(n+1)} = \langle \sigma_k^{(n+1)} \rangle = \frac{1}{b^{d\omega}} \sum_{i \in S_k} \langle \sigma_i^{(n)} \rangle. \quad (1.80)$$

Pero para un sistema translacionalmente invariante cada uno de los b^d términos en esta suma es el mismo e igual a $m^{(n)}$. Entoces la suma puede ser reemplazada por $b^d m^{(n)}$ y

$$m^{(n+1)} = b^{d(1-\omega)} m^{(n)}. \quad (1.81)$$

Ahora, si definimos la correlación de la conexión de nuestras variables de bloque por

$$G_c^{(n)}(i, j) = \langle \sigma_i^{(n)} \sigma_j^{(n)} \rangle_c, \quad (1.82)$$

entonces

$$G_c^{(n+1)}(i, j) = \frac{1}{b^{2d\omega}} \sum_{k \in S_i, l \in S_j} \langle \sigma_k^{(n)} \sigma_l^{(n)} \rangle_c, \quad (1.83)$$

En general ésta expresión no es fácil de evaluar, pero en el caso especial en que los bloques i y j están lo suficientemente lejos, todas las correlaciones pueden suponerse iguales. Debido a que hay b^{2d} de ellas en la suma, podemos entonces simplemente reemplazar la suma con $b^{2d} G_c^{(n)}(k, l)$ y obtener:

$$G_c^{(n+1)}(i, j) = b^{2d(1-\omega)} G_c^{(n)}(k, l), \quad k \in S_i, l \in S_j \quad (1.84)$$

donde k etiqueta algún sitio en S_i y l algún sitio en S_j . Nótese que los sitios k y l , que están en la malla sin renormalizar están b veces mas lejos que los sitios i y j , dado que todas las longitudes se encuentran reducidas por un factor b cuando renormalizamos. Para enfatizar ésto ayudará escribir G_c como función de la separación x de los dos sitios i y j lo cual es justificado debido a que el sistema es translacionalmente invariante. En tal caso

$$G_c^{(n+1)}(x) = b^{2d(1-\omega)} G_c^{(n)}(bx), \quad x \rightarrow \infty. \quad (1.85)$$

Finalmente, podemos definir la susceptibilidad de nuestro modelo renormalizado por:

$$\chi^{(n)} \equiv \sum_i \langle \sigma_0^{(n)} \sigma_i^{(n)} \rangle_c = \frac{1}{N^{(n)}} \sum_{ij} \langle \sigma_i^{(n)} \sigma_j^{(n)} \rangle_c, \quad (1.86)$$

donde $N^{(n)}$ es el número de sitios de la malla después de n renormalizaciones. Entonces usando las ecuaciones (1.72) y (1.83), y el hecho de que $N^{(n+1)} = N^{(n)}/b^d$ se sigue que:

$$\chi^{(n+1)} = b^{d(1-2\omega)} \chi^{(n)}. \quad (1.87)$$

1.4.8 Los Exponentes Críticos en $T = T_c$

Anteriormente hemos calculado el exponente crítico ν , que relaciona la divergencia de la longitud de correlación con la temperatura. Con los resultados generados en la sección anterior, podemos ahora calcular los cinco exponentes críticos restantes. Comencemos con los dos exponentes críticos η y δ que describen el comportamiento del sistema en la temperatura crítica. Como se ha mostrado anteriormente, podemos calcular los exponentes para nuestro sistema después de n iteraciones de la transformación de renormalización y ellos serán los mismos que los exponentes para el sistema sin renormalizar. Con objeto de obtener los exponentes η y δ debemos trabajar en el límite de $n \rightarrow \infty$. En éste límite, dado que nuestro Hamiltoniano inicial está sobre la superficie crítica, \mathbf{H} tiende hacia el punto fijo crítico y entonces permanece estacionario cuando $n \rightarrow \infty$, $\mathbf{H}^{(n+1)} = \mathbf{H}^{(n)} = \mathbf{H}^*$. Los sistemas gobernados por los Hamiltonianos efectivos en los estados sucesivos en la renormalización son entonces el mismo sistema.

El exponente η

El exponente crítico η describe la variación en la temperatura crítica de la función de correlación de la conexión de dos puntos, $G_c(x)$, con la separación x entre los dos puntos, cuando $x \rightarrow \infty$:

$$G_c(x) \sim x^{-(d-2+\eta)}; \quad x \rightarrow \infty, \quad T = T_c. \quad (1.88)$$

Esto implica que, para cualesquiera dos valores de x , tendremos

$$\frac{G_c(x_1)}{G_c(x_2)} = \left(\frac{x_1}{x_2} \right)^{-(d-2+\eta)}. \quad (1.89)$$

En las secciones previas (ecuación (1.85)) habíamos deducido que:

$$G_c^{(n+1)}(x) = b^{2d(1-\omega)} G_c^{(n)}(bx), \quad (1.90)$$

donde x es muy grande en comparación con el tamaño de la malla. Ahora como hemos argumentado antes, cuando hacemos $n \rightarrow \infty$ los sistemas gobernados por los Hamiltonianos efectivos en los sucesivos estados de la renormalización son el mismo sistema. Entonces las funciones de correlación $G_c^{(n)}$ y $G_c^{(n+1)}$ también se aplican al mismo sistema, el índice superior es irrelevante. Entonces podemos sustituir esta ecuación en la ecuación (1.89) y obtener:

$$b^{2d(1-\omega_c)} = b^{d-2+\eta}, \quad (1.91)$$

o

$$\eta = d + 2 - 2d\omega_c. \quad (1.92)$$

El Exponente δ

Mediante un truco similar podemos calcular δ , el exponente que describe cómo varía la magnetización con el campo externo B cuando $B \rightarrow 0$ en la temperatura crítica:

$$m \sim B^{\frac{1}{\delta}}; \quad B \rightarrow 0, \quad T = T_c. \quad (1.93)$$

Para algunos dos valores B_1 y B_2 del campo externo y los correspondientes valores de la magnetización, podemos escribir:

$$\frac{m_1}{m_2} = \left(\frac{B_1}{B_2} \right)^{\frac{1}{\delta}}. \quad (1.94)$$

Cuando estamos en el punto fijo crítico y \mathbf{H} es estacionario, la ecuación (1.74) nos habla justamente acerca de tal par de valores del campo externo, y la ecuación (1.81) hace lo mismo para la magnetización. Sustituyendo estos resultados en la ecuación (1.94) obtenemos:

$$b^{d(1-\omega_c)} = b^{\frac{d\omega_c}{\delta}}, \quad (1.95)$$

o

$$\delta = \frac{\omega_c}{1-\omega_c} = \frac{d+2-\eta}{d-2+\eta}, \quad (1.96)$$

donde hemos usado (1.92)

1.4.9 Los Exponentes Críticos para $T \neq T_c$

Para calcular los valores de los tres exponentes críticos restantes ($T \neq T_c$), estudiamos el modelo en la región de punto de retorno, donde $\mathbf{H}^{(n)}$ pasa cerca del punto fijo crítico. Como comenzamos a partir de una cierta temperatura y nos vamos acercando a T_c la trayectoria de $\mathbf{H}^{(n)}$ a través del espacio de Hamiltonianos se acercará más y más al punto fijo crítico antes de desviarse y alejarse de éste hacia el punto fijo de alta o de baja temperatura. En el punto de retorno, donde nos encontramos muy cerca de \mathbf{H}^* , el Hamiltoniano efectivo se moverá muy lentamente, su valor estará muy cercano a \mathbf{H}^* y por tanto muy cercano a un punto estacionario de la transformación de renormalización. En esta región los valores sucesivos del Hamiltoniano efectivo pueden hacerse muy cercanos unos a otros simplemente haciendo la temperatura t muy cercana a T_c . Entonces podemos, para fines prácticos, considerar los sistemas gobernados por $\mathcal{H}^{(n)}$ y $\mathcal{H}^{(n+1)}$ son el mismo sistema. En particular estos tendrán el mismo comportamiento crítico. Esto no significa, sin embargo, que los valores numéricos de las cantidades medibles permanecen iguales cuando renormalizamos. Nosotros estamos situados en una región muy cercana al punto crítico, donde sabemos que varias de las cantidades medibles cambian drásticamente cuando cambiamos ligeramente algún parámetro del sistema. Entonces la idea aquí, es que los sistemas gobernados por el n -ésimo y el $(n+1)$ -ésimo Hamiltoniano presentan el mismo comportamiento en el régimen crítico.

El Exponente β

De los exponentes para $T \neq T_c$ el más simple de calcular es β , que describe cómo la magnetización espontánea varía con la temperatura cuando nos aproximamos a T_c por debajo:

$$m \sim |T - T_c|^\beta, \quad B = 0, T \rightarrow T_c \text{ por debajo} \quad (1.97)$$

En realidad, sabemos muy poco de cómo T y T_c varían cuando renormalizamos pero podemos evitar este problema cambiando $T - T_c$ por la longitud de correlación ξ que sabemos que varía de acuerdo a la temperatura como:

$$\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}, \quad (1.98)$$

donde ν está dada por la ecuación (1.71). Entonces

$$m \sim \xi^{\frac{-\beta}{\nu}}, \quad \xi \rightarrow \infty. \quad (1.99)$$

Ahora para algunos dos valores de la longitud de correlación y los correspondientes valores de la magnetización podemos escribir:

$$\frac{m_1}{m_2} = \left(\frac{\xi_1}{\xi_2} \right)^{-\frac{\beta}{\nu}}. \quad (1.100)$$

Cuando estamos cerca del punto crítico, sin embargo, la ecuación (1.78) describe justamente tal par de valores para la longitud de correlación y la ecuación (1.81) los correspondientes a la magnetización. Sustituyendo éstos en la ecuación (1.100) entonces obtenemos:

$$b^{d(1-\omega_c)} = b^{\frac{\beta}{\nu}}, \quad (1.101)$$

o

$$\beta = \nu d(1 - \omega_c) = \frac{1}{2} \nu (d + \eta - 2). \quad (1.102)$$

donde hemos hecho uso de la ecuación (1.92). También hemos establecido $\omega = \omega_c$ dado que estamos suponiendo que $\omega \rightarrow \omega_c$ cuando $\mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H}^*$.

El exponente γ

El exponente crítico γ describe como la susceptibilidad χ varía con la temperatura cuando nos aproximamos a T_c por arriba:

$$\chi \sim |T - T_c|^{-\gamma}, \quad T \rightarrow T_c \quad \text{por arriba.} \quad (1.103)$$

Otra vez hacemos uso de la ecuación (1.98) para escribir ésto como

$$\chi \sim \xi^{\frac{\gamma}{\nu}}, \quad (1.104)$$

y entonces

$$\frac{\chi_1}{\chi_2} = \left(\frac{\xi_1}{\xi_2} \right)^{\frac{\gamma}{\nu}}, \quad (1.105)$$

para cualesquiera dos valores de la longitud de correlación, y los valores correspondientes de la susceptibilidad. Entonces usando las ecuaciones (1.78) y (1.87), obtenemos:

$$b^{d(1-2\nu_c)} = b^{-\frac{\gamma}{\nu}}, \quad (1.106)$$

o

$$\gamma = \nu d(2\nu_c - 1) = \nu(2 - \eta). \quad (1.107)$$

El exponente α

Finalmente obtendremos el exponente α , el cual describe como diverge el calor específico con la temperatura cuando nos aproximamos al punto crítico por arriba. Este exponente, a diferencia de los anteriores, es considerablemente más difícil de calcular ya que el calor específico no se encuentra relacionado de una manera simple con las variables de bloque $\sigma_i^{(n)}$. Procederemos primero a calcular la energía libre (adimensional) por sitio del modelo renormalizado después de n iteraciones de la ecuación (1.57):

$$\hat{f}^{(n)} \equiv \frac{\beta F^{(n)}}{N^{(n)}} = -\frac{1}{N^{(n)}} \log Z^{(n)}. \quad (1.108)$$

$N^{(n)}$ es el número de sitios que quedan en la malla después de n iteraciones, y la función de partición está definida de acuerdo a la ecuación (1.52). Afortunadamente, para encontrar $f^{(n)}$ no necesitamos llevar a cabo la suma sobre estados que aparece en la ecuación (1.52). Si hacemos todas las variables

$\sigma_i^{(n)}$ igual a cero en la ecuación (1.51) entonces, usando la ecuación (1.53), encontramos que:

$$P^{(n)}(\{0\}) = \frac{1}{Z^{(n)}} \quad (1.109)$$

entonces

$$\hat{f}^{(n)} = \frac{1}{N^{(n)}} \log[P^{(n)}(\{0\})]. \quad (1.110)$$

Podemos calcular la probabilidad $P^{(n+1)}(\{0\})$ si conocemos $P^{(n)}(\{\sigma_i^{(n)}\})$ simplemente sumando las probabilidades de todas las configuraciones de $\sigma_i^{(n)}$ que dan $\sigma_i^{(n+1)} = 0$:

$$P^{(n+1)}(\{0\}) = \sum_{\sigma_i^{(n+1)}=0} P^{(n)}(\{\sigma^{(n)}\}) = \frac{1}{Z^{(n)}} \sum_{\sigma_i^{(n+1)}=0} \exp[-\mathcal{H}^{(n)}(\{\sigma_i^{(n)}\})]. \quad (1.111)$$

Ahora, obteniendo el logaritmo y dividiendo entre $N^{(n+1)}$, resulta:

$$\begin{aligned} \hat{f}^{(n+1)} &= -\frac{1}{N^{(n+1)}} \log Z^{(n)} + \frac{1}{N^{(n+1)}} \log \sum_{\sigma_i^{(n+1)}=0} \exp[-\mathcal{H}^{(n)}(\{\sigma_i^{(n)}\})] \\ &= b^d (\hat{f}^{(n)} - g^{(n)}), \end{aligned} \quad (1.112)$$

donde

$$g^{(n)} \equiv -\frac{1}{N^{(n)}} \log \sum_{\sigma_i^{(n+1)}=0} \exp[-\mathcal{H}^{(n)}(\{\sigma_i^{(n)}\})]. \quad (1.113)$$

Aquí hemos hecho uso del hecho de que $N^{(n+1)} = N^{(n)}/b^d$. Vemos que la energía libre $f^{(n)}$ no se renormaliza de la misma forma multiplicativa como en el caso de las cantidades que hemos considerado antes. Se requiere de una ley más complicada que involucra cambios aditivos y multiplicativos. Este comportamiento es característico de la energía libre. Nótese también que la nueva cantidad $g^{(n)}$ que hemos definido es intensiva, esto quiere decir que, para un sistema grande, esta cantidad es independiente del tamaño del sistema. Usando la ecuación (1.112) iterativamente podemos mostrar que la energía libre verdadera $f = \kappa_B T f^{(0)}$ para nuestro sistema esta dada por ¹:

$$f = \kappa_B T \sum_{n=0}^{\infty} b^{-nd} g^{(n)}. \quad (1.114)$$

¹ También requerimos que $\lim_{n \rightarrow \infty} b^{-nd} \hat{f}^{(n)} = 0$

Para tener una visión más física de lo anterior, es conveniente escribir g como función de la longitud de correlación $\xi^{(n)} \equiv \xi/b^n$ en lugar de n . De hecho, debido a que g es adimensional y hay sólo dos parámetros en el problema con dimensiones de longitud, ésta debe ser una función de $a/\xi^{(n)}$, siendo a el tamaño de la malla. Llamemos a esta combinación de variables x . Entonces la ecuación (1.114) queda:

$$f = \kappa_B T \left(\frac{\xi}{a} \right)^{-d} \sum_{n=0}^{\infty} x_n^{-d} g(x_n), \quad (1.115)$$

con $x_n \equiv a/\xi^{(n)} = ab^n/\xi$ para $n \geq 0$. La diferencia entre x_n y x_{n+1} es $ab^n(b-1)/\xi$, que se hace menor y menor conforme nos aproximamos a la temperatura crítica y $\xi \rightarrow \infty$. Como tomamos este límite, la suma en la ecuación (1.115) puede ser aproximada mejor por una integral. La forma apropiada para esta integral es

$$\frac{dn}{dx} dx = \frac{dx}{x \log b},$$

y entonces nuestras expresiones de f se vuelven:

$$f = \kappa_B T \left(\frac{\xi}{a} \right)^{-d} [\log b]^{-1} \int_{a/\xi}^{\infty} x^{-d} g(x) \frac{dx}{x}. \quad (1.117)$$

Cuando $T \rightarrow T_c$, el límite inferior de ésta integral se hace cero, y la integral se hace independiente de la longitud de correlación. Por tanto f va como ξ^{-d} y $f \sim |T - T_c|^{\nu d}$ de donde, en el límite cuando $T \rightarrow T_c$, el calor específico C obedece a:

$$C = T \frac{d^2 f}{dT^2} \sim |T - T_c|^{\nu d - 2}, \quad (1.118)$$

y

$$\alpha = 2 - \nu d. \quad (1.119)$$

1.4.10 Las Leyes de Escalamiento

Hemos visto que podemos escribir todos los exponentes críticos en términos de sólo dos números: de ν y de ω_c o de η . Supongamos que tenemos un Hamiltoniano efectivo \mathcal{H} que es una función de las variables de bloque σ_i y un conjunto de parámetros $\{H_i\}$. Supongamos además que hemos construido un

procedimiento de renormalización que mapea este Hamiltoniano efectivo en otro de exactamente la misma forma funcional pero con diferentes valores de los parámetros H_i . Las variables de bloque para esta transformación pueden ser definidas por alguno de los métodos que hemos visto anteriormente o bien, por algún otro método. Ahora deduciremos a partir de este problema completamente general, la ecuación equivalente a (1.112) que nos dice cómo cambia la energía libre cuando la renormalizamos. El factor de Boltzmann para el sistema renormalizado puede ser escrito como:

$$e^{-\mathcal{H}(\{\sigma'_i\})} = e^{-\beta G} \sum_{\{\sigma_i\}^*} e^{-\mathcal{H}(\{\sigma_i\})} \quad (1.120)$$

donde $\{\sigma\}^*$ significa configuraciones $\{\sigma_i\}$ consistentes con $\{\sigma'_i\}$.

Esta ecuación define el Hamiltoniano efectivo renormalizado. La constante $e^{\beta G}$ es independiente de $\{\sigma'_i\}$ y es escogida de tal forma que satisfaga la condición dada por (1.53) o alguna otra condición equivalente. Ahora sumando ambos lados de la ecuación (1.120) sobre todas las posibles configuraciones $\{\sigma'_i\}$ del sistema renormalizado, tomando el logaritmo y dividiendo entre β , encontramos que

$$F' = F - G. \quad (1.121)$$

La energía libre F es una función extensiva de los parámetros H_i que aparecen en \mathcal{H} , entonces podemos escribirla en la forma $\beta F = Nf(\{H_i\})$ donde la función f es la energía libre adimensional por sitio introducida en la última sección. Similarmente podemos escribir $\beta F' = N'f(\{H'_i\})$ donde f es la misma función que en la expresión anterior pero ahora sus argumentos son diferentes. $N' = N/b^d$ es el número de sitios en la malla renormalizada. Si F' y F son proporcionales a N , G también lo es, y podemos definir $\beta G = Ng(\{H_i\})$, donde g es una cantidad intensiva. Con estas consideraciones, la ecuación (1.121) resulta:

$$f(\{H'_i\}) = b^d (f(\{H_i\}) - g(\{H_i\})). \quad (1.122)$$

Ahora consideremos lo que sucede cuando estamos cerca del punto fijo crítico. En esta región el parámetro H'_i puede ser expresado como una combinación lineal de H_i . La relación entre estos dos conjuntos de parámetros es descrito por la matriz \mathbf{M} de acuerdo a la ecuación (1.62). Escribamos esta ecuación en la base en la que \mathbf{M} es diagonal. Si denotamos los parámetros de esta base por x_i , la ecuación (1.62) resulta simplemente:

$$x'_i = \lambda_i x_i, \quad (\text{sin sumar sobre } i). \quad (1.123)$$

donde λ_i es el i -ésimo eigenvalor de M . Esto significa que podemos escribir (1.122) como:

$$f(\lambda_1 x_1, \lambda_2 x_2, \dots) = b^d (f(x_1, x_2, \dots) - g(x_1, x_2, \dots)). \quad (1.124)$$

A continuación debemos hacer la suposición de que el comportamiento singular de la energía libre del sistema renormalizado proviene del término $f(x_1, x_2, \dots)$ del lado derecho de la ecuación (1.124) y no de $g(x_1, x_2, \dots)$. Esta suposición de la regularidad de la transformación de renormalización en el punto fijo crítico es vital para teoría de renormalización. Algunas transformaciones de renormalización son regulares, otras no. Puede mostrarse, por ejemplo, que una transformación como (1.48), en el que las variables de bloque dependen linealmente de las variables originales, es regular. Debemos siempre de tratar de usar sólo transformaciones regulares. Ahora supongamos que así lo hemos hecho, entonces escribiendo los términos singulares de f como f_{sing} tenemos:

$$f_{sing}(\lambda_1 x_1, \lambda_2 x_2, \dots) = b^d f_{sing}(x_1, x_2, \dots). \quad (1.125)$$

Considerando ahora el caso simple en el que tenemos un sistema con campo externo $B = 0$, tenemos un eigenvalor, digamos λ_1 que es mayor que la unidad. Su eigenvector queda fuera de la superficie crítica. La coordenada x_1 en esta dirección es proporcional a $T - T_c$ cerca del punto fijo crítico. Supongamos que cuando nos acercamos hacia el punto fijo crítico variando x_i , la parte singular f_{sing} de la energía libre varía como $x_1^{a_1}$. Poniendo todas las x_i excepto x_1 iguales a cero en la ecuación (1.125), obtenemos:

$$(\lambda_1 x_1)^{a_1} = b^d x_1^{a_1}, \quad (1.126)$$

y también

$$\lambda_1 = b^{y_1}, \quad (1.127)$$

donde

$$y_1 = \frac{d}{a_1}. \quad (1.128)$$

Podemos, a través de un argumento similar, tratar el caso en el que $T = T_c$, pero $B \neq 0$. Aquí otra vez hay un eigenvalor (el magnético), digamos λ_2 , que es mayor que cero. La coordenada x_2 en la dirección del correspondiente eigenvector es proporcional al tamaño del campo externo B cerca del punto

fijo crítico. Cuando nos aproximamos hacia el punto fijo crítico variando x_2 , $f_{sing} \sim x_2^{d/2}$, entonces:

$$\lambda_2 = b^{y_2}, \quad (1.129)$$

donde

$$y_2 = \frac{d}{\alpha_2}. \quad (1.130)$$

Colocando éstos resultados juntos podemos escribir la ecuación (1.125) como

$$f_{sing}(b^{y_1} x_1, b^{y_2} x_2, 0, 0, \dots) = b^d f_{sing}(x_1, x_2, 0, 0, \dots). \quad (1.131)$$

Estableciendo $b = x_1^{-1/y}$, ahora resulta

$$x_1^{d/y} f_{sing}(1, x_2/x_2^{y-2/y}, 0, 0, \dots) = f_{sing}(x_1, x_2, 0, 0, \dots). \quad (1.132)$$

Que es exactamente la forma de la hipótesis de homogeneidad de Widom, de la cual las leyes de escalamiento se siguen inmediatamente.[14]

1.5 Entropía y Principios Variacionales

La descripción de los sistemas termodinámicos, se obtiene mediante la relación fundamental en sus distintas representaciones. Estas funciones presentan la característica de que alcanzan valores extremos cuando el sistema se encuentra en equilibrio. Por ejemplo, el estado de equilibrio termodinámico de un sistema a una temperatura y volumen fijo, es aquel que minimiza la energía libre de Helmholtz. De manera similar, en el equilibrio a presión y temperatura constante, la energía libre de Gibbs alcanza un mínimo. Como sabemos, la entropía alcanza un máximo en el equilibrio, mientras que la energía interna se minimiza. Estos resultados pueden ser empleados en cálculos estadísticos y termodinámicos para estimar los valores de los parámetros en el equilibrio [5].

