

Universidad Carlos III de Madrid
Departamento de Matemáticas
Tesis Doctoral



**MODELIZACION DE DISTINTOS ASPECTOS DE
LA TRANSICIÓN VITREA: DINAMICA FUERA
DEL EQUILIBRIO Y FLUCTUACIONES
CUANTICAS.**

Francisco J. González Padilla



Memoria presentada por D. Francisco J. González Padilla para optar al grado de Doctor por la Universidad Carlos III de Madrid en el programa de tercer ciclo "Ingeniería Matemática".

Realizada bajo la dirección de D. Luis L. Bonilla, Catedrático de Universidad del Departamento de Matemáticas de la Universidad Carlos III de Madrid y D. Félix Ritort i Farrán, Profesor Titular de Universidad del Departamento de Física Fonamental de la Universitat de Barcelona.

Leganés, 15 de Junio de 1999.



a mis padres

Agradecimientos

Deseo agradecer a mis directores de Tesis, Luis Bonilla y Félix Ritort, su dedicación y apoyo durante estos años, sin los cuales este trabajo no hubiera sido posible.

Agradezco al Departamento de Matemáticas de la Universidad Carlos III de Madrid por darme la oportunidad de realizar esta Tesis. Un gran número de estancias en otras universidades y asistencias a congresos no hubieran sido posible si las ayuda del Departamento de Matemáticas, la Fundación Universidad Carlos III y diversos proyectos financiados por el M.E.C. y la C.E. A todos ellos les quedo reconocido.

Debo expresar igualmente mi reconocimiento a Pedro Tarazona y Theo M. Nieuwenhuizen, por su muy positiva y desinteresada influencia.

Quiero agradecer el afecto y el apoyo demostrado por muchas de las personas que he conocido durante mi tiempo en la Carlos III y en la UAM: Enrique, Diego, Esteban, Vicente, Manolo, Miguel, Jesús, Bernardo, Hector, Guillermo, Niurka, Pedro, Carlos y Jose. A todos ellos gracias.

A los nuevos y viejos amigos, a mis hermanos y, muy especialmente, a mis padres, gracias por todo el afecto demostrado desde siempre.

Madrid, 15 de Junio 1999.



Abreviaturas más utilizadas.

- TAM, Teoría de Acoplamiento de Modos.
- ITT, Invariancia translacional en tiempos.
- MC, Monte Carlo.
- OA, Oscilador armónico.
- SK, Sherrington y Kirkpatrick.
- EA, Edwards y Anderson.
- TFD, Teorema de Fluctuación y Disipación.
- ROM, Random Orthogonal Model.
- MCC, Monte Carlo Cuántico.

Contenidos

1	Introducción	1
1.1	La Transición Vítrea. Teorías de Equilibrio.	1
1.2	La Fenomenología Experimental de Sistemas Fuera del Equilibrio: Envejecimiento y Violación del TFD	8
1.3	Modelos para la Dinámica Fuera del Equilibrio.	10
1.3.1	La Dinámica en Equilibrio.	10
1.3.2	Modelos para la Dinámica Fuera del Equilibrio.	12
1.4	Fluctuaciones Cuánticas y Transición Vítrea.	13
1.5	El Contenido de esta Tesis.	14
2	La Dinámica Vítrea y el Crecimiento de Dominios: Dinámica Langevin del Modelo de Lebowitz y Percus.	16
2.1	Introducción	16
2.2	El Modelo de Lebowitz y Percus.	17
2.3	La Termodinámica	18
2.3.1	Dinámica.	20
2.4	Solución Dinámica para las cantidades a un Tiempo.	24
2.5	Jerarquía de Ecuaciones para Cantidades Dependientes de dos Tiempos.	25
2.6	Análisis de la Dinámica.	29
2.6.1	Método General.	29
2.6.2	Magnitudes dependientes de un tiempo.	29
2.6.3	Cantidades dependientes de dos tiempos.	35
2.6.4	El Teorema de Fluctuación y Disipación.	38
2.7	Conclusiones	45

3	<i>Envejecimiento en el Oscilador Armónico Lineal.</i>	47
3.1	Introducción	47
3.2	Definición del Modelo y de la Dinámica.	48
3.3	Relajación al Equilibrio.	49
3.4	Las Funciones de Correlación y Respuesta.	50
3.5	Temperaturas Efectivas.	57
3.6	Conclusiones.	59
4	Dinámica Monte Carlo de un Modelo Desordenado de Largo Alcance.	61
4.1	Introducción	61
4.2	La dinámica de Langevin del Modelo de Sherrington Kirkpatrick Esférico	63
4.2.1	Función Generatriz de las Cantidades Dependientes de un Tiempo.	64
4.2.2	Las funciones de Correlación y Respuesta.	66
4.3	La Dinámica de Monte Carlo.	68
4.3.1	La Distribución de Probabilidad de los Cambios de Energía, $P(\Delta E)$	69
4.3.2	Función Generatriz para las Cantidades Dependientes de un Tiempo.	71
4.3.3	La Función de Correlación.	73
4.4	Análisis de las Ecuaciones para la Dinámica Monte Carlo.	75
4.4.1	Dinámica Monte Carlo en Equilibrio.	75
4.4.2	Simulaciones Monte Carlo.	76
4.4.3	Dinámica a Temperatura Finita.	77
4.4.4	Dinámica a muy Bajas Temperaturas.	80
4.4.5	La aproximación adiabática.	82
4.5	Conclusiones	86
4.6	Apéndice I.Las Ecuaciones del Movimiento.	87
4.7	Apéndice II. Solución de la Ecuación Diferencial.	88
5	Fluctuaciones Cuánticas en Sistemas Vítreos.	90
5.1	Introducción	90
5.1.1	Modelos Desordenados con Interacción a Largo Alcance.	93
5.2	Transiciones de Fase Cuánticas en Sistemas con Desorden Congelado.	96
5.2.1	El R.O.M. clásico.	98

5.2.2	La Versión Cuántica del R.O.M.	100
5.3	El R.O.M. más allá de la aproximación estática.	103
5.3.1	La Energía Libre y las Relaciones de Consistencia en Réplicas Simétricas.	103
5.3.2	Análisis y Solución de las Ecuaciones Autoconsistentes.	105
5.4	Cálculo perturbativo de la Temperatura de Transición.	108
5.5	Transiciones de Fase de Primer Orden en el R. O. M.	113
5.5.1	Energía libre y relaciones de consistencia para la fase 1pRSR.	114
5.6	Conclusiones	119
5.7	Apéndice I: $\langle Z^n \rangle_J$ en el R. O. M.	120
5.8	Apéndice II: Paso a variables fermiónicas.	121
5.9	Apéndice III: Cálculo de los propagadores libres	122
5.10	Apéndice IV. La normalización de la función de correlación.	123
6	Conclusiones y Trabajo Futuro.	124

Capítulo 1

Introducción

1.1 La Transición Vítrea. Teorías de Equilibrio.

Muchos líquidos, si son enfriados de manera suficientemente rápida, evitan la fase cristalina y caen en una fase metaestable: el llamado líquido sobreenfriado. En algunos casos, como en el del Pirex (B_2O_3), no importa cuán lentamente enfriemos el sistema, nunca cristaliza a presión ambiente. En otros, es preciso recurrir a un enfriamiento extremadamente rápido para conseguir que el sistema no cristalice.

La metaestabilidad es tan grande que, en la mayor parte de los casos, el sistema persiste en la fase del líquido sobreenfriado y *nunca* cristaliza. Si continuamos bajando la temperatura del sistema o aumentando la presión, encontramos que la viscosidad del sistema aumenta. Cuando el valor de la viscosidad se hace suficientemente grande, el líquido sobreenfriado se convierte en lo que se suele conocer como *vidrio*, y que en general es difícil de distinguir de un sólido cristalino sin recurrir al estudio de su estructura.

Desde el punto de vista de los experimentos calorimétricos, se observa que el calor específico sufre un cambio brusco (ver figura 1) cuando los valores de la viscosidad ya se han hecho muy grandes. Se podría pensar que este cambio se debe a una transición de fase. No resulta este el caso, puesto que la temperatura de esta transición depende de la velocidad a la que se enfría el sistema durante las medidas del calor específico. Se interpreta este resultado como que alguno de los tiempos de relajación del sistema se hace más grande que el tiempo en el que se realiza la medida. Aunque no existe un convenio, se suele definir la transición vítrea como el valor de la temperatura para el cual la viscosidad alcanza el valor de 10^{13}

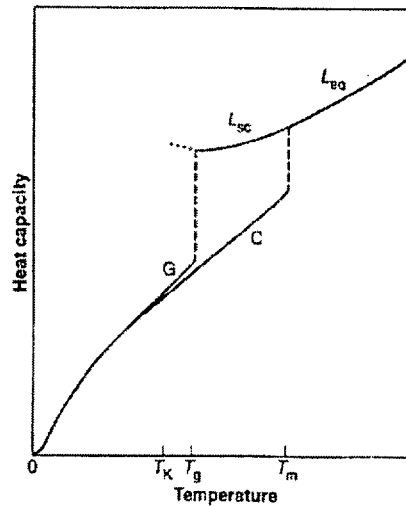


Figura 1.1: Capacidad calorífica. L_{sc} , líquido sobreenfriado, G , vidrio y C , cristal

Poise [1], siendo la velocidad típica de enfriamiento de unos 10 K/min .

Uno de los conceptos mejor establecidos es la separación de los líquidos que son capaces de formar un vidrio en frágiles y fuertes [1]. Esta distinción suele hacerse en términos del comportamiento de la viscosidad del líquido sobreenfriado. En ambos tipos de vidrios, la viscosidad aumenta monotonamente hasta la práctica *congelación* de la dinámica, pero mientras que los vidrios fuertes siguen un comportamiento tipo Arrhenius, $e^{A/T}$, los frágiles parecen seguir una ley Vogel-Fulcher-Tamman-Hesse (VFTH) $e^{B/(T-T_0)}$, con $T_0 > 0$. Es interesante en este sentido la representación de Angell (figura 2). Reescalando la temperatura con T_g , es posible tener una visión general del comportamiento de los líquidos en la fase vítrea. Mientras que algunos líquidos siguen la línea recta en la representación de $\log(\text{viscosidad})$ frente a T_g/T , y por tanto un comportamiento tipo Arrhenius, otros muchos se desvían hacia el comportamiento que hemos denominado VFTH. Faltan en esta representación los polímeros, que tienen un comportamiento mucho más frágil que los líquidos mostrados en esta figura y, si se hace un tratamiento análogo para sistemas magnéticos, se encuentra que los vidrios de espín muestran un comportamiento aún mucho más frágil. En estos se

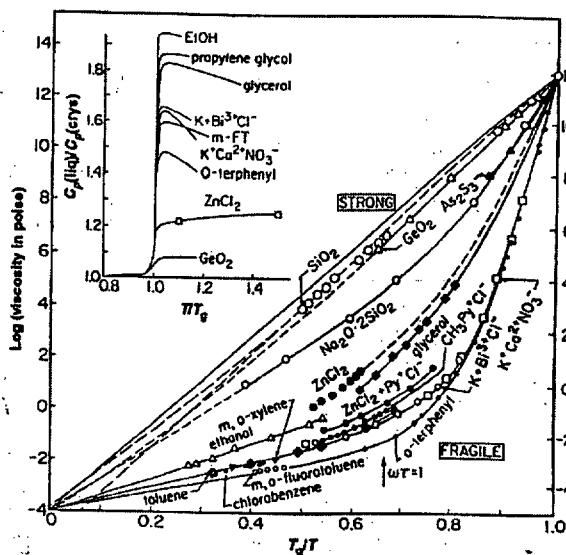


Figura 1.2: Viscosidad y capacidad calorífica, frente a T/T_g .

encuentra que la temperatura a la cual se estima que diverge la susceptibilidad, T_0 , está muy próxima a la de la transición vítrea, T_g . Otra característica que parece diferenciar los vidrios frágiles de los fuertes es el citado salto en el calor específico, que parece ser mucho más pequeño en los vidrios fuertes, ver figura 2. En diversos líquidos, como el agua, se ha encontrado que dependiendo del valor de la presión, pueden presentar un comportamiento fuerte o débil, separados por una transición de primer orden débil.

Mientras que el comportamiento tipo Arrhenius está asociado a las barreras de energía que el sistema debe superar para alcanzar el equilibrio, el comportamiento tipo VFTH es más difícil de explicar. Adam y Gibbs [2] argumentaron que la divergencia del tiempo de correlación podía deberse a la anulación de la entropía configuracional. Idealmente podemos separar el movimiento de las partículas en un movimiento que no implica una reestructuración del sistema y, por tanto, no implica el salto de barreras de energía y un movimiento de más largo alcance, que conlleva el salto de barreras de energía tanto más grandes, cuanto más dentro estemos de la fase vítrea. Es a este segundo tipo de movimientos al que se asocia la entropía configuracional. A temperaturas suficientemente bajas, se supone que el sistema

pierde la capacidad de saltar entre estas configuraciones distintas, '*cristalizando*' en uno de estos estados, la llamada fase vítrea ideal. Este efecto es el que se supone asociado a la anulación de la entropía configuracional. Estas ideas fueron precedidas por las de Kauzmann [3], que hizo notar que si se extrapolaba la entropía de alta temperatura a bajas temperaturas, esta cruzaba de la fase cristalina a una temperatura finita y parecía hacerse menor que esta. Precisamente, la entropía configuracional se define como la diferencia entre la entropía de la fase vítrea y la de la fase cristalina. Aunque durante mucho tiempo la teoría de Adam-Gibbs compitió con las ideas de los modelos de volumen libre [4], estas últimas parecen gozar ahora de mucha menos aceptación.

Los resultados experimentales, como, por ejemplo, el análisis del espectro de relajación dieléctrica, muestran que la relajación tiene lugar mediante dos procesos con escalas de tiempo bien diferenciadas [5]. La primera de las escalas de tiempo es la llamada relajación β , mientras que la segunda, la más larga, se denomina α . Cuanto más baja es la temperatura más se diferencian estas escalas. Por otra parte, simulaciones de sistemas iónicos simples, corroboran esta imagen y además permiten identificar el régimen β con el movimiento de los iones dentro de la *jaula* formada por sus vecinos, y el régimen α con el movimiento difusivo. Para distinguirlas, se suele llamar a la fase de más bajas temperaturas líquido altamente sobreenfriado o *fase vítrea*.

Estos resultados coinciden con los obtenidos de la Teoría de Acoplamiento de Modos (TAM) [6] [7], que se basa en una descripción cinética de la evolución de la función de correlación. A partir de presupuestos muy generales, es posible mostrar como la dinámica en equilibrio de un sistema más el baño se puede expresar como una ecuación de Langevin generalizada. La diferencia fundamental con la ecuación de Langevin ordinaria es que el término disipativo involucra un *núcleo* (Kernel), que hace depender la evolución del sistema de toda la evolución previa. De esta ecuación para la evolución de la densidad del sistema, es inmediato obtener una ecuación para la función de autocorrelación $F_q(t)$.

Las ecuaciones así obtenidas son exactas, pero por desgracia no existe ningún método para calcular explícitamente el *núcleo*. Sin embargo, se puede avanzar en el análisis, si suponemos que nos encontramos en las inmediaciones de una bifurcación y realizamos un análisis cuasilineal de las ecuaciones. En este sentido, es razonable expandir nuestra solución hasta términos cuadráticos o cúbicos, teniendo en cuenta que nuestros resultados solo serán válidos en el límite $(T - T_c)/T_c \ll 1$.



T_c aparece en las versiones más sencillas de la TAM como la temperatura a la cual el tiempo de relajación en el régimen α diverge y la función de correlación del sistema se queda bloqueada, caracterizada por viscosidades de entre 10^4 y 10^2 Poise; aunque aparentemente esta transición no va acompañada de la divergencia de ninguna cantidad termodinámica o la aparición de una divergencia de la longitud de correlación [8]. Esta temperatura separa el líquido sobreenfriado de la fase vítrea. La fase altamente sobreenfriada o vidrio está caracterizada por viscosidades de entre 10^{15} y 10^5 Poise y tiempos de relajación de entre 10^4 y 10^{-6} segundos; la transición vítrea calorimétrica, por una viscosidad de entre 10^{13} y 10^{11} Poises y tiempos de relajación de entre 10^2 y 10^0 segundos y el líquido sobreenfriado por una viscosidad de entre 10^4 y 10^{-1} Poises y los tiempos de relajación de entre 10^{-7} y 10^{-12} segundos. Nótese que en la transición calorimétrica se encuentra dentro de la fase altamente sobreenfriada y que, por tanto, T_g y T_c marcan transiciones distintas.

La TAM parece predecir correctamente la relajación del sistema para $T > T_c$ (ver algunas de las numerosas simulaciones que se han realizado [9], [10] o los experimentos en sistemas coloidales [11], que se consideran una buena realización de las versiones esquemáticas de la TAM), es decir el régimen en el cual el sistema relaja por difusión cinética. Para $T < T_c$ este mecanismo se bloquea, debido a que la densidad se ha hecho tan alta que las partículas ya no pueden escapar de la *jaula* formada por las partículas circundantes. Este resultado es incorrecto, puesto que en esta fase no se espera ruptura de la ergodicidad y la función de correlación debe decaer a cero. Se debe a que las versiones esquemáticas de la TAM no tienen en cuenta los procesos de activación térmica, que parecen ser los relevantes para la relajación a tiempos largos y $T < T_c$. Una de las grandes cuestiones abiertas es la comprensión de este líquido altamente sobreenfriado.

Desde el punto de vista de una teoría cinética como la TAM, resulta natural pensar que no existe una transición termodinámica y que la transición calorimétrica no expresa más que el hecho de que algunos tiempos de relajación del sistema se hacen más grandes que la escala del tiempo de medida. No obstante, la aparente divergencia de la viscosidad y anulación de la entropía configuracional parecen apuntar hacia la existencia de una transición vítrea ideal. Kauzmann sugirió que se llegaría a esta transición a $T = T_K$ en el límite de enfriamiento infinitamente lento.

Un nuevo punto de vista lo aportan los sistemas con desorden congelado. Recientemente [12] se ha llamado la atención sobre la conexión entre sistemas con desorden congelado, como

los *vidrios de espín*, y determinados aspectos de los *vidrios estructurales*. Por ejemplo, el estudio analítico de los primeros [13] [14] y los resultados de simulaciones de los segundos [15] muestran un paisaje de energía muy complejo en sus respectivas fases de bajas temperaturas. Su origen es distinto en ambos casos, mientras que en los primeros proviene del desorden, en los segundos proviene de la dinámica. No obstante, el estudio de los primeros, para los cuales se han desarrollado eficaces técnicas, se espera que contribuya a comprender los segundos.

No todos los modelos con desorden congelado parecen igualmente apropiados para este estudio. Kirkpatrick y Wolynes [12], sugirieron utilizar el modelo de Potts y el p -espín ($p > 2$) para modelar la transición vítrea. Se basaban en dos propiedades que los hace muy próximos a los vidrios estructurales: la presencia de un parámetro de orden que cambia de forma discontinua en la transición y la ausencia de calor latente.

En trabajos posteriores, Kirkpatrick y Thirumalai [16] analizaron en detalle la dinámica del p -espín con $p > 2$ en su versión *soft spin*. Descubrieron la presencia de una transición situada por encima de la transición estática, caracterizada por un valor asintótico finito de la función de correlación, $\lim_{t \rightarrow \infty} C(t) = q_c > 0$. Encontraron también que las ecuaciones dinámicas de este modelo son idénticas en la estructura de las no linealidades a las encontradas por Leutheusser [6] (y de lo que luego se daría en llamar *Teoría de Acoplamiento de Modos* (TAM) [7]) en sus ecuaciones para describir la fase sobreenfriada de los fluidos.

Posteriormente se ha puesto de relieve que la transición dinámica puede ser determinada desde la estática utilizando la condición de marginalidad [17], la presencia de un autovalor cero en la matriz de estabilidad. Aunque esta solución no es la que minimiza la energía libre, el sistema se queda bloqueado en este estado. Muchas de estas propiedades han sido comprobadas en el R.O.M. [17]. Todos estos modelos, el p -espín, el Potts y el R.O.M., comparten la característica común de que su solución de bajas temperaturas puede ser entendida con el *ansatz de un paso de ruptura de la simetría de las réplicas* (1pRSR).

Así el escenario en los vidrios de espín con 1pRSR es el siguiente: existe una transición dinámica caracterizada por un valor asintótico finito de la función de correlación y que es muy semejante a la presentada por la TAM y una segunda temperatura, asociada a una transición de fase termodinámica de segundo orden, pero con discontinuidad en el parámetro de orden. Además, en esta transición se anula la entropía configuracional, siendo así muy parecida a la transición sugerida por Kauzmann.

Por tanto, ciertos sistemas con desorden congelado, aquellos que tienen su origen en mod-

elos de vídrios de espín y que manifiestan la peculiar solución a bajas temperaturas descrita antes, 1pRSR, se convierten en una guía para la comprensión de los vidrios estructurales. En particular, parecen favorecer la hipótesis de una transición vítrea ideal. Desafortunadamente estos modelos presentan las mismas dificultades que las versiones esquemáticas de la TAM: la relajación se detiene para temperaturas por debajo de la transición dinámica, impidiendo un estudio realista del líquido altamente sobreenfriado.

La dificultad con estas diferentes aproximaciones al problema es que, como teorías de campo medio, sobreestiman la estabilidad de los mínimos metaestables. En el caso de la analogía con los sistemas con desorden congelado, encontramos que los distintos mínimos metaestables están separados entre si y del estado de equilibrio por barreras proporcionales a la conectividad, N . En el caso de las teorías de acoplamiento de modos, la dificultad parece encontrarse en las dificultades para modelar apropiadamente los procesos de activación térmica.

Tal y como hemos mencionado, el comportamiento vítreo parece encontrarse en sistemas muy distintos: algunos con desorden congelado, otros careciendo de desorden ,etc... Esta universalidad en el comportamiento nos lleva a pensar que mecanismos muy generales sean los responsables del comportamiento vítreo. En este sentido, se han propuesto distintos modelos simples para capturar los comportamientos relevantes en los sistemas vítreos. Mencionaremos unos pocos.

La aproximación más antigua de este tipo es la introducida por Goldstein [18], basada en una construcción fenomenológica de un *paisaje* de energía complejo; donde los vídrios frágiles viene descritos por una sección del paisaje ocupada por mínimos estrechos y poco profundos y los fuertes por otra región en la cual los mínimos serían anchos y más profundos. Aquí se pone el énfasis entre la transición antes mencionada entre el comportamiento frágil y fuerte en un mismo líquido.

Se ha utilizado dinámica discreta para estudiar distintos regimenes y fenomenología. En [19] se ha estudiando el comportamiento no exponencial en la relajación del modelo de Ising en 1D con dinámica de Glauber y la aparición de una ley KWW (Kohlrausch, William y Watts) en el límite $T \rightarrow 0$. Otro modelos discretos estudiados han sido los de *trampas* [20]. Estos modelos, poseen una cierta distribución de niveles de energía entre los cuales el sistema puede moverse por activación térmica, interaccionando con la estructura de los pozos próximos. En ellos se encuentra relajación del tipo KWW y parece que algunas magnitudes

del problema divergen siguiendo una ley de VFTH. Otros modelos con dinámica discreta han hecho más énfasis en la posibilidad de que las barreras del sistema se deban más a barreras entrópicas que a barreras de energía, como el Backgammon [21], o el *1-spin facilitated model* [22].

1.2 La Fenomenología Experimental de Sistemas Fuera del Equilibrio: Envejecimiento y Violación del TFD

En los sistemas vítreos, debido a la divergencia de los tiempos de relajación, son muy importantes las propiedades de fuera del equilibrio. El fenómeno más comunmente encontrado al estudiar la relajación de estos sistemas es el *envejecimiento* en las magnitudes dinámicas, como las funciones de correlación y respuesta, la magnetización,... Se suele hablar de *envejecimiento* en las magnitudes dinámicas cuando no se verifica la invariancia translacional en tiempos (ITT); cuando las magnitudes dependen no solo del tiempo transcurrido entre medidas, sino también de cuánto tiempo ha transcurrido desde que se sacó al sistema del equilibrio.

Existe numerosos ejemplos de importancia de este tipo de comportamiento. La respuesta a tensiones de polímeros como el PVC, dependen de, no solo, como han sido moldeados, sino también del tiempo que ha transcurrido desde que fueron enfriados [23] (ver la figura 3).

La presencia de *envejecimiento* en sistemas magnéticos también ha sido estudiada intencionalmente; especialmente en vidrios de espín, que están caracterizados por una relajación al equilibrio muy lenta [24] [25]. En estos sistemas se suele estudiar el *envejecimiento* en la magnetización.

El interés en este fenómeno no se queda en simplemente constatar cuanto difiere la dinámica de equilibrio de la de fuera del equilibrio. Los resultados sobre la dinámica fuera del equilibrio nos dan información sobre el paisaje de energía y los mecanismos de relajación. Por ejemplo, en vidrios de espín, la magnetización, apropiadamente normalizada muestra ser una función del tiempo total dividido por el tiempo de espera, $M/M_{FC} \sim f(t/t_w)$. Este resultado suele explicarse recurriendo a la estructura autosimilar de mínimos de energía en la cual se supone que relaja el sistema [13]. Si bien este mismo tipo de comportamiento se encuentra frecuentemente en sistemas donde la relajación ha llevado a la aparición de

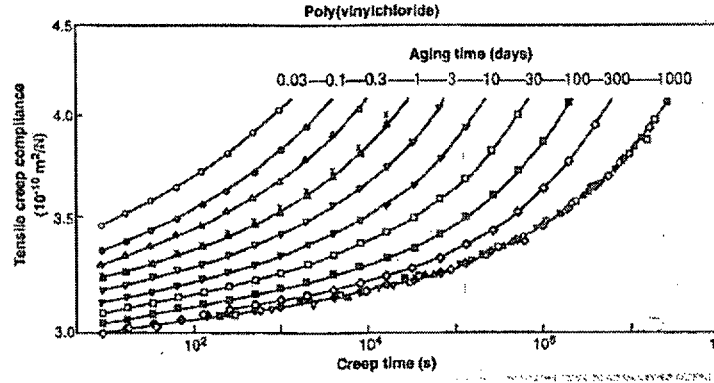


Figura 1.3:

dominios o defectos [26], demandando un análisis más cuidadoso del problema.

Se ha encontrado *envejecimiento* en otros muchos sistemas: en los experimentos sobre la relajación de suspensiones coloidales [27] y también en simulaciones de dinámica molecular para un gas de Lennard-Jones [28]. También se ha encontrado *envejecimiento* en simulaciones sobre medios granulares, donde las vibraciones mecánicas del sistema parecen jugar un papel análogo al de la temperatura. Se encuentra en estos sistemas un peculiar escalado de la forma $\log(t_w)/\log(t)$ [29].

La violación del TFD es menos accesible experimentalmente, aunque esta siendo estudiada de manera cada vez más intensa en simulaciones numéricas y analíticamente. El creciente interés en conocer de que manera se viola el teorema de fluctuación (TFD) y disipación, mediante el estudio de $X(t, t') = \frac{1}{TR(t, t')} \frac{\partial C(t, t')}{\partial t'}$, se debe al papel que juega esta cantidad en la discusión sobre la fase de bajas temperaturas del modelo de Edwards-Anderson y a los intentos de introducir una temperatura de fuera del equilibrio. Esta temperatura de fuera del equilibrio, estaría conectada con la cantidad $X(t, t')$, a la que nos referiremos como el *parámetro de fluctuación y disipación*.