1.5.1 Principio de Máxima Entropía

Si un sistema aislado cambia su estado termodinámico infinitesimalmente, el cambio de entropía en el proceso obedece la relación:

$$S \geq 0. \quad (1.133)$$

La desigualdad ocurre para algún cambio espontáneo (irreversible). Después de que el sistema aislado ha agotado todos los cambios espontáneos posibles (cada uno con $dS > 0$), la entropía habrá alcanzado un valor máximo. Un posterior cambio infinitesimal en el estado será ahora, reversible y se cumplirá la igualdad.

Este es uno de los postulados fundamentales de la termodinámica, y nos dice que existe una función de los parámetros extensivos de algún sistema compuesto, llamada entropía y denotada por S , definida para todos los estados de equilibrio y que tiene la siguiente propiedad: los valores que adquieren los parámetros extensivos en ausencia de alguna restricción interna son aquellos que maximizan la entropía sobre todo el conjunto de estados de equilibrio [12].

1.5.2 Información de Shannon

A continuación introduciremos el concepto de medida de información. El objetivo de tal medida, es distinguir entre distribuciones de probabilidad con alta o baja calidad de predicción. Una medida de información es una medida del conocimiento que un observador gana con respecto a la ocurrencia de un evento si conoce la distribución de probabilidad y nada más.

Números-bit

Podemos considerar una unidad bit de almacenamiento de una computadora como un interruptor con dos posibles posiciones. Un conjunto A de tales interruptores puede tomar

$$N = 2^A \quad (1.134)$$

diferentes estados y entonces dar N diferentes estructuras de bit. En particular cada uno de estos estados puede ser usado para seleccionar uno de los N números $0, 1, 2, \dots, N - 1$. Esto puede hacerse por ejemplo, escribiendo un número m como un número binario de longitud A en la forma:

$$m = \sum_{k=0}^{A-1} s_k 2^k \quad (1.135)$$

donde s_k es 0 o 1. Entonces podemos representar cada s_k por la posición del k -ésimo interruptor. La ecuación (1.134) dice que necesitamos:

$$A = \frac{\ln N}{\ln 2} \quad (1.136)$$

bits para seleccionar uno de N eventos. Es conveniente usar $\ln 2$ como una unidad y definir:

$$b = \ln N \quad (1.137)$$

como el *número bit*. Ahora hagamos que p_i sea la probabilidad de un evento i de un conjunto muestra de R eventos $i = 1, 2, \dots, R$. Llamemos al conjunto de todas las p_i , que en general pueden tomar diferentes valores, una distribución de probabilidades o simplemente una distribución y podemos a veces denotarla por p . Todas las cantidades numéricas que ocurren en un mecanismo digital son números racionales. Entonces, si simulamos probabilidades de ciertos eventos en una computadora podemos suponer que cada probabilidad p_i puede ser representada por el cociente de dos enteros positivos N_i y N , esto es:

$$p_i = \frac{N_i}{N} \quad (1.138)$$

con

$$N = \sum_{i=1}^R N_i. \quad (1.139)$$

Consideremos ahora un gran conjunto de muestras de N eventos elementales α de igual probabilidad. Este conjunto es dividido en subconjuntos $i = 1, 2, \dots, R$ que no tienen elementos en común. Cada subconjunto es una composición de N_i eventos elementales. La probabilidad de encontrar un evento elemental α en el i -ésimo subconjunto está dado por p_i de la ecuación (1.138) y es la probabilidad del evento compuesto i . Este evento es representado por el subconjunto i y significa encontrar algún evento elemental arbitrario α que se encuentra en el subconjunto. El mínimo número bit necesario para seleccionar un evento elemental α fuera del conjunto muestra es $\ln N$. Este tiene que ser independiente de si seleccionamos primero el subconjunto i en el que α se encuentra y entonces seleccionar α fuera de éste subconjunto, o de si seleccionamos α directamente de un conjunto de muestras grande. Denotemos el número bit necesario para seleccionar el subconjunto i por b_i . Entonces se establece que:

$$b_i + \ln N_i = \ln N. \quad (1.140)$$

Y obtenemos el siguiente resultado:

$$b_i = -\ln p_i \quad (1.141)$$

que es el número bit de un observador ausente, cuyo objeto es saber cuando ocurrirá el evento i , si sólo conoce la probabilidad p_i de éste evento. Por conveniencia podemos excluir los eventos con probabilidad cero. En la práctica esta no es una restricción seria.

Medida de Información de Shannon

La medida de información de Shannon se expresa por la siguiente ecuación:

$$I(p) = \sum_{i=1}^R p_i \ln p_i. \quad (1.142)$$

Esta cantidad es una función de la distribución de p . Podemos también incluir eventos con probabilidad cero, debido a que el límite de $p_i \ln p_i$ cuando $p_i \rightarrow 0$ es cero. Tales eventos no contribuyen a $I(p)$. Como la cantidad b_i mide la ausencia de conocimiento, entonces $-b_i$ el conocimiento. $I(p)$ fué introducida por Shannon, Weaver y Wiener como una medida de la información en la teoría de comunicación. Para distinguir $I(p)$ de otras medidas de información esta es llamada Información de Shannon. Esta puede ser considerada como una medida del conocimiento de un observador acerca de la pregunta de cuál evento del conjunto de muestras se espera, si se conoce sólo la distribución p . Como $0 \leq p_i \leq 1$, la cantidad $I(p)$ es siempre negativa, y el valor máximo de cero corresponde al conocimiento óptimo. La medida de información negativa:

$$S(p) = -I(p) \quad (1.143)$$

es llamada entropía de Shannon. Esta es una medida de la ausencia de conocimiento acerca del sistema. Es siempre positiva. La cantidad $S(p)$ es bien conocida en mecánica estadística. Esta corresponde con la entropía térmica en el caso especial de que los eventos i sean microestados dinámicos en el espacio de fase de Gibbs de la mecánica clásica o los estados cuánticos puros en el espacio de Hilbert en la mecánica cuántica. Sin embargo ésta está restringida a el caso en el que la distribución p corresponde con el equilibrio térmico macroscópico. $I(p)$ toma su valor máximo 0 para un estado puro, que significa para una distribución en la que sólo un microestado -digamos j - es alcanzado. Por otro lado $I(p)$ toma su valor mínimo $-\ln R$ si todos los eventos $i = 1, \dots, R$ tienen igual probabilidad.

Principio de Máxima Entropía

En 1877 Boltzmann introdujo la función entropía

$$S = - \int p(x) \ln p(x) dx \quad \text{con} \quad \int p(x) dx = 1. \quad (1.144)$$

En el principio de máxima entropía se busca la distribución $p(x)$ que maximiza la entropía sujeta a las condiciones auxiliares (con $F_1(x) = c_1 = 1$)

$$\int F_i(x) p(x) dx = c_i \quad \text{con} \quad i = 1, 2, \dots, l. \quad (1.145)$$

Por medio del método de multiplicadores de Lagrange uno introduce parámetros $\lambda_1, \dots, \lambda_l$ que serán escogidos después de hacer variaciones del funcional de $p(x)$.

$$F(p) = - \int p(x) [\ln p(x) + \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_l F_l] dx \quad (1.146)$$

se hace cero cuando

$$\delta F(p) = - \int [\ln p(x) + 1 + \lambda_1 + \lambda_2 F_2 + \dots + \lambda_l F_l] \delta p(x) dx = 0 \quad (1.147)$$

esto es con:

$$p(x) = \exp [-(1 + \lambda_1 + \lambda_2 F_2 + \dots + \lambda_l F_l)] \quad (1.148)$$

Ahora examinemos este proceso de una manera inversa. Supongamos que estamos interesados en una distribución conocida $p(x)$, y queremos saber qué condiciones auxiliares se requieren escoger para que la función maximice la entropía para esta distribución. El ejemplo mas simple es :

$$p(x) = \begin{cases} \mu e^{-\mu x} & \text{con } 0 \leq x < \infty \\ 0 & \text{para } x < 0 \end{cases}$$

Entonces

$$S = \int_0^{\infty} \mu e^{-\mu x} [\ln \mu - \mu x] dx. \quad (1.149)$$

λ_1 puede ser escogida como $\lambda_1 = -(1 + \ln \mu)$, λ_2 como μ , y la función $F_2 = x$. Entonces el decaimiento exponencial maximiza la función entropía sujeta a la

restricción de que el valor medio de x es fijo. El siguiente caso más complicado (pero común en mecánica estadística de equilibrio), es la distribución normal.

$$p(x) = (2\pi\sigma^2)^{-1/2} \exp(-x^2/2\sigma^2), \quad -\infty < x < \infty. \quad (1.150)$$

Entonces

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} p(x) \left[\frac{1}{2} \ln(2\pi\sigma^2) - (x^2/2\sigma^2) \right] dx \quad (1.151)$$

Aquí se ha escogido $\lambda_1 = -(1 + \frac{1}{2} \ln 2\pi\sigma^2)$ y $F_2 = cx^2$, entonces se pide de condición que el segundo momento de la distribución sea finito.

1.6 Entropía Generalizada o de Tsallis

1.6.1 Principios Variacionales de la Entropía

Las distribuciones Gaussianas son fundamentales en la naturaleza, y es sabido que se encuentran íntimamente relacionadas con muchos fenómenos. sin embargo, existe otra gran cantidad de fenómenos estocásticos en la física, biología y ciencias socioeconómicas que están controlados por distribuciones de Lévy. La pregunta básica es: ¿cuál es el fundamento termoestadístico de este tipo de distribuciones?. Tal respuesta es bien conocida para los fenómenos regidos por distribuciones gaussianas, y se encuentra fundamentada en dos pilares: la entropía de Boltzmann-Gibbs (BG) y el teorema de límite central estándar. ¿Cuál será el análogo para las distribuciones de tipo Lévy? Montroll y colaboradores mostraron que si usamos la entropía de BG las restricciones auxiliares impuestas para encontrar la forma de la distribución que optimiza la entropía son inaceptables para el caso de distribuciones de Lévy. Sólo una compleja restricción *ad hoc* puede ser usada en este caso. sin embargo este procedimiento es poco satisfactorio. Hace algunos años este problema fué resuelto mediante un nuevo marco teórico de una termoestadística generalizada que involucra una entropía no extensiva. Antes de explicar estas ideas conviene recordar el caso estándar de las distribuciones tipo gaussianas, en términos de principios variacionales. La entropía de BG asociada con el caso tradicional esta dada por:

$$S_1[p] = -k \int_{-\infty}^{\infty} p(x) \ln[\sigma p(x)] dx \quad (k > 0) \quad (1.152)$$

$\sigma > 0$ es la longitud característica. Con:

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx = 1. \quad (1.153)$$

La restricción adicional mas simple está dada por:

$$\langle x^2 \rangle \equiv \int x^2 p(x) dx = \sigma^2. \quad (1.154)$$

Usando multiplicadores de Lagrange, inmediatamente obtenemos la distribución que optimiza $S_1[p]$:

$$p_1(x) = \exp(-\beta x^2) / Z_1, \quad (1.155)$$

con $Z_1 \equiv \int \exp(-\beta x^2) dx = (\pi/\beta)^{1/2}$.

En años recientes [20], se ha encontrado que el comportamiento de muchos sistemas y procesos naturales obedece a distribuciones de probabilidad con decaimiento de ley de potencia. Este hecho ha producido que se desvíe la atención del estudio de sistemas tradicionales, los cuales son gobernados por distribuciones con decaimiento exponencial (Gaussianas). Como consecuencia del teorema de límite central, la distribución Gaussiana resulta ser el límite de todas las distribuciones simétricas que presentan su segundo momento finito. Esta también se obtiene cuando llevamos a cabo la maximización de la expresión de la entropía extensiva de Boltzmann-Shannon, bajo la restricción de mantener su segundo momento fijo. Por otro lado [19], como se dijo, existe otro tipo de distribuciones estables: las distribuciones de Lévy. Estas exhiben un decaimiento de ley de potencia y sus segundos y superiores momentos no son finitos. Tales distribuciones son obtenidas a través de la maximización de la entropía no extensiva o de Tsallis [28], bajo la restricción de momento generalizado [1], [9]. La entropía generalizada o de Tsallis, provee una medida conveniente de la no-extensividad, aplicable cuando los momentos ordinarios de las distribuciones divergen, y se emplea en asociación con los momentos generalizados de la forma $\langle l^\alpha \rangle_q^r \equiv \sum_l l^\alpha [p(l)]_q^r$ [28].

1.6.2 Características de la Entropía de Tsallis

Como se ha mencionado, la termoestadística de Boltzmann-Gibbs (BG) y la termodinámica usual constituyen una útil y poderosa herramienta teórica para situaciones estándar [3], [30], [15], [29]. Esto es, cuando se presenta una termodinámica extensiva (o aditiva). Sin embargo, este formalismo falla

cuando el sistema físico incluye fuerzas de largo alcance o efectos de memoria largos y también si el sistema evoluciona en un espacio-tiempo no euclídeos. Por "falla", nos referimos a el hecho de que las sumas estándar o integrales que aparecen en el cálculo de las cantidades termoestadísticas relevantes divergen. En consecuencia, no estamos en condiciones de calcular cantidades derivadas de éstas, que son las que normalmente se emplean para caracterizar al sistema y que pueden ser comparadas con los datos experimentales.

En general, sistemas que tanto en su descripción espacio-temporal como en su evolución de espacio fase presentan un comportamiento del tipo multifractal o estructura no convencional, pueden exhibir dificultades matemáticas intratables al ser estudiados mediante los formalismos termoestadísticos estándar o, al menos, manifestar escalas no usuales. Para tratar este tipo de anomalías se ha propuesto un formalismo que generaliza la termoestadística convencional y la termodinámica [30]. Este sigue básicamente dos postulados:

- El primer postulado consiste en suponer la siguiente entropía generalizada:

$$S_q \equiv k \frac{1 - \sum_i p_i^q}{q - 1} \quad (q \text{ pertenece } \mathbb{R}; \sum_i p_i = 1). \quad (1.156)$$

o en general:

$$S_q \equiv k \frac{1 - \text{Tr} \mathbf{p}^q}{q - 1}, \quad (1.157)$$

donde k es una constante positiva, p_i son las probabilidades de los estados microscópicos y p es el operador densidad correspondiente. Uno puede reescribir S_q de la siguiente forma:

$$S_q = \frac{k}{q - 1} \sum_{i=1}^w p_i (1 - p_i^{q-1}), \quad (1.158)$$

que hace evidente que $S_q \geq 0$ en todos los casos, es decir que esta entropía es no-negativa, cóncava en el $\{p_i\}$ para $q > 0$ y cóvexa para $q < 0$. Además reproduce la ecuación de Boltzmann-Gibbs-Shannon ($S_1 = -k_B \sum_i p_i \ln p_i$) en el límite $q \rightarrow 1$. Por otro lado, satisface la

pseudo-aditividad, esto es: si A y B son dos sistemas independientes ($p_{ij}^{A+B} = p_i^A p_j^B$), entonces:

$$\frac{S_q(A+B)}{k} = \frac{S_q(A)}{k} + \frac{S_q(B)}{k} + (1-q) \frac{S_q(A)}{k} \frac{S_q(B)}{k}, \quad (1.159)$$

que muestra que $(1-q)$ es una medida de la *no-extensividad* del sistema.

- El segundo postulado consiste en suponer la siguiente energía interna generalizada:

$$U_q \equiv \sum_i p_i^q \epsilon_i, \quad (1.160)$$

o en general:

$$U_q \equiv \text{Tr} p^q \mathcal{H} \equiv \langle \mathcal{H} \rangle_q, \quad (1.161)$$

donde $\{\epsilon_i\}$ es el espectro de energía (esto es, el conjunto de eigenvalores del Hamiltoniano \mathcal{H}).

La optimización de S_q dada por la ecuación (1.157) con la restricción de que $\text{Tr} \mathbf{p} = 1$ y $\text{Tr} p^q \mathcal{H} = U_{q < \infty}$, lleva a la distribución de equilibrio del conjunto canónico:

$$p = \frac{[1 - (1-q)\beta \mathcal{H}_i]^{\frac{1}{(1-q)}}}{Z_q}, \quad (1.162)$$

donde $\beta \equiv \frac{1}{kT}$ es el multiplicador de Lagrange asociado con la temperatura estadística. La función de partición generalizada está dada por:

$$Z_q \equiv \text{Tr} [1 - (1-q)\beta \mathcal{H}]^{\frac{1}{(1-q)}}. \quad (1.163)$$

En el límite $q \rightarrow 1$ recobramos la distribución de Boltzmann-Gibbs $p \propto e^{(-\beta \mathcal{H})}$. Se puede demostrar que, para toda q :

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S_q}{\partial U_q}, \quad (1.164)$$

$$U_q = \frac{\partial Z_q^{1-q} - 1}{\partial \beta (1-q)}, \quad (1.165)$$

$$F_q \equiv U_q - TS_q = -\frac{1}{\beta} \frac{Z_q^{1-q} - 1}{1-q} \quad (1.166)$$

y

$$C_q \equiv T \frac{\partial S_q}{\partial T} = \frac{\partial U_q}{\partial T} = -T \frac{\partial^2 F_q}{\partial T^2}. \quad (1.167)$$

Por lo que la estructura termodinámica de las transformadas de Legendre se conserva a pesar de que el sistema es no-extensivo. Mas aún, la estabilidad termodinámica puede ser probada para toda q basada en el hecho de que siempre $C_q/q \geq 0$ [15].

Capítulo 2

Planteamiento del Problema

Como se mencionó en la introducción, el sistema de percolación es un problema que ha sido ampliamente estudiado. Estos estudios han llevado a la obtención de resultados analíticos exactos para el caso de percolación en una dimensión. Este hecho resulta muy importante para nuestra investigación, ya que nos permite corroborar las hipótesis planteadas sin necesidad de hacer alguna aproximación. Por otro lado, el sistema de percolación presenta la característica de invariancia ante las transformaciones de escala, por lo que es posible estudiarlo mediante la técnica de grupo de renormalización (GR) obteniéndose resultados sencillos y muy ilustrativos en cuanto a lo que a la técnica de GR se refiere.

Debido a lo anterior, se escogió el sistema de percolación en una dimensión para el desarrollo del presente trabajo de tesis, pues resulta ser un excelente candidato para investigar la relación existente entre los puntos fijos que se obtienen mediante la aplicación del GR y la información proporcionada por el estudio de la función entropía asociada al sistema.