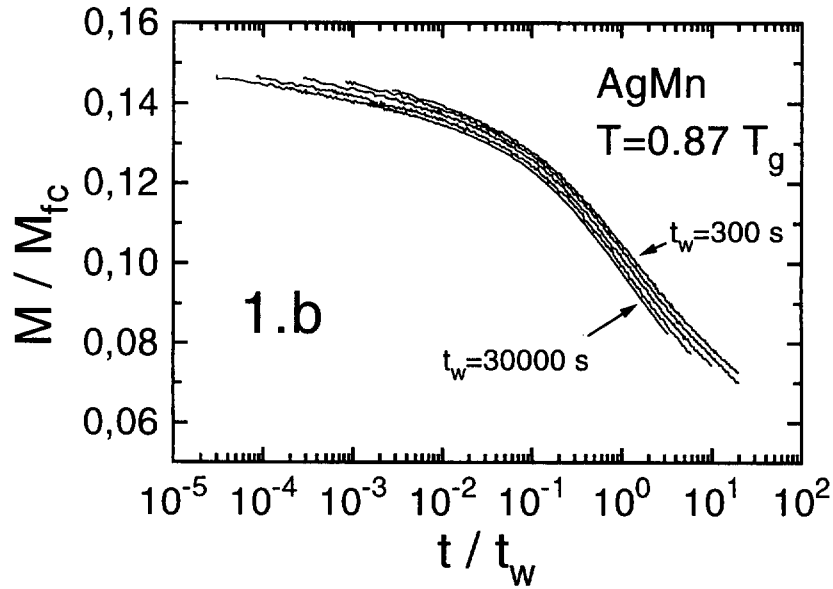


Figura 1.4:

1.3 Modelos para la Dinámica Fuera del Equilibrio.

1.3.1 La Dinámica en Equilibrio.

La dinámica de un sistema con un número macrocópico de grados de libertad clásico es, en principio, resoluble integrando las ecuaciones de Hamilton. Sin embargo, estas ecuaciones son reversibles y conservan la energía. Para estudiar sistemas con disipación se acopla el sistema en estudio con un baño de energía (o de partículas si trabajamos en el colectivo gran canónico). El baño de energía nos interesa en la medida en que permite al sistema relajarse al equilibrio y se toma en consideración tan solo a través de una variable macrocópica como la temperatura (temperatura y potencial químico, en el colectivo gran canónico).

En el caso de modelos continuos, se puede utilizar la dinámica de Langevin, como haremos en el capítulo II. En una dimensión tenemos el ejemplo de la partícula Browniana

$$\dot{v}(t) = F(t) - \Gamma v(t) + \zeta(t) \quad (1.1)$$

donde ζ es una variable aleatoria de media cero y varianza $\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = 2D\delta(t-t')$. La condición para que el sistema alcance el equilibrio implica la *relación de Einstein* $D = \Gamma k_b T$

Para modelos discretos se suele construir una ecuación maestra para definir la evolución de la distribución de probabilidad.

$$\frac{d}{dt}P(\{s\}; t) = - \sum_j w_j(s_j, \dots)P(s_j, \dots; t) + \sum_j w_j(-s_j, \dots)P(-s_j, \dots; t) \quad (1.2)$$

Donde P , nos da la probabilidad de encontrar una cierta configuración en nuestro sistemas y w la probabilidad de que la configuración cambie. En equilibrio,

$$- \sum_j w_j(s_j, \dots)P(s_j, \dots; t) + \sum_j w_j(-s_j, \dots)P(-s_j, \dots; t) = 0 \quad (1.3)$$

Una condición suficiente para que se verifique la ecuación anterior es que ésta se verifique sumando a sumando:

$$w_j(s_j, \dots)P(s_j, \dots; t) = w_j(-s_j, \dots)P(-s_j, \dots; t) \quad (1.4)$$

Esta condición se conoce como *balance detallado*, e implica que el sistema es microscópicamente reversible. Aún imponiendo esta nueva condición quedan muchas posibilidades para escoger las probabilidades de transición. Glauber:

$$w_j(s_j, \dots) = \Gamma(1 - s_j \tanh(h_j)) \quad (1.5)$$

donde h_j es el campo local que actúa sobre el espín j -ésimo. Metrópolis:

$$w_j(s_j, \dots) = \text{Min}(1, \exp(-\beta(E(-s_j, \dots) - E(s_j, \dots)))) \quad (1.6)$$

baño térmico:

$$w_j(s_j, \dots) = \frac{1}{1 + \exp(\beta(E(-s_j, \dots) - E(s_j, \dots)))} \quad (1.7)$$

El tiempo de relajación para la dinámica MC, se puede aproximar por $\tau \sim \frac{V_-}{V_+} e^{-A/T}$, donde V_- es el número de configuraciones que disminuyen la energía, V_+ el número de ellas que la aumentan y A la altura típica de las barreras de energía. En ausencia de barreras de

energía es este cociente entre las configuraciones que aumentan y disminuyen la energía el que controla la dinámica.

Las dinámicas M.C. y Langevin nos proveen de un método para el cálculo de promedios. Partiendo de un sistema termalizado, estimaremos los promedios estadísticos mediante el promedio de los valores que toman las variables durante el tiempo. Los resultados para ambas dinámicas deben ser equivalentes.

Notese que la dinámica anterior es del tipo no conservado: el parámetro de orden, que en el ejemplo anterior es la magnetización, no se conserva localmente. Si el sistema que estamos modelando requiere su conservación, debemos recurrir a una ecuación maestra distinta, la dada, por ejemplo, por la dinámica de Kawasaki [26]. Adicionalmente, tendremos un nuevo tipo de universalidad en la dinámica [26].

Además del cálculo de magnitudes termodinámicas (estáticas), estos métodos permiten el cálculo de magnitudes dependientes del tiempo. En efecto, es posible estudiar la función de correlación. Esta nos da una indicación de como relajan las fluctuaciones espontáneas del sistema. La otra cantidad en la que estaremos interesados, es la función respuesta que mide el cambio en el parámetro de orden debido a una perturbación externa, en el límite en que ésta es muy pequeña. Ambas cantidades están relacionadas por el Teorema de Fluctuación y Disipación,

$$\frac{dC(t)}{dt} = -k_B T G(t) \quad C(t-t') = -k_B T \int_{-\infty}^{t'} G(t-t'') dt'' \quad (1.8)$$

que se suele resumir diciendo que en equilibrio, una fluctuación espontánea y una perturbación espontánea suficientemente pequeña relajan de la misma forma.

1.3.2 Modelos para la Dinámica Fuera del Equilibrio.

Los trabajos mencionados anteriormente sobre modelos con desorden congelado y en la TAM, se refieren siempre a propiedades de equilibrio. Una de las líneas que más interés ha levantado en los últimos años en el campo de los sistemas vítreos son las propiedades de fuera del equilibrio, cuya fenomenología ha sido presentada en el apartado 1.2.

Dentro del trabajo en modelos analíticos, se ha estudiado intensamente la dinámica de fuera del equilibrio del modelo p -espín. Para $p = 2$ [30] [31] y para $p > 2$ [32] [33]. De estos

modelos se desprende un interesante comportamiento de fuera de equilibrio. La función de correlación y otras magnitudes que miden la dinámica del sistema muestran una dependencia de la edad del sistema: el sistema responde de forma distinta según la medida se haga cuando ha pasado más o menos tiempo desde que se sacó al sistema del equilibrio (se hizo, por ejemplo, un enfriado desde la fase de alta temperatura). Se ha encontrado, como parte esencial de las soluciones de fuera de equilibrio, el fenómeno de *envejecimiento* y la violación del teorema de fluctuación y disipación.

También en algunos de los modelos discretos discutidos antes se ha estudiado la dinámica de fuera del equilibrio [21] [22] [34].

1.4 Fluctuaciones Cuánticas y Transición Vítreas.

Un aspecto mucho menos estudiado que los anteriores es la influencia de las fluctuaciones cuánticas en un vidrio. Los estudios están basados en la analogía antes mencionada entre sistemas con desorden congelado y los vidrios estructurales. Los resultados más llamativos han aparecido en sistemas de corto alcance, donde se ha mostrado que a $T = 0$ aparecen singularidades de *Griffiths-McCoy* especialmente intensas. No obstante, nos restringiremos al estudio de sistemas desordenados de largo alcance.

En los modelos clásicos, la aparición de una transición de fase viene caracterizada por la divergencia del tiempo de fluctuación entre dos componentes ergódicas del sistema. A la temperatura crítica, este tiempo diverge y se rompe la ergodicidad del sistema. Algo semejante sucede en un sistema cuántico, salvo que el paso entre dos componentes ergódicas ya no se produce debido a activación térmica sino a *efecto túnel*. Se ha mostrado que ciertos sistemas clásicos con desorden congelado poseen una ruptura de la ergodicidad mucho más compleja que la encontrada en los sistemas ordenados y no frustrados. Por tanto, resulta del mayor interés comprender de qué forma afectan las fluctuaciones cuánticas a la ruptura de la ergodicidad de estos modelos.

Como ya hemos notado, los modelos con desorden congelado y frustración han sido propuestos como guía para la comprensión de los vidrios estructurales. Por otra parte, desde hace años se viene realizando un trabajo muy intenso para comprender las propiedades térmicas de los vidrios a bajas temperaturas [35]. Para analizar la capacidad calorífica y la conductividad térmicas a bajas temperaturas se ha utilizado el llamado el sistema de dos niveles o *two level system* (TLS) [36] y modificaciones posteriores. Los ingredientes básicos de estos modelos son la presencia de desorden y el efecto túnel entre estados atómicos. La comparación de los resultados de ambos tipo de teorías podría ayudar a clarificar los aspectos menos comprendidos. En particular, podría permitir comprender qué modelos microscópicos corresponden a los TLS antes mencionados [37]. También debería ayudar a comprender cual es el efecto de la disipación térmica en las transiciones de fase cuánticas.

1.5 El Contenido de esta Tesis.

En esta tesis vamos a analizar la dinámica en equilibrio y fuera de equilibrio de distintos modelos. Nos vamos a basar para nuestro estudio en modelos suficientemente sencillos como para poder obtener ecuaciones cerradas para la dinámica en el límite termodinámico, $N \rightarrow \infty$. Aunque los modelos tratados necesariamente contendrán simplificaciones o serán muy esquemáticos, esta perspectiva nos permitirá eliminar efectos de tamaño finito que seguramente son irrelevantes. Además, aunque en algún caso las ecuaciones resultantes sean todavía complejas, el coste computacional será mucho más pequeño.

La dinámica en equilibrio es universal, dadas las condiciones mencionadas en el apartado 1.3.1, y no importa como la modelemos, siempre obtendremos el mismo resultado. Sin embargo, la dinámica de fuera del equilibrio puede depender fuertemente de los detalles de cómo la modelemos. Uno de los objetivos de esta Tesis es comprender estos factores y entender qué modelo para la dinámica podría ser más apropiado para cada situación física.

Estudiaremos la dinámica de fuera de equilibrio en sistemas que relajan lentamente, que



es la situación encontrada en sistemas vítreos, e intentaremos comprender como se puede extender los métodos y conceptos de la Termodinámica y Dinámica de equilibrio para el análisis de este problema.

Los aspectos de la transición vítrea que nos van a interesar más serán la presencia de regímenes α y β de fuera del equilibrio, reminiscentes de los encontrados en la TAM (en equilibrio) y el bloqueo de la función de correlación. Este será el tema fundamental del capítulo II. Los resultados de este capítulo han sido publicados en [?]

Otro aspecto que nos interesará es el efecto de barreras de entropía en la dinámica del sistema. Veremos que el efecto de estas barreras es la divergencia del tiempo de correlación y la aparición de *envejecimiento*, incluso en un modelo tan sencillo como el considerado en el capítulo III. También será interesante ver como es posible definir una cierta temperatura de fuera del equilibrio en este modelo. Los resultados originales se pueden consultar en [?].

El capítulo IV se centrará en comparar la dinámica de Langevin y la de M.C. fuera del equilibrio. Veremos como estudiar la dinámica para tiempos largos, lo que pondrá en contacto este trabajo con el del capítulo III. Resultará interesante comparar la dinámica a $T = 0$, de los modelos descritos en ambos capítulos. Los resultados se encuentran en [74] y [?].

Mientras que en los primeros capítulos consideraremos sistemas sin desorden *congelado* o, cómo en el caso del capítulo (IV), sistemas donde no es muy relevante (no tiene frustración); en el capítulo V estudiaremos un modelo con desorden congelado y frustración. Aunque es menos realista considerar desorden congelado, podremos a cambio avanzar en el estudio de como se ve afectado el comportamiento termodinámico de los vidrios cuando tenemos en cuenta las fluctuaciones cuánticas.

Capítulo 2

La Dinámica Vítrea y el Crecimiento de Dominios: Dinámica Langevin del Modelo de Lebowitz y Percus.

2.1 Introducción

Uno de los objetivos de esta tesis es mejorar la comprensión sobre las teorías dinámicas tipo TAM. Esta teoría, como se ha mencionado en la introducción, da una buena descripción del líquido sobreenfriado, pero falla cuando intentamos describir fases de viscosidad demasiado baja. Aunque es posible introducir en la TAM los efectos de activación térmica, aún no se comprende muy bien como se debe proceder. La dificultad parece asociada a que la aproximación de acoplamiento de modos es un tanto incontrolada. Es por tanto, interesante resolver otros modelos de dinámica para poder comparar con los resultados de la TAM.

Por otra parte, también se ha mencionado el interés de estudiar el comportamiento de fuera del equilibrio de sistemas que relajan lentamente. Desde el punto de vista de la TAM, no es posible estudiar estos comportamientos, porque las ecuaciones han sido obtenidas con la hipótesis de equilibrio.

En este capítulo, abordaremos el estudio de un gas de red que relaja al equilibrio llevado por una dinámica de Langevin.

Comenzaremos revisando los resultado bien conocidos de la termodinámica de equilibrio.

Propondremos una dinámica de Langevin para las variables microscópicas del sistema en contacto con un baño de partículas y obtendremos a partir de ellas ecuaciones para las variables macroscópicas estáticas, como la densidad, y dinámicas, como la correlación, la función respuesta y la correlación entre réplicas. La ecuación de evolución de cada una de estas magnitudes depende de nuevas variables macroscópicas, determinando una jerarquía de ecuaciones para cada una de ellas. En el caso de este modelo, estas jerarquías pueden ser cerradas usando una cierta función generatriz. Nos interesaremos por la dinámica en equilibrio y fuera del equilibrio y analizaremos en detalle esta última. La dinámica de equilibrio, que se obtiene en el límite asintótico de la dinámica de fuera del equilibrio, será analizada a la vista de los resultados de TAM.

Haremos especial énfasis en el análisis de posibles extensiones de las propiedades de equilibrio a fuera del equilibrio. Especialmente, analizaremos la posibilidad de definir una temperatura de fuera del equilibrio para el sistema. Este análisis se hará desde dos perspectivas distintas: la estática, estudiaremos la distribución espacial de dominios, y la dinámica, analizando la violación del TFD.

Otro aspecto estudiado en este capítulo es la evolución de la distancia entre dos réplicas del sistema que evolucionan bajo distintas realizaciones del ruido. Esta magnitud nos dará información sobre como está conectado el espacio de las fases.

2.2 El Modelo de Lebowitz y Percus.

Para modelar la física de un fluido de esferas duras, Lebowitz y Percus [41] consideraron un gas de red. En este tipo de modelos se desprecian los grados de libertad asociados al movimiento y solo se toma en consideración las posiciones de las partículas. Estas, solo pueden situarse sobre los vértices de la red, que en este caso se trata de una red cúbica. Por tanto, la densidad estará definida sobre los puntos de la red y tomará valores 1 ó 0. Para tener en cuenta los efectos de volumen excluido, introdujeron un potencial infinitamente repulsivo entre primeros vecinos. Como el problema así formulado es insoluble, consideraron estas restricciones de manera promediada: se trata de un gas de red estudiado en la aproximación esférica.

$$\sigma_1 \equiv \sum_{\mathbf{x}} \rho(\mathbf{x})^2 - \sum_{\mathbf{x}} \rho(\mathbf{x}) = 0 \quad (2.1)$$

$$\sigma_2 \equiv \sum_{\mathbf{x}} \sum_{\mathbf{q}} \rho(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x} + \mathbf{q}) = 0, \quad (2.2)$$

donde \mathbf{x} es una variable discreta que indica las posiciones de los nodos de la red en D dimensiones y \mathbf{q} son los vectores que unen un nodo con sus primeros vecinos. Resumiendo, nuestro modelo cuenta con la misma energía para cada configuración permitida, aquellas que cumplen las restricciones 2.1 y 2.2, condición de ocupación 1 ó 0 y de volumen excluido respectivamente.

2.3 La Termodinámica

Brevemente exponemos los resultados conocidos sobre la termodinámica del modelo LP (Lebowitz y Percus). La función de partición de este modelo viene dada por:

$$\mathcal{Z}_{GC} = \sum_{n=1}^{\infty} z^n Q_n(\beta) \quad (2.3)$$

$Q_n(\beta)$ es la función de partición en el colectivo canónico.

$$Q_n(\beta) = \sum_{\{\rho_l\}'} \delta_{\sigma_1,0} \delta_{\sigma_2,0} \quad (2.4)$$

donde σ_1 y σ_2 fueron definidas en eqs.(2.1,2.2). La prima sobre el símbolo de la suma en la eq.(2.4) indica que la suma está restringida a aquellos estados que verifican la restricción esférica: $\sum_{l=1}^N \rho_l = n$ donde n es el número de partículas y N el de nodos en la red. Como se había avanzado, tratamos un modelo en el cual todos los microestados tienen la misma energía. Sustituyendo la función de partición canónica (2.4) en la función de partición gran canónica (2.3), en el límite en que n y N tienden a infinito con un valor finito de n/N , obtenemos,

$$\mathcal{Z}_{GC} = \sum_{\rho_l=-\infty}^{\infty} \prod_{l=1}^N z^{\rho_l} \delta(\sigma_1) \delta(\sigma_2) \quad (2.5)$$

Introduciendo la representación integral de la delta,

$$\mathcal{Z} = \int \prod_{l=1}^N d\rho_l \int \exp[\beta \sum_{l,l'} \hat{C}(x_l, x_{l'}) \rho_l (1 - \rho_{l'}) + \sum_l \gamma \rho_l] \quad (2.6)$$

donde z es la fugacidad $z = \exp(\gamma) = \exp(\mu\beta)$ y $\hat{C}(x_l, x_{l'}) = \lambda(x_l - x_{l'})$. En nuestro caso, $\lambda(x_l - x_{l'}) = \lambda_0$ para $x_l = x_{l'}$ y $\lambda(x_l - x_{l'}) = \lambda_1$ para $x_l - x_{l'} = q$ y $\lambda(x_l - x_{l'}) = 0$ para el resto de los valores.

El término cuadrático puede ser diagonalizado usando la transformada de Fourier y la función de partición puede ser evaluada exactamente conociendo el valor de los multiplicadores de Lagrange. Estos vienen determinados por las restricciones del sistema a través de las siguientes expresiones $\frac{\partial \log \mathcal{Z}}{\partial \lambda_0} = \sigma_1$ y $\frac{\partial \log \mathcal{Z}}{\partial \lambda_1} = \sigma_2$ que dan eq.(2.1,2.2).

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} T \frac{\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})}{2 \tilde{\lambda}(\mathbf{k})} = \langle \rho \rangle [\delta(\mathbf{x}) - \langle \rho \rangle] \quad (2.7)$$

$$\tilde{\lambda}(\mathbf{k}) = \lambda_0 + 2 \lambda_1 D \gamma(\mathbf{k}) \quad \gamma(\mathbf{k}) = \frac{1}{D} \sum_{i=1}^D \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}_i) \quad (2.8)$$

donde $\mathbf{x} = 0$ ó $\mathbf{x} = \mathbf{q}_i$ con $i = 1, \dots, D$. Nótese que (2.7) determina dos ecuaciones distintas de las que podemos obtener los multiplicadores λ_0 y λ_1 . (Aligeramos la notación y escribimos ρ en lugar de $\langle \rho \rangle$.) Tomando el límite al continuo en la fase de alta temperatura, encontramos:

$$\frac{1}{(2\pi)^D} \int_0^{2\pi} d\mathbf{k}^D \frac{T \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})}{2 \tilde{\lambda}} = \rho (\delta(\mathbf{x}) - \rho) \quad (2.9)$$

de nuevo para $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ ó $\mathbf{x} = \mathbf{q}_i$, ($1 \leq i \leq D$). Para $D > 2$, existe una transición de condensación sobre el estado con $\mathbf{k} = \mathbf{K} = \pi(1, 1, \dots, 1)$. Esto es, aparece una ocupación macroscópica de este estado, que proviene de que $\tilde{\lambda}(\mathbf{K}) = 0$. En la fase condensada, $\lambda \equiv \lambda_0 = 2\lambda_1 D$ y la ecuación para determinar el valor de la temperatura crítica y de λ es ahora,

$$\frac{1}{(2\pi)^D} \int_0^{2\pi} d\mathbf{k}^D \frac{T_c \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})}{2\lambda(1 + \gamma(\mathbf{k}))} = \rho (\delta(\mathbf{x}) - \rho) \quad (2.10)$$

para $x = 0$ ó $x = \mathbf{q}_i$, ($1 \leq i \leq D$). Por debajo de la temperatura crítica, la solución que minimiza la energía libre es aquella que presenta una proyección macroscópica sobre el modo $\mathbf{K} = \pi(1, 1, \dots, 1)$ y cumple que $\lambda_0 = 2\lambda_1 D = \lambda$, que pueden ser determinados de la ecuación

$$a_K \cos(\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}) + \frac{1}{(2\pi)^D} \int_0^{2\pi} d\mathbf{k}^D \frac{T \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})}{2\lambda(1 + \gamma(\mathbf{k}))} = \rho(\delta(\mathbf{x}) - \rho), \quad (2.11)$$

que corresponde a tomar el límite al continuo en 2.7.

El mecanismo para la transición de condensación en el modelo LP es el mismo que en el modelo de Berlin and Kac [46] y aparece tan solo para $D > D_t = 2$ que es la dimensión crítica inferior del modelo. Para $D = 3$ la temperatura crítica es de 20.158. La entropía de este modelo se hace negativa y diverge como $\log(T)$, violando la tercera ley de la termodinámica. Esta patología se puede corregir cuantizando la teoría, introduciendo operadores de espín en lugar de las variables clásicas [43].

2.3.1 Dinámica.

El Hamiltoniano efectivo del modelo LP, que tiene en cuenta las restricciones (2.1) y (2.2) impuestas sobre el sistema, es

$$H_{eff}(\{\mathbf{x}\}) = \lambda_0(t) \sum_x (\rho(\mathbf{x})^2 - \rho(\mathbf{x})) + \lambda_1(t) \sum_x \sum_{l=1}^{n_v} \rho(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x} + \mathbf{q}_l) \quad (2.12)$$

donde n_v es el número de primeros vecinos y \mathbf{q}_l son los vectores que unen cada punto de la red con sus primeros vecinos.

Para modelar la dinámica proponemos usar la ecuación de Langevin, modificada para tener en cuenta que el sistema puede intercambiar partículas con el medio.

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x}', t)}{\partial t} = \mu - \frac{\partial H_{eff}(\{\mathbf{x}\}, t)}{\partial \mathbf{x}'} + \eta(\mathbf{x}', t) \quad (2.13)$$

donde β es la temperatura inversa y μ es el potencial químico del baño de partículas. $\eta(\mathbf{x}, t)$ es un ruido blanco descorrelacionado espacial y temporalmente tal que $\langle \eta(\mathbf{x}, t) \rangle = 0$ y $\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle = 2T \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t')$ donde $\langle \cdot \rangle$ indica un promedio sobre distintas realizaciones del ruido. (De ahora en adelante, solo especificaremos la dependencia temporal cuando aparezcan dos tiempos diferentes).

Como ya se ha mencionado, en este modelo todos los microestados tienen la misma energía y el papel de los multiplicadores de Lagrange es forzar que se verifiquen las restricciones impuestas sobre el sistema. El término del potencial químico, dependiendo del signo,

tiende a llenar o vaciar la red. Sin embargo, la densidad no puede aumentar o disminuir indefinidamente debido a las restricciones. Empezando desde una condición inicial en que la red se encuentra a una densidad por debajo de la de equilibrio; la red comenzará llenandose rápidamente, pero luego, cuando se encuentre cerca del equilibrio, la dinámica se hará considerablemente más lenta, debido a la disminución del número de configuraciones accesibles. Durante el resto del análisis y sin pérdida de generalidad, fijaremos el potencial químico igual a 1 en (2.13),

$$\dot{\rho}(\mathbf{x}) = 1 - \lambda_0(2\rho(\mathbf{x}) - 1) - \lambda_1 \sum_l (\rho(\mathbf{x} + \mathbf{q}_l) + \rho(\mathbf{x} - \mathbf{q}_l)) + \eta(\mathbf{x}) \quad (2.14)$$

Gracias a la invariancia translacional del sistema es posible diagonalizar el Hamiltoniano utilizando la Transformada de Fourier.

$$\tilde{\rho}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}) \quad (2.15)$$

Las Transformadas de Fourier de las restricciones globales (2.1) y (2.2) son

$$\sigma_1 = \sum_{\mathbf{k}} |\tilde{\rho}(\mathbf{k})|^2 - \sqrt{N}\tilde{\rho}(\mathbf{0}) = 0 \quad (2.16)$$

$$\sigma_2 = D \sum_{\mathbf{k}} |\tilde{\rho}(\mathbf{k})|^2 \gamma(k) = 0 \quad (2.17)$$

con $\gamma(\mathbf{k}) = \frac{1}{D} \sum_{l=1}^D \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}_l)$. En términos de las componentes de Fourier, el Hamiltoniano efectivo (2.12) es diagonal,

$$H(\rho(\mathbf{k})) = \lambda_0(t) \left(\sum_{\mathbf{k}} |\tilde{\rho}(\mathbf{k})|^2 - \sqrt{N}\tilde{\rho}(\mathbf{0}) \right) + 2D \lambda_1(t) \sum_{\mathbf{k}} |\tilde{\rho}(\mathbf{k})|^2 \gamma(\mathbf{k}) \quad (2.18)$$

y la ecuación del movimiento para la transformada de Fourier de la distribución de densidades es,

$$\dot{\tilde{\rho}}(\mathbf{k}) = \sqrt{N}\delta(\mathbf{k}) - \lambda_0(2\tilde{\rho}(\mathbf{k}) - \sqrt{N}\delta(\mathbf{k})) - 4\lambda_1 D \tilde{\rho}(\mathbf{k})\gamma(\mathbf{k}) + \tilde{\eta}(\mathbf{k}) \quad (2.19)$$

$$\tilde{\eta}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{x}} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})\eta(\mathbf{x}) \quad (2.20)$$

Obtenemos un conjunto de ecuaciones para la evolución temporal de las componentes de Fourier, que son independientes excepto por los multiplicadores de Lagrange. Los multiplicadores de Lagrange deben ser calculados autoconsistentemente para que se verifiquen las ecuaciones (2.1) y (2.2)

Estados Estacionarios.

Los estados estacionarios se obtienen de las ecuaciones dinámicas haciendo la derivada temporal (2.19) igual a cero. El valor estacionario para cada una de las componentes de Fourier vendrá dado por,

$$|\tilde{\rho}_{eq}(\mathbf{k})|^2 = \frac{T + \delta(\mathbf{k})N\rho(\lambda_0 + 1)}{2\lambda_0 + 4D\lambda_1\gamma(\mathbf{k})} \quad (2.21)$$

Para obtener la expresión anterior hemos utilizado la regularización de la función respuesta [42],

$$\lim_{t' \rightarrow t} \langle \eta(t')\rho(t) \rangle = 2T\Theta(t - t') \quad (2.22)$$

$$\langle \eta(t')\rho(t') \rangle = T \quad (2.23)$$

donde $\Theta(t - t')$ es la función escalón o de Heavyside. Usando que $|\tilde{\rho}(\mathbf{0})|^2 = N\rho^2$, notamos

$$\rho = \frac{\lambda_0 + 1}{2\lambda_0 + 4D\lambda_1} + O\left(\frac{1}{N}\right). \quad (2.24)$$

y las restricciones, $\sigma_1 = 0$ and $\sigma_2 = 0$ eqs.(2.16,2.17) dan,

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{T}{2\lambda_0 + 4\lambda_1 D\gamma(\mathbf{k})} = \rho(1 - \rho) \quad (2.25)$$

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{T\gamma(\mathbf{k})}{2\lambda_0 + 4D\lambda_1\gamma(\mathbf{k})} = -\rho^2 \quad (2.26)$$

Estas son las ecuaciones derivadas por Lebowitz y Percus [41] para la termodinámica y descritas en la sección II.A. A temperatura finita los únicos estados estacionarios son los dados por la termodinámica, pero a temperatura cero esto ya no es cierto, debido a la falta de ergodicidad del sistema. En este caso, aparecen multiples estados cristalinos que son metaestables a temperatura finita. Hay que hacer notar aquí que la transición de fase que presenta este modelo es distinta de la transición entre el sólido y el líquido. Mientras que ésta es de primer orden, la de este modelo es de segundo orden y aparece para $D > 2$.