Para describir y establecer claramente el problema a tratar en esta tesis, es necesario primero introducir algunos conceptos importantes concernientes al fenómeno de percolación, con objeto de presentar los términos, definiciones y relaciones importantes que serán empleados a lo largo de este trabajo.

2.1 Fenómeno de Percolación

En esta sección, presentaremos algunos de los conceptos generales involucrados con el problema de percolación enfocándonos principalmente al caso

unidimensional, tanto para el caso de percolación por sitios como para el de percolación por enlaces.

2.1.1 Percolación

Comencemos explicando en qué consiste el fenómeno de percolación.

Imaginemos un arreglo n -dimensional infinito de sitios, los cuales pueden estar en uno de dos estados, digamos ocupados o vacíos [26],[27].

La forma en la que se establece la distribución de los sitios ocupados (o bien los sitios vacíos) origina una amplia gama de problemas ya que podemos escoger alguna condición especial para decidir la forma de ocupar de los sitios o bien, simplemente (como ocurre en el caso típico de percolación), distribuir los sitios ocupados aleatoriamente.

Ahora bien, además de los diferentes tipos de problemas que se obtienen por la forma de distribuir los sitios ocupados y vacíos, podemos encontrar dos variantes principales del problema de percolación de acuerdo a la forma de establecer la conexión entre los sitios ocupados [26], [8].

Una de ellas es conocida como *percolación por sitios* y consiste en que los sitios del arreglo n -dimensional se encuentran ocupados con una probabilidad p , mientras que la probabilidad de que un sitio se encuentre vacío está dada por $1 - p$. En este tipo de percolación, podemos observar algunos sitios ocupados lo suficientemente cerca para considerarlos como un conjunto de sitios interconectados, esto es lo que se conoce como *cúmulo*.

Un s -*cúmulo* es un conjunto de s sitios ocupados conectados a distancias de n -ésimos vecinos [31]. En el caso de percolación típico, para que éste tenga sentido, el valor de n no puede ser muy grande ya que si $n \rightarrow \infty$ la conexión entre los sitios ya no es evidente y se pierden muchas de las aplicaciones descritas por este modelo, siendo éste un caso límite del problema.

La otra variante del fenómeno de percolación, es la que se conoce como *percolación por enlaces* en este caso todos o algunos de los sitios del arreglo se encuentran ocupados, pero sólo unos cuantos se encuentran conectados entre sí con otros por medio de enlaces, de acuerdo a una cierta probabilidad que describe cada sistema.

De esta forma, la presencia de cúmulos corresponde a un conjunto de s sitios ocupados conectados por medio de enlaces. La probabilidad de que exista un enlace puede entonces, estar dada por alguna distribución de probabilidad arbitraria, lo cual da a esta variante del problema de percolación una amplia gama de miembros que pertenecen a la misma familia [23].

Otra cantidad importante es el número promedio de s -cúmulos (por sitio de la malla) la cual es definida como $n_s(p)$ y que es una cantidad que depende de p .

Analicemos qué pasa al variar el valor de p . Si ésta es cercana a cero, sólo algunos sitios se encontrarán ocupados, formando pequeños cúmulos. Por otro lado, p incrementa observamos que, para un cierto valor conocido como *probabilidad crítica* y denotada por p_c , aparece un cúmulo tan grande que atraviesa la malla de un lado a otro. A éste cúmulo que cruza toda la malla se le conoce como *cúmulo infinito*. Para que este concepto de cúmulo infinito tenga sentido, se requiere que la malla sea de tamaño infinito ya que de esta forma el hecho de que el cúmulo atraviere de arriba hacia abajo o de derecha a izquierda se hace irrelevante y en este caso, se ha comprobado a través de numerosos estudios que este cúmulo infinito es único en sentido estadístico[17]. La p_c queda entonces definida como la probabilidad a la cual aparece por primera vez el cúmulo infinito.

Bajo estas características podemos decir que existe una transición de fase ya que, por encima de un cierto valor de p_c , existe un cúmulo infinito mientras que por debajo de este valor no existe la presencia de cúmulo infinito, quedando definidos así, dos posibles estados del sistema.

Si llamamos *probabilidad infinita* P_∞ a la fracción de sitios ocupados que pertenecen a la red de percolación infinita (cúmulo infinito), esta cantidad se hace cero por debajo de p_c y tiene un cierto valor por encima de p_c por lo que la podemos asociar con el parámetro de orden. Y podemos postular que cerca de p_c la $P_\infty \propto (p - p_c)^\beta$ quedando definido así el exponente crítico β para este sistema.

Así mismo, es posible definir el resto de los exponentes críticos como se presenta en la siguiente subsección.

2.1.2 Exponentes Críticos del Fenómeno de Percolación

El fenómeno de percolación, presenta las mismas características que el resto de los sistemas que presentan transiciones de fase. Bajo estas circunstancias cuando p se aproxima a p_c el comportamiento del sistema de percolación es descrito por los exponentes críticos α , β , γ , δ y ν . A continuación se presenta la definición de las cantidades cuya parte singular se comporta obedeciendo una ley de potencia. Este comportamiento queda expresado respecto a los exponentes críticos que fueron definidos anteriormente cuando $t \rightarrow t_c$ sólo que ahora p sustituye a t , por lo que la dependencia de ley de potencia ahora

se presenta cuando $p \rightarrow p_c$:

$$\left[\sum_s n_s(p) \right]_{sing} \propto |p - p_c|^{2-\alpha}. \quad (2.1)$$

$$\left[\sum_s s n_s(p) \right]_{sing} \propto (p - p_c)^3. \quad (2.2)$$

$$\left[\sum_s s^2 n_s(p) \right]_{sing} \propto |p - p_c|^{-\gamma}. \quad (2.3)$$

$$\left[\sum_s s n_s(p) e^{-hs} \right]_{sing} \propto h^{\frac{1}{\delta}}, \quad (2.4)$$

$$\xi(p) \propto |p - p_c|^{-\nu}. \quad (2.5)$$

Estas ecuaciones son válidas sólo para p cercana a p_c o para h cercana a cero [26], [27].

Por simplicidad suponemos que el mismo exponente describe el comportamiento del sistema cuando nos acercamos por arriba o por debajo de p_c . Recalquemos que el subíndice *sing* denota que esta expresión concierne a la parte no analítica de la cantidad y no necesariamente significa que ésta tiende a infinito.

El número real h en la ecuación (2.4) es meramente una variable muda que completa la analogía de este sistema con el sistema del ferromagneto de Ising en una dimensión [27],[26],[8]. Finalmente ξ es la longitud de correlación y corresponde al radio promedio de un cúmulo de percolación típico.

Podemos observar que las ecuaciones anteriores son esencialmente la definición de los exponentes críticos en función de los momentos de la distribución del tamaño del cúmulo n_s .

Haciendo la analogía con las otras transiciones de fase donde $T_c - T$ es reemplazada por $p - p_c$, la expresión $\sum_s n_s$ corresponde a la energía libre, la probabilidad de percolación $P_\infty = \sum_s s n_s$ corresponde a la magnetización espontánea y la susceptibilidad magnética se encuentra relacionada con $\sum_s s^2 n_s$.

2.1.3 Probabilidades Asociadas al Fenómeno de Percolación

El problema de percolación es, en la mayoría de los casos, un fenómeno aleatorio. Por lo tanto, las diferentes redes de percolación contendrán cúmulos de diferentes tamaños y formas.

Para estudiar las propiedades promedio del sistema uno debe entonces, estudiar la estadística de estos cúmulos. Lo anterior se realiza mediante el análisis del número de cúmulos de s sitios por sitio de la malla, esta cantidad se representa como $n_s(p)$ [26].

Existen diferentes tipos de mallas, pero para todas ellas en el caso de percolación por sitios, cada sitio se encuentra ocupado aleatoriamente con probabilidad p o vacío con probabilidad $(1 - p)$ y los cúmulos son grupos de sitios vecinos ocupados. En el caso de percolación por enlaces, generalmente cada sitio de la malla se encuentra ocupado, y algunos de ellos se encuentran conectados por medio de enlaces. Entonces cada enlace se encuentra presente con una probabilidad p mientras que un enlace ausente se encuentra representado por una probabilidad $(1 - p)$. Un cúmulo es entonces un conjunto de sitios ocupados conectados por medio de enlaces.

Una importante variante de este caso es llamado *percolación por sitios de enlace*, en la cual sólo una fracción p de sitios se encuentran ocupados y el resto vacíos. Los enlaces entre los sitios vecinales ocupados se encuentran dados por enlaces con una probabilidad x . El umbral de percolación por enlace x_c ahora es menor que la unidad, si p es igual al umbral de percolación por sitios, y se aproxima al umbral de enlace normal si $p = 1$.

Como se ha dicho, el umbral de percolación p_c es la concentración p a la cual aparece por primera vez un cúmulo infinito en una malla infinita. Para todo $p > p_c$ uno tiene un cúmulo extendiéndose de un lado del sistema al otro, mientras que para todo $p < p_c$ no existe tal cúmulo infinito [8],[26].

Como muchos otros problemas de la física teórica, el problema de percolación puede resolverse exactamente en una dimensión y algunos aspectos de esta solución resultan válidos para dimensiones mayores.

Por este motivo, presentamos a continuación el estudio de percolación por sitios en una larga cadena lineal, donde los sitios de la malla están dispuestos a distancias fijas.

Cada uno de los sitios de la cadena se encuentra aleatoriamente ocupado con una probabilidad p . Para el caso de interacción a primeros vecinos un cúmulo es un grupo de sitios ocupados conectados sin ningún sitio vacío

entre ellos. Un sólo sitio vacío puede desdoblarse el grupo en dos cúmulos diferentes. Con objeto de que el cúmulo se encuentre separado de los otros cúmulos se requiere que los sitios que se presentan en los sitios siguientes de los extremos del cúmulo se encuentren vacíos. Así pues, para tener un s cúmulo necesitamos s sitios ocupados y dos desocupados (los extremos).

La probabilidad de que cada sitio esté ocupado es p . Dado que todos los sitios están ocupados aleatoriamente la probabilidad de que s sitios arbitrarios se encuentren ocupados es p^s . Esta propiedad del producto de las probabilidades es válida sólo para eventos estadísticamente independientes, como la percolación aleatoria. La probabilidad de que un sitio este desocupado es $(1 - p)$ y por tanto, la probabilidad de que los dos extremos del sistema se encuentren desocupados es $(1 - p)^2$.

Entonces la probabilidad total, de que un sitio fijo de la malla sea el extremo de un s -cúmulo es $p^s(1 - p)^2$. El número de cúmulos de tamaño s en una cadena de longitud L , si $L \rightarrow \infty$ es $Lp^s(1 - p)^2$, debido a que cada sitio tiene una probabilidad $p^s(1 - p)^2$ de ser el extremo de un s -cúmulo y existen L de tales sitios. Por esto es práctico hablar de el número de cúmulos por sitio de malla, el cual es el número total dividido entre L esto es $p^s(1 - p)^2$. Este número de cúmulo normalizado es entonces, independiente del tamaño de la malla L e igual a la probabilidad de que un sitio dado sea el extremo de un s -cúmulo.

Definiendo n_s como el número de s -cúmulos por sitio de la malla, en el caso unidimensional obtenemos finalmente:

$$n_s = p^s(1 - p)^2. \quad (2.6)$$

Este número de cúmulo normalizado es crucial para muchas de las discusiones siguientes. Y es igual la probabilidad de que, en una cadena infinita, un sitio arbitrario sea el extremo de un s -cúmulo. Para $p < 1$, el número de cúmulo se va exponencialmente a cero si el tamaño del cúmulo s tiende a infinito. La probabilidad de que un sitio arbitrario sea parte de un s -cúmulo y no sólo de su extremo es mayor por un factor de s , dado que cada sitio puede ser algún sitio del s -cúmulo. Entonces esta probabilidad es $n_s s$.

Para el caso unidimensional a primeros vecinos, el umbral de percolación es $p_c = 1$ debido a que en esta probabilidad todos los sitios de la cadena se encuentran ocupados, y por tanto existe un único cúmulo infinito que atraviesa todo el sistema.

2.1.4 Teoría de Escalamiento y Fenómeno de Percolación

A continuación se presenta la suposición de escalamiento del fenómeno de percolación, con dos exponentes libres σ y τ que se fijan mediante el experimento. En este sentido, la teoría de escalamiento es fenomenológica es decir, que únicamente relaciona diferentes cantidades medibles sin calcular alguna de ellas directamente.

El comportamiento crítico cerca de p_c se encuentra caracterizado por el hecho de que el tamaño de cúmulo típico se hace muy grande cerca de la transición de fase y diverge a p_c . Mientras que el radio de cúmulo típico ξ puede no diverger. Uno puede definir el *tamaño de cúmulo típico* s_ξ como el tamaño que da la contribución principal a las partes singulares de $\sum_s s^2 n_s$, $\sum_s s^3 n_s$, o alguna otra suma de las que aparecen en las ecuaciones donde se definieron los exponentes críticos. Supondremos que todas estas definiciones dan el mismo tamaño típico s_ξ aparte de las constantes numéricas, esto es que todos los diferentes s_ξ divergen con la misma potencia de $|p - p_c|$, este exponente de $|p - p_c|$ es a menudo llamado exponente de escalamiento, y suele denotarse por $1/\sigma$. Entonces el postulado básico es [26], [8]:

“Suponemos que el comportamiento crítico de la percolación es dominado por cúmulos de tamaño $s_\xi \propto |p - p_c|^{-1/\sigma}$, donde todos los diferentes tamaños de cúmulo divergen con el mismo exponente.”

En otras palabras, existe esencialmente un único tamaño de cúmulo típico. El término comportamiento crítico en el postulado anterior se refiere a las partes singulares como fué explicado anteriormente. Por ejemplo s_ξ es el tamaño dominante en $[\sum_s s n_s]_{sing}$ pero no en $\sum_s s n_s$; las singularidades vienen del tamaño de cúmulo típico, el resto de los términos analíticos provienen de cúmulos mucho mas pequeños [26].

Todas las propiedades singulares de los cúmulos deben depender entonces, principalmente de la razón s/s_ξ dado que se ha supuesto que el tamaño de cúmulo típico es único. Pero la suposición $n_s(p) = f(s/s_\xi)$ puede ser demasiado simple, dado que a $p = p_c$, donde $s_\xi = \infty$ el número de cúmulo resultaría ser constante lo cual no ocurre experimentalmente.

Parece entonces razonable que, así como expresamos el tamaño del cúmulo por medio de la razón s/s_ξ , podemos expresar también el número de cúmulos a través de la razón n_s/n_{s_ξ} , suponiendo que ésta depende únicamente de s/s_ξ , esto es:

$$\frac{n_s}{n_{s_\xi}} = F\left(\frac{s}{s_\xi}\right). \quad (2.7)$$

Debido a que el tamaño de cúmulo típico se encuentra definido sólo por factores numéricos, esta suposición no es muy práctica y entonces reemplazamos la razón n_s/n_{s_ξ} por $n_s/n_s(p_c)$, entonces:

Suponemos que la razón $v_s(p) = n_s(p)/n_s(p_c)$ y razones similares de otras propiedades de los cúmulos son funciones sólo de la razón s/s_ξ , esto es

$$v_s(p) = F\left(\frac{s}{s_\xi}\right). \quad (2.8)$$

Las ecuaciones (2.7) y (2.8) explican por que las teorías de este tipo son llamadas teorías de escalamiento: si graficamos n_s contra s obtenemos las gráficas para diferentes $(p - p_c)$ pero si escalamos el tamaño del cúmulo s dividiendo entre s_ξ y el número de cúmulos $n_s(p)$ dividiendo entre $n_s(p_c)$ o n_{s_ξ} entonces en estas variables escaladas las gráficas son independientes de $(p - p_c)$.

Los resultados experimentales han mostrado que a $p = p_c$ el número de cúmulos n_s decae con una ley de potencia simple: $n_s(p_c) \propto s^{-\tau}$ y ahora entendemos que esto se debe a que una ley de decaimiento mas complicada como $n_s(p_c) \propto s^{-\tau} \exp\{-s/s_0\}$ significaría que a p_c existe un cúmulo típico finito de tamaño s_0 . Dado que $s_\xi(p = p_c)$ es infinito, este resultado significaría que podría existir mas de un tamaño de cúmulo típico, en contradicción con nuestra suposición básica. Entonces la ecuación (2.8) se lee: $n_s(p) \propto s^{-\tau} F(s/s_\xi)$ dado que $s/s_\xi \propto |(p - p_c)s^\sigma|^{1/\sigma}$, podemos resumir lo anterior en la forma final:

$$v_s(p) \equiv \frac{n_s(p)}{n_s(p_c)} = f(z), \quad \text{o} \quad n_s(p) \propto s^{-\tau} f(z) \quad (2.9)$$

con $z \equiv (p - p_c)s^\sigma \quad \text{y} \quad f(0) = 1.$

La normalización $f(0) = 1$ proviene del requerimiento $v_s(p_c) = 1$.

2.1.5 Relación entre los Exponentes Críticos

Ahora relacionaremos los exponentes de los cúmulos σ y τ con los otros exponentes críticos $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ definidos anteriormente en la ecuación (2.5). Con objeto de evaluar la parte singular de algún momento $\sum_s s^k n_s$ cualitativamente.

esto es con objeto de obtener sus exponentes críticos correctamente, podemos reemplazar en la suma cada factor de s por el tamaño típico s_ξ y el número de cúmulos n_s por el número de cúmulo típico $n_{s_\xi} \propto s^{-\tau} f(\text{const}) \propto s^{-\tau}$. La suma sobre todos los tamaños de cúmulo s da un factor adicional s_ξ : $[\sum_s s^k n_{s,\text{sing}} \propto s_\xi^{1+k-\tau}$. Debido a que $s_\xi \propto |p - p_c|^{-1/\sigma}$ por definición, tenemos:

$$\left[\sum_s s^k n_s(p) \right]_{\text{sing}} \propto |p - p_c|^{\frac{(\tau-1-k)}{\sigma}}. \quad (2.10)$$

La ecuación (2.10) nos da inmediatamente los exponentes de las ecuaciones (3.1) a (2.5), simplemente tomamos $k = 0$ para el número de cúmulos, $k = 1$ para la probabilidad de percolación, $k = 2$ para la susceptibilidad para obtener α, β, γ como:

$$2 - \alpha = \frac{(\tau - 1)}{\sigma}, \quad \beta = \frac{\tau - 2}{\sigma}, \quad -\gamma = \frac{(\tau - 3)}{\sigma}. \quad (2.11)$$

En $p = p_c$, la suma en la ecuación (3.4) que define el exponente δ proviene fundamentalmente del cúmulo de tamaño s cerca de $\frac{1}{h}$. Entonces la parte no analítica de $\sum_s s n_s(p_c) e^{-hs}$ varía como $h^{-1} h^{-1} h^\tau = h^{\tau-2}$, y tenemos:

$$\frac{1}{\delta} = \tau - 2. \quad (2.12)$$

Y podemos resolver estas cuatro ecuaciones para obtener los exponentes del cúmulo como función de los otros exponentes y derivar las relaciones entre los exponentes:

$$\begin{aligned} \tau &= 2 + \frac{1}{\delta}, \\ \sigma &= \frac{1}{\beta\delta} = \frac{1}{\gamma + \beta}, \\ 2 - \alpha &= \gamma + 2\beta = \beta(\delta + 1) = d\nu. \end{aligned} \quad (2.13)$$

2.1.6 Grupo de Renormalización Aplicado al Sistema de Percolación en una Dimensión

La idea básica de la renormalización es la autosimilaridad en el punto crítico. Lo que define el concepto principal del escalamiento de tamaño finito es el

hecho de que la longitud del sistema L sea mayor o menor que la longitud de correlación $\xi \propto |p - p_c|^{-\nu}$. Los cúmulos pueden separarse en dos grupos principales: aquellos de tamaño s mayor que $|p - p_c|^{-1/\sigma}$ y aquellos con s menores. Para sistemas o cúmulos pequeños, es válido un tipo de ley de potencia por ejemplo $P \propto L^{-\beta/\nu}$, y para cúmulos o sistemas mayores ocurren otras leyes de potencia, por ejemplo $P \propto (p - p_c)^\beta$.

En otras palabras, todos los cúmulos o sistemas menores (en dimensión lineal) que la longitud de correlación ξ son similares unos a otros en sentido promedio. Esta similaridad se rompe para tamaños grandes del orden de ξ así como para tamaños pequeños del orden de la distancia a entre vecinos de la malla. Justo en el umbral de percolación la longitud de correlación es infinita y todos los cúmulos grandes son similares unos a otros.

Si a $p = p_c$ tomamos una porción de tamaño medio de una malla más grande, entonces tanto ésta parte como la malla mas grande son todavía mucho menores que ξ , y por tanto similares unas a otras en el sentido promedio. Como se ha sugerido antes, la similaridad en el sistema se presenta para distancias entre a y ξ . La idea de similaridad basada en lo observado en el fenómeno crítico térmico y la idea de escalamiento, dieron fruto a la primera teoría de renormalización de Wilson[8],[26], [11].