Estados Cristalinos

Las ecuaciones que determinan las densidades $\tilde{\rho}(\mathbf{k})$ para los estados estacionarios a temperatura cero se obtienen de la ecuación (2.19) haciendo las derivadas y la temperatura iguales a cero.

$$(2\lambda_0 + 4D\lambda_1\gamma(\mathbf{k}))|\tilde{\rho}(\mathbf{k})|^2 = N\rho\delta(\mathbf{k})(1 + \lambda_0) \quad \forall \mathbf{k} \quad (2.27)$$

Salvo por $\mathbf{k} = 0$, las ecuaciones anteriores son todas homogéneas. Las soluciones no triviales aparecen para los valores de λ_0 y $\lambda_1 = 0$ que anulan $2\lambda_0 + 4D\lambda_1\gamma(\mathbf{k})$. Para $\mathbf{k} = 0$ obtenemos $(2\lambda_0 + 4\lambda_1 D)\rho = (1 + \lambda_0)$, pero para $\mathbf{k} \neq 0$ encontramos diferentes soluciones dependiendo del valor de \mathbf{k} y $-\mathbf{k}$ donde el término $(2\lambda_0 + 4\lambda_1 D\gamma(\mathbf{k}))$ se anula. Por tanto, los estados cristalinos vienen caracterizados por un valor no nulo de $\tilde{\rho}(0)$, $\tilde{\rho}(\mathbf{k}')$ y $\tilde{\rho}(-\mathbf{k}') = \tilde{\rho}(\mathbf{k}')^*$ siendo cero el resto de las componentes $\rho(\mathbf{k})$ con $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$. El primero de los términos determina la densidad media y el segundo y tercero la periodicidad de la red. Cuando, además, imponemos $\sigma_1 = 0$ y $\sigma_2 = 0$ (2.16, 2.17), obtenemos que el valor de $\gamma(\mathbf{k})$ debe ser más pequeño que cero para que exista solución. Obtenemos también que $\lambda_0 = 1$, y $2\lambda_1 D = -\frac{1}{\gamma(\mathbf{k})}$ para \mathbf{k} distinto de cero, y la densidad de equilibrio vendrá dada por:

$$\rho = \frac{\gamma(\mathbf{k})}{\gamma(\mathbf{k}) - 1} \quad (2.28)$$

Se puede comprobar que el número de estados estacionarios es proporcional al volumen de la red. No nos extenderemos más sobre este punto salvo para indicar como construir algunos de los estados cristalinos anteriores en 1-D. La manera más simple de construirlos es asignar una densidad igual a 1 a un punto de la red de cada p . Si p es primo, en la configuración resultante solo los términos $\tilde{\rho}(k=0)$, $\tilde{\rho}(k = \frac{2\pi}{p})$ y $\tilde{\rho}(k = 2\pi(1 - \frac{1}{p}))$ son diferentes de cero. Adicionalmente, la condición $\gamma(k) < 0$ implica que k debe pertenecer al intervalo $(\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2})$. Así, solo los estados con $p = 2$ (máximo llenado de la red, $\rho = 1/2$) y $p = 3$ (llenado parcial de la red, $\rho = 1/3$) son estados cristalinos y cumplen las restricciones sobre la dinámica (2.17) y (2.16). El resto de los estados periodicos con valores más grandes de p tienen un valor de $\gamma(k) > 0$ y decaen a un estado con $\gamma(k) < 0$.

2.4 Solución Dinámica para las cantidades a un Tiempo.

Para estudiar la relajación hacia el equilibrio de nuestro sistema, vamos a centrar nuestra atención en las cantidades a un tiempo como la densidad, que también necesitaremos cuando estudiemos las cantidades a dos tiempos. La dinámica debe respetar las restricciones $\sigma_1 = 0$ (2.16) y $\sigma_2 = 0$ (2.17) para todo tiempo, esto es $\dot{\sigma}_1 = 0$ y $\dot{\sigma}_2 = 0$. Estas condiciones nos servirán para determinar la dependencia temporal de los multiplicadores de Lagrange.

$$2\rho - \lambda_0 + 4D\lambda_1\rho - 1 + 2R_0 = 0 \quad (2.29)$$

$$\lambda_0\rho - 4\lambda_1DT_2 + \rho + 2R_1 = 0 \quad (2.30)$$

donde ρ es la densidad promedio ($\rho = \langle \rho \rangle$). Las cantidades T_n son las correlaciones densidad-densidad y las R_n son las correlaciones ruido-densidad.

$$T_n(t) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} |\tilde{\rho}(\mathbf{k})|^2 \gamma(\mathbf{k})^n \quad (2.31)$$

$$R_n(t) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} (\tilde{\rho}(\mathbf{k})\tilde{\eta}^*(\mathbf{k}) + \tilde{\eta}(\mathbf{k})\tilde{\rho}^*(\mathbf{k}))\gamma(\mathbf{k})^n \quad (2.32)$$

donde n es un número entero. Estas cantidades son invariantes bajo translación, que es la principal simetría del Hamiltoniano efectivo (2.12). A priori, podemos hacer algunas afirmaciones sobre el valor de estas cantidades. Primero, que T_0 es, debido a la restricción esférica, igual a la densidad promedio, ρ . T_1 es proporcional a la correlación a primeros vecinos, que, debido a la restricción de volumen excluido, es cero. T_2 es una correlación a segundos vecinos. Ésta es una cantidad que depende del tiempo y que necesita ser conocida para calcular la evolución de la densidad. Veremos que a su vez, la evolución de T_2 depende de T_3 , la de T_3 depende de T_4 y así sucesivamente.

En el límite termodinámico y usando la regularización de la correlación entre el ruido y la densidad a tiempos iguales (2.23) encontramos que las R_n , toman los siguientes valores,

$$R_n(t) = T \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k})^n \quad (2.33)$$

que son independientes de t y se anulan para valores impares de n .

Veamos como evoluciona la densidad promedio. Teniendo en cuenta que $\langle \eta \rangle$ es de orden $O(\frac{1}{\sqrt{N}})$ obtenemos,

$$\dot{\rho} = 1 - \lambda_0(2\rho - 1) - 4D \lambda_1 \rho \quad (2.34)$$

Como ya se ha dicho, para calcular la evolución de la densidad es preciso conocer la evolución de los multiplicadores de Lagrange (2.29,2.30,2.34) y para conocer la evolución de estos es preciso conocer la evolución de toda la jerarquía de cantidades T_n . La ecuación para estas cantidades es,

$$\dot{T}_n = 2\rho(1 + \lambda_0) - 4\lambda_0 T_n - 8D \lambda_1 T_{n+1} + 2R_n. \quad (2.35)$$

Es posible cerrar esta jerarquía de infinitas ecuaciones multiplicandolas todas por $\frac{1}{n!}x^n$ y sumando sobre todos los valores de n . Definiendo $g_T(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} T_n(t)$ y usando que $\frac{\partial g_T(x, t)}{\partial x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} T_{n+1}(t)$, obtenemos una ecuación en derivadas parciales para $g_T(x, t)$,

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_T(x, t)}{\partial t} &= -8D \lambda_1 \frac{\partial g_T(x, t)}{\partial x} - 4\lambda_0 g_T(x, t) + 2\rho(1 + \lambda_0)e^x + 2g_N(x) \\ g_N(x) &= \sum_n \frac{1}{n!} x^n R_n = \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \exp(x \gamma(\mathbf{k})) \end{aligned} \quad (2.36)$$

Podemos integrar formalmente la ecuación diferencial anterior usando el método de las curvas características, para obtener

$$\begin{aligned} g_T(t, x) &= g_0(x - \int_0^t 8D \lambda_1 dt') \exp(-\int_0^t 4\lambda_0 dt') + \\ &\int_0^t [2\rho(1 + \lambda_0) \exp(x - \int_{t'}^t 8D \lambda_1 dt'') + 2g_N(x - \int_{t'}^t 8D \lambda_1 dt'')] \exp(-\int_{t'}^t 4\lambda_0 dt'') dt' \quad \text{distin} \end{aligned} \quad (2.37)$$

donde g_0 viene determinada por las condiciones iniciales, $g_T(0, x) = g_0(x)$. Una vez que el valor de $g_T(t, x)$ ha sido determinado, podemos obtener los distintos elementos de la jerarquía derivando con respecto a x tantas veces como sea preciso, $T_n(t) = \frac{\partial^n g_T(x, t)}{\partial x^n} |_{x=0}$.

2.5 Jerarquía de Ecuaciones para Cantidades Dependientes de dos Tiempos.

En esta sección, siguiendo un procedimiento análogo a la anterior, formulamos ecuaciones diferenciales para determinar la evolución temporal de cantidades que dependen de dos

tiempos: la función de correlación, de respuesta y el solape entre dos réplicas del sistema.

$$G(t, t', \mathbf{x}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{x}'} \rho(\mathbf{x}' + \mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}(\mathbf{k}, t) \tilde{\eta}(-\mathbf{k}, t') \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \quad (2.38)$$

$$C(t, t', \mathbf{x}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{x}'} \rho(\mathbf{x}' + \mathbf{x}, t) \rho(\mathbf{x}', t') = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}(\mathbf{k}, t) \tilde{\rho}(-\mathbf{k}, t') \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \quad (2.39)$$

$$Q(t, t') = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{x}'} \rho_1(\mathbf{x}' + \mathbf{x}, t) \rho_2(\mathbf{x}', t) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}_1(\mathbf{k}, t) \tilde{\rho}_2(-\mathbf{k}, t) \quad (2.40)$$

$C(t, t', \mathbf{x})$ (2.39) es la función de correlación entre las densidades de dos puntos separados por una distancia \mathbf{x} y en instantes t y t' . La función respuesta (2.38) mide el cambio de la densidad local cuando se modifica el potencial químico a una distancia x y con una diferencia de tiempos $t - t'$ [48]. Finalmente, el solapamiento (2.40) mide cuán rápidamente dos copias del sistema, idénticas en el instante t' , se separan al evolucionar con distintas realizaciones del ruido para $t > t'$ [30, 31, 52]. En el resto del capítulo consideraremos siempre $t > t'$. Para obtener su evolución temporal, procedemos como en el caso de la densidad a definir una jerarquía de magnitudes relacionada con cada una de las cantidades en las que estamos interesados.

$$G_n(t, t', \mathbf{x}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}(\mathbf{k}, t) \tilde{\eta}(-\mathbf{k}, t') \gamma(\mathbf{k})^n \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \quad (2.41)$$

$$C_n(t, t', \mathbf{x}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}(\mathbf{k}, t) \tilde{\rho}(-\mathbf{k}, t') \gamma(\mathbf{k})^n \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \quad (2.42)$$

$$Q_n(t, t') = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}_1(\mathbf{k}, t) \tilde{\rho}_2(-\mathbf{k}, t) \gamma(\mathbf{k})^n \quad (2.43)$$

Usando la ec.(2.19) obtenemos las siguientes ecuaciones,

$$\frac{\partial G_n}{\partial t}(t, t', \mathbf{x}) = -4D \lambda_1(t) G_{n+1}(t, t', \mathbf{x}) - 2\lambda_0(t) G_n(t, t', \mathbf{x}) \quad (2.44)$$

$$\frac{\partial C_n}{\partial t}(t, t', \mathbf{x}) = -4D \lambda_1(t) C_{n+1}(t, t', \mathbf{x}) - 2\lambda_0(t) C_n(t, t', \mathbf{x}) + \rho(t')(1 + \lambda_0(t)) \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial Q_n}{\partial t}(t, t') = -8D \lambda_1(t) Q_{n+1}(t, t') - 4\lambda_0(t) Q_n(t, t') + 2\rho(t)(1 + \lambda_0(t)) \quad (2.46)$$

Para la función respuesta tenemos $\langle \rho(t') \eta(t) \rangle = 0$. Ahora definimos las siguientes funciones generadoras,

$$\Gamma_G(t, t', \mathbf{x}, y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{y^n}{n!} G_n(t, t', \mathbf{x}) \quad (2.47)$$

$$\Gamma_C(t, t', \mathbf{x}, y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{y^n}{n!} C_n(t, t', \mathbf{x}) \quad (2.48)$$

$$\Gamma_Q(t, t', y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{y^n}{n!} Q_n(t, t') \quad (2.49)$$

y, finalmente, cerrando cada una de estas jerarquías (2.47),(2.48) y (2.49), obtenemos las siguientes ecuaciones diferenciales.

$$\frac{\partial \Gamma_G}{\partial t}(t, t', \mathbf{x}, y) = -4D \lambda_1(t) \frac{\partial \Gamma_G}{\partial y}(t, t', \mathbf{x}, y) - 2\lambda_0(t) \Gamma_G(t, t', \mathbf{x}, y) \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial \Gamma_C}{\partial t}(t, t', \mathbf{x}, y) = -4D \lambda_1(t) \frac{\partial \Gamma_C}{\partial y}(t, t', \mathbf{x}, y) - 2\lambda_0(t) \Gamma_C(t, t', \mathbf{x}, y) + \rho(t')(1 + \lambda_0(t))e^y \quad (2.51)$$

$$\frac{\partial \Gamma_Q}{\partial t}(t, t', y) = -8D \lambda_1(t) \frac{\partial \Gamma_Q}{\partial y}(t, t', y) - 4\lambda_0(t) \Gamma_Q(t, t', y) + 2\rho(t)(1 + \lambda_0(t))e^y \quad (2.52)$$

La condición inicial para las ecuaciones diferenciales (2.41,2.42,2.43) se obtiene haciendo $t = t'$. Usando la regularización de la correlación entre densidad y el ruido a tiempos iguales (2.23), la condición inicial para la función respuesta $\Gamma_G^{(0)}(t', \mathbf{x}, y)$ viene dada por

$$\Gamma_G^{(0)}(t', \mathbf{x}, y) = \Gamma_G(t', t', \mathbf{x}, y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{y^n}{n!} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(k)^n \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \quad (2.53)$$

Para la función de correlación, tenemos,

$$\Gamma_C^{(0)}(t', \mathbf{x}, y) = \Gamma_C(t', t', \mathbf{x}, y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{y^n}{n!} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} |\bar{\rho}(\mathbf{k}, t')|^2 \gamma(\mathbf{k})^n \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \quad (2.54)$$

En $\mathbf{x} = 0$ tenemos $\Gamma_C^{(0)}(t', 0, y) = g_T(t', y)$. Por tanto, podemos utilizar la función generatriz de la densidad como condición inicial para la de la correlación.

La misma condición inicial es necesaria para la función generadora del solape entre réplicas,

$$\Gamma_Q^{(0)}(t', y) = \Gamma_Q(t', t', y) = g_T(t', y) \quad (2.55)$$

Las ecuaciones (2.50,2.51,2.52) con sus correspondientes condiciones iniciales (2.53,2.54,2.55) pueden ser resueltas formalmente como hicimos con la función generadora de la jerarquía para la densidad (2.36) y (2.37).

La solución de equilibrio.

Usando la expresión integral para Γ_C , Γ_G y Γ_Q , podemos encontrar los valores de equilibrio para las cantidades a dos tiempos. En equilibrio, ρ , λ_0 y λ_1 son constantes, y la expresión integral se puede simplificar. Imponiendo el equilibrio como condición inicial y usando (2.21) obtenemos los siguientes resultados,

$$\begin{aligned}\Gamma_C^{eq}(t, t', \mathbf{x}, y) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{T \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \exp((y - 4D\lambda_1(t-t'))\gamma(\mathbf{k}) - 2\lambda_0(t-t'))}{2\lambda_0 + 4D\lambda_1\gamma(\mathbf{k})} + \rho^2 \exp(y) \\ \Gamma_G^{eq}(t, t', \mathbf{x}, y) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} T \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \exp((y - 4D\lambda_1(t-t'))\gamma(\mathbf{k}) - 2\lambda_0(t-t')) \\ \Gamma_Q^{eq}(t, t', \mathbf{x}, y) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{T \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \exp((y - 8D\lambda_1(t-t'))\gamma(\mathbf{k}) - 4\lambda_0(t-t'))}{2\lambda_0 + 4D\lambda_1\gamma(\mathbf{k})} + \rho^2 \exp(y)\end{aligned}$$

Inmediatamente, podemos ver que la solución de equilibrio depende del tiempo solo a través de la diferencia de tiempos, posee ITT (invariancia translacional en tiempos) y que el Teorema de Fluctuación y Disipación (TFD) se verifica para la función generadora, i.e. $\frac{\partial \Gamma_C(t, t', \mathbf{x}, y)}{\partial t'} = \Gamma_G(t, t', \mathbf{x}, y)$ y para cada uno de los elementos de la jerarquía, en particular para los de orden más bajo $\frac{\partial C_0(t, t', \mathbf{x})}{\partial t'} = G_0(t, t', \mathbf{x})$, que se corresponde con la formulación habitual del teorema. Notamos también que $\Gamma_C^{eq}(2(t-t'), \mathbf{x}, y) = \Gamma_Q^{eq}(t-t', \mathbf{x}, y)$, tal y como se ha predicho [52].

En el límite termodinámico las sumas anteriores se convierten en integrales. En la fase condensada obtenemos las siguientes expresiones,

$$\begin{aligned}\Gamma_C^{eq}(t-t', \mathbf{x}, y) &= a_{\mathbf{K}} \cos(\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}) \exp(y) + \\ &\frac{1}{(2\pi)^D} \int_0^{2\pi} d\mathbf{k}^D \frac{T \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \exp((y - 4D\lambda_1(t-t'))\gamma(\mathbf{k}) - 2\lambda_0(t-t'))}{2\lambda(1 + \frac{1}{D} \sum_{\mathbf{q}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}))} - \rho^2 \exp(y) \\ \Gamma_G^{eq}(t-t', \mathbf{x}, y) &= a_{\mathbf{K}} \cos(\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}) \exp(y) + \\ &\frac{1}{(2\pi)^D} \int_0^{2\pi} d\mathbf{k}^D T \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \exp((y - 4D\lambda_1(t-t'))\gamma(\mathbf{k}) - 2\lambda_0(t-t')) \\ \Gamma_Q^{eq}(t-t', y) &= a_{\mathbf{K}} \exp(y) + \\ &\frac{1}{(2\pi)^D} \int_0^{2\pi} d\mathbf{k}^D \frac{T \exp((y - 8D\lambda_1(t-t'))\gamma(\mathbf{k}) - 4\lambda_0(t-t'))}{2\lambda(1 + \frac{1}{D} \sum_{\mathbf{q}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}))} - \rho^2 \exp(y)\end{aligned} \tag{2.56}$$

donde los valores de λ y $a_{\mathbf{K}}$ vienen determinados por la ecuación (2.11). Por encima de la temperatura crítica, en la fase desordenada, las expresiones para Γ_C , Γ_G y Γ_Q son muy similares a las anteriores, diferenciándose en que no se verifica $\lambda_0 = 2D\lambda_1$ y $a_{\mathbf{K}} = 0$. En este caso los multiplicadores de Lagrange vienen determinados por la ecuación (2.9).

2.6 Análisis de la Dinámica.

2.6.1 Método General.

No es posible la solución analítica de las ecuaciones anteriores en el régimen de fuera del equilibrio. Tampoco es posible simplificar las expresiones utilizando la transformada de Laplace y el uso de otros métodos para analizar el comportamiento a largos tiempos no parece obvio. En lo que sigue vamos a analizar numéricamente la solución de nuestras ecuaciones. Para ello integramos numéricamente las ecuaciones truncando la jerarquía hasta un cierto número de elementos. Hemos considerado entre 100 y 500 elementos para las jerarquías en $D = 1$ y entre 5000 y 20000 elementos en la fase condensada en $D = 3$, donde la relajación es más lenta. La integración se realizó con un método de Euler de segundo orden y en algunos casos los resultados fueron comprobados con un método de Euler de cuarto orden.

2.6.2 Magnitudes dependientes de un tiempo.

Relajación de la densidad.

Estudiamos cómo relaja la densidad media del sistema a su valor de equilibrio. En 1-D, encontramos que la relajación es exponencial para T distinto de cero. Para $T = 0$, existe un comportamiento distinto dependiendo de la condición inicial, semejante al encontrado en [30, 31]. Si la condición inicial tiene una proyección macrocópica sobre el estado inicial, la relajación es exponencial, si no la relajación es algebraica, t^{-1} .

En 3-D, la relajación en la fase de alta temperatura es exponencial, mientras que en la fase condensada se comporta como t^{-1} (figura 1). El comportamiento de la densidad en el modelo L.P. es muy semejante al de la energía en el S.K. esférico [30, 31].

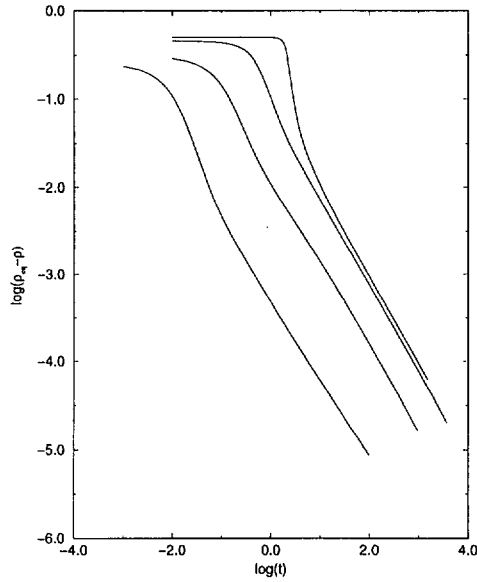


Figura 2.1: Evolución de la densidad en 3-D $\rho_{eq} - \rho$ (de arriba a abajo) $T = 0.0001, 0.1, 1$ y 10 , con condiciones iniciales homogéneas, La densidad de equilibrio a $T = 0.0001$ es 0.499950 , a $T = 0.1$ es 0.454950 , a $T = 1$ es 0.309017 y a $T = 10$ es 0.256246 .

Fenómeno de Histeresis.

Utilizando las ecuaciones diferenciales (2.35), podemos hacer el experimento numérico consistente en bajar la temperatura hasta cero y volverla a aumentar hasta la temperatura inicial. En $3 - D$, empezamos siempre desde la fase desordenada. Como solo estamos interesados en el régimen de enfriamiento lento, al integrar nuestras ecuaciones cambiamos la temperatura en la ecuación diferencial en incrementos constantes ΔT . La velocidad de enfriamiento viene definida por $r = \frac{\Delta T}{t^*}$, donde t^* es el tiempo que el sistema está a una determinada temperatura. Observamos que el sistema progresivamente se separa de la curva de equilibrio a una temperatura T^* , que aumenta al aumentar la velocidad de enfriamiento. Por debajo de T^* el sistema no logra relajarse al equilibrio y su densidad es más pequeña que la correspondiente al equilibrio. Una vez que alcanzamos la temperatura cero, comenzamos a aumentar de nuevo la temperatura a la misma velocidad. Encontramos aquí que la curva de no equilibrio cruza a la de equilibrio. De nuevo, el sistema no logra relajarse a la densidad de equilibrio y se queda a una densidad por encima de la de equilibrio. Finalmente, a temperaturas suficientemente

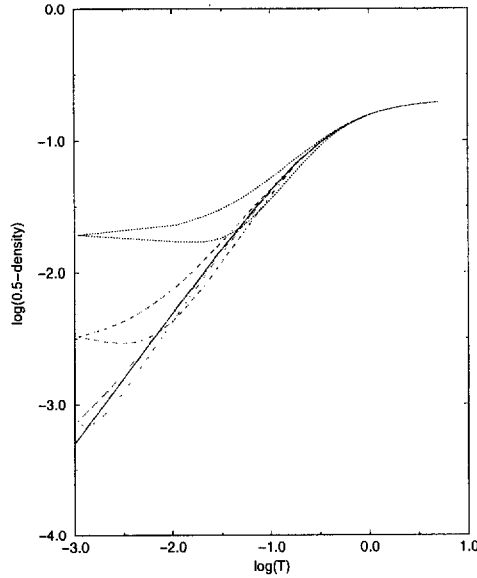


Figura 2.2: Experimento de enfriamiento en 1-D. 0.5 – densidad frente a temperatura. Mostramos el valor de la densidad en equilibrio (línea continua) y el correspondiente a diferentes valores de la velocidad de enfriamiento: (de arriba a abajo) 0.1, 0.01 y 0.001.

altas, el sistema es capaz de relajarse de nuevo al equilibrio y ambas curvas se juntan para una temperatura del orden de T^* . Este comportamiento se muestra para 1-D en la figura 2 y para 3-D en la figura 3. En éstos experimentos no hay ninguna diferencia significativa entre ambos casos, indicando que no es sensible a la existencia de una transición de fases. Similares efectos han sido observados en el caso de modelo de Ising en 1-D [19] y también en el modelo Backgammon [21].

Experimentos de Calentamiento.

Una característica sorprendente de este modelo es que aunque no hemos introducido un término de interacción, aparecen un gran número de estados cristalinos estables a temperatura cero. Para ver el efecto de estos estados cristalinos, estudiamos la dinámica al aumentar la temperatura. A $T = 0$ y en 1-D, construimos el estado inicial ordenado haciendo la densidad igual a 1 en 1 de cada p sitios.

Como hemos mostrado en la sección (2.3.1), las únicas configuraciones estables con p entero son $p = 2$ y 3 . Numéricamente, encontramos que las configuraciones con $p = 4$ y $p = 6$

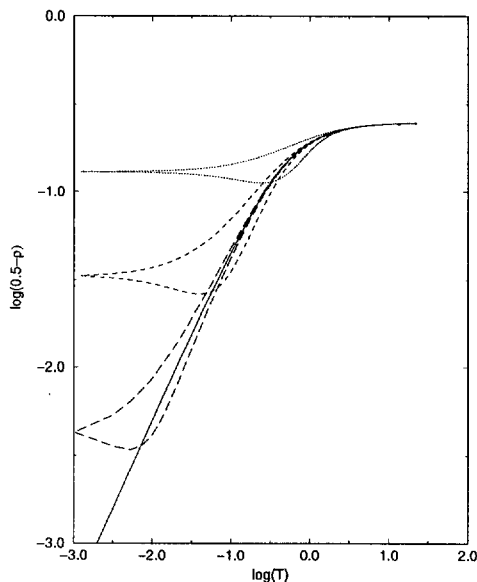


Figura 2.3: Ciclos de temperatura en 3-D. 0.5-densidad frente a la temperatura. Mostramos la densidad de equilibrio (línea continua) y el valor para la densidad a diferentes velocidades de enfriamiento: (de arriba a abajo) 0.1, 0.01 y 0.001.

decaen a la configuración con $p = 2$, pero que $p = 5$ y $p = 7$ no decaen a $p = 2$ o a $p = 3$, sino a soluciones con densidades entre $\frac{1}{2}$ ($p = 2$) y $\frac{1}{3}$ ($p = 3$). Estos resultados se comprenden, si nos damos cuenta de que aunque la restricción $\sigma_2 = 0$ es de tipo global, aparentemente la única manera de cumplir esta restricción es imponer que cada estado ocupado esté rodeado de sitios vacíos.

A temperatura finita, los estados metaestables tienen una vida media finita y decaen al estado de equilibrio. No obstante, a bajas temperaturas, la vida media de los estados metaestables puede ser muy larga y sus efectos observables. Para estudiarlos, preparamos el sistema de tal manera que la condición inicial pertenece al dominio de atracción de uno de los estados estacionarios. Al calentar el sistema, observamos que queda atrapado durante un tiempo en el dominio de atracción del estado metaestable. En la figura 4, empezamos en un estado inestable con $p = 5$. Observamos que el sistema decae a un sistema cuasicristalino de densidad aproximadamente $\frac{2}{5}$ y que corresponde a la primera *meseta* encontrada, para luego decaer al equilibrio. Este estado no es metaestable a temperatura finita, sin embargo de la gráfica queda claro que la dinámica de relajación de este estado al de equilibrio es muy

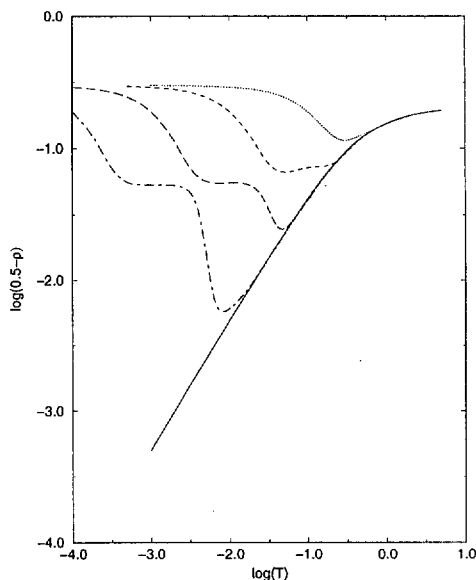


Figura 2.4: Experimento de calentamiento en 1-D. 0.5 – *densidad* frente a temperatura (logaritmos en base 10). Condición inicial de periodo 5. Solución de equilibrio (línea continua) y el valor de la densidad para distintos velocidades de enfriamiento. De arriba a abajo: 0.1, 0.01, 0.001 y 0.0001.

lenta.

Crecimiento Cinético.

En el modelo L.P., contrariamente a lo que sucede en el S.K. esférico [30, 31], es posible estudiar el problema del crecimiento de dominios. Consideremos las densidades en el espacio de Fourier (2.15). Usando (2.19), podemos obtener la ecuación que rige su evolución,

$$\frac{1}{2} \frac{d|\tilde{\rho}(\mathbf{k})|^2}{dt} = N\delta(k)\rho - \lambda_0(2|\tilde{\rho}(\mathbf{k})|^2 - N\delta(k)\rho) - 4\lambda_1 D |\tilde{\rho}(\mathbf{k})|^2 \gamma(k) + T \quad (2.57)$$

Integrando esta ecuación con los valores de los multiplicadores de Lagrange obtenidos de la jerarquía de la densidad, obtenemos la transformada de Fourier de las densidades del sistema en el límite termodinámico. Durante la evolución desde una condición inicial de no

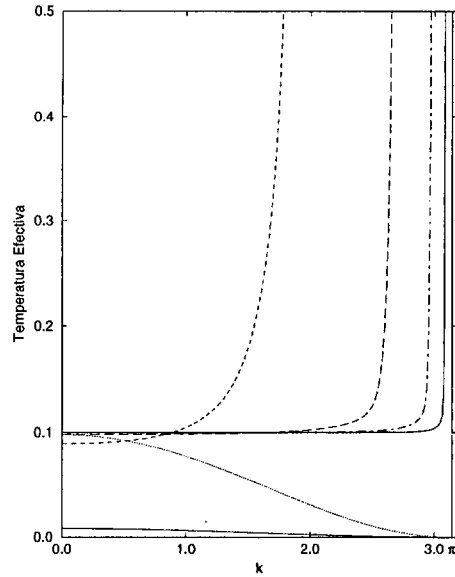


Figura 2.5: Temperatura efectiva frente a k en 3-D para $T = 0.1$. Se muestran distintos valores del tiempo: 0.01, 0.1, 1, 10, 100, 1000. La línea vertical señala $k = \pi$.

equilibrio, observamos, a *temperaturas suficientemente bajas*, como se forma un pico para $k = \pi$ en 1-D y alrededor de $\mathbf{k} = (\pi, \pi, \pi)$ en 3-D. Este pico se hace tanto más acentuado cuanto más baja es la temperatura. Para una mejor comprensión del problema, podemos recurrir a las expresiones de equilibrio. Usando (2.21), (2.25) y (2.26), podemos calcular una temperatura efectiva para cada $|\tilde{\rho}(\mathbf{k})|^2$. Obviamente, en equilibrio, a todos les corresponde una única temperatura, la de equilibrio.

En la figura 5, mostramos los valores de la temperatura efectiva para $\mathbf{k} = k(1, 1, 1)$, cuando k va entre 0 y π en 3-D (la figura es simétrica alrededor de $k = \pi$). Para tiempos mayores que un tiempo característico $t^* \simeq 1$, aparece una 'meseta' en la temperatura efectiva, cuyo valor decae muy rápidamente a la temperatura del baño. Para valores de k comprendidos entre cero y un cierto valor k_{max} , todos los modos tienen aproximadamente la misma temperatura efectiva, la de equilibrio [49]. Hay un cierto valor de k , al que llamamos k^* , donde la temperatura efectiva diverge y más allá de este valor no hay una temperatura definida, esto es, no existe un sistema en equilibrio equivalente al descrito por las densidades dinámicas $|\tilde{\rho}(\mathbf{k}, t)|^2$. En la figura 5, se aprecia como para $t = 1, 10, 100$ y 1000 aparece la citada divergencia, que se aproxima a $k = \pi$ al aumentar t .

Usando el valor de k_{max} , podemos estimar el valor de la longitud de correlación $\xi \simeq \frac{1}{\pi - k_{max}}$. Encontramos que la longitud de correlación diverge como $t^{\frac{1}{2}}$ típico del crecimiento de dominios en una dinámica [26] sin conservación del parámetro de orden (figura 6). Encontramos básicamente dos regímenes. Para valores de $t < t^* \simeq 1$, el sistema se llena descorrelacionadamente y no aparece una estructura de dominios compacta. Para $t > t^*$, el sistema está 'lleno' e introducir nuevas partículas requiere una reorganización de la estructura de los dominios. Es preciso que dos o más dominios se ordenen y añadan partículas en el espacio que antes ocupaban sus fronteras. Por tanto esperamos una evolución en la cual los dominios vayan creciendo al irse juntando los unos con los otros. Esta imagen es consistente con las temperaturas efectivas mostradas en la figura 5. Si medimos las propiedades físicas del sistema, tales como la densidad, en una escala muy grande, debido al promedio entre distintos dominios su valor no diferirá mucho del de equilibrio; pero cuando la escala de medida sea comparable con el tamaño de los dominios, empezaremos a ver que los valores promedio de regiones más pequeñas son distintos de los de equilibrio. En el caso de que midamos la densidad, una región que contiene muchas fronteras de dominio tendrá una densidad más baja que una que no las tenga.

2.6.3 Cantidades dependientes de dos tiempos.

Las funciones de Correlación y Respuesta.

En esta sección, vamos a estudiar la función de correlación y respuesta definidas en las ecuaciones (2.45) y (2.46) para el valor $x = 0$

$$C_{norm}(t, t') = \frac{C_0(t, t', x = 0) - \rho_{eq}^2}{C_0(t', t', x = 0) - \rho_{eq}^2} = \frac{C_0(t, t', x = 0) - \rho_{eq}^2}{\rho_0 - \rho_{eq}^2}. \quad (2.58)$$

En lo que sigue redefinimos la variable temporal $t' = t_w$ y estudiaremos el comportamiento para diferentes valores de t_w .

Nuestros resultados confirman el escenario más sencillo de la Teoría de Acoplamiento de Modos (TAM) donde la relajación se divide en dos procesos, α y β . Originalmente la TAM fue pensada para estudiar la dinámica en equilibrio de los líquidos cerca de la transición vítrea Götze y sus colaboradores [7] propusieron una teoría para la compresión de los procesos de relajación, basados en el estudio perturbativo de la función de autocorrelación $C(t)$ alrededor

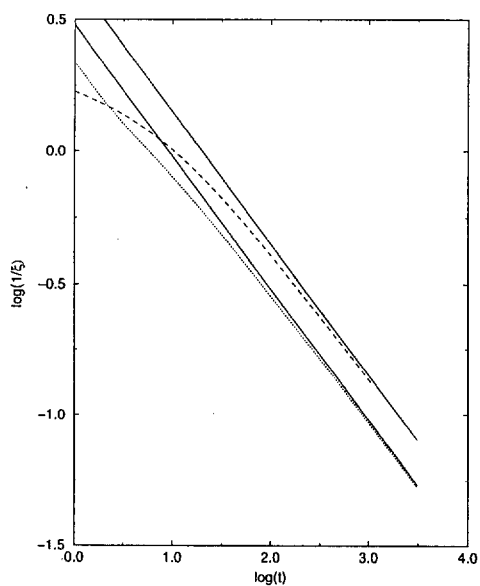


Figura 2.6: Inversa de la longitud de correlación $1/\xi$, frente al tiempo en 3-D y a $T = 0.1$ (línea de puntos) y 1 línea discontinua. La línea recta muestra $t^{-1/2}$.

de una bifurcación. Para $T = T_{MC}$, encontraban que el valor asintótico de la función de correlación dejaba de ser cero para tomar un valor finito $\lim_{t \rightarrow \infty} C(t) = f > 0$. A esta cantidad f se le da el nombre de *parámetro de ruptura de la ergodicidad*, pues indica que las partículas ya no son capaces de difundir ilimitadamente. El modelo que proponemos aquí es una versión muy simplificada del comportamiento anterior, en el que no hay una discontinuidad en el *parámetro de ruptura de la ergodicidad* en la bifurcación. De hecho, por encima de $d_l = 2$ el modelo LP sufre una transición de segundo orden con exponentes críticos de campo medio $\nu = 1/(D - 2)$, $\eta = 0$ ($d \leq 4$). El exponente crítico dinámico es $z = 2$, implicando que el tiempo de relajación diverge al acercarnos a la temperatura crítica como $\tau \sim (T - T_c)^{-2/(d-2)}$. En el punto crítico el tiempo de correlación decae como $t^{-(d-2)/z}$, y, por tanto, como $t^{-1/2}$ para $d = 3$. Entre otros resultados, estas relaciones de escalado nos llevan a un decaimiento de la densidad en el punto crítico y por debajo como $1/t$ para todas las dimensiones como se muestra en la figura 1. Por encima de T_c , el escalado de la función de correlación es $C(t) \sim t^{-(d-2)/z} f(t/\tau)$, donde τ es tiempo característico. A diferencia de lo que sucede en otros escenarios para la transición vítrea (ver [50]), en este caso solo hay un proceso de relajación por encima de la transición T_c . Esto está asociado a la ausencia de discontinuidades en el *parámetro de ruptura de la ergodicidad* en T_c . Aún así es muy interesante estudiar la extensión de la TAM a la dinámica fuera del equilibrio ‘por debajo de T_c ’. Aparecen en este régimen una serie de propiedades típicas del comportamiento fuera del equilibrio como *envejecimiento* y violación del TFD. Además de encontrar dos procesos de relajación fuera del equilibrio bien diferenciados, debido a que por debajo de T_c el *parámetro de ruptura de la ergodicidad* se hace finito.

Consideraremos valores de t_w más grandes que t^* , el tiempo necesario para que comiencen a tener lugar los procesos colectivos. Encontramos diferencias cualitativas importantes entre los casos $1 - D$ y $3 - D$, debido a que en el segundo de los casos aparece una fase condensada. La función de correlación de fuera del equilibrio en $3 - D$ decae mediante dos procesos: el proceso β (se le llamado así por su semejanza con el encontrado en equilibrio para la TAM), que consiste en un decaimiento a una meseta y en el cual la función de correlación verifica *invariancia translacional en tiempos* (ITT) con $t^{-1/2}$ y un proceso lento α (análogo al encontrado en equilibrio) en el cual la función de correlación decae como $t^{-\frac{3}{2}}$. En este segundo proceso, la función de correlación pierde la (ITT) (figura 7) y aparece *envejecimiento* con un escalado t/t_w (figura 8). En $1 - D$ el comportamiento es similar, salvo por la *meseta*

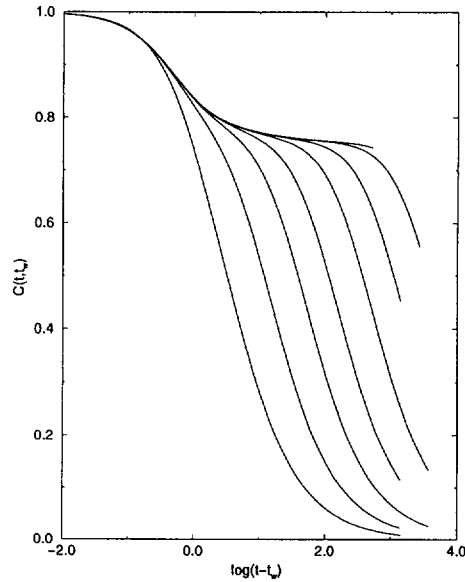


Figura 2.7: Función de Correlación frente a $t - t_w$ en 3-D para $T = 0.1$. Se muestran diferentes valores del tiempo de espera. De arriba a abajo $t_w = 10000, 1000, 300, 100, 30, 10, 3, 1$.

que no aparece. En $3 - D$, la *meseta* persiste hasta un tiempo comparable con t_w , mientras que en $1 - D$ el regimen con *envejecimiento* desaparece cuando t_w es del orden del tiempo de relajación, que es finito para temperaturas finitas.

La función respuesta, en las dimensiones estudiadas, decae muy lentamente a cero mostrando ausencia de *envejecimiento* en el regimen asintótico. En $3 - D$, vemos que $G(t, t_w)$ decae como $t^{-3/2}$ para tiempos largos y de aquí que la función respuesta integrada vaya como $t^{-1/2}$. Esto implica que el sistema guarda poca memoria de las perturbaciones anteriores en el tiempo y, por tanto, carece de anomalía en la función respuesta [52].

2.6.4 El Teorema de Fluctuación y Disipación.

Conociendo los valores de la función de correlación y de respuesta, podemos estudiar el *parámetro de fluctuación y disipación*, definido por el cociente de la función respuesta y de la derivada de la función de correlación.

$$X(t, t_w) = \frac{G_0(t, t_w)}{\frac{\partial C_0(t, t_w)}{\partial t_w}} \quad (2.59)$$

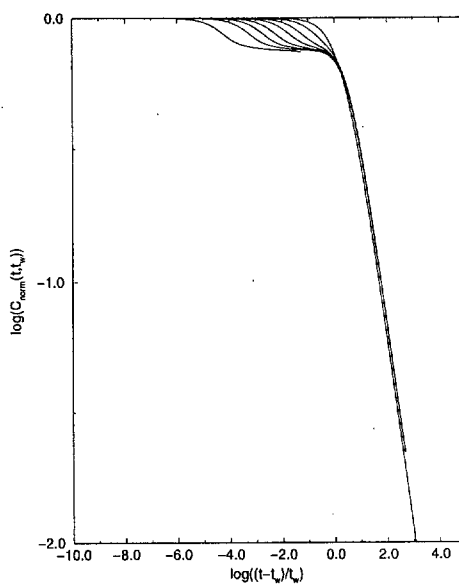


Figura 2.8: Función de correlación frente a $(t - t_w)/t_w$ en $3-D$ y $T = 0.1$. Diferentes valores de espera $t_w = 1000, 300, 100, 30, 10, 3, 1$. Para tiempos más grandes que 1, todas las curvas se juntan en una única curva, excepto $t_w = 1$, que es demasiado corta.

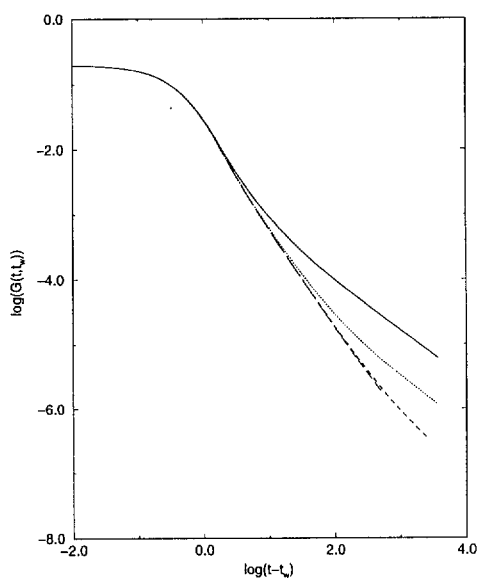


Figura 2.9: Función de Respuesta, $G(t, t_w)$, frente a $t - t_w$ en $3-D$ y para $T = 0.1$. Diferentes valores del tiempo de espera. De arriba a abajo $t_w = 10, 100, 1000, 10000$.

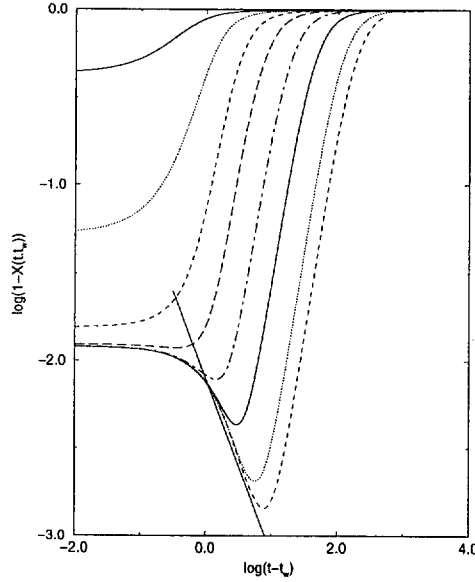


Figura 2.10: $1-X(t, t_w)$ frente a $t - t_w$. Diferentes valores del tiempo de espera. De arriba a abajo: $t_w=1,3,10,30,100,300,1000,10000$. La línea recta, representa $\frac{1}{t-t_w}$.

Este cociente es igual a 1 en equilibrio. En algunas formulaciones este cociente debería tomar el valor T , en nuestro caso este factor está incluido en la función respuesta, debido a la definición que hemos hecho del ruido. El parámetro $X(t, t_w)$ toma aproximadamente el valor 1 para $t - t_w < t_w$, mostrando que el sistema está en equilibrio local en este régimen. Para tiempos $t - t_w$ más grandes que t_w , X decae muy rápidamente a cero. Este es el comportamiento esperado en ausencia de anomalía en la función respuesta. Encontramos cualitativamente el mismo comportamiento para 1 y $3 - D$. Si analizamos con más cuidado este comportamiento (figura 10), encontramos dos regímenes. Para valores pequeños del tiempo de espera $t_w < t^* \simeq 1$, el valor de X decrece monotonamente; pero para valores más grandes de t_w , X crece con t hasta alcanzar un máximo tanto más pronunciado cuanto más grande sea el valor de t_w . Al extrapolar gráficamente el comportamiento de $t_w \rightarrow \infty$ con $t - t_w < t_w$ (régimen β), observamos que $1 - X(t, t_w) \sim (t - t_w)^{-1}$

Usando el hecho de que para tiempos largos la función respuesta va como $t^{-3/2}$ y que $X(t, t_w) \simeq 1$, podemos estimar que la función de correlación decae a la meseta como $t^{-1/2}$, que coincide con el ajuste de los resultados numéricos.

Podemos, también, estudiar la evolución de $X(t, t')$ como una función de $C(t, t')$. Cual-

itativamente, encontramos resultados semejantes en las dimensiones estudiadas (figuras 11 y 12). En 3-D, encontramos que todas las curvas se cortan en un mismo punto dando indicaciones de un posible escalado del *parámetro de fluctuación y disipación* en función de la correlación. Numéricamente hemos encontrado que el escalado más apropiado parece ser:

$$X(t, t_w) = X((C^* - C_{norm}(t, t_w)) t_w^{0.4}) \quad (2.60)$$

que para $C_{norm}(t_w, t) < 0.75$ hace colapsar todas las curvas en una sola (como se muestra en la figura 12). Este es un resultado inesperado y parece particular de este modelo.

El valor de X se puede interpretar como el cociente entre la temperatura del baño y una cierta *temperatura efectiva* T_f . Para $C_{norm}(t_w, t) > C^*$, encontramos $X \simeq 1$ y la temperatura efectiva coincide con la temperatura de baño térmico. En este régimen β el sistema está en un estado de equilibrio local. Para $C_{norm}(t_w, t) < C^*$ encontramos $X \simeq 0$, lo que significa que la temperatura efectiva es infinita. Esta es una confirmación de los resultados obtenidos en la sección dedicada al estudio de la temperatura efectiva para las componente de Fourier de la densidad. En aquel caso, encontrábamos que la temperatura efectiva divergía al ser medida en escalas de longitud comparables con el tamaño de los dominios. Estas definiciones de temperaturas efectivas no están libres de inconsistencias. La inconsistencia más importante es que la temperatura definida a partir de cantidades a un tiempo, podría no coincidir con las definidas a dos tiempos, a través del *parámetro de fluctuación y disipación*. Un resultado de este tipo se ha encontrado en el modelo *Backgammon* [51]. No obstante, mostraremos que en el modelo presentado en el siguiente capítulo si es posible definir esta temperatura efectiva.

Correlación entre Réplicas.

Hasta ahora hemos encontrado resultados cualitativamente semejantes en el comportamiento de fuera del equilibrio en 1-D y 3-D. La pregunta es ahora si es posible distinguir de la dinámica la existencia de una fase condensada, que pudiera distinguir entre el comportamiento en 1-D y en 3-D a temperatura finita. Se ha sugerido [52] que es posible caracterizar el *paisaje* de energía libre mediante la correlación entre réplicas. Para hacer ésto se deja evolucionar el sistema hasta un cierto tiempo t_w , después se crea una copia del sistema, que se deja evolucionar bajo una distinta realización del ruido térmico y se estudia la correlación

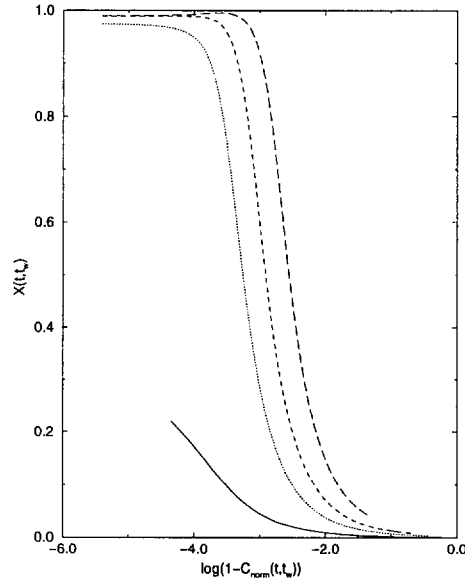


Figura 2.11: $X(t, t_w)$ frente a $C_{norm}(t, t_w)$ en 1D a $T = 0.0001$. Se muestran diferentes valores del tiempo de espera. De arriba a abajo $t_w = 1000, 300, 100, 10$.

entre estos sistemas. El solapamiento o correlación entre réplicas se definió en la ecuación (2.43).

Analizamos la cantidad $Q(t_w, t) - Q_{eq}$, donde $Q_{eq} = \rho_{eq}^2$ para diferentes valores de t_w . En la fase desordenada, esperamos que $Q(t_w, t) - Q_{eq}$ vaya a cero para tiempos largos, debido a que las dos réplicas se separan la una de la otra, incluso cuando parten de la misma condición inicial. Este es el comportamiento que encontramos en 1-D (figura 13). En 3-D, en la fase condensada (figura 14), la situación es distinta. Ahora las dos réplicas recuerdan que estaban en la misma configuración a t_w y no se separan indefinidamente. El sistema está obligado a seguir algo así como canales en el espacio de fases [52]. No es difícil interpretar este resultado en términos del proceso de crecimiento de dominios. En 1-D, los dominios aparecen y desaparecen, debido a que el sistema está en una fase desordenada. En 3-D, una vez que se forman los dominios estos solo se destruyen para incorporarse a un dominio más grande. Durante la condensación la estructura de dominios permanece básicamente inalterada. Consecuentemente, el solapamiento entre réplicas $Q(t_w, t) - Q_{eq}$ ya no decae a cero para tiempos largos.

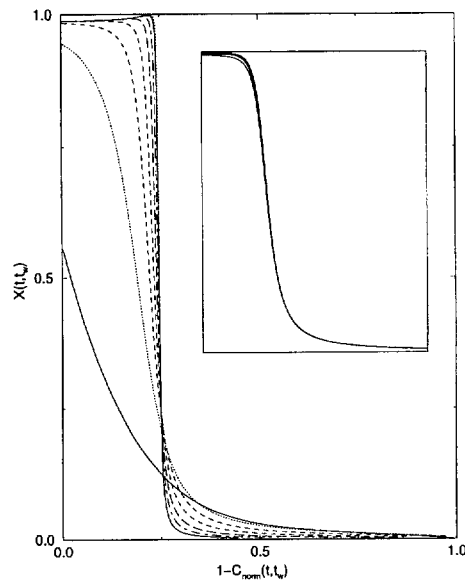


Figura 2.12: $X(t, t_w)$ frente a $1 - C_{norm}(t, t_w)$ en 3-D a $T = 0.1$. Se muestran diferentes valores del tiempo de espera, de abajo a arriba (en el lado de la izquierda) $t_w = 1, 3, 10, 30, 100, 300, 1000, 10000$. En la gráfica interior se muestra el resultado de usar las relaciones de escalado mostradas en (2.60), para $t_w = 30, 100, 300, 1000$.

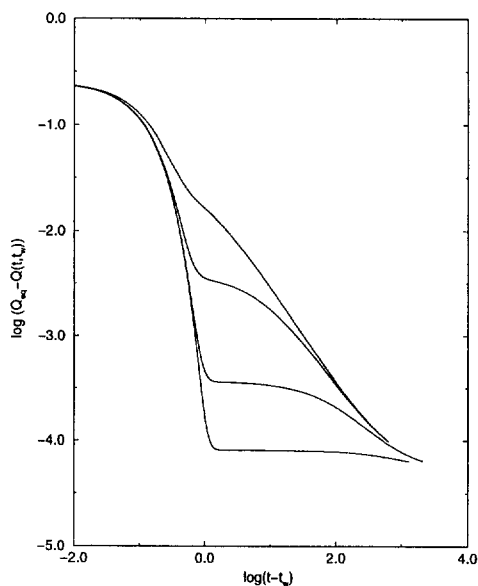


Figura 2.13: Correlación entre réplicas, $Q(t, t_w) - Q_{eq}$ frente a $t - t_w$ en 1-D y $T = 0.0001$. Diferentes valores, de espera de arriba a abajo: $t_w = 1, 10, 100, 1000$.

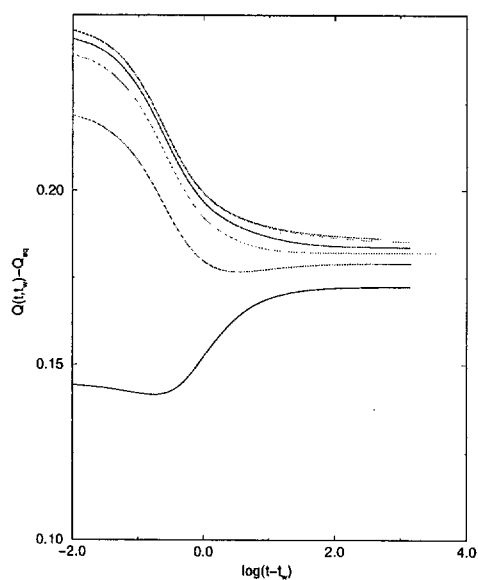


Figura 2.14: Correlación entre réplicas $Q(t, t_w) - Q_{eq}$ frente a $t - t_w$ 3-D y $T = 0.1$. Diferentes tiempos de espera, de arriba a abajo: $t_w = 1, 3, 10, 30, 100, 300, 1000$.



2.7 Conclusiones

Hemos analizado en detalle las propiedades dinámicas del modelo L.P., que fue introducido para estudiar las propiedades termodinámicas de los gases de esferas duras en la aproximación del gas de red y en aproximación esférica. Desde el punto de vista de la dinámica este modelo es muy interesante porque es exactamente resoluble, permitiéndonos un análisis detallado de las propiedades de fuera del equilibrio. Este modelo, definido por restricciones sobre su dinámica, carece de desorden congelado y es la dinámica del sistema la que genera el desorden. Sin embargo, comparte numerosas características comunes con la dinámica de otros sistemas desordenados estudiados, como por ejemplo la del Sherrington-Kirkpatrick en aproximación esférica [31].

Hemos presentado en este capítulo una investigación detallada de las ecuaciones dinámicas del modelo para cantidades a uno y dos tiempos. Una de las razones para considerar este modelo ha sido que nos da información sobre la estructura espacial del sistema durante la relajación, cosa que otros modelos de campo medio estudiados no pueden hacer [31].