En la renormalización en el espacio real reemplazamos una celda de sitios por un solo *supersitio* considerando que la dimensión lineal b de la celda es mucho menor que ξ . Por supuesto perdemos información al reemplazar un conjunto de sitios, pero si el escalamiento está presente el conjunto de celdas de tamaño b son similares unas a otras, por lo que podemos esperar una buena aproximación cuando renormalizamos todo el sistema. Cuantitativamente tal renormalización requiere una cierta regla que nos diga que hay que hacer, originando que la concentración p' de supersitios ocupados sea en general, diferente que la de los sitios originales. Sólo justo en el punto crítico donde hay autosimilaridad tenemos que $p' = p = p_c$. En general sabemos que la longitud de correlación ξ limita la validéz de la similaridad: entonces el límite ξ es el mismo tanto en el sistema original como en la malla renormalizada ya que ambos presentan similaridad. Así pues, si en la malla original teníamos que $\xi = \text{const}|p - p_c|^{-\nu}$ entonces en la malla renormalizada con la constante de malla b , tenemos $\xi' = \text{const}|p' - p_c|^{-\nu}$, con la misma constante de proporcionalidad y el mismo exponente crítico ν lo cual lleva a que $|p - p_c|$ y $|p' - p_c|$ permanezcan muy pequeñas. Sin embargo, la nueva malla tiene una nueva constante de malla b , y ξ' es medida en estas unidades, $\xi' = \xi/b$. Entonces:

$$b|p' - p_c|^{-\nu} = |p - p_c|^{-\nu}, \quad (2.14)$$

es la ecuación básica de la renormalización en espacio real. Tomando el logaritmo de ambos lados llegamos a lo siguiente:

$$\frac{1}{\nu} = \frac{\log \left[\frac{(p' - p_c)}{(p - p_c)} \right]}{\log b} = \frac{\log \lambda}{\log b}, \quad (2.15)$$

donde $\lambda = p' - p_c / p - p_c = dp' / dp$ en $p = p_c$ (desarrollando en series y despreciando los órdenes superiores).

En resumen, renormalizamos una celda de tamaño b en un sólo supersitio, para mantener la cantidad ξ sin cambio en esta renormalización. También hemos renormalizado p en p' .

Abordaremos ahora el caso unidimensional, con objeto de ilustrar las ideas anteriores. Supongamos que agrupamos los sitios de la cadena en celdas de tamaño b cada una. Una celda ocasionará la conectividad con uno de sus extremos con el otro sólo si todos los sitios se encuentran ocupados. Podemos entonces reemplazar la celda por un nuevo supersitio, e identificar la probabilidad de ocupación de este supersitio como

$$p' = p^b. \quad (2.16)$$

Si comenzamos con $p = 1$, esto lleva también a $p' = 1$. El punto $p^* = 1$ es entonces identificado como punto fijo de esta transformación de grupo de renormalización, ya que como mencionamos anteriormente un punto fijo permanece sin cambio ante la transformación de grupo. Si comenzamos con $p < 1$, entonces la ecuación (2.16) lleva a $p' < p$. Si repetimos este procedimiento muchas veces, la concentración renormalizada se aproxima a cero. Entonces $p = 0$ es también un punto fijo.

En el punto fijo $p^* = 1$, p' es igual que p . Sin embargo si calculamos ξ' en unidades de distancia entre nuestros nuevos supersitios, tendremos $\xi' = \frac{\xi}{b}$. Y dado que $p' = p$ entonces $\xi' = \xi$. Estas dos ecuaciones son consistentes sólo si $\xi = \infty$ (o cero). Por lo tanto identificamos el punto fijo $p^* = 1$ con el umbral de percolación p_c . Obteniendo λ para la ecuación (2.16) resulta:

$$\lambda = \frac{dp'}{dp} = bp^{b-1} = b \quad \text{en} \quad p = 1. \quad (2.17)$$

y entonces:

$$\frac{1}{\nu} = \frac{\log \lambda}{\log b} = \frac{\log b}{\log b} = 1. \quad (2.18)$$

de acuerdo a lo esperado y por tanto, a partir de la transformación de grupo de renormalización se obtienen resultados exactos en una dimensión.

2.1.7 Percolación por Enlaces en una Dimensión con Interacciones de Largo Alcance

A continuación hablaremos un poco acerca de la percolación por enlaces en una dimensión con interacciones de largo alcance.

Hoy en día, el efecto de interacciones de largo alcance en sistemas Hamiltonianos es muy estudiado [23], [3], [30]. Esto debido a que se presenta en una gran variedad de interesantes problemas dinámicos y termodinámicos, tales como exponentes anómalos, ruptura de la extensividad e intensividad termodinámicas estándar y difusión anómala, entre otros. Esta intensa actividad es bien justificada ya que, además, existe una fuerte evidencia de que en tales sistemas ocurre una violación no trivial de la ergodicidad [21].

Este es otro de los motivos por el que resulta interesante estudiar el sistema de percolación por enlaces con interacciones de largo alcance, ya que presenta características de no extensividad bajo ciertas condiciones como veremos a continuación. Lo anterior, puede ser aprovechado para estudiar la entropía generalizada o de Tsallis para este sistema.

El problema de percolación por enlaces consiste en una cadena lineal abierta de tamaño N , donde todos los sitios están conectados unos con otros, a través de enlaces que están presentes con probabilidades p_{ij} entre los sitios i y j , separados por una distancia $l = r_{ij}$. El problema completo es, por supuesto, intratable debido a que consiste en establecer cantidades tales como el parámetro de orden (P_∞) como una función de todo el conjunto $\{p_{ij}\}$.

Sin embargo, un caso particularmente relevante de éste ha sido estudiado numericamente [21], y corresponde a un sistema en el cual la probabilidad de ocupación del enlace está dada por una distribución de ley de potencia de la forma $p_{ij} = p/r_{ij}^\alpha$, donde la probabilidad de ocupación p entre primeros vecinos satisface $0 \leq p \leq 1$, y $\alpha \geq 0$. Podemos ver que el límite de $\alpha \rightarrow \infty$ corresponde a la cadena estándar lineal con interacciones a primeros vecinos, para la cual se sabe que no existe transición de fase a cualquier $p < 1$ (de hecho $p_c = 1$). El estudio mediante simulación numérica de éste sistema, ha

mostrado que este ejemplo presenta tres regímenes con diferente umbral de percolación p_c . En el primero, $p_c = 1$ cuando $2 \leq \alpha < \infty$, en el segundo, $0 < p_c < 1$ cuando $1 < \alpha < 2$, y en el tercero, $p_c = 0$ cuando $0 \leq \alpha \leq 1$.

Para los casos no triviales que son aquellos con $0 \leq \alpha \leq \infty$, se ha encontrado que para la región en la vecindad de $\alpha = 1$ aparece un cambio de la extensividad a la noextensividad para el sistema. Explicaremos un poco más esto. La termodinámica ($N \rightarrow \infty$) del sistema está básicamente controlada por la siguiente integral:

$$N^* \equiv d \int_1^{N^{\frac{1}{d}}} dr r^{d-1} r^{-\alpha} = \frac{N^{1-\frac{\alpha}{d}} - 1}{1 - \frac{\alpha}{d}}. \quad (2.19)$$

Y se puede verificar que en el límite $N \rightarrow \infty$ tenemos:

$$\begin{aligned} N^* &\sim \frac{1}{\frac{\alpha}{d} - 1} && \text{si } \frac{\alpha}{d} > 1, \\ N^* &\sim \ln N && \text{si } \frac{\alpha}{d} = 1, \\ N^* &\sim \frac{N^{1-\frac{\alpha}{d}}}{1 - \frac{\alpha}{d}} && \text{si } 0 \leq \frac{\alpha}{d} < 1. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Estos regímenes implican que el sistema es extensivo para $\alpha/d > 1$ y es no extensivo para $0 \leq \alpha/d \leq 1$. Se encuentra que en el caso $d = 1$ existen dos subregiones físicamente diferentes en la región extensiva. Una para $1 < \alpha \leq 2$ en la cual $0 < p_c < 1$. Otra con $\alpha > 2$, para la cual $p_c = 1$. Mientras que en $\alpha = 2$ ocurre la peculiaridad de que en este valor $p_c(\alpha)$ es discontinua.

El modelo de percolación por enlaces puede ser visto como una forma equivalente de un problema de caminatas aleatorias con una probabilidad de paso p_{ij} entre los sitios i y j . En particular, la ley de potencia $p_{ij} = p/l^\alpha$ lleva a la bien conocida caminata de Weierstrass, el análogo en malla de los vuelos de Lévy [22], [24], [21]. Para facilitar la descripción de éste sistema, es conveniente restringir la longitud de enlace que sean como $l = b^n$, $b > 1$, por lo que hemos pedido esta restricción a nuestro modelo.

2.2 El Problema

Lo presentado anteriormente puede extenderse para estudiar una familia de sistemas dentro de la misma clase de universalidad. En el presente trabajo

nuestro objetivo será estudiar el caso de percolación en una dimensión con interacción a n -ésimos vecinos tanto para el caso de percolación por sitios como para el de percolación por enlaces.

Para el caso de percolación por sitios, el punto de partida será encontrar las expresiones generales para la distribución de probabilidad n_s que acompaña a cada uno de los miembros de una familia de sistemas de percolación por sitios cuando se permite que los sitios se encuentren conectados a n -ésimos vecinos. Una vez identificada esta cantidad se procederá al cálculo de la función entropía tradicional y otras cantidades importantes como la energía libre, parámetro de orden, probabilidad crítica, etc. A continuación se llevará a cabo el estudio variacional de la función entropía de cada sistema, lo cual nos permitirá encontrar los puntos extremos y analizar su comportamiento. Finalmente se propondrá y aplicará la transformación de grupo de renormalización y se obtendrán cantidades importantes como los puntos fijos y los exponentes críticos.

Para el caso de percolación por enlaces, la estrategia será establecer dos variantes del caso descrito anteriormente para la probabilidad asociada a la presencia o ausencia del enlace. Una de ellas será una trayectoria crítica, para tratar de encontrar los puntos fijos no triviales de la transformación de GR y la otra será una trayectoria no crítica para mostrar como la misma transformación de grupo aplicada a esta probabilidad nos conduce hacia el punto fijo trivial. Para estas dos diferentes distribuciones de probabilidad se analizará la entropía tradicional y en adición a ésta, dado que este sistema ha mostrado tener un comportamiento no extensivo para la entropía bajo ciertas condiciones, se obtendrá la expresión para la entropía generalizada o no extensiva (entropía de Tsallis) o bien se hará el análisis mediante el uso de multiplicadores de Lagrange en caso de ser necesario.

Una vez obtenidos estos resultados se hará un análisis del comportamiento de la función entropía en sus valores extremos y se tratará de plantear la posible conexión de estos con los puntos fijos arrojados por medio de la aplicación del GR.

Capítulo 3

Resultados

En este capítulo, se presenta el desarrollo del estudio del sistema de percolación en una dimensión incluyendo dos familias de problemas asociadas a dos de sus variantes, la de percolación por sitios y la de percolación por enlaces.

- Para el caso de *percolación por sitios*, el cual se refiere a un sistema en el que los sitios de la cadena se encuentran ocupados o vacíos, con una cierta probabilidad p y $q = 1 - p$ respectivamente, consideramos la familia de sistemas formada por el grupo de problemas de percolación por sitios en una dimensión donde los vecinos n -ésimos se encuentran conectados (interacciones a n -ésimos vecinos). En este conjunto de sistemas, cada miembro de la familia es un problema completo, y presenta su propia transformación de grupo de renormalización (TGR) conteniendo sus puntos fijos.
- En el caso de *percolación por enlaces*, en el que todos los sitios de la cadena se encuentran ocupados pero sólo algunos de ellos se encuentran conectados por medio de enlaces a sus vecinos más cercanos, a cada enlace se le asigna una cierta probabilidad de que esté presente o ausente. Consideramos dos distribuciones de probabilidades distintas, una de ellas se encuentra sobre la superficie crítica, mientras que la otra no. En este caso estas dos probabilidades constituyen dos miembros de una gran familia de problemas pero, a diferencia del caso anterior, constituyen juntas un sólo problema y la transformación de grupo de renormalización es la misma. Como se espera, una de ellas (la que se

encuentra en la superficie crítica) nos lleva hacia el punto fijo no trivial, mientras que la segunda distribución se aleja de éste y nos conduce hasta el punto fijo trivial al aplicar la TGR.

Para el estudio de estos sistemas, primero comenzamos con una descripción de cada uno de ellos para, posteriormente, presentar el análisis de la distribución de probabilidad asociada a los distintos casos. Posteriormente se presentan, para el modelo de percolación por sitios, las expresiones de las probabilidades asociadas a los casos de interacción a primeros, segundos, terceros y en general para el modelo a n -ésimos vecinos. Para el caso de percolación por enlaces se introducen dos distribuciones de probabilidad distintas asociadas con el enlace de percolación del sistema, las cuales representan también casos de interacciones de largo alcance. Una vez identificada la distribución de probabilidad que describe a cada sistema, se obtienen las expresiones de la función entropía tradicional (S) a partir de la relación:

$$S = -k \sum_i P_i \ln P_i.$$

Para el caso de percolación por enlaces fué necesario además de S , el uso de la entropía no extensiva o de Tsallis dada por:

$$S_q = \frac{k}{q-1} \left\{ 1 - \sum_i [P(i)]^q \right\}. \quad (3.1)$$

Una vez obtenidas estas cantidades se realiza el análisis de los puntos donde la función presenta valores máximos y mínimos. También se muestra el cálculo de otras cantidades importantes como parámetro de orden, energía libre, probabilidad crítica y exponentes críticos en el caso de percolación por sitios. Finalmente se presenta la técnica de grupo de renormalización aplicada a cada sistema con el fin de encontrar los puntos fijos y otras cantidades importantes asociadas al problema (exponentes críticos y la probabilidad crítica p_c) para poder plantear la posible conexión entre estos puntos fijos y los puntos extremos de la función entropía. Para los casos que estudiamos encontramos que estos se corresponden.

3.1 Percolación por Sitios en una Dimensión

En esta sección se discutirá el modelo de percolación por sitios en una dimensión con interacciones a largo alcance. Consideremos una cadena de longitud

infinita compuesta de sitios que se encuentran ocupados o vacíos. La probabilidad de que un sitio se encuentre ocupado esta dada por p mientras que, la probabilidad de que un sitio se encuentre desocupado estará dada por $q = 1 - p$.



Figura 3.1: Percolación por sitios en una dimensión

Como se mencionó anteriormente, al hablar de un s -cúmulo, nos referimos a un conjunto de s sitios ocupados conectados. Estos sitios podrán estar conectados con sus vecinos n -ésimos (interacción a n -ésimos vecinos), entendiendo por primeros vecinos aquellos que se encuentren inmediatamente después del sitio de interés, por segundos vecinos a aquellos que se encuentren dos sitios después del sitio de interés, etc. Y n_s representa la probabilidad de encontrar un s -cúmulo.

3.1.1 Probabilidades Asociadas al Modelo de Percolación por Sitios en una Dimensión

A continuación se retoman algunos resultados ya conocidos para el sistema de percolación por sitios en una dimensión con interacción a primeros vecinos y se amplian para el caso general de interacción a n -ésimos vecinos. Como vimos anteriormente, para el caso de interacción a primeros vecinos los s -cúmulos posibles serán de la forma que se presenta en la figura 3.2, y la distribución de probabilidades de encontrar un s -cúmulo estará dada por:

$$n_s = p^s(1 - p)^2. \quad (3.2)$$

Dado que las probabilidades son independientes y sólo hay una forma de arreglar s sitios ocupados contiguos. La probabilidad de encontrar s sitios ocupados será p^s y la probabilidad de que sólo estos s sitios se encuentren a distancias de primeros vecinos es $(1 - p)^2$ ya que esta probabilidad representa el caso de que los extremos de la cadena de s sitios se encuentren desocupados (ver figura 3.2).

Para el caso de interacción a segundos vecinos, las configuraciones posibles para cada s -cúmulo se muestran en la figura 3.3.

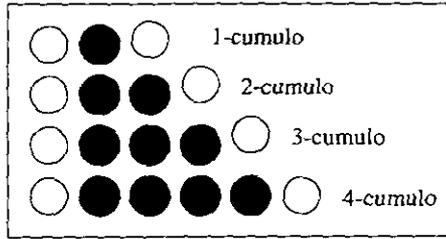


Figura 3.2: Forma de los cúmulos posibles en el caso de percolación por sitios en una dimensión a primeros vecinos.

Por lo que la probabilidad n_s de tener un s -cúmulo será, dependiendo del valor de s :

$$\begin{aligned} n_1 &= pq^4 \\ &= pq^4(1+q)^0, \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} n_2 &= p^2q^4 + p^2q^5 = p^2q^4(1+q) \\ &= p^2q^4(1+q)^1, \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} n_3 &= p^3q^4 + 2p^3q^5 + p^3q^6 = p^3q^4(1+2q+q^2) \\ &= p^3q^4(1+q)^2, \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} n_4 &= p^4q^4 + 3p^4q^5 + 3p^4q^6 + p^4q^7 = p^4q^4(1+3q+3q^2+q^3) \\ &= p^4q^4(1+q)^3, \end{aligned} \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} &\vdots \\ n_s &= p^s q^4 (1+q)^{s-1}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Y rearrreglando la ecuación general (3.7) para la interacción a segundos vecinos tenemos:

$$n_s = p^s q^4 (1+q)^{s-1} = p^s (1-p)^4 [1 + (1-p)]^{s-1} = p^s (1-p)^4 (2-p)^{s-1}. \quad (3.8)$$

De manera semejante para interacción a terceros vecinos, podemos encontrar las configuraciones mostradas en la figura 3.4.

A partir de las posibles configuraciones obtenemos las ecuaciones siguientes para n_s , con $q = 1 - p$:

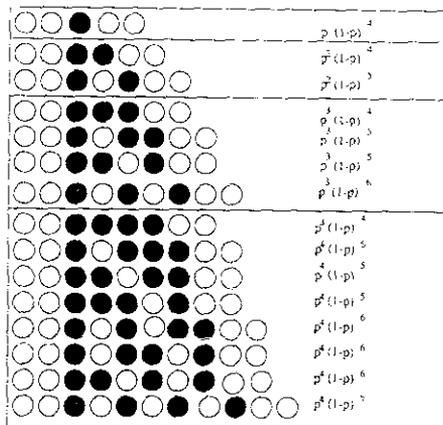


Figura 3.3: Cúmulos posibles en el caso de percolación por sitios en una dimensión a segundos vecinos.

$$\begin{aligned}
 n_1 &= pq^6 \\
 &= pq^6(1 + q + q^2)^0,
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

$$\begin{aligned}
 n_2 &= p^2q^6 + p^2q^7 + p^2q^8 = p^2q^6(1 + q + q^2) \\
 &= p^2q^6(1 + q + q^2)^1,
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

$$\begin{aligned}
 n_3 &= p^3q^6 + 2p^3q^7 + 3p^3q^8 + 2p^3q^9 + p^3q^{10} \\
 &= p^3q^6(1 + 2q + 3q^2 + 2q^3 + q^4) \\
 &= p^3q^6(1 + q + q^2)^2,
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

$$\begin{aligned}
 n_4 &= p^4q^6 + 3p^4q^7 + 6p^4q^8 + 7p^4q^9 + 6p^4q^{10} + 3p^4q^{11} + p^4q^{12} \\
 &= p^4q^6(1 + 3q + 6q^2 + 7q^3 + 6q^4 + 3q^5 + q^6) \\
 &= p^4q^6(1 + q + q^2)^3,
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

$$\begin{aligned}
 n_5 &= p^5q^6 + 4p^5q^7 + 10p^5q^8 + 16p^5q^9 + 19p^5q^{10} + 16p^5q^{11} + 10p^5q^{12} + 4p^5q^{13} + p^5q^{14} \\
 &= p^5q^6(1 + 4q + 10q^2 + 16q^3 + 19q^4 + 16q^5 + 10q^6 + 4q^7 + q^8) \\
 &= p^5q^6(1 + q + q^2)^4,
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

⋮

$$n_s = p^s q^6 (1 + q + q^2)^{s-1}. \tag{3.14}$$

Rearreglado la ecuación (3.14) obtenemos la expresión de n_s para la interac-

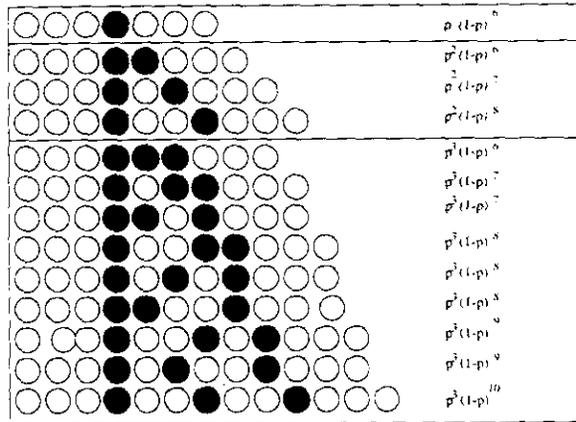


Figura 3.4: Forma de los cúmulos posibles en el caso de percolación por sitios en una dimensión a terceros vecinos.

ción a terceros vecinos:

$$\begin{aligned} n_s &= p^s q^6 (1 + q + q^2)^{s-1} = p^s (1-p)^6 [1 + (1-p) + (1-p)^2]^{s-1} \\ &= p^s (1-p)^6 (3 - 3p + p^2)^{s-1}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

A partir de las ecuaciones (3.2), (3.7) y (3.14) obtenemos la expresión general de n_s para el caso de percolación por sitios en una dimensión con interacciones a n -ésimos vecinos:

$$n_s = p^s q^{2n} \left\{ \sum_{i=0}^{n-1} q^i \right\}^{s-1} = p^s q^{2n} \left(\frac{1 - q^n}{1 - q} \right)^{s-1}. \quad (3.16)$$

Donde la última igualdad se obtiene a partir de la fórmula de la serie geométrica. Analizando esta distribución de probabilidades, podemos observar que el primer término corresponde a la probabilidad de encontrar s sitios ocupados y por tanto representa el tamaño del cúmulo, la información de si se trata de una interacción a primeros, segundos ó n -ésimos vecinos se encuentra contenida en el segundo término q^{2n} dado que este significa la probabilidad de encontrar n sitios desocupados en cada extremo para formar un cúmulo. En otras palabras la presencia de este término nos indica

que el cúmulo no pertenece al cúmulo infinito. Finalmente el término entre paréntesis $(1 - q^n/1 - q)^{s-1}$ nos habla de las posibles configuraciones que pueden existir en los cúmulos.

Energía Libre y Parámetro de Orden Asociados al Modelo de Percolación por Sitios en una Dimensión

A partir de la expresión de n_s para las interacciones a primeros, segundos, terceros y en general a n -ésimos vecinos, se han calculado cantidades importantes [31], [26] tales como el equivalente a la energía libre, que está dada por ¹:

$$\text{energía libre} = \sum_s n_s, \quad (3.17)$$

y el parámetro de orden:

$$\text{parámetro de orden} = \sum_s s n_s. \quad (3.18)$$

Para el caso de primeros vecinos estas cantidades resultan:

$$\begin{aligned} \sum_{s=1}^{\infty} n_s &= \sum_{s=1}^{\infty} (1-p)^2 p^s = (1-p)^2 \sum_{s=1}^{\infty} p^s = \frac{(1-p)^2 p}{(1-p)} \\ &= p(1-p). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Mientras que para el parámetro de orden tenemos:

$$\begin{aligned} \sum_{s=1}^{\infty} s n_s &= \sum_{s=1}^{\infty} s (1-p)^2 p^s = (1-p)^2 \sum_{s=1}^{\infty} s p^s = (1-p)^2 \sum_{s=1}^{\infty} p \frac{d(p^s)}{dp} \\ &= (1-p)^2 p \frac{d \sum_{s=1}^{\infty} p^s}{dp} = (1-p)^2 p \frac{d(p/(1-p))}{dp} \\ &= \frac{(1-p)^2 p}{(1-p)^2} = p. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Extendiendo los resultados anteriores para el caso de segundos vecinos la energía libre queda:

¹ Ver capítulo de planteamiento del problema

$$\begin{aligned}
 \sum_{s=1}^{\infty} n_s &= \sum_{s=1}^{\infty} (2-p)^{s-1} (1-p)^4 p^s = (1-p)^4 \sum_{s=1}^{\infty} p^s \frac{(2-p)^s}{(2-p)} \\
 &= \frac{(1-p)^4}{(2-p)} \sum_{s=1}^{\infty} [p(2-p)]^s = \frac{(1-p)^4 (2p-p^2)}{(2-p)(1-2p+p^2)} \\
 &= \frac{(1-p)^4 (2-p)p}{(2-p)(1-p)^2} = p(1-p)^2. \tag{3.21}
 \end{aligned}$$

Y el parámetro de orden:

$$\begin{aligned}
 \sum_{s=1}^{\infty} s n_s &= \sum_{s=1}^{\infty} s (1-p)^4 p^s (2-p)^{s-1} = \frac{(1-p)^4}{(2-p)} \sum_{s=1}^{\infty} s [p(2-p)]^s \\
 &= \frac{(1-p)^4 p(2-p)}{(2-p)(1-p)^4} = p. \tag{3.22}
 \end{aligned}$$

Procediendo de la misma manera para terceros vecinos resulta para la energía libre:

$$\sum_{s=1}^{\infty} n_s = p(1-p)^3. \tag{3.23}$$

Mientras que el parámetro de orden resulta p como se espera. De las ecuaciones (3.19), (3.21) y (3.23) se deduce fácilmente que la expresión general para la energía libre en el caso de percolación por sitios a n -ésimos vecinos tiene la forma:

$$\sum_{s=1}^{\infty} n_s = p(1-p)^n = pq^n. \tag{3.24}$$

De acuerdo a esta expresión, la energía libre del sistema disminuye conforme n crece. esto es, la energía libre presente en el sistema con interacción a vecinos lejanos es menor que la asociada al sistema con interacción a vecinos cercanos.

Probabilidad Crítica

A continuación se presenta el cálculo de la probabilidad crítica para el conjunto de sistemas de percolación por sitios con interacción a n -ésimos vecinos.

De acuerdo a lo anterior la expresión general de n_s para n -ésimos vecinos está dada por:

$$n_s = p^s q^{2n} \left\{ \sum_{i=0}^{n-1} q^i \right\}^{s-1} = p^s q^{2n} \left(\frac{1 - q^n}{1 - q} \right)^{s-1}. \quad (3.25)$$

Como se mencionó en la sección anterior, sabemos que la función generadora, la cual nos da el número medio de cúmulos por sitio, se obtiene mediante la siguiente expresión:

$$G_L(p) = \sum_{s=1}^{\infty'} \langle n_s \rangle. \quad (3.26)$$

donde la ' indica que el cúmulo ∞ es omitido. Como nos encontramos en una dimensión esperamos que en p_c sólo exista el cúmulo infinito por lo que $G_L(p) = 0$ (no hay cúmulos de ningún otro tamaño). Por tanto calculando esta cantidad tenemos:

$$\begin{aligned} G_L(p) &= \sum_{s=1}^{\infty'} p^s q^{2n} \left(\frac{1 - q^n}{1 - q} \right)^{s-1} = q^{2n} \sum_{s=1}^{\infty'} p^s \left(\frac{1 - (1-p)^n}{1 - (1-p)} \right)^{s-1} \\ &= q^{2n} \sum_{s=1}^{\infty'} p^s \frac{(1 - q^n)^{s-1}}{p^{s-1}} = q^{2n} \sum_{s=1}^{\infty'} p(1 - q^n)^{s-1} \\ &= q^{2n} p \sum_{s=1}^{\infty'} (1 - q^n)^{s-1} = q^{2n} p \sum_{s=1}^{\infty'} \frac{(1 - q^n)^s}{1 - q^n} \\ &= \frac{q^{2n} p}{1 - q^n} \sum_{s=1}^{\infty'} (1 - q^n)^s = \frac{q^{2n} p}{1 - q^n} \left(\frac{1 - q^n}{1 - 1 + q^n} \right) \\ &= \frac{q^{2n} p}{q^n} = q^n p, \end{aligned} \quad (3.27)$$

de donde para que $G_L(p) = 0$ como $p_c \neq 0$, en p_c tenemos $G_L(p) = q^n p_c = 0$ solo si $q = 0$ por lo tanto $p_c = 1$. Esto quiere decir que para todos los casos aún cuando se tenga interacción de largo alcance, la probabilidad crítica continúa siendo 1, esto se entiende si pensamos en que tenemos una cadena infinita de sitios y aun cuando quitemos una cantidad finita de sitios dada, seguiremos teniendo una probabilidad igual a uno.

3.1.2 Entropías Asociadas al Modelo de Percolación por Sitios en una Dimensión

Una vez establecidas las expresiones de la distribución de probabilidades para cada caso, es posible obtener la entropía asociada a cada uno de los sistemas a partir de la conocida expresión:

$$S = -k \sum n_s(p) \ln n_s(p).$$

Para ello es necesario primero normalizar la distribución n_s , esto dividiendo entre:

$$\sum_s n_s = p(1-p)^n. \quad (3.28)$$

donde n significa interacción a n -ésimos vecinos².

Entropía Asociada al Caso de Interacción a Primeros Vecinos

Para el caso de interacción a primeros vecinos, dividiendo ecuación (3.2) entre $p(1-p)$ obtenemos para n_{sn} (n_s normalizada):

$$n_{sn} = \frac{p^s(1-p)^2}{p(1-p)} = p^{s-1}(1-p). \quad (3.29)$$

Y entonces S resulta:

$$\begin{aligned} S &= -k \sum_{s=1}^{\infty} \frac{p^s(1-p)}{p} \ln \left[\frac{p^s(1-p)}{p} \right] = -k \frac{(1-p)}{p} \sum_{s=1}^{\infty} p^s \left[s \ln(p) + \ln \left(\frac{1-p}{p} \right) \right] \\ &= -k \frac{(1-p)}{p} \left[\ln(p) \sum_{s=1}^{\infty} s p^s + \ln \left(\frac{1-p}{p} \right) \sum_{s=1}^{\infty} p^s \right] \\ &= -k \frac{(1-p)}{p} \left[\frac{p}{(1-p)^2} \ln(p) + \frac{p}{(1-p)} \ln \left(\frac{1-p}{p} \right) \right] \\ &= -k \left[\frac{\ln(p)}{(1-p)} + \ln \left(\frac{1-p}{p} \right) \right]. \end{aligned}$$

De donde, la entropía asociada al caso de percolación por sitios con interacción a primeros vecinos en una dimensión puede ser escrita como:

²ver obtención de energía libre sección anterior

$$S = -k \left\{ \frac{\ln[p(q^0)^1]}{q^1} + \ln \left[\frac{q^1}{p(q^0)} \right] \right\}. \quad (3.30)$$

Entropía Asociada al Caso de Interacción a Segundos Vecinos

Procediendo de la misma manera podemos calcular la entropía del sistema con interacción a segundos vecinos normalizando la ecuación (3.8) obtenemos:

$$n_{sn} = \frac{p^s(1-p)^4(2-p)^{s-1}}{p(1-p)^2} = \frac{[p(2-p)]^s(1-p)^2}{p(2-p)}$$

Y para S :

$$\begin{aligned} S &= -k \sum_{s=1}^{\infty} \frac{[p(2-p)]^s(1-p)^2}{p(2-p)} \ln \left\{ \frac{[p(2-p)]^s(1-p)^2}{p(2-p)} \right\} \\ &= -k \frac{(1-p)^2}{p(2-p)} \sum_{s=1}^{\infty} (2p-p^2)^s \left\{ s \ln(2p-p^2) + \ln \left[\frac{(1-p)^2}{2p-p^2} \right] \right\} \\ &= -k \frac{(1-p)^2}{p(2-p)} \left\{ \ln(2p-p^2) \sum_{s=1}^{\infty} s(2p-p^2)^s + \ln \left[\frac{(1-p)^2}{2p-p^2} \right] \sum_{s=1}^{\infty} (2p-p^2)^s \right\} \\ &= -k \frac{(1-p)^2}{(2p-p^2)} \left\{ \frac{(2p-p^2)}{(1-2p+p^2)^2} \ln(2p-p^2) + \frac{(2p-p^2)}{(1-2p+p^2)} \ln \left[\frac{(1-p)^2}{(2p-p^2)} \right] \right\} \\ &= -k \left\{ \frac{(1-p)^2}{(1-p)^4} \ln(2p-p^2) + \frac{(1-p)^2}{(1-p)^2} \ln \left[\frac{(1-p)^2}{(2p-p^2)} \right] \right\} \\ &= -k \left\{ \frac{\ln[p(2-p)]}{(1-p)^2} + \ln \left[\frac{(1-p)^2}{p(2-p)} \right] \right\}. \end{aligned}$$

Reexpresando la ecuación anterior con $q = 1 - p$ obtenemos finalmente la siguiente expresión para S :

$$S = -k \left\{ \frac{\ln[p(q^0 + q^1)]}{q^2} + \ln \left[\frac{q^2}{p(q^0 + q^1)} \right] \right\}. \quad (3.31)$$

Entropía Asociada al Caso de Interacción a Terceros Vecinos

Partiendo de la ecuación (3.14) y siguiendo el mismo desarrollo para el caso de interacción a terceros vecinos, obtenemos:

$$n_{sn} = \frac{p^s(1-p)^6(3-3p+p^2)^{s-1}}{(1-p)^3p} = \frac{(1-p)^3[p(3-3p+p^2)]^s}{p(3-3p+p^2)}, \quad (3.32)$$

y

$$\begin{aligned} S &= -k \sum_{s=1}^{\infty} \frac{(1-p)^3[p(3-3p+p^2)]^s}{p(3-3p+p^2)} \ln \left\{ \frac{(1-p)^3[p(3-3p+p^2)]^s}{p(3-3p+p^2)} \right\} \\ &= -k \frac{(1-p)^3}{p(3-3p+p^2)} \sum_{s=1}^{\infty} [p(3-3p+p^2)]^s \left\{ s \ln[p(3-3p+p^2)] + \ln \left[\frac{(1-p)^3}{p(3-3p+p^2)} \right] \right\} \\ &= -k \left\{ \ln \left[\frac{(1-p)^3}{p(3-3p+p^2)} \right] + \frac{\ln[p(3-3p+p^2)]}{(1-p)^3} \right\}. \end{aligned}$$

Rearreglando esta última expresión tenemos:

$$S = -k \left\{ \frac{\ln[p(q^0 + q^1 + q^2)]}{q^3} + \ln \left[\frac{q^3}{p(q^0 + q^1 + q^2)} \right] \right\}. \quad (3.33)$$

Entropía Asociada al Caso con Interacción a n -ésimos Vecinos

A partir de las ecuaciones (3.30), (3.31), (3.33) podemos obtener la expresión general de la entropía asociada al sistema de percolación por sitios en una dimensión con interacciones a n -ésimos vecinos:

$$\begin{aligned} S &= -k \left\{ \frac{\ln[p(\sum_{i=0}^{n-1} q^i)]}{q^n} + \ln \left[\frac{q^n}{p(\sum_{i=0}^{n-1} q^i)} \right] \right\} \\ &= -k \left\{ \frac{\ln \left[\frac{p(q^n-1)}{q-1} \right]}{q^n} + \ln \left[\frac{q^n}{p \left(\frac{q^n-1}{q-1} \right)} \right] \right\} \\ &= -k \left\{ \frac{\ln(1-q^n)}{q^n} + \ln \left(\frac{q^n}{1-q^n} \right) \right\}. \quad (3.34) \end{aligned}$$

Graficando las expresiones obtenidas para S a primeros, segundos y terceros vecinos obtenemos el comportamiento mostrado en la figura 3.5.

Como podemos observar en la gráfica, la entropía asociada a cada uno de los sistemas presenta su valor mínimo en $p = 0$ mientras que en $p =$

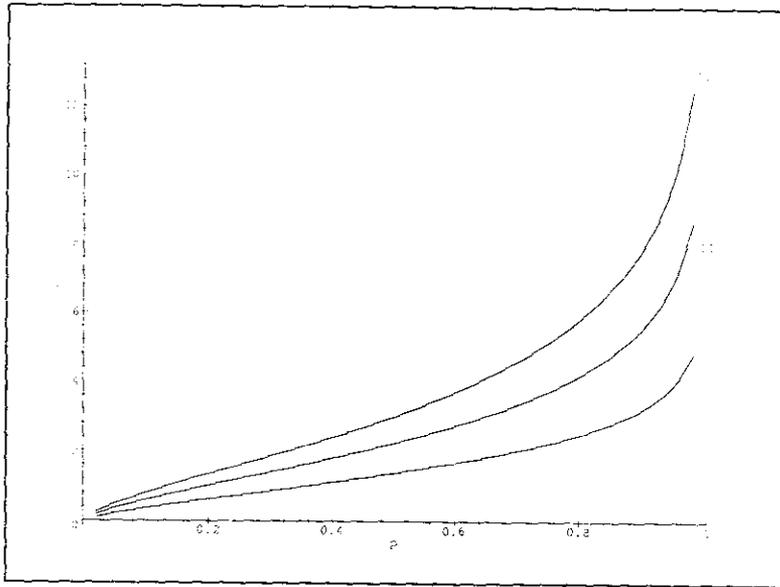


Figura 3.5: Gráfica de la entropía para el sistema de percolación por sitios en una dimensión con interacciones a I) Primeros vecinos, II) Segundos vecinos, III) Terceros vecinos

La entropía alcanza un valor máximo. Hay que notar que esta entropía corresponde a la entropía fuera de la región crítica para todo $p < 1$, ya que $p_c = 1$.

3.1.3 Exponentes Críticos

A continuación se muestra la obtención de los exponentes críticos para la familia de sistemas estudiados [31]. Sabemos que n_s está dada por:

$$n_s = pq^{2n}(1 - q^n)^{s-1} = p(1 - p)^{2n}(1 - (1 - p)^n)^{s-1}.$$

Rearreglando la expresión anterior podemos escribirla de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} n_s &= \frac{p(1-p)^{2n}(1-(1-p)^n)^s}{(1-(1-p)^n)} = \frac{p(p_c-p)^{2n}(1-(1-p)^n)^s}{(1-(1-p)^n)} \\ &= (p_c-p)^{2n} \exp[s \ln(1-(1-p)^n)] \left[\frac{p}{(1-(1-p)^n)} \right]. \end{aligned} \quad (3.36)$$

y desarrollando en series en torno a $p_c = 1$ tenemos para el logaritmo:

$$\ln(1-(1-p)^n) \approx -(1-p)^n = -(p_c-p)^n. \quad (3.37)$$

Mientras que para el otro término tenemos:

$$\frac{p}{(1-(1-p)^n)} \approx 1 + (p-1) - (p-1)^3 - (p-1)^4 = 1. \quad (3.38)$$

en $p = p_c = 1$, por lo que n_s puede ser escrito como:

$$n_s = (p_c-p)^{2n} \exp[-s(p_c-p)^n]. \quad (3.39)$$

Definiendo la variable de escalamiento Z_n como:

$$Z_n \equiv s^\sigma (p_c-p)^n, \quad (3.40)$$

de acuerdo con la ecuación (3.9):

$$n_s(p) \propto s^{-\tau} f(Z_n). \quad (3.41)$$

obtenemos que $\sigma = 1$ y $\tau = 2$, hay que notar que ahora la forma de escalamiento de n_s depende de el número de vecinos n . El resto de los exponentes son obtenidos fácilmente mediante las relaciones entre ellos dadas por las ecuaciones (3.11) a (3.13), estos son:

$$\delta = \infty, \quad (3.42)$$

$$\alpha = 1, \quad (3.43)$$

$$\beta = 0, \quad (3.44)$$

$$\gamma = 1, \quad (3.45)$$

$$\nu = 1. \quad (3.46)$$

3.1.4 Grupo de Renormalización Aplicado al Modelo de Percolación por Sitios en una Dimensión

Como vimos en el capítulo anterior, en la renormalización en el espacio real, reemplazamos una celda de sitios por un supersitio, considerando que la dimensión lineal de la celda, b , es mucho menor que ξ . Recordando que sólo cerca del punto crítico donde la autosimilaridad es válida tenemos que $p' = p = p_c$ y retomando la ecuación básica del grupo de renormalización para percolación en una dimensión cuya obtención fue discutida en el capítulo 3, resulta lo siguiente:

$$b|p' - p_c|^{-\nu} = |p - p_c|^{-\nu}, \quad (3.47)$$

donde p' es la probabilidad renormalizada y p_c es la probabilidad crítica. Tomando el logaritmo de ambos lados llegamos a la siguiente expresión:

$$\frac{1}{\nu} = \frac{\log \lambda}{\log b}, \quad (3.48)$$

donde

$$\lambda = \frac{|p' - p_c|}{|p - p_c|} = \frac{dp'}{dp} \quad \text{en } p = p_c.$$

La transformación de grupo de renormalización para el caso de interacción a primeros vecinos ha sido muy estudiada y esta dada por:

$$p' = p^b. \quad (3.49)$$

Los puntos fijos se obtienen cuando $p' = p$, esto es $p^* = 1$ y $p^* = 0$, y

$$\frac{1}{\nu} = \frac{\log \lambda}{\log b} = \frac{\log bp^{(b-1)}}{\log b} \Big|_{p=p_c=1} = 1$$

De donde $\nu = 1$.