En la evolución del sistema distinguimos dos regímenes. Si la densidad inicial es mucho más pequeña que la de equilibrio, entonces hay un tiempo inicial de llenado rápido y descorrelacionado. El tiempo típico de este régimen es $t^* \sim 1$.

Para valores de t más grandes que t^* , el aumento de la densidad requiere la reorganización de regiones tanto más grandes cuanto más próximos nos hallemos a la densidad de equilibrio. Encontramos que se comporta de manera muy semejante a lo que se encuentra en el crecimiento cinético de dominios en un ferromagneto, que es un ejemplo de los modelos de dominios con parámetro no conservado, modelo B [26]. Si se consideran escalas de longitud más pequeñas que ξ , que a su vez crece con el tiempo, el sistema está en equilibrio local y las fluctuaciones están determinadas por la temperatura de equilibrio. Para longitudes más grandes que ξ , el sistema está completamente desordenado y la temperatura asociada a las fluctuaciones espaciales es infinita.

El estudio de las cantidades a dos tiempos coincide con la interpretación dada antes. Encontramos que la relajación tiene lugar a través de dos procesos: uno rápido que por analogía a las TAM llamamos β , donde se verifica TFD y ITT, seguido de un proceso más lento, que llamamos α , donde no se verifican y el parámetro de fluctuación y disipación se hace cero. Ambos procesos se pueden interpretar de manera fácil: el proceso beta esta

asociado a procesos de reordenación local en una escala de tiempos en la cual la estructura de dominios no cambia y por tanto la dinámica es reversible. Si los cambios suceden en una escala de tiempos más larga, de tal manera que la estructura de dominios ya se ha modificado, los cambios no serán reversibles y no se verificará TFD y ITT

El resultado sobre la violación del TFD es muy interesante. Este y otros trabajos muestran que la violación del TFD es cualitativamente distinta en modelos de crecimiento de dominios [53], en modelos desordenados como el p -spin [53], que se propone como modelo para el estudio de la transición vítrea, y en el E.A. en 3 y 4 - D [54]. Esto lleva a una clasificación de estos distintos sistemas en su comportamiento de fuera del equilibrio en tres categorías [55]. Además, estos resultados han tenido gran importancia en la polémica sobre la validez del modelo de *droplets* para describir la fase de bajas temperaturas de los vidrios de espín, que debe violar el TFD de la forma en que lo hace un sistema de crecimiento de dominios. Medidas claras de la violación del TFD, deberían mostrar si el modelo de Edwards-Anderson está suficientemente bien descrito mediante un modelo de crecimiento de dominios [14].

Trabajos posteriores a este en un modelo más realista de un gas de red y mediante simulaciones MC, han mostrado que ciertas cantidades, tales como la violación del TFD, se comportan de manera más parecida a lo encontrado para el p -espín con $p > 2$ [58]. Podría pensarse que estos efectos se deben a la dinámica no conservada de este modelo, pero trabajos recientes que estudian la violación del TFD en modelos de parámetro conservado [57] muestran exactamente el mismo comportamiento. Parece por tanto, que esta peculiar violación del TFD se debe a la difusión anómala de las partículas en el sistema.

Encontramos, además, que el solapamiento o correlación entre réplicas $Q(t, t_w) - Q^{eq}$ tiende a cero en el caso 1-D, pero tiende a una cantidad finita para 3-D. El resultado se puede interpretar en término de la aparición de dominios persistentes en el caso 3-D.

No encontramos anomalía ninguna en la función respuesta y. por tanto, ausencia de *envejecimiento*. Solo encontramos *envejecimiento* en la función de correlación. Tampoco encontramos *stretching* en la función de correlación $\exp(-(\frac{t}{\tau})^\theta)$ con $0 < \theta \leq 1$. Esto es debido seguramente a la simplificación introducida al tratar restricciones locales como globales.

Capítulo 3

Envejecimiento en el Oscilador Armónico Lineal.

3.1 Introducción

Los procesos de relajación lenta son de gran importancia en numerosos campos de la materia condensada. Incluyen la relajación magnética en los vidrios de espín, procesos de transporte en vidrios estructurales, efectos de *pinnig* en superconductores y relajación en medios granulares entre otros.

Un número grande de ellos tienen en común que la función de respuesta depende del tiempo en que fué aplicada la perturbación y, por tanto, las funciones de correlación y de respuesta dependen de ambos tiempos y no se verifica la invariancia translacional en tiempos (ITT). Se suele decir entonces que presentan *envejecimiento*. Estos efectos [60][24] son una de las indicaciones de que el sistema está fuera del equilibrio y de que el TFD no es válido [38]. Recientemente se ha comprobado que este efecto, junto con una particular forma de violación de TFD, son herramientas básicas para obtener las soluciones de fuera del equilibrio de las ecuaciones dinámicas de ciertos modelos exactamente resolubles [33, 61].

El fenómeno de *envejecimiento*, del que ya hemos hablado en la introducción, está asociado a la relajación lenta al equilibrio debido a la presencia de múltiples barreras de energía, de entropía [21, 62] o a una combinación de ambas. Mientras que se han dedicado múltiples trabajos a analizar la dinámica en presencia de un paisaje de energía potencial complejo, la

influencia de las *barreras de entropía* en la relajación lenta ha sido mucho menos estudiada. En ciertos casos, puede suceder que, aunque dos estados estén conectados por una secuencia de estados de energía decreciente, de tal manera que no sea precisa la activación térmica para pasar de uno a otro; la probabilidad de que la partícula vaya de uno al otro sea muy pequeña y en la práctica esté confinada de manera tan efectiva como por barreras de energía. Si el número de direcciones en el espacio de las fases que disminuyen la energía decrece rápidamente al aproximarse a los estados de equilibrio, podría aparecer *envejecimiento*. No cualquier modelo para la dinámica es capaz de generar estas barreras de entropía, es preciso que sea un modelo estocástico en el cual los estados estén conectados por una matriz de transición. Por ejemplo, si modelamos la dinámica con una ecuación de Langevin, nunca encontraremos estas barreras. Ésto se debe a que en la dinámica de Langevin la dirección efectiva en la que se mueve la partícula viene determinada por la energía potencial (más las fluctuaciones térmicas) mientras que en el caso de una dinámica Monte Carlo (M. C.) es aleatoria y la dinámica depende de la energía solo a través de la aceptación. El sistema prueba a 'ciegas' distintas direcciones sin 'saber' a priori cuales son las direcciones que disminuyen la energía. Si el número de direcciones en el espacio de las fases que la aumentan la energía se hace mucho mayor que las que la disminuyen, la mayor parte de los cambios serán rechazados y la dinámica se ralentizará. En trabajos previos [21] se ha mostrado que modelos muy simples en su Hamiltoniano, pero con unas reglas dinámicas apropiadamente escogidas, pueden generar estas barreras.

En equilibrio, ambas dinámicas son equivalentes y las funciones de correlación y respuesta son ITT y verifican TFD. Una extensa comparación entre ambas dinámicas se dará en el capítulo IV.

En este capítulo, consideraremos un modelo aún más simple, el oscilador Browniano. Su dinámica Langevin es perfectamente conocida y puede consultarse en los libros de texto [64]. En este caso, la relajación no es lenta, sino exponencial. Aquí consideraremos la dinámica M. C. de este modelo.

3.2 Definición del Modelo y de la Dinámica.

La energía del oscilador armónico viene dada por,

$$E = \frac{1}{2}Kx^2 \quad (3.1)$$

donde K es la constante de Hooke y x define la posición de la partícula armónica. Consideraremos un colectivo de N osciladores lineales independientes con energía total $E(\{x_i\}) = (K/2) \sum_i x_i^2$. Estudiaremos la siguiente dinámica MC. Como primer paso, proponemos un cambio en la posición de cada uno de los osciladores $\{x_i\} \rightarrow \{x_i \rightarrow x'_i = x_i + r_i/\sqrt{N}, \forall i\}$, donde los valores de $\{r_i\}$ se escogen de una distribución Gaussiana de media cero y varianza Δ^2 . El cambio es aceptado con probabilidad 1 si disminuye la energía, $\delta E = E(\{x'_i\}) - E(\{x_i\}) < 0$, y con probabilidad $\exp(-\beta\delta E)$, si $\delta E > 0$, siendo $\beta = \frac{1}{T}$, la inversa de la temperatura del baño.

3.3 Relajación al Equilibrio.

Mostraremos los pasos principales que llevan a la obtención de las ecuaciones que describen la relajación de la energía. Primero, calculamos la probabilidad de que, dada la dinámica descrita en el párrafo anterior, encontrar un cierto valor de δE en la energía.

$$P(\delta E) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\delta E - K \sum_i (\frac{r_i x_i}{\sqrt{N}} + \frac{r_i^2}{2N})) \left(\prod_i \frac{dr_i}{\sqrt{2\pi\Delta^2}} \exp(-\frac{r_i^2}{2\Delta^2}) \right) \quad (3.2)$$

Para simplificar, consideramos el caso en el cual la posición media $M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$ en el instante inicial es cero. Usando la representación integral de la delta, en el límite termodinámico, obtenemos,

$$P(\delta E) = (4\pi K E \Delta^2)^{-\frac{1}{2}} \exp(-\frac{(\delta E - \frac{K\Delta^2}{2})^2}{4K E \Delta^2}) \quad (3.3)$$

Debido a que la distribución de probabilidad $P(\delta E)$ solo depende de la energía, el estudio de la evolución de ésta es muy simple. De acuerdo con la dinámica M.C. y usando el algoritmo Metrópolis para determinar la matriz de transición, la ecuación de evolución para la energía es,

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \int_{-\infty}^0 dx xP(x) + \int_0^{\infty} dx xP(x) \exp(-\beta x) \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{a_c}{2} \left(\frac{1 - 4E\beta}{a_c\beta} f(t) + \operatorname{erfc}(\alpha) \right) \quad (3.5)$$

donde $\alpha = (K\Delta^2/16E)^{\frac{1}{2}}$, $a_c = \frac{\Delta^2 K}{2}$ y

$$\operatorname{erfc}(x) = (2/\sqrt{\pi}) \int_x^{\infty} \exp(-x^2) dx \quad (3.6)$$

$$f(t) = a_c\beta e^{-\beta a_c(1-2E(t)\beta)} \operatorname{erfc}(\alpha(t)(4E(t)\beta - 1)) \quad (3.7)$$

Es fácil comprobar que la única solución estacionaria de las ecuaciones dinámicas es $E = T/2$, de acuerdo con el resultado del Teorema de Equipartición.

Dado el valor de la energía, podemos calcular el valor de la aceptación.

$$A(t) = \int_{-\infty}^0 dx P(x) + \int_0^{\infty} dx P(x) e^{-\beta x} = \frac{1}{2} \left(\frac{f(t)}{a_c\beta} + \operatorname{erfc}(\alpha) \right) \quad (3.8)$$

En equilibrio, $E_{eq} = \frac{T}{2}$ y la aceptación $A_{eq} = \operatorname{erfc}(\alpha_{eq})$.

3.4 Las Funciones de Correlación y Respuesta.

También es posible derivar las ecuaciones para la correlación $C(t, t')$ y para la función respuesta, $G(t, t')$, definidas por (de ahora en adelante, consideraremos el tiempo t' como el más pequeño) :

$$C(t, t') = \frac{1}{N} \langle \sum_i x_i(t') x_i(t) \rangle \quad (3.9)$$

$$G(t, t') = \left(\frac{\delta M(t)}{\delta h(t')} \right)_{h=0} \quad t' < t \quad (3.10)$$

donde $\langle \dots \rangle$ representa el promedio sobre distintas realizaciones estocásticas, $M(t) = (1/N) \sum_i \langle x_i(t) \rangle$ es la posición promedio del colectivo de osciladores. La función respuesta se calcula con la energía $E = (K/2) \sum_i x_i^2 - h \sum_i x_i$ empezando de una condición inicial $M = 0$ y tomando al final el límite $h \rightarrow 0$. Si $M(t=0) \neq 0$, el cálculo es más complicado y la ecuación de evolución para la respuesta $G(t, t')$ está relacionada con la respuesta en energías $G_E(t, t') = \left(\frac{\delta E(t)}{\delta h(t')} \right)_{h=0}$ [70]. Procediendo de una manera semejante a la del apartado anterior,

$$\frac{\partial C(t, t')}{\partial t} = -f(t)C(t, t') \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial G(t, t')}{\partial t} = -f(t)G(t, t'). \quad (3.12)$$

La diferencia entre las ecuaciones para C y G tienen que ver con la condición inicial. Igual que en el caso anterior, las ecuaciones dependen solo de la variable de la ecuación diferencial C o G y la energía. Las ecuaciones deben ser integradas con las condiciones iniciales $C(t', t') = 2E(t')/K$ y $G(t', t') = \frac{f(t')}{K}$. Integrándolas, obtenemos,

$$C(t, t') = \frac{2E(t')}{K} \exp\left(-\int_{t'}^t f(x)dx\right) \quad (3.13)$$

$$G(t, t') = \frac{f(t')}{K} \exp\left(-\int_{t'}^t f(x)dx\right) \Theta(t - t') \quad (3.14)$$

A partir de estas magnitudes, podemos calcular fácilmente el parámetro de fluctuación y disipación.

$$X(t, t') \equiv \frac{\frac{\partial C(t, t')}{\partial t'}}{TG(t, t')} = 1 - 2E'/T + \frac{\text{erfc}(\alpha') \exp(a_c \beta (1 - 2E' \beta))}{\text{erfc}(\alpha' (4E' \beta - 1))} \quad (3.15)$$

donde $\alpha' = \alpha(t')$ and $E' = E(t')$. Notar que $X(t, t')$ solo depende del más pequeño de los tiempos. Este resultado es bastante peculiar y es debido seguramente a la simplicidad del modelo.

Es inmediato comprobar que, en equilibrio térmico, tanto la función de correlación como la de respuesta tan solo dependen de la diferencia de tiempos (ITT) y que se verifica el

TFD, $X(t, t') = \frac{-TG(t)}{C(t)} = 1$. Ésto es una consecuencia del balance detallado que verifica el algoritmo Metrópolis. Con un reescalado apropiado del tiempo, encontramos que las funciones de correlación y respuesta en equilibrio son iguales a las de la dinámica Langevin. Sin embargo, las ecuaciones (3.5) y (3.11),(3.12) son muy distintas de las correspondientes a la dinámica de Langevin. Hay que hacer notar que la función respuesta a tiempos iguales es 1 en la dinámica de Langevin, mientras que es diferente de 1 en el caso M.C., incluso en equilibrio térmico.

La dinámica Langevin se puede obtener como límite de la MC, cuando el tamaño típico del paso va a cero. En este caso más sencillo, cuando $\Delta \rightarrow 0$, las ecuaciones (3.5, 3.11,3.12) se transforman en,

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{K\Delta^2}{2}(1 - 2E\beta) \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial C(t, t')}{\partial t} = -\frac{K\beta\Delta^2}{2}C(t, t') \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial G(t, t')}{\partial t} = -\frac{K\beta\Delta^2}{2}(G(t, t') - \frac{1}{K}\delta(t - t')) \quad (3.18)$$

con condiciones iniciales $C(t, t') = KE(t')/2$ y $G(t', t') = \frac{\beta\Delta^2}{2}$. Estas ecuaciones son idénticas a las del caso Langevin con ruido descorrelacionado de varianza $2T$, si el tiempo se reescala con $\Delta^2\beta/2$. Esto significa que ambas dinámicas son esencialmente equivalentes, siempre que el factor de reescalado permanezca finito. El caso interesante corresponde con el límite de temperaturas bajas $\beta \rightarrow \infty$ para valores de Δ distintos de cero. En este caso, aparece un nuevo tipo de dinámica regida por una aceptación muy baja. La linealización de la ecuación (3.5) alrededor de la solución de equilibrio nos da un tiempo de relajación que diverge a temperaturas bajas como $\tau \simeq \beta^{\frac{1}{2}} \exp(K\Delta^2\beta/8)$. Esto implica una divergencia del tiempo de relajación como un proceso activado.

Para valores de la temperatura suficientemente bajos comparados con Δ , el número típico de cambios de configuración que aumenta la energía se hace mucho más grande que el de configuraciones que la hacen disminuir. Como a bajas temperaturas, las primeras son casi todas rechazadas, encontramos que la dinámica se frena debido a la baja aceptación. Si realizamos el experimento numérico de disminuir la temperatura del baño a una velocidad constante, semejante al que se realiza en el laboratorio; encontramos que la energía decrece de manera rápida al principio, hasta que su disminución se frena y finalmente se bloquea.



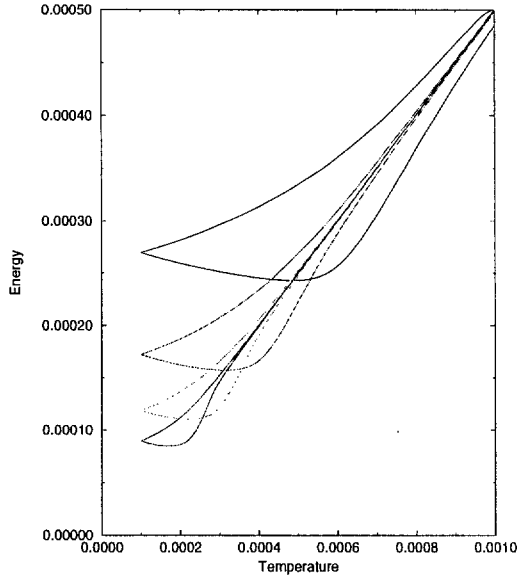


Figura 3.1: Ciclo de enfriamiento y calentamiento. Valores de la energía, cuando hacemos decrecer y crecer la temperatura del baño a distintas velocidades. De izquierda a derecha, las velocidades son: 0.1,0.01,0.001 and 0.0001.

Cuanto más baja sea la velocidad de enfriado, más baja será la energía a la que se bloquea el sistema. La dinámica propuesta reproduce las características fundamentales de las medidas de la capacidad calorífica de un sistema vítreo (ver figura 2 de la introducción para la capacidad calorífica, que es la derivada de la energía, y la figura 1 de este capítulo). Este resultado no es inesperado, lo que encontramos es que el tiempo de relajación se hace más grande que nuestra escala de medida. Como el tiempo de relajación diverge a $T = 0$, no importa lo lento lo que enfriemos, siempre habrá una temperatura para la cual el sistema será incapaz de relajarse al equilibrio. Lo sorprendente de este modelo es que aparezca esta escala divergente a $T = 0$ con un paisaje de energía tan simple. En general, una relajación tipo Arrhenius es esperable en presencia de barreras de energía, que en este sistema no existen.

Vamos a centrar ahora nuestro estudio en un sistema conectado con un baño de temperatura muy baja $T \rightarrow 0$, que, por lo argumentado antes, esperamos que se aproxime al equilibrio muy lentamente. Para $T = 0$, la energía vendrá dada por:

$$\frac{\partial E}{\partial t} = -\left(\frac{KE\Delta^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \exp(-\alpha^2) + \frac{K\Delta^2}{4} \operatorname{erfc}(\alpha) \quad (3.19)$$

Obtenemos el comportamiento para tiempos largos desarrollando la función error en el límite $\alpha \rightarrow \infty$,

$$\frac{\partial E}{\partial t} = -\left(\frac{64}{\pi K \Delta^2}\right)^{\frac{1}{2}} E^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{K \Delta^2}{16E}\right) \quad (3.20)$$

Encontraremos en el capítulo IV un comportamiento muy semejante para el Sherrington-Kirkpatrick esférico con dinámica MC en el límite de bajas temperaturas. Podemos reescribir ahora (3.20) en términos del parámetro α ,

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = \frac{\exp(-\alpha^2)}{\sqrt{\pi}} \quad (3.21)$$

Para tiempos grandes, el parámetro α crece logaritmicamente.

$$\alpha(t) \simeq \left(\log\left(\frac{2t}{\sqrt{\pi}}\right) + \frac{1}{2} \log\left(\log\left(\frac{2t}{\sqrt{\pi}}\right)\right)\right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.22)$$

y la aceptación (3.8) decrece como,

$$A(t) \simeq \frac{1}{4t \log\left(\frac{2t}{\sqrt{\pi}}\right)} \quad (3.23)$$

más algunas correcciones logarítmicas. La energía también decae logaritmicamente,

$$E(t) \simeq \frac{K \Delta^2}{16} \frac{1}{\log\left(\frac{2t}{\sqrt{\pi}}\right) + \frac{1}{2} \log\left(\log\left(\frac{2t}{\sqrt{\pi}}\right)\right)} \quad (3.24)$$

Por otra parte, la función de correlación satisface la ecuación,

$$\frac{\partial C(t, t')}{\partial t} = -\left(\frac{K \Delta^2}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{C(t, t')}{\sqrt{E(t)}} \exp\left(-\frac{K \Delta^2}{16E(t)}\right). \quad (3.25)$$

y la función respuesta verifica la misma ecuación. Utilizando la ecuación diferencial asintótica para la energía (3.20), la correlación (3.25) y la respuesta, podemos expresar la función de correlación y respuesta en términos de la energía $C(t, t') \simeq \frac{2E(t')}{K} \frac{g(t)}{g(t')}$ y $G(t, t') \simeq \frac{2\alpha(t')}{\sqrt{\pi K}} g(t)$, siendo $g(t) \simeq \exp(-\alpha^2 - 3\log(\alpha))$. Utilizando la expresión asintótica para la energía (3.24) tenemos,

$$C_{norm}(t, t') = \frac{C(t, t')}{2E(t')/K} \simeq \frac{t'}{t} \left(\frac{\log\left(\frac{2t'}{\sqrt{\pi}}\right)}{\log\left(\frac{2t}{\sqrt{\pi}}\right)}\right)^2 \quad (3.26)$$

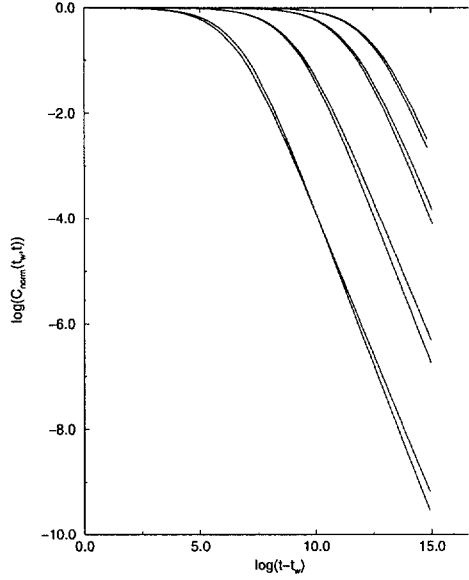


Figura 3.2: Función de correlación para distintos tiempos de espera. De arriba a abajo, $t' = 3 \cdot 10^5, 1 \cdot 10^5, 1 \cdot 10^4, 1 \cdot 10^3$. Las líneas más cortas representan el comportamiento asintótico calculado de (3.26).

$$G(t, t') \simeq \frac{1}{Kt} \left(\frac{\log\left(\frac{2t'}{\sqrt{\pi}}\right) + \frac{1}{2} \log\left(\log\left(\frac{2t'}{\sqrt{\pi}}\right)\right)}{\log\left(\frac{2t}{\sqrt{\pi}}\right)} \right)^2 \quad (3.27)$$

Esta aproximación es válida para valores grandes de t' y t . La función de correlación normalizada muestra *envejecimiento* del tipo $\frac{t'}{t}$ más algunas correcciones logarítmicas. Aparentemente, la función respuesta (3.27) no muestra *envejecimiento* del tipo anterior, pero esto es un efecto de la normalización. La función respuesta decae a cero para tiempos largos y por tanto se hace necesaria una normalización a tiempos iguales. Notese que esta normalización no es necesaria en la dinámica de Langevin, puesto que $G(t, t')$ a tiempos iguales toma por definición el valor 1 ($\lim_{t' \rightarrow t} G(t, t') = 1$). La función de respuesta normalizada tendrá la forma,

$$G_{norm}(t, t') = \frac{G(t, t')}{G(t' + 0, t')} \simeq \frac{t'}{t} \left(\frac{\log\left(\frac{2t'}{\sqrt{\pi}}\right)}{\log\left(\frac{2t}{\sqrt{\pi}}\right)} \right)^2, \quad (3.28)$$

que muestra *envejecimiento* en el comportamiento dominante, de idéntica manera al que muestra la función de correlación. A partir de la función de respuesta podemos obtener

información sobre diversas magnitudes dinámicas. En el OA la magnetización se corresponde con la posición promedio del colectivo de osciladores (definida después de (3.10)). Las ecuaciones que determinan la dinámica (3.5), (3.11) y (3.12) han sido derivadas en ausencia de un campo externo y con una condición inicial con magnetización cero. En este caso, es natural calcular la magnetización de un sistema enfriado a campo cero M_{ZFC} (*zero-field cooled magnetization*), que consiste en enfriar el sistema en ausencia de campo y después de un tiempo de espera t_w aplicar un pequeño campo magnético. Se puede realizar el mismo experimento al revés, enfriando en presencia de un campo magnético y desconectando el campo para $t = t_w$, llamada magnetización *termo remanente* o M_{TR} . Estas magnitudes están, en el régimen de respuesta lineal, relacionadas con la magnetización resultante de aplicar un campo constante en el tiempo y de la misma magnitud que en los casos anteriores, M_{FC} , por la relación,

$$M_{TR} + M_{ZFC} = M_{FC} \quad (3.29)$$

En el régimen de respuesta lineal, la magnetización crecerá como,

$$\begin{aligned} M_{ZFC} &= \int_{-\infty}^t G(t, t') h(t') dt' = \\ &= h \int_{t_w}^t G(t, t') dt' = h I(t_w, t). \end{aligned} \quad (3.30)$$

$I(t_w, t) = \int_{t_w}^t G(t, t') dt'$ es la llamada función de respuesta integrada. A partir de la expresión exacta para la función respuesta (3.14) obtenemos,

$$I(t_w, t) = \frac{1}{K} (1 - \exp(- \int_{t_w}^t f(t') dt')) \quad (3.31)$$

Para $t_w \rightarrow \infty$, y $T \neq 0$, $\int_{t_w}^t f(t') dt'$ tiende a $f_{eq}(t - t_w)$ y, como cabía esperar, la magnetización del sistema tiende a su valor de equilibrio $M_{FC} = \frac{h}{K}$ y la susceptibilidad lineal magnética es $\chi_0 = M_{FC}/h = \frac{1}{K}$. Por tanto, a temperatura distinta de cero la magnetización no presentará *envejecimiento*. Incidentalmente observamos que ambas son independientes de la temperatura. Otra cantidad interesante es la anomalía en la función respuesta [65], definida como,

$$\bar{\chi} \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t dt' G(t, t') - \int_0^\infty G_{eq}(\tau) d\tau \quad (3.32)$$

$$= \lim_{t \rightarrow \infty} I(0, t) - \chi_0 \quad (3.33)$$

$$= -\frac{1}{k} e^{-\int_0^t f(t') dt'} \quad (3.34)$$

$$G_{eq}(\tau) = \lim_{t_w \rightarrow \infty} G(t_w, t_w + \tau). \quad (3.35)$$

Al igual que sucede con la magnetización y la función respuesta integrada, para valores de $T \neq 0$ esta cantidad tiende exponencialmente a cero. Mientras que para $T = 0$, el decaimiento es algebraico, $1/Kt$. Utilizando el comportamiento asintótico para la energía (3.24), se puede ver que la magnetización a campo cero va como,

$$\frac{M_{ZFC}}{M_{FC}} \simeq 1 - \frac{t_w}{t} \left(\frac{\log(\frac{2t_w}{\sqrt{\pi}})}{\log(\frac{2t}{\sqrt{\pi}})} \right)^2. \quad (3.36)$$

Utilizando (3.29),

$$\frac{M_{TR}}{M_{FC}} \simeq \frac{t_w}{t} \left(\frac{\log(\frac{2t_w}{\sqrt{\pi}})}{\log(\frac{2t}{\sqrt{\pi}})} \right)^2. \quad (3.37)$$

Tanto M_{ZFC} como M_{TR} muestran *envejecimiento* con un comportamiento dominante t/t_w multiplicado por correcciones logarítmicas. En la figura 3 mostramos la magnetización termo remanente para el OA para distintos valores de t_w .