Grupo de Renormalización para el Caso de Interacción a Segundos Vecinos

Para el caso de interacción a segundos vecinos proponemos la siguiente transformación de grupo: formaremos bloques de grupos de b sitios y diremos que

un bloque está ocupado si la mayoría de sus sitios están ocupados, eliminando de las configuraciones posibles aquellas que tengan sitios desocupados en alguna de sus posiciones extremas o dos sitios vacíos contiguos, ya que estas configuraciones harían que en el propio supersitio no hubiera percolación. De acuerdo a esto, la probabilidad de que el supersitio percole estará dada por la probabilidad de encontrar $b - i$ sitios ocupados, e i sitios desocupados, esto es $p^{b-i}q^i$ con las configuraciones permitidas. Las configuraciones consideradas como sitios llenos en nuestra nueva malla se muestran en la figura 3.6; por lo que la transformación de grupo de renormalización, que depende del valor escogido de b , resulta:

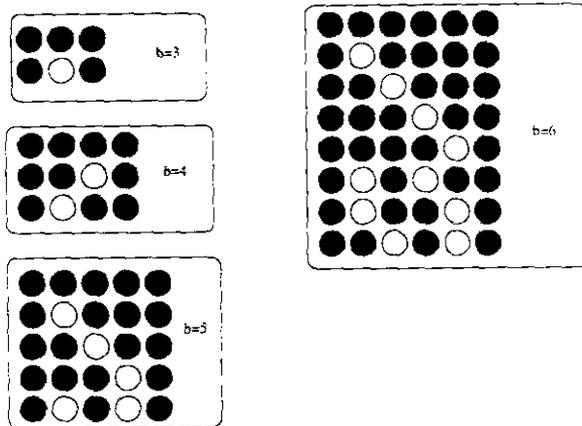


Figura 3.6: Configuraciones consideradas como sitios ocupados para bloques de tamaño b en la TGR para la percolación por sitios en una dimensión con interacción a segundos vecinos

$$\begin{aligned}
 p' &= p^3 + \frac{1}{3}p^2q & \text{si } b = 3, \\
 p' &= p^4 + \frac{2}{4}p^3q & \text{si } b = 4, \\
 p' &= p^5 + \frac{3}{5}p^4q + \frac{1}{10}p^3q^2 & \text{si } b = 5, \\
 p' &= p^6 + \frac{4}{6}p^5q + \frac{3}{15}p^4q^2 & \text{si } b = 6, \\
 & & \vdots
 \end{aligned}$$

A partir de estas ecuaciones podemos obtener la forma general de la transformación de grupo de renormalización para el caso de interacción a segundos vecinos,

$$p' = \sum_{i=0}^n p^{b-i} q^i \frac{\{(b-i-1)!\}^2 (b-i)}{(b-2i-1)! b!} \quad (3.50)$$

donde n es el máximo número entero que satisface $b-2i-1 > 0$. Trabajando de la misma manera que la presentada para el caso de interacción a primeros vecinos, es posible obtener los puntos fijos para $p' = p = p^*$ por medio del cálculo de las raíces de los polinomios correspondientes. Así mismo, se puede obtener ν a partir de:

$$\lambda = \left. \frac{dp'}{dp} \right|_{p=p^*}$$

y con:

$$\frac{1}{\nu} = \frac{\log \lambda}{\log b}$$

Los resultados obtenidos para distintos valores de b se presentan en la tabla 4.1.

Haciendo lo anterior encontramos que las únicas raíces reales y positivas son 0 y 1 en todos los casos. De donde los únicos puntos fijos son 0 y 1. Realizando iterativamente la transformación del grupo observamos que efectivamente al comenzar con un valor menor que 1, las sucesivas iteraciones llevan al punto fijo $p^* = 0$, la forma del flujo de la TGR se muestra en la figura 3.7. Observamos que el punto fijo $p^* = 0$ se alcanza, como ya se mencionó, para toda $p < 1$ por lo que estas probabilidades se encuentran

b	$p = p' = p^*$	ν
	0	
3	1	1.12
	-1.5	
	0	
4	1	1.106
	$-1 \pm i$	
	0	
	-1.3943	
5	$-0.20283 \pm 1.1804i$	1.08
	1	
	0	
	$-0.97298 \pm 0.70772i$	
6	$0.22298 \pm 1.116i$	1.07
	1	
	0	
	-1.1312	
7	$-0.6013 \pm 1.0019i$	1.058
	$0.45609 \pm 0.99245i$	
	1	
	0	
	$-1.037 \pm 0.47466i$	
8	$-0.29534 \pm 1.0873i$	1.04
	$0.59902 \pm 0.87841i$	
	1	

Tabla 3.1: Renormalización a segundos vecinos

fuera de la superficie crítica y el flujo de la TGR las lleva hacia el punto fijo trivial alejándolas del punto fijo no-trivial $p^* = 1$. Este es alcanzado sólo si nos encontramos en la superficie crítica, esto es, exactamente en $p = 1$.



Figura 3.7: Flujo del GR para el sistema de percolación por enlaces

Así mismo observamos que conforme b se hace mas grande se obtiene un mejor valor de ν el cual sabemos es de $\nu = 1$. La gráfica 3.8 muestra éste resultado, donde hemos graficado el valor de ν contra b .

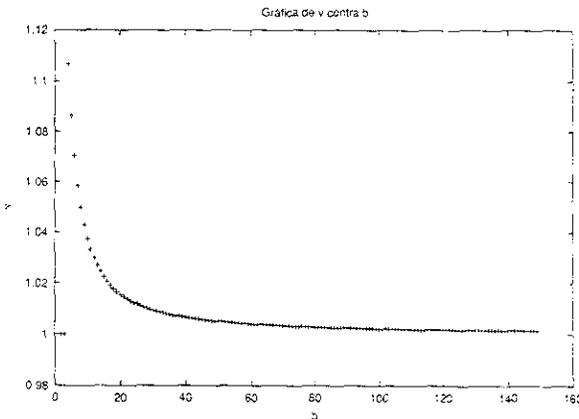


Figura 3.8: Gráfica de ν vs b para la TGR en el caso de interacción a segundos vecinos

Grupo de Renormalización para el Caso de Interacción a Terceros Vecinos

Procediendo de manera semejante para el caso de interacciones a terceros vecinos, proponiendo una transformación de grupo similar a la propuesta para

segundos vecinos obtenemos las configuraciones mostradas en la figura 3.9 dependiendo del valor de b . De estas posibles configuraciones tomamos como sitio ocupado aquél supersitio en el que la mayoría de sus sitios se encuentren ocupados con la restricción de que las configuraciones que contengan sitios desocupados en las posiciones extremas serán desechadas. También hay que recordar que no podrá haber mas de dos sitios contiguos vacíos ya que en tal caso, así como en el caso anterior, no habría la posibilidad de que dicho supersitio percolara.

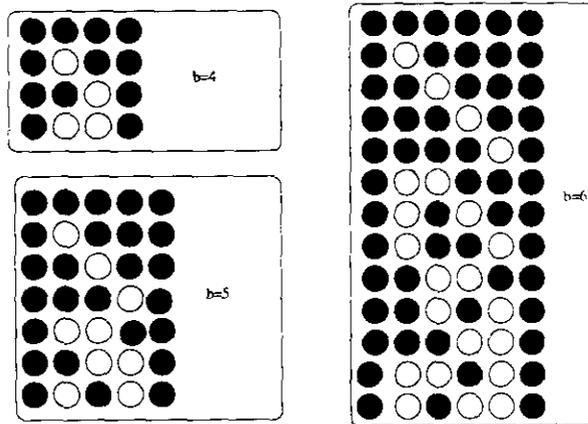


Figura 3.9: Configuraciones consideradas como sitios ocupados para bloques de tamaño b para el caso de interacción a terceros vecinos.

Con esta transformación de grupo obtenemos las siguientes expresiones para la transformación del grupo con $b = 4, 5, 6$ y 7

$$\begin{aligned}
 p' &= p^4 + \frac{2}{4}p^3q + \frac{1}{6}p^2q^2 \quad \text{si } b = 4. \\
 p' &= p^5 + \frac{3}{5}p^4q + \frac{3}{10}p^3q^2 \quad \text{si } b = 5. \\
 p' &= p^6 + \frac{4}{6}p^5q + \frac{6}{15}p^4q^2 + \frac{2}{20}p^3q^3 \quad \text{si } b = 6. \\
 p' &= p^7 + \frac{5}{7}p^6q + \frac{10}{21}p^5q^2 + \frac{7}{35}p^4q^3 + \frac{1}{35}p^3q^4 \quad \text{si } b = 7.
 \end{aligned}$$

Procediendo igual que para el caso de segundos vecinos, obtenemos los siguientes resultados para las raíces de los polinomios para $p = p' = p^*$ y ν :

b	$p = p' = p^*$	ν
	0	
4	1	1.03
	$\frac{5}{8} \pm \frac{1}{8}i\sqrt{71}$	
	0	
5	-1	1.08
	$\pm 1.1952i$	
	1	
	0	
	$-0.92632 \pm 0.63396i$	
6	$0.29474 \pm 1.08i$	1.07
	1	
	0	
	-1.0457	
7	$-0.56797 \pm 0.99522i$	1.02
	$0.4872 \pm 0.96361i$	
	1	

Tabla 3.2: Renormalización a terceros vecinos

De estos resultados y los obtenidos para S encontramos que los puntos fijos corresponden a los puntos extremos de S , por un lado el punto fijo trivial $p^* = 0$ corresponde al mínimo de la función entropía, esto es, el flujo de la TRG fuera de la superficie crítica nos dirige a un valor que corresponde al mínimo de la función entropía que describe al sistema. Por otro lado, el punto de máxima entropía se relaciona con el punto fijo no trivial que es alcanzado sólo si nos colocamos sobre el propio punto fijo $P^* = 1$. Podemos considerar además, que en este caso las variables irrelevantes posiblemente se encuentran asociadas con las configuraciones permitidas dentro de los cúmulos originadas por la libertad de tener interacciones de largo alcance, de este modo, la transformación de grupo elimina grados de libertad y reduce el problema de percolación por sitios con interacción a n -ésimos vecinos a un problema de interacción a primeros vecinos, llevando así las variables asociadas con la probabilidad de que el sitio se encuentre desocupado q a cero cuando $p \rightarrow p_c$.

3.2 Percolación por Enlaces en una Dimensión

A continuación abordaremos el caso de percolación por enlaces en una dimensión con interacciones de largo alcance. Como se mencionó al inicio de este capítulo, el problema de percolación por enlaces en una dimensión queda definido mediante una cadena de sitios que se encuentran ocupados y conectados unos con otros a través de enlaces que están presentes con probabilidades p_{ij} entre los sitios i y j , separados por una distancia $r_{ij} = l$.

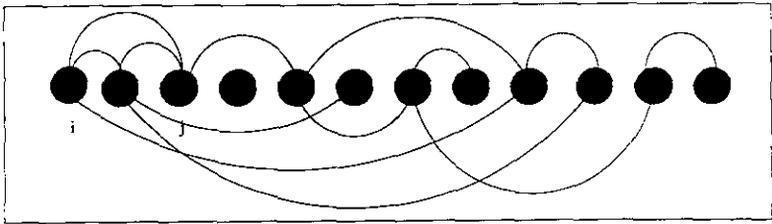


Figura 3.10: Percolación por enlaces en una dimensión.

Los problemas que estudiaremos aquí, serán dos variantes del caso en el que la probabilidad de que un sitio i se encuentre conectado con un sitio j , está dada por $P(l) = p/l^\alpha$. La probabilidad p representa la interacción a primeros vecinos y satisface $0 \leq p \leq 1$ y $\alpha \geq 0$. Además pediremos que l sea de la forma $l = b^n$ donde b y n son enteros y $b > 1$. Cabe notar que la probabilidad $P(l)$ definida arriba no está normalizada, mientras que la p sí lo está. Una variante de este tipo de sistema, se ha estudiado numéricamente [23], encontrándose que, para los casos no triviales con $0 \leq \alpha \leq \infty$, en la vecindad de $\alpha = 1$ se presenta un comportamiento no extensivo, por lo que un estudio completo para este tipo de sistemas requiere de la entropía generalizada o de Tsallis [3],[30].

3.2.1 Probabilidades Asociadas al Caso de Percolación por Enlaces en una Dimensión

En esta sección se describen las probabilidades que emplearemos para el desarrollo del caso de percolación por enlaces en una dimensión.

1. **Caso 1:** Nos dedicaremos primero al caso particular en el que la probabilidad de que exista un enlace entre los sitios i y j decae como ley de potencia conforme aumenta la distancia que los separa. Este comportamiento se presenta hasta un cierto valor r . Para valores mayores de r la probabilidad se hace cero, lo anterior queda expresado como:

$$P(l) = \begin{cases} p/l^\alpha & \text{para } 0 < l < r, \\ 0 & r \leq l < \infty. \end{cases}$$

donde la probabilidad de enlace a primeros vecinos, p , satisface que $0 \leq p \leq 1$ y $\alpha \geq 0$, además hemos pedido que l sea de la forma $l = b^n$. Definiremos ahora la cantidad α como:

$$\alpha \equiv \ln a / \ln b. \quad (3.51)$$

donde $a > 1$ y $b > 1$, además b tiene que ser un entero múltiplo de la longitud de enlace l , con lo anterior podemos reescribir la ecuación inicial como:

$$P(l) = p \sum_{n=0}^r a^{-n} (\delta_{l, b^n}). \quad (3.52)$$

donde³ $a^{-n} = l^{-\alpha}$. Cuando $r \rightarrow \infty$ el sistema adquiere una distribución de probabilidad crítica, debido a que presenta interacciones de alcance infinito. Así, existe correlación a distancia infinita o en otras palabras la longitud de correlación $\xi \rightarrow \infty$. Esta distribución es una ley de potencia pura y la representaremos como P^* .

El comportamiento de esta probabilidad se muestra en la figura 3.11. El caso con $r \neq \infty$, es una probabilidad truncada, que comienza con un decaimiento de ley de potencia pero que, al llegar a un cierto valor de r , se hace cero. Esta probabilidad no es una distribución de probabilidad crítica ya que no contiene interacciones de largo alcance, pues no presenta un decaimiento de ley de potencia cuando $r \rightarrow \infty$ debido a que repentinamente se hace cero para cualquier valor de l mayor que $l = b^r$, como se muestra en la figura 3.12.

³Dado que $a^{-n} = \exp\{\ln a^{-n}\} = \exp\{-n \ln a\}$ y $l = b^n$, tenemos $\ln l = n \ln b$ y $n = \ln l / \ln b$, por lo que sustituyendo n resulta: $a^{-n} = \exp\{-\ln l \ln a / \ln b\} = \exp\{-\alpha \ln l\}$. Esto es $a^{-n} = l^{-\alpha}$.

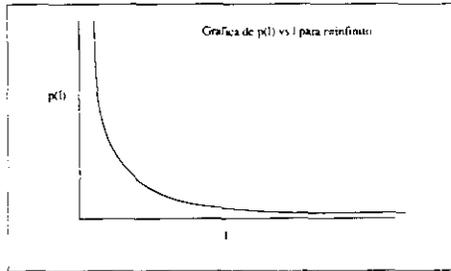


Figura 3.11: Probabilidad del caso 1 con $r \rightarrow \infty$

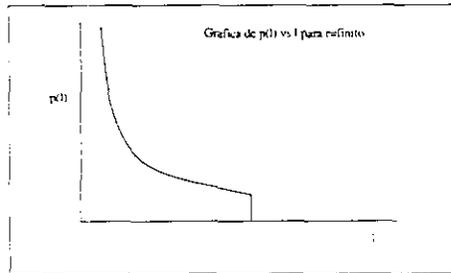


Figura 3.12: Probabilidad del caso 1 con $r \neq \infty$

En este caso, al no ser una distribución de probabilidades crítica el valor de p_c se encuentra en $p_c = 1$, ya que bajo estas características no se presenta *transición de fase en una dimensión*.

Una forma de observar la relación entre el comportamiento de la distribución de probabilidad y la criticalidad del sistema es la siguiente. Recordando que la longitud de correlación ξ diverge cuando nos encontramos en la región crítica, esto es $\xi \rightarrow \infty$, y estableciendo la relación entre ésta y la longitud l que separa dos sitios i y j de la cadena, tenemos que:

$$\xi \rightarrow l = b^n \quad (3.53)$$

ya que hemos pedido que l sea de ésta forma.

Entonces cuando $\xi \rightarrow \infty$, $n \rightarrow \infty$. Recordando que en la región crítica

ξ diverge como

$$\xi \sim |p - p_c|^{-\nu} = |p - 1|^{-\nu}, \quad (3.54)$$

ya que $p_c = 1$ y $\nu = 1$ para el caso en una dimensión con interacciones de alcance finito. Entonces encontramos que:

$$b^n = (p - 1)^{-1} \quad (3.55)$$

$$p = 1 - b^{-n} \quad (3.56)$$

Así cuando $n \rightarrow \infty$, $p \rightarrow p_c$, como se espera.

2. **Caso 2:** En el segundo caso que abordaremos, la probabilidad de enlace se encuentra dada por la siguiente expresión:

$$P(l) = p \sum_{n=0}^m a_n(\delta_{l,b^n}) + p \sum_{n=m+1}^{\infty} a^{-n}(\delta_{l,b^n}). \quad (3.57)$$

La cual representa una probabilidad que inicia con un comportamiento arbitrario (definido por las a_n) y a partir de un cierto valor de r (para $n = m + 1$) decae como ley de potencia. Esta probabilidad también puede ser considerada como una probabilidad crítica ya que su comportamiento a valores muy grandes de l sigue un decaimiento de ley de potencia, por lo que presenta interacciones de alcance infinito y por tanto $\xi \rightarrow \infty$. El esquema 3.13 muestra esta probabilidad para un caso arbitrario.

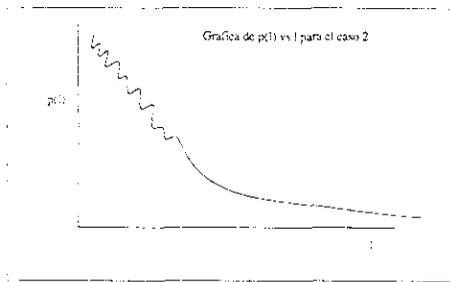


Figura 3.13: Gráfica de $P(l)$ para el caso 2 con una a_n arbitraria

Para los casos donde se presenta una distribución de probabilidades crítica (caso 1 con $r \rightarrow \infty$ y caso 2) el valor de la probabilidad crítica puede encontrarse mediante simulación numérica [23]. De acuerdo con la literatura, se ha estudiado, a través de simulaciones Monte Carlo, el sistema de percolación por enlaces en una dimensión con interacciones de largo alcance. En el sistema estudiado, todos los sitios se encuentran conectados entre sí a través de enlaces que se encuentran presentes con probabilidades p_{ij} entre los sitios i y j , separados por una distancia r_{ij} (en unidades cristalinas, esto es $r_{ij} = 0, 1, 2, \dots$). El caso particular relevante que se estudia en esta referencia es el caso en que las probabilidades de ocupación del enlace están dadas por $p_{ij} = p/r_{ij}^\alpha$, donde la probabilidad de ocupación p entre primeros vecinos satisface $0 \leq p \leq 1$, y $\alpha \geq 0$. El límite $\alpha \rightarrow \infty$ corresponde con el caso de la cadena lineal con interacción a primeros vecinos, para el cual es bien conocido que no existe transición de fase a cualquier $p < 1$ (de hecho $p_c = 1$). Los casos no triviales son aquellos para los cuales $0 \leq \alpha \leq \infty$. En este trabajo se reporta que se encuentran dos subregiones físicamente diferentes. Una de ellas corresponde a $1 < \alpha \leq 2$, para la cual $0 < p_c < 1$ y la otra para $\alpha > 2$ para la cual $p_c = 1$. Se observa además una peculiaridad para $\alpha = 2$, en este valor, $p_c(\alpha)$ es discontinua y de hecho el valor exacto de p_c se desconoce, pero se ha conjeturado que $p_c(2) = 0.703$ [18],[6].

3.2.2 Entropías Asociadas al Modelo de Percolación por Enlaces en una Dimensión

A continuación se presenta el desarrollo del análisis de las entropías asociadas a cada una de las probabilidades descritas en la sección anterior.