3.5 Temperaturas Efectivas.

Se ha sugerido que $X(t, t')$ podría ser interpretado como una temperatura efectiva [51][53]. Si definimos $T_f(t') = TX(t, t')$, entonces el TFD (3.15) se verifica con una temperatura efectiva $T_f(t')$. Aunque ésta es una relación formal, es interesante analizar si, en algunos casos tales como en el de la relajación lenta al equilibrio, pudiera tener sentido físico. Esto es, si tiene esta temperatura efectiva las mismas propiedades que la temperatura de equilibrio. Para empezar, es evidente que esta temperatura efectiva debe ser más alta que la de equilibrio, puesto que muchos de los grados de libertad del sistema no son capaces de disminuir su energía cediéndola al baño. Si estudiamos el límite $t \gg 1$ o, equivalentemente, $\alpha \gg 1$, en 3.15 ; encontramos $T_f(t') \rightarrow 2E(t')$. En la medida en que la relajación del sistema para temperaturas del baño muy bajas se hace muy lenta, se queda bloqueado a energías más altas que las de equilibrio y $T_{ef} \sim 2E(t') > T_{baño}$.

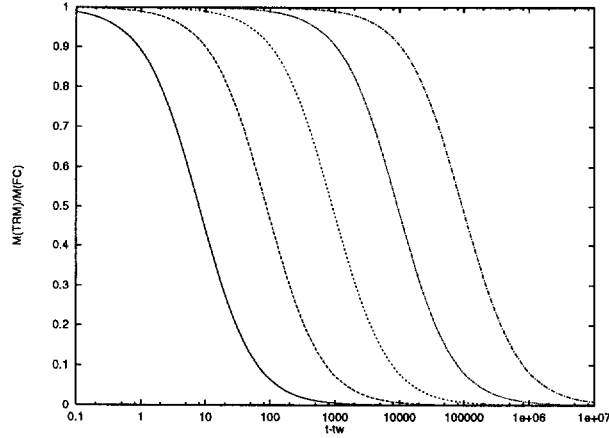


Figura 3.3: Magnetización termo-remanente para distintos tiempos de espera, de (3.37). De izquierda a derecha, $t_w = 10, 10^2, 10^3, 10^4, 10^5$.

Observamos, que la temperatura efectiva proveniente del TFD, $T_f(t) = TX(t, t')$ coincide con la que definiríamos de forma natural a partir de las relaciones de equilibrio, $E_{eq} = \frac{T_{eq}}{2}$. Consecuentemente, las temperaturas efectivas definidas por el parámetro de fluctuación disipación y por las relaciones termodinámicas de equilibrio coinciden.

Esto sugiere que algún tipo de teorema adiabático se verifica: el sistema pasa tanto tiempo a una energía efectiva, que desde el punto de vista del Teorema de Fluctuación y Disipación es imposible distinguirlo de un sistema que estuviera en equilibrio con una bañ a $T = T_{ef}$.

También podemos preguntarnos si no solo el segundo momento, sino todos los momentos o la distribución de x_i , está determinada por T_{ef} , esto es $p_t(\{x_i\}) \sim \exp(-E(\{x_i\})/T_f(t))$. Es fácil comprobar que tal resultado no es posible [67] y el Teorema de Equipartición solo es válido para algunos momentos de la distribución.

3.6 Conclusiones.

Hemos estudiado la dinámica M.C. de un colectivo de osciladores armónicos lineales, que debido a su simplicidad es fácilmente analizable. A pesar de ésto, muestra un comportamiento rico, semejante al analizado en modelos mucho más complejos y dando una alternativa a los modelos basados en un *paisaje de energía complejo* para explicar distintos comportamientos fuera del equilibrio en *vidrios de espín y estructurales*.

Encontramos una relajación muy lenta cerca de la temperatura cero debida a valores de la aceptación muy bajos. Este comportamiento es semejante al encontrado en el modelo Backgammon [21], en modelos de adsorción [68] y en modelos de medios granulares [69]. En estos modelos, el origen de esta relajación lenta es la presencia de barreras de entropía, si bien el origen de estas es distinto en cada caso. En nuestro modelo, estas barreras se manifiestan en un decaimiento extremadamente lento de la energía (3.24), mientras que en los medios granulares este decaimiento aparece en la densidad; aunque muestran la misma dependencia temporal $1/\log(t)$ [29].

El OA tiene en común con otros modelos de vidrios la presencia de *envejecimiento* en la función de correlación a tiempos largos. $C(t, t')$ presenta un decaimiento $\frac{t'}{t}$ con correcciones logarítmicas, en lo que difiere de la relajación en los medios granulares, $\log(t')/\log(t)$ [29]. Es interesante resaltar que estas correcciones aparecen también en el Backgammon [71]. También hemos encontrado *envejecimiento* en la función de respuesta y en la magnetización. Este comportamiento aparece asociado con el decaimiento algebraico de la *anomalía* en la función respuesta. En efecto, parece haber una correlación entre los modelos que presentan *envejecimiento* en la función respuesta y los que presentan anomalía en la función respuesta [52], que parece poder extenderse a aquellos sistemas en los cuales la anomalía decae algebraicamente a cero. Un ejemplo de modelo con *envejecimiento* en la función de correlación, pero sin anomalía en la función respuesta y sin *envejecimiento* en la magnetización, es el modelo tratado en el capítulo anterior. En este sentido, el OA es más semejante al modelo *p-espín* con $p > 2$ desordenado, que ha sido intensamente estudiado tanto como modelo teórico de sistema desordenado y como posible modelo para la transición vítrea. La resolución de este modelo es mucho más complicada que la de este, aunque a cambio presenta un comportamiento más rico. Por ejemplo, en el OA no encontramos una relajación mediante dos procesos α y β presente en los vidrios estructurales y en el *p-espín*; debido seguramente a la

falta de procesos cooperativos.

En diversos trabajos previos se ha planteado la pregunta de si podemos sacar ventaja de la relajación lenta de un sistema vítreo al equilibrio introduciendo promedios en equilibrio. Coolen y Sherrington han analizado esta posibilidad en el S.K. [87]. En este trabajo hemos mostrado que la temperatura definida por el parámetro de fluctuación y disipación, coincide con la temperatura definida a través de la energía de fuera del equilibrio y la relación de equilibrio entre la temperatura y la energía: el sistema parece cambiar de forma cuasiestacionaria de una energía a otra energía. Falta un análisis más completo en modelos más complejos para saber si este comportamiento no es un efecto de la sencillez del modelo.

En trabajos posteriores de otros autores, se ha mostrado que este modelo puede servir como test para diferentes ideas sobre la termodinámica de fuera del equilibrio. En [70] se ha propuesto modificar las relaciones termodinámicas de equilibrio introduciendo una temperatura efectiva. El OA y otros modelos basados en dinámica MC están siendo utilizados para estudiar dicha generalización [70].

Capítulo 4

Dinámica Monte Carlo de un Modelo Desordenado de Largo Alcance.

4.1 Introducción

En el capítulo anterior analizamos la dinámica MC de un colectivo de osciladores armónicos. Aunque este modelo presenta un interesante comportamiento, tiene, como cabía esperar, notables carencias. La primera y más importante es que su relajación tiene lugar en un solo paso, a diferencia de lo que sucede en los sistemas vítreos que tratamos de modelar y a diferencia de lo encontrado en la dinámica de sistemas desordenados y en la TAM.

Estamos interesados en esta Tesis en la dinámica de sistemas que relajan lentamente al equilibrio y por tanto en la dinámica de modelos desordenados. Sería, por supuesto, muy interesante comprender la dinámica del modelo de S.K., porque probablemente representaría un método alternativo para resolver este sistema sin utilizar el truco de las réplicas. (En procedimientos dinámicos como el de Martin-Siggia-Rose [63] no es preciso introducir el truco de las réplicas).

A pesar de todos los trabajos realizados sobre la dinámica de SK, todavía no se tiene un método una solución completa del problema. Si ha tenido éxito el análisis de este modelo en la llamada aproximación esférica, que ha permitido resolver la dinámica de Langevin de este modelo [30][31]. Esta aproximación consiste en convertir las variables discretas de espín en variables continuas, que solo están restringidas en la suma de los cuadrados $\sum_{i=1}^N \sigma_i^2 = N$.

El éxito de esta aproximación se debe a que gracias a que las variables se convierten en continuas, el Hamiltoniano se puede diagonalizar. Por desgracia, esta simplificación resta mucho interés al problema, debido a que la fase de bajas temperaturas está descrita por una solución que no requiere ruptura de la simetría de las réplicas.

En este capítulo estudiaremos la dinámica MC de la versión esférica del modelo SK. Como acabamos de notar, esta versión tiene menos interés que el modelo original. No obstante, todavía tiene interés si queremos desarrollar los métodos necesarios para resolver una dinámica discreta; para avanzar hacia la resolución de la dinámica del SK. Aquí conviene reconocer que el paso de uno a otro es muy grande.

Uno de las características frecuentemente encontradas en la dinámica de Langevin es la aparición de un régimen en el cual se verifica ITT, como se mostró en el capítulo II. Estaremos interesados en estudiar la presencia de este régimen en la la dinámica MC.

En la mayor parte de los modelos tratados, el comportamiento para tiempos largos es difícil de calcular. Entre las pocas excepciones encontradas, está la relajación del Oscilador Armónico estudiada en el capítulo anterior o la del p -espín con $p = 2$, que puede ser tratado fácilmente utilizando el método de Laplace [31]. Para el modelo de S.K, se ha ensayado la llamada aproximación adiabática, aunque solo se han logrado soluciones para tiempos cortos [87]. No obstante, veremos que la idea básica de esta aproximación se puede extender a este modelo, la versión esférica del SK. Utilizaremos relaciones de equilibrio para cerrar la jerarquía de ecuaciones diferenciales, asociadas a la evolución de la energía, y quedarnos tan solo con la primera.

El modelo estudiado en este capítulo es desde el punto de vista del Hamiltoniano muy semejante al colectivo de osciladores estudiado en el capítulo III. Al diagonalizar el Hamiltoniano, vemos que nos queda un colectivo de osciladores armónicos independientes, cuyas constantes efectivas siguen la ley de Wigner, y que están acoplados por una restricción global. Sin embargo, veremos que el análisis de la dinámica es más complejo que en el caso del OA.

El capítulo se organiza de la siguiente forma. Empezamos resolviendo la dinámica Langevin del SK esférico, utilizando el mismo procedimiento que emplearemos para resolver la dinámica MC. Plantearemos la ecuaciones maestras de la dinámica y la jerarquía de ecuaciones asociada a la evolución de la energía y mostraremos como se puede cerrar esta jerarquía de ecuaciones. En el tercer apartado repetiremos este mismo procedimiento con la función de correlación. En el cuarto apartado, analizamos numéricamente la ecuaciones que

rigen la dinámica haciendo énfasis en compararla con los resultados de la dinámica Langevin. En las últimas secciones de este apartado analizaremos la aproximación adiabática que nos permitirá obtener una ecuación para la relajación de la energía a tiempos largos.

4.2 La dinámica de Langevin del Modelo de Sherrington-Kirkpatrick Esférico

Para ilustrar el método que vamos a utilizar para resolver la dinámica Monte Carlo, empecemos resolviendo la dinámica de Langevin del modelo de Sherrington y Kirkpatrick esférico. Éste viene definido por el Hamiltoniano,

$$\mathcal{H}\{\sigma\} = - \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (4.1)$$

donde los índices i, j van de 1 a N , siendo N el número de sitios. En la versión esférica de este modelo, los espines se convierten en variables continuas, que deben verificar la llamada restricción esférica,

$$\sum_{i=1}^N \sigma_i^2 = N. \quad (4.2)$$

La interacción viene dada por los elementos de matriz J_{ij} , que son variables aleatorias tomadas de una distribución Gaussiana de media cero y varianza $1/N$. La estática de este modelo revela la existencia de una transición termodinámica de segundo orden a $T = 1$ [47] a una fase condensada donde, a diferencia de los que sucede en el modelo discreto, no se rompe la simetría de las réplicas. La ecuación de Langevin es,

$$\frac{\partial \sigma_i}{\partial t} = - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \sigma_i} + \mu(t) \sigma_i + \eta_i(t) \quad (4.3)$$

siendo $\eta_i(t)$ un ruido blanco $\overline{\eta_i(t)\eta_j(t')} = 2T\delta_{i,j}\delta(t-t')$, ($\overline{\dots}$ representa el promedio sobre el ruido); $\mu(t)$ es un multiplicador de Lagrange que asegura que se verifica la restricción esférica (4.2) para todos los tiempos y \mathcal{H} es el Hamiltoniano definido por la ecuación (4.1). Gracias a que en esta aproximación los espines son variables continuas y que \mathcal{H} es una matriz simétrica y positiva, y por tanto diagonalizable; podemos reescribir las ecuaciones de evolución como las de modos independientes,

$$\frac{\partial \sigma_\lambda}{\partial t} = \lambda \sigma_\lambda + \mu(t) \sigma_\lambda + \eta_\lambda(t) \quad (4.4)$$

Donde σ_λ y η_λ son las proyecciones de la configuración $\{\sigma_i\}$ y del ruido sobre la base de los autovectores que diagonalizan la matriz de interacción J_{ij} . Los $\{\sigma_\lambda\}$ deben satisfacer la condición $\sum_{\lambda=1}^N \sigma_\lambda^2 = N$. La matriz de cambio de base que diagonaliza J_{ij} es una matriz ortogonal y, por tanto, las componentes del ruido η_λ generan un ruido del tipo,

$$\overline{\eta_\lambda(t) \eta_{\lambda'}(t')} = 2T \delta_{\lambda, \lambda'} \delta(t - t') \quad (4.5)$$

Los autovalores λ de una matriz Gaussiana simétrica se distribuyen siguiendo la ley semicircular de Wigner $w(\lambda)$ [73],

$$w(\lambda) = \frac{\sqrt{4 - \lambda^2}}{2\pi} \quad (4.6)$$

4.2.1 Función Generatriz de las Cantidades Dependientes de un Tiempo.

Para describir la evolución del sistema definimos los siguientes momentos,

$$h_k = \frac{1}{N} \sum_{(i,j)} \overline{\sigma_i (J^k)_{ij} \sigma_j} = \frac{1}{N} \sum_\lambda \lambda^k \overline{\sigma_\lambda^2} \quad (4.7)$$

Observese que $h_0 = 1$, debido a la restricción esférica y $h_1 = -2E$, donde E es la energía. Usando $\lim_{t \rightarrow t'} \overline{\eta_\lambda(t') \sigma_\lambda(t)} = 2T$ llegamos a la ecuación,

$$\frac{\partial h_k}{\partial t} = 2h_{k+1} + 2\mu h_k + 2T \ll \lambda^k \gg \quad (4.8)$$

donde

$$\ll f(\lambda) \gg = \int_{-2}^2 f(\lambda) w(\lambda) d\lambda \quad (4.9)$$

y $w(\lambda)$ viene dada por (4.6). En particular, la ecuación (4.8) para $k = 0$ da el multiplicador de Lagrange como una función de la energía y de la temperatura: $\mu = 2E - T$. Para cerrar esta jerarquía de ecuaciones definimos una función generatriz,

$$g(x, t) = \frac{1}{N} \sum_{(i,j)} \sigma_i (e^{xJ})_{ij} \sigma_j = \frac{1}{N} \sum_{\lambda} e^{\lambda x} \sigma_{\lambda}^2(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} h_k(t). \quad (4.10)$$

Esta función da todos los momentos $h_k = \left(\frac{\partial^k g(x,t)}{\partial x^k} \right)_{x=0}$.

Usando las ecuaciones (4.7), (4.8) y (4.10), encontramos que $g(x, t)$ satisface la siguiente ecuación diferencial en derivadas parciales,

$$\frac{\partial g(x, t)}{\partial t} = 2 \frac{\partial g(x, t)}{\partial x} + 2\mu(t)g(x, t) + 2T \ll \exp(x\lambda) \gg, \quad (4.11)$$

$$\mu(t) = -\frac{\partial g}{\partial x}(0, t) - T. \quad (4.12)$$

Con la condición inicial $g(0, t) = 1$, condición esférica, y la condición inicial $g(x, 0) = g_0(x)$, que viene determinada por la configuración inicial del sistema. Tomando el límite al continuo, vemos,

$$g(x, t) = \int_{-2}^2 d\lambda w(\lambda) e^{x\lambda} \hat{g}(\lambda, t), \quad (4.13)$$

donde la transformada espectral verifica $\hat{g}(\lambda, t) \geq 0$. La última condición es conservada por la dinámica: si se verifica inicialmente, se verifica para todos los tiempos posteriores. La ecuación diferencial (4.11), puede resolverse utilizando el método de las características dejando la solución en función de $\mu(t)$, ver Apendice II. El resultado es,

$$g(x, t) = g_0(x + 2t) e^{2 \int_0^t \mu(t') dt'} + 2T \int_0^t dt' \ll e^{(x+2(t-t'))\lambda} \gg e^{2 \int_{t'}^t \mu(t'') dt''} \quad (4.14)$$

Introduciendo (4.14) en la condición esférica, es posible deducir una ecuación integral que se puede resolver utilizando la transformada de Laplace [31].

Es fácil comprobar que la ecuación (4.15) es una solución estacionaria de (4.11) para $T > T_c = 1$.

$$g^{eq}(x) = - \ll \frac{e^{x\lambda}}{\beta(\lambda + \mu^{eq})} \gg \quad (4.15)$$

En este caso, los momentos h_k se pueden calcular fácilmente.

$$h_k^{eq} = - \ll \frac{\lambda^k}{\beta(\lambda + \mu^{eq})} \gg, \quad (4.16)$$

y los multiplicadores μ^{eq} vienen dados por

$$1 = - \ll \frac{1}{\beta(\lambda + \mu^{eq})} \gg \quad (4.17)$$

Para $T \leq T_c = 1$, $\mu^{eq} = -2$, la solución estacionaria viene dada por,

$$g^{eq}(x) = (1 - \frac{1}{\beta})e^{2x} - \ll \frac{e^{x\lambda}}{\beta(\lambda - 2)} \gg, \quad (4.18)$$

y los momentos h_k son

$$h_k^{eq} = (1 - \frac{1}{\beta})2^k - \ll \frac{\lambda^k}{\beta(\lambda - 2)} \gg, \quad (4.19)$$

Sustituyendo las ecuaciones (4.15, 4.18) en (4.11), se puede comprobar que el lado de la derecha de (4.11) es cero.

4.2.2 Las funciones de Correlación y Respuesta.

Definimos el siguiente conjunto de momentos que nos va a permitir cerrar la jerarquía de ecuaciones asociada a la dinámica.

$$C_k(t', t) = \frac{1}{N} \sum_{(i,j)} \overline{\sigma_i(t')(J^k)_{ij} \sigma_j(t)} = \frac{1}{N} \sum_{\lambda} \lambda^k \overline{\sigma_{\lambda}(t') \sigma_{\lambda}(t)} \quad (4.20)$$

En esta notación la función de correlación usual viene dada por $C_0(t', t)$. La ecuación de evolución para $C_k(t', t)$ será

$$\frac{\partial C_k(t', t)}{\partial t} = C_{k+1}(t', t) + \mu(t) C_k(t', t) \quad (4.21)$$

donde hemos utilizado el resultado $\overline{\eta(t') \sigma_{\lambda}(t)} = 0$ para $t' < t$. Las ecuaciones anteriores deben resolverse con la condición inicial $C_k(t', t') = h_k(t')$, donde las $h_k(t)$ son los momentos a un tiempo obtenidos con anterioridad de la función generatriz $g(x, t)$.

Definimos la siguiente función generatriz,

$$K(x, t', t) = \frac{1}{N} \sum_{(i,j)} \overline{\sigma_i(t') (e^{xJ})_{ij} \sigma_j(t)} = \frac{1}{N} \sum_{\lambda} e^{\lambda x} \overline{\sigma_{\lambda}(t') \sigma_{\lambda}(t)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} C_k(t', t). \quad (4.22)$$

La función generatriz $K(x, t', t)$ da los momentos generalizados dependientes de dos tiempos $C_k(t', t) = \left(\frac{\partial^k K(x, t', t)}{\partial x^k} \right)_{x=0}$ y satisface la siguiente EDP homogénea,

$$\frac{\partial K(x, t', t)}{\partial t} = \frac{\partial K(x, t', t)}{\partial x} + \mu(t)K(x, t', t) \quad (4.23)$$

con la condición inicial $K(x, t', t') = g(x, t')$ y $g(x, t')$ viene dada por eq.(4.14).

Un método semejante se aplica a la función respuesta. Definimos el conjunto de momentos dependientes de dos tiempos

$$G_k(t', t) = \frac{1}{N} \sum_{(i,j)} (J^k)_{ij} \overline{\frac{\partial \sigma_j(t)}{\partial \eta_i(t')}} = \frac{1}{N} \sum_{\lambda} \lambda^k \overline{\frac{\partial \sigma_{\lambda}(t)}{\partial \eta_{\lambda}(t')}}} \quad (4.24)$$

donde $t' < t$. En esta notación la función respuesta inicial viene dada por $G_0(t', t)$. Construimos la función generatriz,

$$\begin{aligned} \Gamma(x, t', t) &= \frac{1}{N} \sum_{(i,j)} (e^{xJ})_{ij} \overline{\frac{\partial \sigma_j(t)}{\partial \eta_i(t')}} = \frac{1}{N} \sum_{\lambda} e^{\lambda x} \overline{\frac{\partial \sigma_{\lambda}(t)}{\eta_{\lambda}(t')}}} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} G_k(t', t). \end{aligned} \quad (4.25)$$

La función generatriz $\Gamma(x, t', t)$ nos da los momentos generalizados dependientes de dos tiempos $G_k(t', t) = \left(\frac{\partial^k \Gamma(x, t', t)}{\partial x^k} \right)_{x=0}$. Con la regularización usual de la función respuesta a tiempos iguales, la ecuación dinámica para $\Gamma(x, t', t)$ es,

$$\frac{\partial \Gamma(x, t', t)}{\partial t} = \frac{\partial \Gamma(x, t', t)}{\partial x} + \mu(t)\Gamma(x, t', t) + \delta(t - t') \ll \exp(x\lambda) \gg \quad (4.26)$$

Para resolver esta ecuación necesitamos imponer la condición de causalidad $\Gamma(x, t', t) = 0$, para $t < t'$. La solución de las ecuaciones es,

$$\begin{aligned} K(x, t', t) &= g(x + t - t', t') e^{\int_{t'}^t \mu(t'') dt''} \\ \Gamma(x, t', t) &= \ll e^{(x+t-t')\lambda} \gg e^{\int_{t'}^t \mu(t'') dt''} \theta(t - t') \end{aligned} \quad (4.27)$$

De estas funciones generatrices, podemos obtener los momentos de la función correlación y respuesta, $C_0(t', t) = K(0, t', t)$ y $G_0(t', t) = \Gamma(0, t', t)$. En equilibrio, podemos sustituir la solución (4.15) en (4.26) para obtener,

$$\begin{aligned}
K(x, t', t) &= K^{eq}(x, t - t') = g^{eq}(x + t - t') e^{\mu^{eq}(t-t')} \\
\Gamma(x, t', t) &= \Gamma^{eq}(x, t - t') = \ll e^{(x+t-t')\lambda} \gg e^{\mu^{eq}(t-t')} \theta(t - t')
\end{aligned} \tag{4.28}$$

Ambas funciones son ITT y verifican el TFD,

$$\Gamma^{eq}(x, t - t') = \beta \frac{\partial K^{eq}(x, t - t')}{\partial t'} \tag{4.29}$$

4.3 La Dinámica de Monte Carlo.

Consideramos la dinámica de Monte Carlo (M.C.) con el algoritmo de Metrópolis. La idea perseguida con esta aproximación es proponer un modelo para la dinámica en el cual las nuevas configuraciones que el sistema podría tomar son aceptadas con una cierta probabilidad, a diferencia de lo que sucede en la dinámica de Langevin en la cual todas las configuraciones propuestas son aceptadas. Vamos a considerar un tipo de cambio de configuración particularmente sencillo que permitirá que el sistema sea exactamente resoluble: tomamos la configuración $\{\sigma_i\}$ a tiempo t y realizamos una pequeña rotación que afecta a todas las coordenadas del sistema para llegar a $\{\tau_i\}$ donde,

$$\tau_i = \sigma_i + \frac{r_i}{\sqrt{N}} \tag{4.30}$$

y los valores de r_i se toman de una distribución Gaussiana de varianza ρ ,

$$p(r_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\rho^2}} \exp\left(-\frac{r_i^2}{2\rho^2}\right) \tag{4.31}$$

ΔE es el cambio de energía debido a un cambio en la configuración del sistema $\Delta E = E\{\tau\} - E\{\sigma\}$. De acuerdo con el algoritmo de Metrópolis, aceptamos la nueva configuración con probabilidad 1 si $\Delta E < 0$ y con probabilidad $\exp(-\beta\Delta E)$, si $\Delta E > 0$; donde $\beta = \frac{1}{T}$.

Esta dinámica es idéntica a la definida en el caso del OA.

4.3.1 La Distribución de Probabilidad de los Cambios de Energía, $P(\Delta E)$

Al igual que en la dinámica de Langevin, queremos obtener los momentos dependientes de uno y dos tiempos. También en este caso es útil trabajar en la base para la cual la matriz de interacción es diagonal. La energía en este caso será,

$$E\{\sigma_\lambda\} = -\frac{1}{2} \sum_\lambda \lambda \sigma_\lambda^2 \quad (4.32)$$

Donde los valores de λ se distribuyen de acuerdo con la ecuación (4.6). En esta base, el cambio de configuración todavía corresponde a una pequeña rotación y, por tanto, $\sigma_\lambda \rightarrow \sigma_\lambda + r_\lambda/\sqrt{N}$ donde los nuevos números aleatorios r_λ se obtienen también de la distribución (4.31).

La magnitud que queremos determinar es la probabilidad, $P(\Delta E)$, de encontrar un cambio dado ΔE de la energía en un paso M.C. Esta viene dada por,

$$\Delta E^* = -\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\lambda \lambda \sigma_\lambda r_\lambda - \frac{1}{2N} \sum_\lambda \lambda r_\lambda^2 \quad (4.33)$$

mientras que la cantidad $h_0 = \frac{1}{N} \sum_\lambda \sigma_\lambda^2$ cambia en la siguiente cantidad,

$$\Delta h_0^* = \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_\lambda \sigma_\lambda r_\lambda + \frac{1}{N} \sum_\lambda r_\lambda^2. \quad (4.34)$$

La probabilidad $P(\Delta E)$ de tener un cierto cambio en la energía,

$$P(\Delta E) = \int \delta(\Delta E - \Delta E^*) \delta(\Delta h_0^*) \prod_\lambda (p(r_\lambda) dr_\lambda) \quad (4.35)$$

donde la última función delta de la integral sirve para tener en cuenta la condición esférica y la cantidad ΔE^* será (4.33).

Usando la representación integral de la función delta tenemos,

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\alpha x} d\alpha \quad (4.36)$$

y sustituyendo en (4.35) llegamos a

$$P(\Delta E) = \int d\mu d\eta \exp(i\mu \Delta E -$$

$$\frac{\rho^2}{2N} \sum_{\lambda} \frac{\sigma_{\lambda}^2 \gamma_{\lambda}^2}{(1 - \frac{i\gamma_{\lambda}^2 \rho^2}{N})} - \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \log(1 - \frac{i\gamma_{\lambda}^2 \rho^2}{N}) \quad (4.37)$$

donde $\gamma_{\lambda} = \mu\lambda + 2\eta$. Después de expandir el logaritmo y quedarnos a primer orden en las correcciones $1/N$, tenemos,

$$P(\Delta E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\rho^2 B_1}} \exp\left(-\frac{(\Delta E + \rho^2 E)^2}{2\rho^2 B_1}\right) \quad (4.38)$$

con

$$B_1 = h_2 - 4E^2; \quad (h_0 = 1); \quad h_2 = \frac{1}{N} \sum_{\lambda} \lambda^2 \sigma_{\lambda}^2; \quad (4.39)$$

La ecuación para evolución de la energía se obtiene considerando la variación promedio de la energía en cada paso MC. En este caso, cada paso MC se corresponde con N movimientos elementales. En el límite termodinámico, podemos escribir las ecuaciones continuas,

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \overline{\Delta E} = \int_{-\infty}^0 \Delta E P(\Delta E) d(\Delta E) + \int_0^{\infty} \Delta E \exp(-\beta\Delta E) P(\Delta E) d(\Delta E) \quad (4.40)$$

Con las técnicas estacionarias comunes [13, 47], podemos mostrar que, en equilibrio, $B_1 = h_2 - 4E^2 = -2ET$. En este caso, un cálculo inmediato muestra que se verifica balance detallado. Esto significa que, para un valor dado de ΔE , la primera integral que aparece en la derecha de (4.40) cancela la contribución proveniente de la segunda integral de la derecha de (4.40) para valores idénticos de ΔE ,

$$P(-\Delta E) = \exp(-\beta\Delta E)P(\Delta E) \quad (4.41)$$

Mostramos así que el equilibrio es una solución estacionaria de la ecuación diferencial (4.40).

Utilizando la distribución de probabilidad $P(\Delta E)$ y la ecuación diferencial (4.40), obtenemos la ecuación para la energía,

$$\frac{\partial E}{\partial t} = -\frac{a(t)}{2} h_2(t) + b(t)E(t) \quad (4.42)$$

donde los coeficientes $a(t)$ y $b(t)$ vienen dados por,

$$\begin{aligned}
a(t) &= \rho^2 \beta e^{\frac{\rho^2 \beta}{2}(\beta B_1 + 2E)} \operatorname{Erf}\left(\rho \beta \sqrt{\frac{2}{B_1}} - \alpha\right) \\
b(t) &= -\frac{1}{2}(\rho^2 \operatorname{Erf}(\alpha) + (4E - T)a(t))
\end{aligned} \tag{4.43}$$

y $\operatorname{Erf}(x)$ es la función de error complementaria definida por $\operatorname{Erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty dx \exp(-x^2)$ y α es,

$$\alpha = -\frac{\rho E}{\sqrt{2B_1}} \tag{4.44}$$

Notese que las cantidades E , B_1 , y α dependen del tiempo.

La gran diferencia entre la dinámica MC del OA del capítulo anterior y la dinámica del modelo tratado en este capítulo es que la energía en este modelo (4.42), depende de una nueva cantidad $h_2(t)$, cuya dependencia con el tiempo no se conoce.

También podemos calcular la tasa de aceptación como una función del tiempo, esto es, la probabilidad de aceptar un cierto cambio en la configuración,

$$A(t) = \int_{-\infty}^0 P(\Delta E) d(\Delta E) + \int_0^\infty \exp(-\beta \Delta E) P(\Delta E) d(\Delta E) \tag{4.45}$$

Un cálculo inmediato muestra que,

$$A(t) = \frac{\operatorname{Erf}(\alpha)}{2} + \frac{1}{2} e^{\frac{\rho^2 \beta}{2}(\beta B_1 + 2E)} \operatorname{Erf}\left(\rho \beta \sqrt{\frac{2}{B_1}} - \alpha\right) \tag{4.46}$$

Para obtener la evolución temporal de la tasa de aceptación y resolver la ecuación (4.42) de la evolución temporal de la energía, necesitamos conocer la energía y h_2 . Desafortunadamente, se puede ver que la ecuación para $h_2(t)$, necesita de $h_3(t)$ y así sucesivamente. Esta jerarquía de momentos puede ser cerrada introduciendo una función generatriz [74], igual que se ha hecho para la dinámica Langevin.

4.3.2 Función Generatriz para las Cantidades Dependientes de un Tiempo.

Para cerrar las ecuaciones del movimiento, consideramos un conjunto de momentos definidos en la ecuación (4.7). La cantidad esencial para describir esta dinámica es $P(\Delta h_k, \Delta E)$. Esta cantidad se puede escribir como,

$$P(\Delta h_k, \Delta E) = \int \delta(\Delta h_k - \Delta h_k^*) \delta(\Delta E - \Delta E^*) \delta(\Delta h_0) \prod_{\lambda} (p(r_{\lambda}) dr_{\lambda}) \quad (4.47)$$

donde la función delta que aparece al final de la integral es para tener en cuenta la restricción esférica y la variación en ΔE^* viene dada por (4.33) mientras que la variación Δh_k^* es

$$\Delta h_k^* = \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_{\lambda} \lambda^k \sigma_{\lambda} r_{\lambda} + \frac{1}{N} \sum_{\lambda} \lambda^k r_{\lambda}^2. \quad (4.48)$$

Utilizando un procedimiento análogo al utilizado para calcular $P(\Delta E)$, obtenemos el siguiente resultado,

$$P(\Delta h_k, \Delta E) = P(\Delta E) P(\Delta h_k | \Delta E) \quad (4.49)$$

donde $P(\Delta E)$ es la distribución de probabilidad (4.38) y $P(\Delta h_k | \Delta E)$ es la probabilidad condicionada de encontrar Δh_k dado $P(\Delta h_k | \Delta E)$. La expresión resultante será

$$P(\Delta h_k | \Delta E) = \frac{1}{\sqrt{8\pi\rho^2(C_k - (B_k^2/B_1))}} \exp\left(-\frac{(\Delta h_k + \rho^2(h_k - \ll \lambda^k \gg) + 2\frac{B_k}{B_1}(\Delta E + \rho^2 E))^2}{8\rho^2(C_k - B_k^2/B_1)}\right) \quad (4.50)$$

con $C_k = h_{2k} - h_k^2$; $B_k = h_{k+1} + 2Eh_k$; ($h_0 = 1$; $h_1 = -2E$); y el promedio $\ll \dots \gg$ se definió en (4.9).

Para obtener la evolución de los momentos h_k , calculamos su variación media en un paso M.C. En el límite termodinámico, podemos escribir las ecuaciones,

$$\frac{\partial h_k}{\partial t} = \overline{\Delta h_k} = \int_{-\infty}^{\infty} d(\Delta h_k) \Delta h_k \left(\int_{-\infty}^0 d(\Delta E) P(\Delta h_k, \Delta E) + \int_0^{\infty} d(\Delta E) \exp(-\beta\Delta E) P(\Delta h_k, \Delta E) \right) \quad (4.51)$$

El resultado general de una integral del tipo anterior se muestra en el Apéndice I. En nuestro caso, obtenemos el siguiente resultado,

$$\frac{\partial h_k(t)}{\partial t} = a(t)h_{k+1}(t) + b(t)h_k(t) + c_k(t) \quad (4.52)$$

donde las cantidades dependientes del tiempo $a(t)$ y $b(t)$ vienen dadas por (4.43) y los coeficientes $c_k(t)$ vienen definidos por

$$c_k(t) = (2E(t)a(t) - b(t)) \ll \lambda^k \gg = \rho^2 A(t) \ll \lambda^k \gg . \quad (4.53)$$

Aquí $A(t)$ es la tasa de aceptación, definida en (4.46). Nótese que la variación de h_k depende linealmente de los momentos h_k y h_{k+1} , pero los coeficientes a, b y c son funciones no lineales de $h_1 = -\frac{1}{2}E$ y $B_1 = h_2 - h_1^2$, que es el segundo cumulante. Es por tanto razonable esperar que la dinámica M.C. venga determinada por los dos primeros momentos. Utilizando la función generadora de los momentos $g(x, t)$ (4.10), obtenemos de (4.51)

$$\frac{\partial g(x, t)}{\partial t} = a(t) \frac{\partial g}{\partial x} + b(t)g(x, t) + c(x, t). \quad (4.54)$$

donde las cantidades dependientes del tiempo a y b son funciones de los dos primeros momentos $E(t)$ y $h_2(t)$ a través de las relaciones dadas en (4.43), y

$$c(x, t) = (2E(t)a(t) - b(t)) \ll e^{x\lambda} \gg = \rho^2 A(t) \ll e^{x\lambda} \gg . \quad (4.55)$$

Como en el caso de la dinámica de Langevin, $g(x, t)$ es una solución de la ecuación (4.54), con los condiciones iniciales y de contorno que se indican a continuación,

$$\begin{aligned} g(x, 0) &= g_0(x) \\ g(0, t) &= 1 \\ \frac{\partial g}{\partial x} \Big|_{x=0} &= -2E(t) \\ \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} \Big|_{x=0} &= h_2(t) \end{aligned} \quad (4.56)$$

La segunda condición es la esférica y la tercera y cuarta definen primer y segundo momentos del conjunto h_k . Esta ecuación diferencial lineal puede ser resuelta utilizando el método de las características. La solución general de ecuaciones de este tipo se muestra en el Apéndice B.

4.3.3 La Función de Correlación.

Para el cálculo de la función de correlación seguimos un procedimiento análogo al utilizado para la evolución de la energía y que ya ha sido esquematizado para el caso de la dinámica Langevin.

Un cambio básico de la configuración del sistema (4.30) en un tiempo t , induce un cambio ΔE^* y ΔC_k^* , de la energía y del k -ésimo momento de la función de Correlación $C_k(t', t)$ (en lo que sigue consideraremos siempre $t' < t$) definido en (4.20),

$$\begin{aligned}\Delta E^* &= -\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\lambda} \lambda \sigma_{\lambda}(t) r_{\lambda}(t) - \frac{1}{2N} \sum_{\lambda} \lambda r_{\lambda}(t)^2 \\ \Delta C_k^* &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\lambda} \lambda^k \sigma_{\lambda}(t') r_{\lambda}(t)\end{aligned}\quad (4.57)$$

La probabilidad de encontrar un cambio ΔE de la energía y ΔC_k de la correlación viene dado por la probabilidad conjunta,

$$P(\Delta E, \Delta C_k) = \int \delta(\Delta E - \Delta E^*) \delta(\Delta C_k - \Delta C_k^*) \delta(\Delta h_0) \prod_{\lambda} (p(r_{\lambda}) dr_{\lambda})$$

Usando la representación integral de la delta de Dirac, reteniendo solo los términos hasta orden $\frac{1}{N}$ y calculando las integrales Gaussianas restantes, encontramos,

$P(\Delta E, \Delta C_k) = P(\Delta E) P(\Delta E | \Delta C_k)$ donde,

$$P(\Delta E | \Delta C_k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\rho^2(h'_{2k} - C_k^2 - \frac{D_k^2}{B_1})}} \exp\left(-\frac{(\Delta C_k + \frac{\rho^2}{2} C_k + \frac{D_k}{B_1} (\Delta E - \frac{\rho^2}{2} h_1))^2}{2\rho^2(h'_{2k} - C_k^2 - \frac{D_k^2}{B_1})}\right),$$

$h'_{2k} = h_{2k}(t')$; $D_k(t', t) = C_{k+1}(t', t) + 2E(t)C_k(t', t)$ y $P(\Delta E)$ viene dado por (4.38).

Para resolver las ecuaciones del movimiento para $C_k(t', t)$, escribimos su variación promedio a tiempo t sobre los cambios aceptados de configuración.

$$\begin{aligned}\frac{\partial C_k(t', t)}{\partial t} &= \overline{\Delta C_k(t', t)} = \int_{-\infty}^{\infty} \Delta C_k d(\Delta C_k) \\ \left(\int_{-\infty}^0 d(\Delta E) P(\Delta C_k, \Delta E) + \int_0^{\infty} d(\Delta E) \exp(-\beta\Delta E) P(\Delta C_k, \Delta E) \right)\end{aligned}\quad (4.58)$$

Usando la formula obtenida en el Apéndice I, obtenemos el resultado,

$$\frac{\partial C_k(t', t)}{\partial t} = \frac{a(t)}{2} C_{k+1}(t', t) + \frac{b(t)}{2} C_k(t', t)\quad (4.59)$$



donde $a(t), b(t)$ se definieron en (4.43).

La condición inicial para resolver la ecuación (4.59), es $C_k(t', t') = h_k(t')$. Por tanto, es necesario resolver con anterioridad o a la vez la jerarquía de ecuaciones asociada a la energía.

Para cerrar esta jerarquía de ecuaciones, usamos la función generatriz $K(x, t', t)$, definida en (4.22), que nos da los momentos generalizados de la función de Correlación $C_k(t', t) = \left(\frac{\partial^k K(x, t', t)}{\partial x^k} \right)_{x=0}$. Usando el resultado anterior, vemos que $K(x, t', t)$, satisface la siguiente ecuación en derivadas parciales,

$$\frac{\partial K}{\partial t} = \frac{a(t)}{2} \frac{\partial K}{\partial x} + \frac{b(t)}{2} K \quad (4.60)$$

junto con $K(x, t', t') = g(x, t')$. Una vez más es posible encontrar la solución utilizando el método de las características.

4.4 Análisis de las Ecuaciones para la Dinámica Monte Carlo.

En esta sección, analizaremos las ecuaciones para la dinámica M.C. Empezaremos estudiando la dinámica en equilibrio, mostrando que coincide con la de Langevin, tras reescalar apropiadamente el tiempo. Después, estudiaremos la dinámica de fuera del equilibrio en el límite $T \rightarrow 0$. Compararemos nuestras soluciones con las obtenidas de simulaciones M.C. y con los resultados obtenidos de la dinámica de Langevin.

4.4.1 Dinámica Monte Carlo en Equilibrio.

Las ecuaciones dinámicas para cantidades a un tiempo y dos tiempos pueden resolverse de manera inmediata en equilibrio. Los observables h_k son, en equilibrio, independientes del tiempo y las cantidades a dos tiempos como $C(t, t')$, dependen tan solo de la diferencia $t - t'$. Es fácil comprobar que los coeficientes $a(t), b(t), c(x, t)$ de las ecuaciones (4.43, 4.55) son, en equilibrio, independientes del tiempo y vienen dados por,

$$\begin{aligned} a^{eq} &= \rho^2 \beta \text{Erf}(\alpha^{eq}) \\ b^{eq} &= \rho^2 \beta (2E - T) \text{Erf}(\alpha^{eq}) \\ c^{eq}(x) &= \rho^2 \ll \exp(x\lambda) \gg \text{Erf}(\alpha^{eq}) \end{aligned} \quad (4.61)$$

con

$$\alpha^{eq} = -\frac{\rho E^{eq}}{\sqrt{2B_1^{eq}}} = \rho \sqrt{\frac{(2\beta - 1)}{8}} \quad (4.62)$$

Estos coeficientes son los mismos que en la dinámica de Langevin excepto por un reescalado del tiempo $t \rightarrow t' = \frac{\rho^2 \beta E_{rf}(\alpha^{eq})}{2} t$. También podemos mostrar, usando (4.46)), que la tasa de aceptación viene dada por,

$$A^{eq} = Erf(\alpha^{eq}) \quad (4.63)$$

Por tanto, ambas dinámicas coinciden salvo un reescado del tiempo. [75].

4.4.2 Simulaciones Monte Carlo.

Para comparar con los resultados de la dinámica de MC, hemos realizado algunas simulaciones para tamaños finitos. Para simular tamaños suficientemente grandes, trabajamos en la base de los autovectores σ_λ . De esta manera, toda la información sobre el desorden está contenida en el espectro de autovalores λ , que ocupa mucha menos memoria de ordenador, que la matriz Gaussiana J_{ij} . El conjunto de autovalores λ , se escoge de acuerdo a la ley semicircular (4.6). Típicamente empezamos en una configuración inicial aleatoria que verifica la restricción esférica, realizamos un pequeño desplazamiento en el espacio de N dimensiones $\{\sigma_\lambda\} \rightarrow \{\sigma_\lambda + \frac{r_\lambda}{\sqrt{N}}\}$ (4.30) y después normalizamos todo el sistema para que vuelva a verificarse la condición esférica. El efecto neto es el de una rotación en el espacio de N dimensiones. Nótese que éste es el movimiento más general posible y que no da preferencia a ninguna de las direcciones del espacio, a diferencia de los procedimientos típicos que tienden a mover un espín tras otro, rompiendo la simetría de rotación. El siguiente paso es calcular el cambio en energía producido por este cambio de configuración, que es aceptado con probabilidad $Min(1, \exp(-\beta \Delta E))$. Como cada movimiento implica el cambio de la configuración de N espines y el consiguiente coste en reevaluar las magnitudes termodinámicas, este M.C. requiere más tiempo que el que requieren procedimientos análogos. Realizamos simulaciones en estaciones de trabajo para sistemas relativamente grandes $N = 500 - 2000$, en un tiempo de ordenador no demasiado largo.

4.4.3 Dinámica a Temperatura Finita.

En el caso de temperatura finita, es relativamente sencillo resolver las ecuaciones en el límite de tiempos largos. Toda la información de la dinámica esta contenida en los coeficientes $a(t), b(t), c(x, t)$, que convergen monotonamente a sus valores de equilibrio. Esperamos en consecuencia que la dinámica de M.C. converja a la de equilibrio salvo un reescalado del tiempo

$$t \rightarrow t' = \frac{\rho^2 \beta \text{Erf}(\alpha^{eq})}{2} t \quad (4.64)$$

A temperatura finita y dependiendo del valor de ρ encontramos dos regimenes distintos, caracterizados por distintos valores de la tasa de aceptación. Estos límites se diferencian en el orden de magnitud de la escala de tiempos en la cual volvemos a tener la dinámica de Langevin.

El caso $\rho < 1$

En este caso $\text{Erf}(\alpha) \sim O(1)$, puesto que el valor de α es pequeño. Esto implica que la aceptación es grande, de orden 1.

Nótese que, en el límite $\rho \rightarrow 0$, se recupera la dinámica de Langevin con un reescalado del tiempo.

$$t \rightarrow t' = \frac{\rho^2 \beta}{2} t \quad (4.65)$$

En la figura 1, mostramos el decaimiento de la energía para diferentes valores de la temperatura y $\rho = 0.1$. Los valores se han obtenido resolviendo numéricamente la ecuación (4.77), que comparamos con simulaciones M.C. para $N = 500$ espines. En la figura, también mostramos el comportamiento asintótico obtenido mediante la dinámica Langevin $E(t) - E^{eq} \sim \frac{3}{8} t^{-1}$ [30] [31] con el reescalado del tiempo de la ecuación (4.64).

Los resultados para la función de correlación $C_0(t_w, t_w + t) = K(0, t_w, t_w + t)$ se muestran en la segunda figura para diferentes valores del tiempo de espera, $t_w = 1, 10, 100, 1000$, a $T = 0.4$ con $\rho = 0.1$, obtenidos numéricamente resolviendo la ecuación (4.78). De nuevo, comparamos la solución con la de las simulaciones para $N = 500$. También mostramos el comportamiento asintótico para la dinámica de Langevin $C(t_w, t_w + t) \sim t^{-\frac{3}{4}}$ (ver [30],[31]).

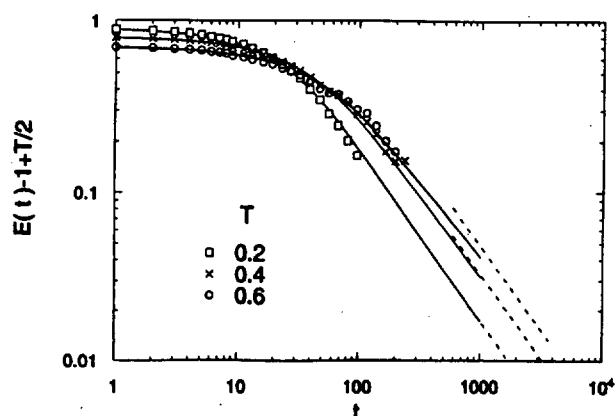


Figura 4.1: $E(t) - E^{eq}$, para $\rho = 0.1$ y $T = 0.2$, 0.4 y 0.6 . Los puntos representan los resultados de las simulaciones M.C. (para $N = 500$), las líneas continuas representan la solución analítica de las ecuaciones para la dinámica MC y las discontinuas la solución de la dinámica Langevin después del apropiado reescalado con el tiempo.

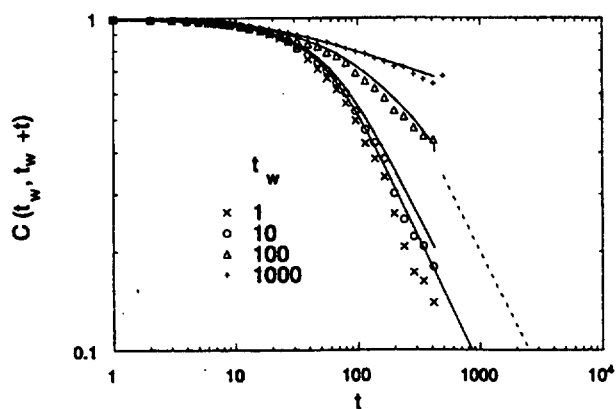


Figura 4.2: $C_0(t_w, t_w + t)$ con $\rho = 0.1$, $T = 0.4$ para $t_w = 1, 10, 100$ y 1000 . Los puntos representan los resultados de las simulaciones M.C. (para $N = 500$), las líneas continuas representan la solución analítica de las ecuaciones para la dinámica MC y las discontinuas la solución de la dinámica Langevin después del apropiado reescalado con el tiempo.

En el regimen dinámico mostrado en la figura 2, no hay evidencias de una meseta o regimen beta de relajación. Este proceso señala la existencia de un regimen para tiempos $t - t_w < t_w$, en el cual el sistema esta en equilibrio local y el TTD se verifica y también se cumple la ITT, $C_0(t_w, t_w + t) \simeq C_0(t)$. El proceso de relajación β no se ve debido a lo pequeño de los valores de t_w utilizados. En la dinámica Langevin, este regimen usualmente aparece para valores suficientemente grandes de t_w , que son mucho más grandes en el caso M.C., puesto que tenemos que reescalar el tiempo con el parámetro (4.64) (la constante con la que tenemos que reescalar el tiempo en la figura 2 es aproximadamente 87, 87 pasos M.C. se corresponden a una unidad de tiempo en el caso Langevin. En este regimen $\rho \ll 1$, debido a que $Erf(\alpha)$ es finito, esperamos que el valor de t_w necesario para observar la meseta escale sea ρ^{-2} veces mayor que el tiempo necesario para verlo en la dinámica de Langevin. Este regimen de fuera del equilibrio es semejante al observado en modelos con ruptura continua de la simetría de las réplicas como el S.K. [80] o en vidrios de espín de dimensión finita [78, 100], donde no aparecen indicaciones de una meseta para los valores del tiempo de espera utilizados.

El caso $\rho > 1$

En este caso $Erf(\alpha) \sim \frac{e^{-\alpha^2}}{\alpha}$ debido a que α es grande y, por tanto, la aceptación es muy pequeña. Para valores de $t_w \ll \frac{\exp(\rho^2)}{\rho}$ el sistema está en el regimen de tiempos cortos donde aparece una meseta y envejecimiento, $C_0(t_w, t_w + t)$ depende fuertemente del tiempo t_w . En la figura 3, se ve perfectamente este comportamiento, donde se muestra $C_0(t_w, t_w + t)$ para distintos valores de $t_w = 1, 10, 100, 1000$ a $T = 0.4$ y $\rho = 5$ dada por la solución numérica de (4.78). En el regimen, $t_w \ll \frac{\exp(\rho^2)}{\rho}$ aparece una meseta, cuya longitud crece con el valor de t_w y que converge al valor $q_{EA} = 1 - T$ para tiempos de espera del orden de $\frac{\exp(\rho^2)}{\rho}$. Durante este transitorio el decaimiento a la meseta no verifica ITT. No se ha observado un régimen análogo en la dinámica de Langevin del S.K. esférico.

El comportamiento mostrado en la figura 3 es semejante al encontrado en sistemas con una fuerte congelación en la fase de bajas temperaturas, donde la aceptación es muy pequeña. Generalmente, éstos son sistemas con un paso en la ruptura de la simetría de las réplicas, tales como el p -espín esférico con $p > 2$ [32, 76], el modelo de Potts con p estados, para $p > 4$ [77], el R.O.M (Random Orthogonal Model) y algunos sistemas con

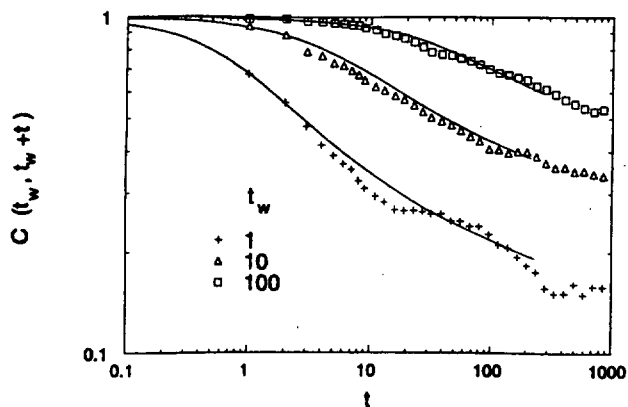


Figura 4.3: $C_0(t_w, t_w + t)$ con $\rho = 5$, $T = 0.4$ para $t_w = 1, 10, 100$ y 1000 . Los puntos representan los resultados de las simulaciones M.C. (para $N = 500$ y promedio sobre 5 realizaciones del desorden), las líneas continuas representan la solución analítica de las ecuaciones para la dinámica MC.

frustración, pero sin desorden, como el modelo de Bernasconi [82][17] [39] y otros [129, 128]. Todos ellos están caracterizados por la presencia de una dinámica con una aceptación muy baja y la existencia de una transición dinámica diferente de la estática. Estos modelos, a diferencia de lo que sucede en el caso del SK esférico, poseen un gran número de estados metaestable. Mientras que la estática de los modelos anteriores es muy distinta, la dinámica muestra notable semejanzas.

4.4.4 Dinámica a muy Bajas Temperaturas.

En esta sección estamos interesados en extraer el comportamiento para tiempos largos de las ecuaciones dinámicas para $T \rightarrow 0$. No hay razones para esperar que las dinámicas de Langevin y de M.C. coincidan, debido a la divergencia del tiempo de reescalado(4.64): en el regimen de temperatura cero la aceptación va monotonamente a cero, los coeficientes $a(t), b(t), c(x, t)$ de las ecuaciones (4.43,4.55) tienen un límite a tiempos largos no trivial. Por tanto, esperamos un regimen dinámico muy diferente del predicho en la dinámica de Langevin. De hecho, veremos que la dinámica de Langevin no se encuentra como límite a

tiempos largos de la dinámica M.C.

A $T = 0$ los coeficientes $a(t), b(t), c(x, t)$ de las ecuaciones (4.43), (4.55) son

$$\begin{aligned} a_{T=0}(t) &= -\frac{2\alpha e^{-\alpha^2}}{E\sqrt{\pi}} \\ b_{T=0}(t) &= -\left(\frac{\rho^2 \operatorname{Erf}(\alpha)}{2} + \frac{4\alpha e^{-\alpha^2}}{\sqrt{\pi}}\right) \\ c_{T=0}(x, t) &= \frac{1}{2}\rho^2 \ll e^{x\lambda} \gg \operatorname{Erf}(\alpha) \end{aligned} \quad (4.66)$$

Por tanto, la ecuación (4.45) para la aceptación será,

$$A(t) = \frac{\operatorname{Erf}(\alpha)}{2} \quad (4.67)$$

Nótese que la dinámica a tiempos largos está controlada por el parámetro dependiente del tiempo α , que diverge en el límite de tiempos infinitos. Desafortunadamente, la dependencia de los coeficientes en α es no lineal, lo que dificulta el análisis de la solución. No obstante, podemos derivar una ecuación no lineal dinámica para la energía por medio de la aproximación adiabática explicada en la proxima sección. La ecuación resultante es una buena aproximación para el comportamiento para tiempos largos, como se puede comprobar de compararla con la solución numérica de la ecuación.