Entropía Asociada al Caso 1 con $r \rightarrow \infty$

Para el primer caso, la probabilidad esta dada por la ecuación (3.52) con $r \rightarrow \infty$, tenemos

$$P^*(l) = c \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n} (\delta_{l, bn}).$$

Para la evaluación de las entropías asociadas a las distribuciones, requerimos que éstas estén normalizadas. En la ecuación anterior c es la constante de normalización y se ha incluido p dentro de ésta. La entropía tradicional

corresponde a la expresión:

$$S = -k \sum_{l=0}^{\infty} P(l) \ln P(l).$$

Por lo que

$$\begin{aligned} S_1^{\infty} &= -k \sum_{l=0}^{\infty} P^*(l) \ln P^*(l) \\ &= -k \sum_{l=0}^{\infty} c \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n} (\delta_{l,b^n}) \ln \left[c \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n} (\delta_{l,b^n}) \right] \\ &= -k \left[\sum_{l=0}^{\infty} c \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n} (\delta_{l,b^n}) \ln(c) + \sum_{l=0}^{\infty} c \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n} (\delta_{l,b^n}) \ln \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n} (\delta_{l,b^n}) \right]. \end{aligned}$$

Sumando sobre l para cada n notamos que sólo contribuyen los términos que corresponden a $l = b^n$ en ambas sumas, esto es para una misma n , por lo que obtenemos

$$\begin{aligned} S_1^{\infty} &= -k \left[c \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n} \ln(c) + c (a^0 \ln a^0 + a^{-1} \ln a^{-1} + a^{-2} \ln a^{-2} + \dots) \right] \\ &= -kc \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n} \ln(c) - kc \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n} \ln a^{-n} \\ &= -kc \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n} \ln(c) + kc \sum_{n=0}^{\infty} n a^{-n} \ln a \\ &= -kc \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n \ln(c) + kc \sum_{n=0}^{\infty} n \epsilon^n \ln a \\ &= -kc \left[\frac{\ln(c)}{1-\epsilon} \right] + kc \ln a \left[\frac{\epsilon}{(1-\epsilon)^2} \right], \end{aligned} \quad (3.58)$$

donde hemos definido $\epsilon \equiv a^{-1}$. Considerando la normalización:

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{\infty} P^*(l) &= \sum_{l=0}^{\infty} c \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n} (\delta_{l,b^n}) = \sum_{l=0}^{\infty} c \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n (\delta_{l,b^n}) = c \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n \\ &= \frac{c}{1-\epsilon} = 1. \end{aligned} \quad (3.59)$$

resultan las siguientes equivalencias:

$$c = 1 - \epsilon \text{ y } \epsilon = 1 - c. \quad (3.60)$$

Así podemos reescribir S_1^∞ como:

$$\begin{aligned} S_1^\infty &= -kc \left[\frac{\ln(c)}{c} - \frac{1-c}{(c)^2} \ln \frac{1}{1-c} \right] = -k \ln(c) - k \frac{1-c}{c} \ln(1-c) \\ &= -k \left[\ln(c) + \frac{1-c}{c} \ln(1-c) \right], \end{aligned} \quad (3.61)$$

o bien, en términos de ϵ :

$$S_1^\infty = -k \left[\ln(1-\epsilon) + \frac{\epsilon}{1-\epsilon} \ln(\epsilon) \right]. \quad (3.62)$$

Mientras que para la entropía no extensiva (entropía de Tsallis) la cual está dada por:

$$S_q^\infty = \frac{k}{(q-1)} \left\{ 1 - \sum_{l=0}^{\infty} [P(l)]^q \right\}, \quad (3.63)$$

tenemos que (sumando primero sobre l):

$$\begin{aligned} S_q^\infty &= \frac{k}{(q-1)} \left\{ 1 - \sum_{l=0}^{\infty} \left[c \sum_{n=0}^{\infty} a^n (\delta_{l,b^n}) \right]^q \right\} \\ &= \frac{k}{(q-1)} \left\{ 1 - [(c)^q (a^{-0q} + a^{-1q} + a^{-2q} + \dots)] \right\} \\ &= \frac{k}{(q-1)} \left[1 - (c)^q \sum_{n=0}^{\infty} a^{-nq} \right] \\ &= \frac{k}{(q-1)} \left[1 - (c)^q \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^{nq} \right] \\ &= \frac{k}{(q-1)} \left[1 - \frac{(c)^q}{1-\epsilon^q} \right] \\ &= \frac{k}{(q-1)} \left[1 - \frac{(c)^q}{1-(1-c)^q} \right], \end{aligned} \quad (3.64)$$

ó en términos de c :

$$S_q^\infty = \frac{k}{(q-1)} \left[1 - \frac{(1-\epsilon)^q}{1-\epsilon^q} \right]. \quad (3.65)$$

Entropía Asociada al Caso 1 con $r \neq \infty$

Para el caso 1 con $r \neq \infty$ la probabilidad está dada por:

$$P(l) = c \sum_{n=0}^r a^{-n} (\delta_{l,b^n}).$$

Procediendo de la misma manera que en caso anterior la entropía tradicional resulta:

$$\begin{aligned} S_1^r &= -k \sum_{l=0}^{\infty} c \sum_{n=0}^r a^{-n} (\delta_{l,b^n}) \ln \left[c \sum_{n=0}^r a^{-n} (\delta_{l,b^n}) \right] \\ &= -k \left[\sum_{l=0}^{\infty} c \sum_{n=0}^r a^{-n} (\delta_{l,b^n}) \ln(c) + \sum_{l=0}^{\infty} c \sum_{n=0}^r a^{-n} (\delta_{l,b^n}) \ln \sum_{n=0}^r a^{-n} (\delta_{l,b^n}) \right]. \end{aligned} \quad (3.66)$$

$$\begin{aligned} S_1^r &= -k \left[c(a^{-0} + a^{-1} + a^{-2} + \dots + a^{-r}) \ln(c) \right. \\ &\quad \left. - c(a^{-0} \ln a^{-0} + a^{-1} \ln a^{-1} + \dots + a^{-r} \ln a^{-r}) \right] \\ &= -k \left[c \ln(c) \sum_{n=0}^r a^{-n} + c \sum_{n=0}^r a^{-n} \ln a^{-n} \right] \\ &= -k \left[c \ln(c) \sum_{n=0}^r \epsilon^n + c \ln \epsilon \sum_{n=0}^r n \epsilon^n \right] \\ &= -kc \left[\ln(c) \frac{1-\epsilon^{r+1}}{1-\epsilon} + \frac{\epsilon(1-\epsilon^{r+1}) - (r+1)\epsilon^{r+1}(1-\epsilon) \ln(\epsilon)}{(1-\epsilon)^2} \right]. \end{aligned} \quad (3.67)$$

Ahora considerando la normalización:

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{\infty} P(l) &= 1 = \sum_{l=0}^{\infty} c \sum_{n=0}^r a^{-n} (\delta_{l,b^n}) = c \sum_{n=0}^r a^{-n} \\ &= c \sum_{n=0}^r \epsilon^n = c \frac{1 - \epsilon^{r+1}}{1 - \epsilon} = 1, \end{aligned} \quad (3.68)$$

resulta que:

$$c = \frac{1 - \epsilon}{1 - \epsilon^{r+1}}. \quad (3.69)$$

Sustituyendo este valor en (3.67) obtenemos:

$$\begin{aligned} S_1^r &= -k \frac{(1 - \epsilon)}{(1 - \epsilon^{r+1})} \left\{ \frac{(1 - \epsilon^{r+1})}{(1 - \epsilon)} \ln \left[\frac{1 - \epsilon}{1 - \epsilon^{r+1}} \right] \right\} \\ &= -k \frac{(1 - \epsilon)}{(1 - \epsilon^{r+1})} \left\{ \frac{\epsilon(1 - \epsilon^{r+1}) - (r+1)\epsilon^{r+1}(1 - \epsilon)}{(1 - \epsilon)^2} \ln \epsilon \right\}. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Así S_1^r se expresa finalmente como:

$$S_1^r = -k \left\{ \ln \left[\frac{1 - \epsilon}{1 - \epsilon^{r+1}} \right] + \frac{\epsilon \ln \epsilon}{(1 - \epsilon)} - \frac{(r+1)\epsilon^{r+1} \ln \epsilon}{(1 - \epsilon^{r+1})} \right\}. \quad (3.71)$$

Mientras que la entropía no extensiva (entropía de Tsallis) resulta:

$$\begin{aligned} S_q^r &= \frac{k}{(q-1)} \left\{ 1 - \sum_{l=0}^{\infty} \left[c \sum_{n=0}^r a^{-n} (\delta_{l,b^n}) \right]^q \right\} \\ &= \frac{k}{(q-1)} \left\{ 1 - \sum_{n=0}^r [ca^{-n}]^q \right\} \\ &= \frac{k}{(q-1)} \left\{ 1 - (c)^q [a^{-0q} + a^{-1q} + a^{-2q} + \dots + a^{-rq}] \right\} \\ &= \frac{k}{(q-1)} \left\{ 1 - (c)^q \sum_{n=0}^r \epsilon^{nq} \right\} \\ &= \frac{k}{(q-1)} \left\{ 1 - (c)^q \frac{(1 - \epsilon^{q(r+1)})}{(1 - \epsilon^q)} \right\}. \end{aligned} \quad (3.72)$$

Sustituyendo el valor de c dado por la normalización en la ecuación (3.69) tenemos:

$$S_q^r = \frac{k}{(q-1)} \left\{ 1 - \frac{(1-\epsilon)^q}{(1-\epsilon^{r+1})^q} \frac{(1-\epsilon^{q(r+1)})}{(1-\epsilon^q)} \right\}. \tag{3.73}$$

A partir de las expresiones para la entropía encontradas, podemos observar que en el punto $P_0(t)$ la entropía se hace cero $S_q^0 = 0$ para toda q . Si tomamos el límite $S_q^\infty = \lim_{r \rightarrow \infty} S_q^r$ resulta:

$$S_q^\infty = \frac{k}{(q-1)} \left[1 - \frac{(1-\epsilon)^q}{1-\epsilon^q} \right] \tag{3.74}$$

y

$$S_1^\infty = k \left[\ln \frac{1}{1-\epsilon} - \frac{\epsilon \ln \epsilon}{1-\epsilon} \right]. \tag{3.75}$$

como se había encontrado anteriormente. También se puede mostrar que $\lim_{q \rightarrow 1} S_q^r = S_1^r$ y $\lim_{q \rightarrow 1} S_q^\infty = S_1^\infty$. Por tanto encontramos para toda $q \geq 1$ y toda $r > 0$ (dado que $\epsilon^{q(r+1)} < q\epsilon^{r+1}$, $0 < \epsilon < 1$) que $S_q^0 < S_q^r < S_q^\infty$, por lo que la entropía es monótonicamente creciente en r . Tiene su valor mínimo en $r = 0$ y alcanza su valor máximo en $r = \infty$. La gráfica siguiente muestra este comportamiento.

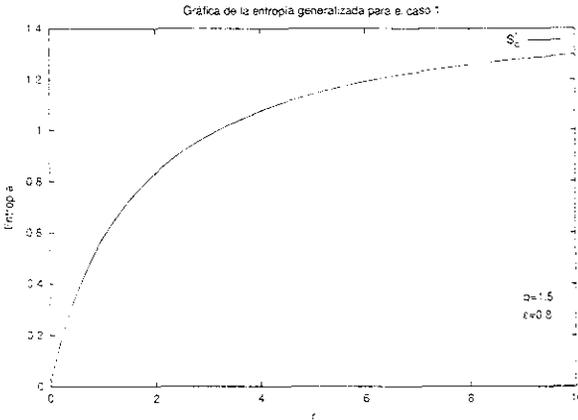


Figura 3.14: Gráfica de la S_q^{vsr} para el caso 1 a una q fija ($q=1.5$).

Entropía Asociada al Caso 2

Para el segundo caso, donde la probabilidad de enlace se encuentra dada por la ecuación (3.57), la obtención de las entropías resulta más difícil y sería necesario hacer una aproximación. Por este motivo⁴ para este caso emplearemos el método de multiplicadores de Lagrange. Podemos escribir esta probabilidad como:

$$\begin{aligned} P(l) &= c' \sum_{n=0}^m a_n(\delta_{l,b^n}) + c' \sum_{n=m+1}^{\infty} a^{-n}(\delta_{l,b^n}) \\ &= c' \sum_{n=0}^m a_n(\delta_{l,b^n}) + c' \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n}(\delta_{l,b^n}) - c' \sum_{n=0}^m a^{-n}(\delta_{l,b^n}) \end{aligned} \quad (3.76)$$

donde c' es la constante de normalización. Definiendo:

$$\alpha_n \equiv a_n - a^{-n}, \quad (3.77)$$

$$\delta P(l) \equiv c' \sum_{n=0}^m \alpha_n(\delta_{l,b^n}). \quad (3.78)$$

Y recordando que

$$P^*(l) = c \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n}(\delta_{l,b^n}), \quad (3.79)$$

podemos escribir la expresión inicial (3.76) como:

$$\begin{aligned} P(l) &= \frac{c'}{c} P^*(l) + c' \sum_{n=0}^m \alpha_n(\delta_{l,b^n}) \\ &= \frac{c'}{c} P^*(l) + \delta P(l). \end{aligned} \quad (3.80)$$

⁴A sugerencia de la Dra. Carmen Varea Gilabert a quien se agradece por hacer esta observación.

Por lo que la entropía tradicional puede ser escrita como:

$$\begin{aligned}
 S_1^m &= -k \sum_{l=0}^{\infty} P(l) \ln P(l) = -k \left[\sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{c'}{c} P^*(l) + \delta P(l) \right) \ln \left(\frac{c'}{c} P^*(l) + \delta P(l) \right) \right] \\
 &= -k \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} \left[\sum_{n=0}^{\infty} c' a^{-n} (\delta_{l,b^n}) + c' \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n (\delta_{l,b^n}) \right] \ln \left(\sum_{n=0}^{\infty} c' a^{-n} (\delta_{l,b^n}) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + c' \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n (\delta_{l,b^n}) \right) \right\}
 \end{aligned} \tag{3.81}$$

Sumando sobre l obtenemos:

$$S_1^m = -k \sum_{n=0}^{\infty} [c' a^{-n} + c' \alpha_n] \ln (c' a^{-n} + c' \alpha_n) \tag{3.82}$$

Definiendo las siguientes cantidades:

$$P_n^* \equiv c a^{-n}, \tag{3.83}$$

$$\delta P_n \equiv c' \alpha_n, \tag{3.84}$$

$$P_n \equiv \frac{c'}{c} P_n^* + \delta P_n. \tag{3.85}$$

La entropía del sistema puede reescribirse como sigue:

$$S_1^m k^{-1} = - \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{c'}{c} P_n^* + \delta P_n \right) \ln \left(\frac{c'}{c} P_n^* + \delta P_n \right) = - \sum_{n=0}^{\infty} P_n \ln P_n. \tag{3.86}$$

Entropía Tradicional por Medio de Multiplicadores de Lagrange

La familia de distribuciones que deseamos considerar para obtener $P_n^* = c a^{-n}$ como un extremo de la entropía debe obedecer algunas restricciones, para que su comportamiento no se encuentre muy alejado de P_n^* , por ejemplo consideremos las siguientes distribuciones: Supongamos que deseamos eliminar distribuciones de la forma:

$$P_n \sim \frac{1}{n} \tag{3.87}$$

entonces si pedimos una restricción como:

$$\sum_{n=0}^{\infty} nP_n = cte, \quad (3.88)$$

con la distribución dada por la ecuación (3.87), tenemos que:

$$\sum_{n=0}^{\infty} n \frac{1}{n} \rightarrow \infty \quad (3.89)$$

diverge, por lo tanto la restricción impuesta elimina la posibilidad de este tipo de distribuciones. Otro ejemplo es suponer que tenemos una distribución que es una ley de potencias de la forma:

$$P_n \sim a'^{-n} \quad \text{con} \quad a \neq a' \quad (3.90)$$

entonces

$$\sum_{n=0}^{\infty} nP_n = -(\ln a)(1 - a'^{-1}) \sum_{n=0}^{\infty} na'^{-n} = -\ln a \frac{1}{a' - 1} \quad (3.91)$$

que es una constante, sin embargo es una constante distinta de la que se obtiene si empleamos la distribución $P_n^* = ca^{-n}$ que sería $-(\ln a)(1/(a-1))$. Pero si consideramos una restricción adicional de la forma.

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{P_n^2}{P_n^*} = cte. \quad (3.92)$$

donde c es la constante de normalización de la distribución P_n^* , y tenemos el caso analizado anteriormente dado por la ecuación (3.90), entonces:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{P_n^2}{P_n^*} &= \left[\frac{1 - a'^{-1}}{1 - a^{-1}} \right]^2 \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{a}{a'^2} \right]^n \\ &= \left[\frac{1 - a'^{-1}}{1 - a^{-1}} \right]^2 \left[\frac{1}{1 - (a/a'^2)} \right] \end{aligned} \quad (3.93)$$

que diverge si $a' = \sqrt{a}$. De esta forma encontramos una manera mas efectiva de eliminar posibles distribuciones que no cumplan con las características deseadas. Es conveniente multiplicar $\sum nP_n$ por $-\ln a$ y $\sum P_n^2/P_n^*$ por $\nu/2c$

por razones que serán claras adelante. Entonces pedimos una restricción de la forma:

$$-\ln a \sum_{n=0}^{\infty} n P_n + \frac{\nu}{2c} \sum_{n=0}^{\infty} a^n P_n^2 = CTE \quad (3.94)$$

donde el parámetro ν es una cantidad que puede variar para analizar el comportamiento de la entropía para diferente peso del término cuadrático en la restricción. La constante de normalización de la distribución que extremiza \mathcal{F} es c . Esta restricción puede interpretarse de la siguiente manera. Si la reescribimos de la siguiente forma:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \ln P_n^* P_n + \frac{\nu}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{P_n}{P_n^*} P_n = \langle \ln P_n^* \rangle_{P_n} + \nu/2 \left\langle \frac{P_n}{P_n^*} \right\rangle_{P_n} \quad (3.95)$$

tenemos que el primer término corresponde al promedio del *bit-number*⁵ con la distribución P_n mientras que el segundo es el promedio del cociente de la distribución P_n/P_n^* con la distribución P_n . De esta forma las variaciones de P_n con respecto a P_n^* son pequeñas.

Introduciremos ahora los parámetros de Lagrange α , β y definiremos la cantidad \mathcal{F} como:

$$\mathcal{F} = - \sum_{n=0}^{\infty} P_n \ln P_n - (\alpha - 1) \sum_{n=0}^{\infty} P_n - \beta \left[\ln a \sum_{n=0}^{\infty} n P_n + \frac{\nu}{2c} \sum_{n=0}^{\infty} a^n P_n^2 \right] \quad (3.96)$$

Ahora obtenemos $P_n = P_n^{\dagger}$ que es la distribución que extremiza \mathcal{F} , esto es $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial P_n^{\dagger}} = 0$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial P_n} &= -\ln P_n - \frac{P_n}{P_n} - \alpha + 1 - \beta \left[(\ln a)n - 2 \frac{\nu}{2c} a^n P_n \right] \\ \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial P_n^{\dagger}} &= -\ln P_n^{\dagger} - \alpha - \beta \left[(\ln a)n - \frac{\nu}{c} a^n P_n^{\dagger} \right] = 0 \end{aligned} \quad (3.97)$$

Escogiendo el parámetro de Lagrange $\beta = 1$ obtenemos la solución para P_n^{\dagger} , encontrando:

$$-\ln P_n^{\dagger} - \alpha - n \ln a + \frac{\nu}{c a^n} P_n^{\dagger} = 0 \quad (3.98)$$

⁵ver autocedentes

y resolviendo encontramos $P_n^i = ca^{-n} = P_n^*$, donde identificamos $e^{\nu-\alpha} = c$ como la constante de normalización:

$$\begin{aligned} \ln P_n^i &= -\alpha + \ln a^{-n} + \frac{\nu}{ca^{-n}} ca^{-n} \\ &= -\alpha + \ln a^{-n} + \nu \\ P_n^i &= e^{\nu-\alpha} a^{-n} = ca^{-n}. \end{aligned} \quad (3.99)$$

Ahora analizaremos los casos para los cuales tenemos máximos y mínimos.

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial P_n^2} &= -\frac{1}{P_n^i} + \frac{\nu}{ca^{-n}} = -\frac{1}{P_n^i} + \frac{\nu}{P_n^i} \\ &= \frac{1}{P_n^i}(\nu - 1) \end{aligned} \quad (3.100)$$

entonces tenemos que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial P_n^2} &> 0 \quad \text{si} \quad \nu > 1 \quad (\text{mínimo}) \\ \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial P_n^2} &< 0 \quad \text{si} \quad \nu < 1 \quad (\text{máximo}). \end{aligned} \quad (3.101)$$

Con esto encontramos que dependiendo del valor de ν la función es máxima o mínima.

Entropía de Tsallis por Medio de Multiplicadores de Lagrange

De la misma manera que procedimos para el caso anterior analizaremos ahora el comportamiento de la entropía no extensiva o de Tsallis. La expresión de la entropía de Tsallis para el caso 2 es:

$$\begin{aligned}
S_q^m &= \frac{k}{(q-1)} \left\{ 1 - \sum_{l=0}^{\infty} \left[\frac{c}{c} P^*(l) + \delta P(l) \right]^q \right\} \\
&= \frac{k}{(q-1)} \left\{ 1 - \sum_{l=0}^{\infty} c \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n} (\delta_{l, b^n}) + c \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n (\delta_{l, b^n}) \right\} \\
&= \frac{k}{(q-1)} \left\{ 1 - \sum_{n=0}^{\infty} (c a^{-n} + c \alpha_n)^q \right\} \\
&= \frac{k}{(q-1)} \left\{ 1 - \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{c}{c} P_n^* + \delta P_n \right]^q \right\} \\
&= \frac{k}{(q-1)} \left\{ 1 - \sum_{n=0}^{\infty} [P_n]^q \right\}, \tag{3.102}
\end{aligned}$$

Para el desarrollo siguiente conviene recordar algunas de las definiciones de las cantidades q y sus propiedades. La cantidad $\ln_q a$ se define como:

$$\ln_q a \equiv -\frac{1 - a^{q-1}}{q-1} \tag{3.103}$$

y se cumple que:

$$\lim_{q \rightarrow 1} \ln_q a = \ln a, \tag{3.104}$$

y

$$\ln_q a^n = -\frac{1 - a^{n(q-1)}}{q-1} = \frac{1 - a^{-n(q-1)}}{1 - a^{-(q-1)}} \ln_q a. \tag{3.105}$$

Definiendo

$$n_q \equiv \frac{1 - a^{-n(q-1)}}{1 - a^{-(q-1)}}, \tag{3.106}$$

n_q tiene la propiedad de que $\lim_{q \rightarrow 1} n_q = n$. Así

$$\ln_q a^n = n_q \ln_q a. \tag{3.107}$$

Es útil recordar también que:

$$\exp_q(a) \equiv [1 + a(q-1)]^{\frac{1}{q-1}} \tag{3.108}$$

y que su límite cuando $q \rightarrow 1$ es:

$$\lim_{q \rightarrow 1} \exp_q(a) = \exp(a). \quad (3.109)$$

Analizaremos ahora la entropía no extensiva S_q sujeta a la siguiente restricción, la cual es equivalente a la del caso anterior con $q = 1$.

$$-\ln_q a \sum_{n=0}^{\infty} n_q P_n + \frac{\nu}{2c} \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n(q-2)} P_n^2 = CTE \quad (3.110)$$

donde, otra vez, el parámetro ν es una cantidad variable que permite analizar el comportamiento de la entropía para diferente peso del término cuadrático. Denotamos de nuevo por c a la constante de normalización de la distribución que extremiza \mathcal{F}_q . Introduciremos ahora los parámetros de Lagrange α_q , β_q y definiremos la cantidad \mathcal{F}_q como:

$$\mathcal{F}_q = \frac{1}{q-1} \left[1 - \sum_{n=0}^{\infty} P_n^q \right] - \alpha_q \sum_{n=0}^{\infty} P_n + \alpha_q \beta_q \left[\ln_q a \sum_{n=0}^{\infty} n_q P_n - \frac{\nu}{2c} \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n(q-2)} P_n^2 \right] \quad (3.111)$$

Ahora obtenemos $P_n = P_n^\dagger$ que es la distribución que extremiza \mathcal{F}_q , esto es $\frac{\partial \mathcal{F}_q}{\partial P_n^\dagger} = 0$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{F}_q}{\partial P_n} &= -\frac{q}{q-1} P_n^{q-1} - \alpha_q - \alpha_q \beta_q \left[n_q \ln_q a - \frac{\nu}{2c} 2 P_n a^{-n(q-2)} \right] \\ &= -\frac{q}{q-1} P_n^{q-1} - \alpha_q - \alpha_q \beta_q \left[-\ln_q a^{-n} - \frac{\nu}{c} P_n a^{-n(q-2)} \right] \\ &= -\frac{q}{q-1} P_n^{q-1} - \alpha_q - \alpha_q \beta_q \left[\frac{1 - a^{-n(q-1)}}{q-1} \right] + \alpha_q \beta_q \frac{\nu}{c} P_n a^{-n(q-2)} \end{aligned} \quad (3.112)$$

Escogiendo los parámetros de Lagrange $\alpha_q = q(\alpha - \frac{1}{q-1})$, $\beta_q = 1 - q$ obtenemos la solución para P_n^\dagger , encontrando:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{F}_q}{\partial P_n^\dagger} &= -\frac{q}{q-1} P_n^{q-1} - \alpha_q + \alpha_q (1 - a^{-n(q-1)}) - \alpha_q \frac{\nu(q-1)}{c} P_n a^{-n(q-2)} \\ &= -\frac{q}{q-1} P_n^{q-1} - \alpha_q a^{-n(q-1)} - \alpha_q \frac{\nu(q-1)}{c} P_n a^{-n(q-2)} = 0 \end{aligned} \quad (3.113)$$

y resolviendo encontramos $P_n^1 = ca^{-n} = P_n^*$, donde $e_q^\nu e_q^{-\alpha} = c$ es la constante de normalización:

$$\begin{aligned} \frac{q}{q-1} P_n^{q-1} &= -\alpha_q \left[a^{-n(q-1)} + \frac{\nu(q-1)}{c} ca^{-n} a^{-n(q-2)} \right] \\ &= -q \left(\alpha - \frac{1}{q-1} \right) \left[a^{-n(q-1)} + \nu(q-1) a^{-n(q-1)} \right] \\ &= q \left(-\alpha + \frac{1}{q-1} \right) \left[(a^{-n(q-1)})(1 + \nu(q-1)) \right] \end{aligned} \quad (3.114)$$

Por lo que:

$$P_n^1 = [1 - \alpha(q-1)]^{\frac{1}{q-1}} [1 + \nu(q-1)]^{\frac{1}{q-1}} a^{-n} = ca^{-n} \quad (3.115)$$

Ahora obtenemos la segunda derivada para analizar los casos para los cuales tenemos máximos y mínimos.

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial P_n^2} &= -\frac{q(q-1)}{q-1} (P_n^1)^{q-2} - \frac{q\nu(\alpha(q-1)-1)a^{-n(q-2)}}{c} \\ &= -\frac{q(q-1)}{q-1} (P_n^1)^{q-2} - \frac{q\nu(e_q^{-\alpha})^{q-1} (e_q^\nu)^{q-1} a^{-n(q-2)}}{e_q^\nu (e_q^\nu)^{q-1} e_q^{-\alpha}} \\ &= -q \left[(P_n^1)^{q-2} \left(1 - \frac{\nu}{1 + \nu(q-1)} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.116)$$

También tenemos que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial P_n^2} &> 0 \quad \text{mínimo si} \\ 1 \leq q < 2 \quad &\text{y} \quad \nu > \frac{1}{2-q} \\ q > 2 \quad &\text{y} \quad \nu < \frac{1}{2-q} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial P_n^2} &< 0 \quad \text{máximo si} \\ 1 \leq q < 2 \quad &\text{y} \quad \nu < \frac{1}{2-q} \\ q > 2 \quad &\text{y} \quad \nu > \frac{1}{2-q} \end{aligned} \quad (3.117)$$

3.2.3 Grupo de Renormalización Aplicado al Modelo de Percolación por enlaces en una Dimensión

Grupo de Renormalización para el Caso 1

Para el caso 1, dado por la ecuación

$$P(l) = c \sum_{n=0}^r a^{-n} (\delta_{l, bn}), \quad (3.118)$$

podemos encontrar dos puntos fijos de la TGR. Uno para la probabilidad $P^*(l)$, $r \rightarrow \infty$ que corresponde con la ley de potencia pura. Esta es un punto fijo de la transformación de grupo de renormalización propuesta ya que si aplicamos ésta sobre $P(l) = p \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n} (\delta_{l, bn})$ con $a_n = a^{-n}$ resulta,

$$a'_n = aa_{n+1} = a'^{-n} = aa^{-(n+1)} = a^{-n} = a_n, \quad (3.119)$$

que deja invariante la probabilidad inicial. Este punto fijo corresponde al punto fijo no trivial ya que se encuentra asociada a una distribución de probabilidad de enlace entre sitios a una distancia infinita (interacción infinita), la cual puede ser alcanzada vía la TGR sólo a través de otras distribuciones de alcance infinito. esta propiedad se requiere para la correcta aproximación asintótica de la condición $a_n = a^{-n}$, cuando $n \rightarrow \infty$ y corresponde a situarnos sobre la hiper-superficie crítica.

Otro punto fijo que encontramos para esta TGR es el que corresponde a la probabilidad dada por $P_0(l)$, la cual corresponde al caso $r = 0$ y representa la probabilidad asociada al caso de percolación por enlaces con interacción a primeros vecinos. Así, si aplicamos la TGR a esta probabilidad con

$$\begin{aligned} a_n &= a^0 \quad \text{si } n = 0, \\ a_n &= 0 \quad \text{si } n \geq 1, \end{aligned}$$

tenemos,

$$\begin{aligned} a'_n &= aa_{n+1} = a'^0 = aa^{-(0+1)} = a^0 = a_n \quad \text{si } n = 0, \\ a'_n &= aa_{n+1} = 0 = a_n \quad \text{si } n \geq 1. \end{aligned}$$

Esta operación deja otra vez invariante la probabilidad inicial. en este caso se trata de un punto fijo trivial, ya que es generado por la transformación

de grupo de renormalización a partir de alguna probabilidad $P(l)$ no crítica, esto es $r < \infty$, de alcance finito. Así, cuando consideramos la probabilidad de algún valor de $r < \infty$ tenemos que:

$$\begin{aligned} a_n &= a^{-n} \quad \text{si } n \leq r, \\ a_n &= 0 \quad \text{si } n > r. \end{aligned}$$

ahora bien, si iniciamos de una $n > r$ al aplicar varias veces la TGR nos vamos acercando hacia el punto fijo $P_0(l)$, ya que para valores de $n > r$, $a_n = 0$ y este valor se va recorriendo, llevando los valores de a_n a cero, hasta llegar al punto fijo trivial.

Encontramos que para este caso el punto fijo trivial corresponde con el mínimo de la función entropía del sistema bajo la restricción. Este es el punto fijo hacia el cual nos lleva la TGR ya que nos encontramos fuera de la superficie crítica, por lo tanto podemos decir que el flujo de la TGR nos lleva hacia un mínimo de la función entropía. El punto fijo no trivial se encuentra relacionado con el valor máximo de S para el caso 1 (ver párrafo siguiente a la ecuación 3.75).

Grupo de Renormalización para el Caso 2

Ahora consideraremos el caso 2, que se encuentra descrito por la siguiente distribución de probabilidad

$$P(l) = c' \sum_{n=0}^m a_n(\delta_{l,b^n}) + c' \sum_{n=m+1}^{\infty} a^{-n}(\delta_{l,b^n}). \quad (3.120)$$

Es decir

$$P(l) = c' \sum_{n=0}^{\infty} a_n(\delta_{l,b^n}), \quad (3.121)$$

donde

$$\begin{aligned} a_n &= a_n \quad \text{si } n \leq m, \\ a_n &= a^{-n} \quad \text{si } n > m. \end{aligned}$$

En este caso al aplicar varias veces la TGR a la probabilidad anterior, observamos que nos dirigimos hacia el punto fijo no trivial esto es hacia $P^*(l)$, ya

que al llegar a los valores de a_n para $n > m$ que corresponden al decaimiento de ley de potencia estos se van "recorriendo" sobre los valores de a_n de $n \leq m$, eliminando así los valores de a_n arbitrarios, hasta llegar a la distribución de ley de potencia pura, donde hemos alcanzado el punto fijo no trivial. Esto nos indica que esta distribución se encuentra en la "hipersuperficie crítica" y las cantidades $\alpha_n \equiv a_n - a^{-n}$ son las variables irrelevantes que se hacen cero cuando \mathcal{R} es aplicado repetidas veces. Este punto fijo corresponde también al extremo de la función entropía encontrada para el sistema.

En resumen, si aplicamos esta transformación de grupo de renormalización a las dos probabilidades estudiadas encontramos que:

- Para el primer caso, la probabilidad estudiada es una trayectoria no crítica ya que representa las interacciones entre sitios separados por una distancia finita ($\tau < \infty$). Al aplicar la transformación de grupo de renormalización repetidas veces, ésta nos arroja hacia el punto fijo trivial. Mientras que el punto fijo no trivial es alcanzado sólo si nos situamos en éste, esto es con $\tau \rightarrow \infty$.
- Finalmente, para el segundo caso, la trayectoria representada por esta probabilidad, es una trayectoria crítica con interacciones a largo alcance y al aplicar la transformación de grupo repetidamente nos dirige hacia el punto fijo no trivial, como se espera. En este caso podemos observar las variables irrelevantes $\alpha_n = a_n - a^{-n}$ las cuales se hacen cero al aplicar la transformación de grupo repetidas veces.

Con lo anterior hemos identificado los puntos fijos de la transformación de grupo de renormalización para cada uno de los casos estudiados, y con base en los resultados de la entropía observamos que el punto fijo no trivial (P^*) siempre corresponde con un máximo de la función entropía, mientras que el valor mínimo corresponde con el punto fijo trivial.

Capítulo 4

Conclusiones

Las conclusiones e ideas generales originadas a partir de este trabajo son:

- Se consiguieron alcanzar los objetivos fundamentales planteados al inicio, ya que fue posible, mediante una técnica variacional, obtener los valores extremos de la función entropía (S) para los sistemas estudiados, y comparar estos resultados con los puntos fijos encontrados mediante la transformación de grupo de renormalización (TGR) aplicada al sistema, estableciéndose una relación entre ellos.
- La relación encontrada entre los valores extremos de S y los puntos fijos de la TGR en todos los casos que estudiamos fue que, al encontrarnos en un sistema fuera de la superficie crítica, la TGR nos lleva hacia el punto fijo trivial (como se espera), el cual corresponde al valor mínimo de la función entropía asociada al sistema. Mientras que el punto fijo no trivial se encuentra asociado con el máximo de la función entropía en este caso, y no puede ser alcanzado vía la TGR.
- Por otro lado si nos encontramos sobre una trayectoria crítica, la TGR nos dirige hacia el punto fijo no trivial y este valor corresponde también con un extremo de la función entropía del sistema en estas condiciones. Este extremo puede ser máximo o mínimo según el valor del parámetro ν impuesto a la restricción sobre las distribuciones de probabilidad.

En particular encontramos que:

Caso de Percolación por Sitios en una Dimensión con Interacción a n -ésimos Vecinos

- Para el caso de percolación por sitios fue posible obtener la expresión general de la distribución de probabilidad que describe a cada miembro de la familia de sistemas de percolación por sitios en una dimensión con interacción a n -ésimos vecinos.
- También, para este caso, se encontró la forma general de la función entropía para la familia de sistemas estudiados.
- Retomando resultados anteriores fue posible calcular analíticamente cantidades importantes como la energía libre, el parámetro de orden, la probabilidad crítica p_c , y los exponentes críticos $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \tau$ y ν mostrándose que todos los miembros de esta familia pertenecen a la misma clase de universalidad.
- Se planteó una transformación de grupo de renormalización para el caso con interacciones a primeros, segundos y terceros vecinos, estableciéndose la expresión general de ésta en el caso de primeros y segundos vecinos. Para el caso de terceros a n -ésimos vecinos, se propuso una forma sistemática de establecer esta transformación de grupo.
- Mediante esta TGR fue posible calcular el exponente crítico ν y la p_c coincidiendo con los valores obtenidos mediante el procedimiento analítico.
- Los valores para los puntos fijos para todos los miembros de esta familia resultaron ser los mismos en todos los casos (0 y 1), y correspondieron a los valores extremos de S , el punto fijo no trivial se encuentra asociado con el máximo de S , mientras que el punto fijo trivial correspondió al del valor mínimo. En este caso, los sistemas estudiados se encontraban fuera de la superficie crítica por lo que la TGR nos dirigió hacia el punto fijo trivial y una S mínima.
- Cada uno de estos sistemas mostró ser un problema independiente, presentando su propia TGR y puntos fijos.
- En todos los casos estudiados los puntos fijos alcanzados correspondieron con los valores extremos de la función entropía.

Caso de Percolación por Enlaces en una Dimensión con Interacciones de Largo Alcance

- Para el caso de percolación por enlaces en una dimensión se consiguió estudiar el comportamiento de dos variantes de un caso particular del sistema con interacciones de largo alcance, uno de ellos con una distribución de probabilidad crítica y otro con una distribución de probabilidad no crítica.
- Se consiguió evaluar la función entropía en uno de los casos y en el otro se hizo el análisis por medio de multiplicadores de Lagrange. Debido a que este sistema presenta un comportamiento no extensivo, se calculó la entropía generalizada o de Tsallis (S_q), la cual en el caso límite $q \rightarrow 1$ corresponde a la entropía tradicional.
- Se propuso una misma transformación de grupo de renormalización para ambos sistemas y se encontraron los puntos fijos de ésta, así mismo fué posible identificar las variables irrelevantes del sistema.
- En el caso de la probabilidad no crítica que se propuso se encontró, como en los casos anteriores, que la TGR nos dirige hacia el punto fijo trivial y que éste corresponde con el valor mínimo de S_q , el punto fijo no trivial corresponde con el máximo de la entropía.
- Por otro lado, para el caso de la probabilidad crítica propuesta, la TGR nos dirige hacia el punto fijo no trivial y este corresponde con un máximo o mínimo de S_q bajo estas condiciones dependiendo del valor de ν que especifica la restricción impuesta a la distribución de probabilidad.

Finalmente cabe decir que los casos estudiados, a pesar de ser sistemas sencillos, no resultan ser del todo triviales ya que son lo suficientemente ricos como para poder estudiar características y propiedades generales de las transiciones de fases llevando a conclusiones importantes.

Bibliografía

- [1] P.A. Alcamany and D.H. Zanette. *Phys. Rev. E*, 49:R956, 1994.
- [2] D.J. Amit. *Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena*. World Scientific, 1997.
- [3] C. Antencodo and C. Tsallis. *Phys. Rev. Lett.*, 80:5313, 1998.
- [4] Atkins. *Fisicoquímica*. Addison Wesley, 1990.
- [5] H.B. Callen. *Thermodynamics*. John Wiley & Sons, 1960.
- [6] S.A. Cannas and A.C.N. de Magalhaes. *J. Phys A*, 30:3345, 1997.
- [7] J. Cardy. *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 1997.
- [8] J. W. Essam. *Rep. Prog. Phys.*, 43:833, 1980.
- [9] C. Tsallis et al. *Phys. Rev Lett.*, 75:3589, 1995.
- [10] M. Fisher. Scaling, universality and renormalization group theory. *Lecture Notes in Physics*, 186:1- 139, 1983.
- [11] M.E. Fisher. *Renormalization Group Theory: Its Basis and Formulation in Statistical Physics*. Reviews of Modern Physics, vol 70. No. 2. 1998.
- [12] T. L. Hill. *An Introduction to Statistical Thermodynamics*. Dover, 1986.
- [13] Huang. *Statistical Physics*. McGraw-Hill, 1982.
- [14] J. Fisher y M.E.J. Newman J.J. Binney, N.J. Dowrick. *The Theory of Critical Phenomena (An Introduction to the Renormalization Group)*. Oxford University Press. 1993.

- [15] P. Jund, S.G. Kim, and C. Tsallis. *Phys. Rev. B*, 52:50, 1995.
- [16] L.P. Kadanoff. *Physics*, 2:263, 1966.
- [17] C.M. Newman, M. Aizenman, H.Kesten. *Comm. Math. Phys.*, 90:14-19, 1986.
- [18] L. Chayes, M. Aizenman, J.T. Chayes and C. M. Newman. *J. Stat. Phys.* 50:1, 1988.
- [19] G.M. Zaslavsky, M.F. Shlesinger and U. Frisch. *An Introduction to probability Theory and its Applications*. Wiley, N.Y., 1971.
- [20] G.M. Zaslavsky, M.F. Shlesinger and U. Frisch. *Lévy Flights and Related Topics in Physics*. Springer, Berlin, 1995.
- [21] E.W. Montroll and M.F. Shlesinger. *J. Stat. Phys.*, 32:209, 1983.
- [22] D. Prato and C. Tsallis. *Phys. Rev. E*, page 2398, 1999.
- [23] H.H.A. Rego, L.S. Lucena, L. R. da Silva, and C. Tsallis. *Physica A*, 266:42-48, 1999.
- [24] M.F. Shlesinger and B.D. Hughes. *Physica A*, 109:597, 1981.
- [25] H. E. Stanley. *Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena*. Oxford University Press, 1971.
- [26] D. Stauffer. *Physics Reports (Review Section of Physics Letters)*, 54, No. 1:1-74, 1979.
- [27] D. Stauffer and A. Aharony. *Introduction to Percolation Theory*. Taylor and Francis, 1994.
- [28] C. Tsallis. *J. Stat. Phys.*, 52:479, 1988.
- [29] C. Tsallis and B.J. Bukman. *Phys. Rev. E*, 54:R2197, 1996.
- [30] C. Tsallis, S.V.F. Levi, A.M.C. de Souza, and R. Maynard. *Phys. Rev Lett.*, 75:3589, 1996.
- [31] S. Redner, W. Klein, H. E. Stanley and P.J. Reynolds. *J. Phys: A: Math. Gen.* 11:L17-L22, 1978.

Índice de Materias

- cúmulo infinito, 55
- clase de universalidad, 7
- decimación, 22
- definición lineal, 21
- energía libre, 56
- entropía generalizada o de Tsallis, 49
- exponente de escalamiento, 14
- exponentes críticos, 7, 9
- exponentes críticos del fenómeno de percolación, 55
- fase, 1
- fenómeno crítico, 2
- fenómenos críticos, 3
- ferromagnético, 5
- flujo de grupo de renormalización, 19
- función de correlación, 9
- grupo de renormalización, 6, 18
- Hamiltoniano efectivo, 22
- hipótesis de escalamiento, 10
- leyes de escalamiento, 7, 11
- longitud de correlación, 2
- magnetización espontánea, 56
- número promedio de s-cúmulos, 55
- no universales, 14
- parámetro de orden, 8
- parámetro impar, 32
- parámetro par, 32
- paramagnético, 5
- parametro de orden, 4
- percolación, 54
- percolación por enlaces, 54
- percolación por sitios, 54
- percolación por sitios de enlace, 57
- principio de máxima entropía, 43
- probabilidad crítica, 55
- probabilidad de percolación, 56
- probabilidad infinita, 55
- punto crítico, 3
- punto fijo, 24
- punto fijo crítico, 27
- punto fijo de alta temperatura, 26
- punto fijo de baja temperatura, 26
- radio de cúmulo típico, 59
- radio promedio, 56
- regla de la mayoría, 21
- relaciones de escalamiento, 10
- renormalización en espacio k , 19
- renormalización en espacio real, 19
- s-cúmulo, 54
- superficie crítica, 27
- susceptibilidad magnética, 56

- tamaño de cúmulo típico, 59
temperatura de Curie, 4
teoría de campo medio de Landau,
 11
transición de fase, 1
transición de fase continua, 2
transición de fase de primer orden,
 1
transición de primer orden o dis-
 continua, 3
transición de segundo orden o con-
 tinua, 3
universalidad, 7
variables de bloque, 21
variables irrelevantes, 26
variables relevantes, 26