Podemos analizar cualitativamente como el sistema evoluciona a temperatura cero. Supongamos que el sistema comienza de una configuración inicial aleatoria $\sigma_i = \pm 1$, tal que $E(t = 0) = 0$ y $B_1(t = 0) = 1$. La energía decrece monotonamente al estado fundamental $E = -\frac{J_{max}}{2} = -1$, mientras B_1 decrece a cero. Hay dos regimenes diferentes en la dinámica. El primero, para tiempos pequeños, donde α es pequeño y la aceptación es aproximadamente $1/2$. Esto se corresponde a una distribución Gaussiana para $P(\Delta E)$ ((4.38)) con anchura $\rho\sqrt{B_1}$, mayor que la distancia del centro de la distribución al origen, $(\rho^2 E)$. En este caso los cambios de energía son positivos y negativos con igual probabilidad. En este regimen, la energía decrece rápidamente debido a que la aceptación es grande. El segundo regimen aparece cuando B_1 es pequeño y α se hace grande. En este caso la aceptación es muy pequeña, va como $\frac{\exp(-\alpha^2)}{\alpha}$, y la dinámica se hace muy lenta. Es en este segundo regimen donde esperamos que la aproximación adiabática se aplique.

La aproximación adiabática muestra que el comportamiento para largos tiempos de la dinámica M.C. es bastante diferente de la dinámica Langevin. Esto no es una sorpresa, puesto que en el capítulo III hemos mostrado que incluso para un colectivo de osciladores armónicos lineales, ambas dinámicas son distintas. La razón inmediata para ello es la

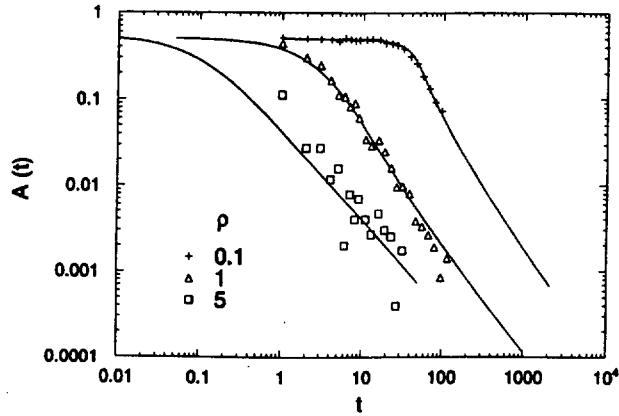


Figura 4.4: Tasa de aceptación $A(t)$ a $T = 0$ para $\rho = 0.1, 1$ y 5 , obtenida resolviendo las ecuaciones para la dinámica MC (líneas) y mediante simulaciones MC (puntos) ($N = 500$)

bajísima aceptación en la dinámica M.C. En las figuras 4 y 5, mostramos la aceptación y la energía, respectivamente, como una función del tiempo, para tres valores diferentes de ρ . Para calcularlas, utilizamos las ecuaciones (4.77) con los coeficiente obtenidos en el límite $T \rightarrow 0$ (4.66).

Notamos dos resultados importantes. Primero, observamos que α es el parámetro que controla la dinámica: determina dos regimenes con valores muy distintos de la aceptación y, por tanto, con dinámicas muy distintas. Segundo, encontramos que el comportamiento asintótico de la energía es muy distinto del encontrado en la dinámica de Langevin. Mientras que en ésta el decaimiento es $E(t) + 1 \simeq 1/t$ [30],[31], en la dinámica M.C. es $1/\log(t)$ como mostraremos a continuación.

La figura 6 muestra $C_0(t_w, t_w + t)$ para distintos valores de t_w . También en este caso las dinámica de Langevin y M.C. son muy distintas. No aparece un decaimiento $t^{-3/4}$ ni escalado del tipo $\frac{t}{t_w}$. La función de correlación normalizada se bloquea en 1, para valores suficientemente grandes de t_w .

4.4.5 La aproximación adiabática.

Pasamos a discutir la aproximación adiabática, que da el comportamiento asintótico de la energía y la aceptación a $T = 0$. La ecuación de la energía (4.42) se puede escribir, en este

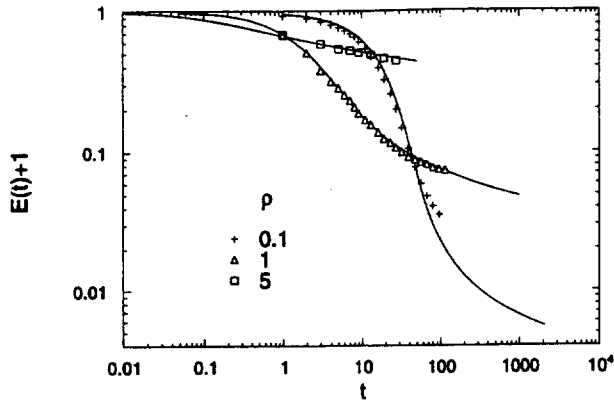


Figura 4.5: Relajación de la energía a $T = 0$ y para $\rho = 0.1, 1$ y 1.5 , obtenidos resolviendo las ecuaciones para la dinámica MC (líneas) y comparado con las simulaciones MC (puntos) con $N = 500$.

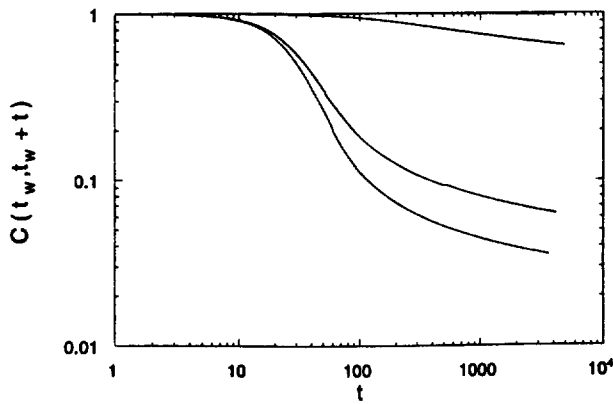


Figura 4.6: $C_0(t_w, t_w + t)$ a $T = 0$. con $\rho = 0.1$ para $t_w = 1, 10, 100$ y 1000 (de arriba a abajo), obtenidas de las ecuaciones analíticas para la dinámica MC.

caso, como una función del parámetro α ,

$$\frac{1}{E} \frac{\partial E}{\partial t} = -\frac{1}{2} \rho^2 \text{Erf}(\alpha) + \frac{\rho^2 e^{-\alpha^2}}{2\alpha\sqrt{\pi}} \quad (4.68)$$

Esta es una ecuación exacta para la energía. Desafortunadamente, no podemos resolverla porque no conocemos la evolución temporal de α . Una vez que α fuera conocido, conoceríamos inmediatamente la evolución del resto de las magnitudes. En el límite de tiempos largos, cuando α es muy grande, podemos expandir la función error como $\text{Erf}(\alpha) \simeq \frac{e^{-\alpha^2}}{\sqrt{\pi}\alpha} (1 - \frac{1}{2\alpha^2})$ para obtener una ecuación más sencilla

$$\frac{1}{E} \frac{\partial E}{\partial t} = \frac{\rho^2 e^{-\alpha^2}}{2\sqrt{\pi}\alpha^3} \quad (4.69)$$

Resolvemos esta ecuación utilizando la aproximación adiabática, que resulta ser la solución correcta para tiempos grandes, como se puede comprobar comparando con los resultados numéricos de la ecuación (4.77). Reemplazamos α por un parámetro efectivo, obtenido de sustituir los valores de fuera del equilibrio por los obtenidos de la relación de quasi-equilibrio (4.62) a una temperatura efectiva dada por $\beta_{ef} = \frac{1}{T_{ef}} = \frac{1}{\mu^*(E+1)}$, donde μ^* es un parámetro renormalizado, que tiene el significado físico de una masa efectiva. Donde, $\mu^* = 2$ en la ecuación anterior nos lleva a la ecuación de equilibrio $E = -1 + \frac{T}{2}$ en la fase de bajas temperaturas. Sustituyendo en (4.69) y usando $B_1 = -2\mu^*E(E+1)$, obtenemos, en el límite de tiempos largos ($E \simeq -1$) y despreciando ordenes más altos en $E+1$,

$$\frac{\partial E}{\partial t} = -\frac{2}{\rho\sqrt{\pi}} (\mu^*(E+1))^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{\rho^2}{4\mu^*(E+1)}\right) \quad (4.70)$$

En principio, μ^* es un parámetro desconocido. En la aproximación adiabática más simple $\mu^* = 2$. Esto se corresponde, a utilizar el Teorema de Equipartición en la superficie de energía constante, donde la relación de equilibrio $B_1 = -4E(E+1)$ se cumple para todo tiempo. En el capítulo III, hemos mostrado que para $\mu^* = 2$ la ecuación, (4.70) es la ecuación de la energía para un oscilador colectivo de osciladores armónicos con Hamiltoniano $\mathcal{H} = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$, donde $m\omega^2 = \lambda^{max} = 2$ (3.20). Físicamente esto significa que el sistema relaja como un oscilador armónico con un valor de $m\omega^2$ determinado por el máximo autovalor del espectro de autovalores, 2. Un valor más pequeño que 2, implica que el SK esférico se comporta de manera efectiva como un oscilador armónico con masa efectiva más grande ($m\omega^2 = \frac{4}{\mu^*}$) de la que le corresponde mediante la aproximación adiabática sin parametrizar.

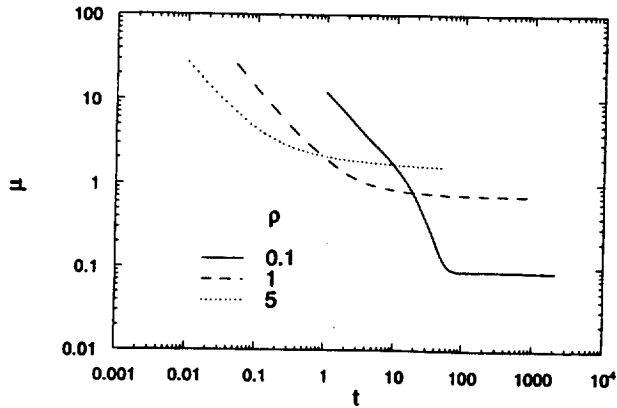


Figura 4.7: Valor de $-B_1/(2E(E+1))$ como función del tiempo para $T=0$ para diferentes valores de ρ . El límite para tiempos largos nos da el valor del parámetro efectivo μ^* .

La solución para tiempos grandes de la ecuación (4.70), puede ser obtenida fácilmente. Si α diverge como $(\log(t))^{\frac{1}{2}}$, la energía decae como $E(t) = -1 + O(\frac{1}{\log(t)})$ y la aceptación va como $A(t) \simeq \frac{1}{t}$. Todas estas cantidades tienen correcciones logarítmicas subdominantes. En la figura 7, mostramos el valor del parámetro efectivo $\mu^* = -\frac{B_1}{2E(E+1)}$ como función del tiempo, obtenido resolviendo (4.77) para diferentes valores de ρ . Nótese que el parámetro efectivo μ^* converge a un valor independiente del tiempo, para tiempos grandes. Resolviendo numéricamente la ecuación obtenida de la aproximación adiabática (4.70), hemos comprobado que la relajación de la energía está en buen acuerdo con la solución numérica de (4.77). Encontramos que $\mu^* \simeq 0.087, 0.72, 1.65$ para $\rho = 0.1, 1, 5$, respectivamente. Obsérvese que los valores de μ^* encontrados son todos más pequeños que 2.

4.5 Conclusiones

En este trabajo, presentamos la solución analítica de la dinámica M.C. del modelo de Sherrington-Kirkpatrick esférico. Como resultado de la simplicidad del modelo, se puede obtener una gran cantidad de resultados analíticos. Estudiamos y resolvemos las ecuaciones de la dinámica utilizando el método de la función generatriz, que nos permite cerrar la jerarquía de ecuaciones dinámicas de una manera semejante a como se ha hecho en otros modelos vítreos sin desorden congelado. Como ejemplo y término de comparación, hemos resuelto la dinámica Langevin con este mismo método. En el caso de la dinámica de M.C., hemos utilizado la función generatriz para derivar expresiones cerradas para las cantidades a un tiempo, como la energía, y a dos tiempos como la función de correlación. El uso del mismo procedimiento, el método de la función generatriz, para resolver la evolución descrita por ambas dinámicas, permite una comparación muy sencilla de ambas. Basta comparar las ecuaciones diferenciales que verifica la función generatriz sin necesidad de estudiar los detalles de la dinámica.

Al estudiar un modelo tan simple, perdemos toda la fenomenología asociada a una fase en la cual se rompe la simetría de las réplicas, [?]. No obstante, nuestros resultados para la dinámica M.C. dejan claro lo importante que es la aceptación para la dinámica de fuera del equilibrio. Por tanto, hemos centrado nuestro análisis en esta última dinámica.

La dinámica Langevin se obtiene en el límite $\rho \rightarrow 0$ con un reescalado efectivo del tiempo $t \rightarrow t' = t \frac{\rho^2 \beta}{2}$ y la tasa de aceptación es siempre 1 (ecuaciones (4.43) y (4.55)). De la comparación entre ambas dinámicas, obtenemos diferencias notables, cuando la aceptación en la dinámica M.C. es muy pequeña y para tiempos no muy largos. Para valores finitos de ρ y temperaturas finitas, hemos visto que la dinámica Langevin se obtiene para tiempos $t \simeq \rho^{-2}$ cuando ρ es pequeña y para $t \simeq \exp(\rho^2)/\rho$ cuando ρ es grande. Para tiempos más pequeños que los anteriores, se ha encontrado una variedad de regímenes. La dinámica observada en la figura 3 recuerda mucho la observada en modelos con 1 paso en la ruptura de la simetría de las réplicas [85, 86].

Los resultados más interesantes se obtienen en el límite de temperaturas bajas. La primera característica que llama nuestra atención es el lento decaimiento de la energía $1/\log(t)$, que es semejante al comportamiento encontrado para la dinámica M.C. del Oscilador Armónico del capítulo III. Este modelo nos sirve para estudiar la aproximación

adiabática. En esta aproximación, dada la lentitud con la que el sistema relaja al equilibrio, suponemos que el sistema visita todos los estados asociados a la energía $E(t')$ con igual probabilidad, como si de hecho se encontrara en equilibrio en el colectivo microcanónico asociado a ésta energía. De esta manera, el resto de las magnitudes dinámicas se pueden calcular con promedios termodinámicos. Basta utilizar las relaciones de equilibrio para saber cuál es la temperatura efectiva del sistema a la energía dada y con élla calcular los promedios habituales. Utilizando este método encontramos solo un acuerdo parcial con los resultados, apareciendo un parámetro efectivo μ^* que depende de la dinámica M.C. a través de ρ . Observamos que el valor de μ^* crece acercándose a 2, cuando aumentamos el valor de ρ . Como $\mu^* = 2$ es el resultado de la aproximación adiabática, concluimos que esta aproximación se hace tanto más precisa al aumentar ρ .

La función de correlación muestra un decaimiento también muy lento y distinto del que muestra la dinámica de Langevin. Mientras que en esta última el decaimiento es mediante una ley de potencias, $t^{-3/4}$, en la primera sigue un comportamiento $1/\log(t)$, muy semejante al encontrado en la relajación de medios granulares [29]. Nótese que este comportamiento es distinto del obtenido para la dinámica del oscilador armónico: en el caso presente el decaimiento es mucho más lento. Es bastante sorprendente que estos modelos se parezcan tanto en el decaimiento de la energía y difieran tanto en el comportamiento de la función de correlación. Este resultado parece indicar que el espacio de las fases de uno y otro son distintos y no coinciden tan siquiera a bajas temperaturas.

4.6 Apéndice I. Las Ecuaciones del Movimiento.

En esta sección, escribimos la ecuación general del movimiento asociada a la distribución de probabilidad conjunta,

$$P(\Delta E, \Delta O) = K \exp\left(-\frac{(\Delta E - a)^2}{2b^2}\right) \exp\left(-\frac{(\Delta O - c)^2}{2d^2}\right) \quad (4.71)$$

donde $c = e + f(\Delta E - a)$ y a, b, c, d, e, f son, en general, cantidades independientes del tiempo, ΔE representa el cambio de energía y ΔO el cambio de cualquier observable (momento generalizado, correlación, función respuesta...). En la dinámica M.C. $a = -\rho^2 E$, $b^2 = \rho^2 B_1$, con B_1 dada en la ecuación (4.39) y c, d, e, f dependen del observable O . La constante

$K = (4\pi b^2 d^2)^{-\frac{1}{2}}$ normaliza la distribución de probabilidad.

La ecuación de evolución del observable O es,

$$\frac{\partial O}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy y P(x, y) w(x) \quad (4.72)$$

donde $w(x) = \text{Min}(1, e^{-\beta x})$ es el factor de Boltzman.

$$\frac{\partial O}{\partial t} = \frac{1}{2} \left(e \text{Erf}(\alpha) + (e - f\beta b^2) \exp(-a\beta + \frac{b^2 \beta^2}{2}) \text{Erf}(\sqrt{\frac{b^2 \beta^2}{2}} - \alpha) \right) \quad (4.73)$$

$\alpha = -\frac{a}{(2b^2)^{\frac{1}{2}}}$, que coincide con (4.44) para los valores anteriores de a, b .

A $T = 0$, la ecuación del movimiento es,

$$\frac{\partial O}{\partial t} = \frac{1}{2} \left(e \text{Erf}(\alpha) - f \sqrt{\frac{2b^2}{\pi}} \exp(-\alpha^2) \right). \quad (4.74)$$

4.7 Apéndice II. Solución de la Ecuación Diferencial.

En esta sección presentamos la solución general de la ecuación diferencial para la función generatriz $g(x, t)$ en la ecuación (4.54), obtenida usando el método de las curvas características,

$$\frac{\partial g(x, t)}{\partial t} = a(t) \frac{\partial g}{\partial x} + b(t)g + c(x, t) \quad (4.75)$$

Para resolver esta ecuación, hacemos el siguiente cambio de variables $x \rightarrow u(t) = x + \int_0^t a(t') dt'$ y la ecuación (4.75) se transforma en

$$\frac{d\hat{g}(u, t)}{dt} = b(t)\hat{g}(u, t) + c(u, t) \quad (4.76)$$

que es una ecuación diferencial lineal ordinaria fácilmente resoluble. El resultado final es,

$$g(x, t) = g_0(x + \int_0^t a(t') dt') B(t) + B(t) \int_0^t dt' \frac{c(x + \int_{t'}^t a(t'') dt'', t')}{B(t')} \quad (4.77)$$

donde $B(t) = \exp(\int_0^t b(t') dt')$ y $g_0(x) = g(x, t = 0)$ es la condición inicial. Una vez que $g(x, t)$ ha sido obtenida podemos obtener también la función generatriz para cantidades dependientes de dos tiempos. Por ejemplo, la $K(x, t', t)$ asociada a la función de correlación en (4.60) viene dada por,

$$K(x, t', t) = g\left(x + \frac{1}{2} \int_{t'}^t a(t'') dt'', t'\right) \left(\frac{B(t)}{B(t')}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.78)$$

Capítulo 5

Fluctuaciones Cuánticas en Sistemas Vítreos.

5.1 Introducción

En pocos campos como en la Mecánica Estadística de los fenómenos críticos resulta posible despreciar los efectos cuánticos. Es cierto que para un número grande de transiciones de fase es imprescindible la Mecánica Cuántica para definir el parámetro de orden, como sucede en el caso del Helio superfluido o de la superconductividad. No obstante, suficientemente cerca de un punto crítico, las fluctuaciones cuánticas son solo importantes en la escala microscópica, pero no lo son en las escalas más grandes que determinan el comportamiento crítico.

Las transiciones de fase de segundo orden suelen venir acompañadas de un tiempo y de una longitud de correlación divergentes. Ésto implica que el sistema, al acercarnos al punto crítico, fluctúa de manera coherente sobre longitudes más y más largas. Cuando la energía asociada a estas fluctuaciones se hace mucho más pequeña que la asociada a las fluctuaciones térmicas $\hbar\omega \ll k_b T_c$, el sistema deja de comportarse cuánticamente, pierde la coherencia, y el comportamiento crítico se puede considerar como clásico. No obstante, en diversos sistemas físicos el cambio de uno de los parámetros del Hamiltoniano puede hacer descender la temperatura crítica a cero. En este caso, el argumento anterior deja de ser válido y el sistema posee una longitud y tiempo de correlación coherente que diverge y que caracteriza el estado crítico. Pudiera parecer que la presencia de una transición a temperatura cero tiene

tan solo un interés académico, sin embargo este tipo de transiciones determinan a $T \neq 0$ la existencia de un 'cross-over' entre una región caracterizadas por exponentes clásicos y otra caracterizada por los exponentes asociados al punto crítico cuántico.

Cuando las transiciones de fase están guiadas por fluctuaciones cuánticas y el estado del sistema está definido por un estado puro, esto es a $T = 0$, el concepto fundamental en la teoría de las transiciones de fase, la ruptura de la ergodicidad en el límite termodinámico, ha de ser revisado. La ruptura de la ergodicidad ya no está relacionada con la imposibilidad de superar por activación térmica barreras de energía proporcionales al tamaño del sistema, sino con el hecho de que ningún término de orden finito en la teoría de perturbaciones nos da una transición entre estados degenerados en energía correspondientes a distintas componentes ergódicas, puesto que para pasar de uno a otro es necesario el cambio en un número infinito de variables.

La otra propiedad que hace diferentes las transiciones de fase cuánticas de las clásicas es que en las primeras la termodinámica y la dinámica están conectadas. El conocimiento de una implica el conocimiento de la otra o dicho de otra forma, es preciso calcular ambas de manera consistente. Esta conexión es más clara si se utiliza la descomposición de Trotter y Suzuki. A mediados de los '70, Suzuki [89] usó la fórmula de Trotter [90] para mostrar la equivalencia entre un problema cuántico en d -dimensiones y un problema clásico en $d+1$ dimensiones, donde la dimensión adicional representa el tiempo imaginario. Esta equivalencia ha permitido comprender muchos de los sistemas cuánticos gracias a su analogía con sistemas clásicos ya estudiados.

Sistemas Desordenados.

Hertz [91] mostró que un sistema cuántico de dimensión d está relacionado con un sistema clásico de dimensión $d + z$. Esto se debe a la anisotropía entre la dirección temporal y la dirección espacial, siendo z el exponente crítico dinámico, que relaciona las longitudes de correlación en ambos dominios, $\xi_t = \xi^z$. Hertz llegó a la conclusión de que muchas de las transiciones de fase cuánticas en 3-D son triviales desde el punto de vista del comportamiento crítico puesto que $d + z$ es mayor o igual que la dimensión crítica superior.

Posteriormente, Belitz y Kirkpatrick [92] notaron que los argumentos presentados por Hertz fallan en el caso en el cual aparecen modos blandos o lentos. Este es el caso en los sistemas desordenados. En estos sistemas, se sabe ahora que el exponente asociado con la longitud de correlación debe verificar $\nu \geq 2/d$ [93]. Hertz encontró que este exponente era

$\nu = 1/2$ para todas las dimensiones, lo cual muestra que su teoría no puede ser correcta para $d < 4$.

Modelos de Espines.

Un buen número de estudios teóricos se han centrado en el estudio de modelos de espines [94]. Un ejemplo particularmente interesante de su realización experimental es el $Rb_{1-x}(NH_4)_xH_2PO_4$. Para composiciones $0.2 \leq x \leq 0.75$, en estos sistemas se forma la fase de vidrio protónico, que se cree asociada con la congelación del movimiento intraenlace del protón $O - H..O \rightarrow O..H - O$, para valores no lo suficientemente grandes de la presión [96].

Para modelar estos sistemas, se añade al Hamiltoniano clásico un campo transversal,

$$H = \sum_{(i,j)} J_{i,j} \sigma_i^z \sigma_j^z + \Gamma \sum_i \sigma_i^x \quad (5.1)$$

El modelo de dimensión finita más intensamente estudiado ha sido el modelo en 1-D, típicamente con interacción a primeros vecinos y elementos de matriz tomados de una distribución Gaussiana de varianza J^2 y media cero. Presenta un comportamiento bastante rico, del que cabe destacar las singularidades de Griffiths-McCoy [97] [98]. Estas singularidades, que se manifiestan como una divergencia de la susceptibilidad para toda una región de la recta $T = 0$ y que no van acompañadas de una longitud de correlación divergente, se suponen provocadas por regiones del sistema fuertemente correlacionadas. En el resto de capítulo no nos referiremos a ellas, porque en dimensión infinita no aparecen.

D. S. Fisher [99] analizó estos modelos en gran detalle a $T = 0$ utilizando el grupo de renormalización, encontrando grandes diferencias entre los valores medios y los típicos de distintas magnitudes físicas. En dimensión 1 el cálculo se puede simplificar usando una representación de fermiones [100] y en dimensiones más grandes se estudia utilizando MCC (Monte Carlo Cuántico), basado en la descomposición de Trotter y Suzuki [89] y *Finite Size Scaling*.

Otros modelos desordenados cuánticos con campo transversal distintos del EA han sido estudiados. Utilizando un procedimiento análogo al utilizado por D. S. Fisher, T Senthil y S. N. Majumdar estudiaron el modelo de Potts y el así llamado modelo 'clock' o del reloj [103].

5.1.1 Modelos Desordenados con Interacción a Largo Alcance.

Un gran número de ideas y resultados provienen de los sistemas de largo alcance. Estos son accesibles al estudio teórico mediante distintas técnicas, algunas de las cuales describiremos a continuación.

Sin lugar a dudas el modelo de Sherrington Kirkpatrick [105] es el modelo estadístico desordenado más estudiado en su versión clásica y cuántica. A diferencia de lo que sucede en el caso clásico, este modelo no puede ser resuelto de manera exacta en su versión cuántica. Ha sido estudiado mediante técnicas perturbativas, esto es mediante expansiones en alto campo transverso, o mediante las técnicas variacionales propuestas por Bray y Moore ([109]) y por Kopec [110].

En un mismo trabajo, Bray y Moore (1985) [109] propusieron un método variacional para estudiar el modelo S.K. cuántico y una aproximación para hacer manejable este método: la aproximación estática. El Hamiltoniano del model S.K. cuántico viene dado por:

$$H = \frac{1}{2} Tr(\mathbf{J} \hat{\mathbf{O}}) + \Gamma \sum_i \hat{\sigma}_i^z \quad (5.2)$$

donde la matriz \mathbf{J} tiene elementos tomados aleatoriamente de una distribución Gaussiana con varianza J^2 y $\hat{O}_{i,j} = \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_j^x$. Como se ha hecho notar antes, tenemos la parte desordenada correspondiente al Hamiltoniano clásico más un campo transverso, esto es que *no conmuta con el Hamiltoniano de interacción*.

La energía libre vendrá dada por $F = \langle \log(Z) \rangle_J$, donde $\langle \dots \rangle_J$ representa el promedio sobre el desorden. Para calcular este promedio se utiliza el truco de las réplicas [105], que nos sirve para calcular el promedio sobre el desorden de un logaritmo.

Tal y como sucede en el caso clásico, el promedio sobre el desorden permite desacoplar cada uno de los sitios de la red, pero a cambio introduce una interacción entre las réplicas. La complicación más grande que introduce tomar en consideración las fluctuaciones cuánticas es que, por cada término de interacción entre réplicas en el caso clásico; en el caso cuántico, aparece una función con soporte entre $[0, \beta]$: la interacción entre réplicas depende ahora del tiempo.

Se obtiene una energía libre dependiente de la interacción $R_{a,b}(\tau, \tau')$, que deber ser calculada autoconsistentemente, imponiendo que sea un extremo local de la energía libre.

$$D_{a,b}(\tau, \tau') = R_{a,b}(\tau, \tau') = \langle \hat{P} \hat{\sigma}^{z,(a)}(t) \hat{\sigma}^{z,(b)}(t') \rangle_{H_{eff}} \quad (5.3)$$

$$H_{eff} = e^{-\beta H_0} \text{Pexp} \left(\int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \frac{1}{2} R_{a,b}(t, t') \hat{\sigma}^{z,(a)}(t) \hat{\sigma}^{z,(b)}(t') dt dt' \right) \quad (5.4)$$

Por tanto, vemos que el promedio sobre el desorden nos lleva a un sistema sin desorden, pero en el cual aparece una interacción dependiente del tiempo.

En la fase de alta temperatura, es correcto considerar la simetría de las réplicas [106]. Aunque ésto simplifica los cálculos, el problema variacional es todavía muy complicado. Para salvar esta dificultad, los autores introdujeron la llamada aproximación estática, que consiste en aproximar la función $R(\tau, \tau')$ por una constante.

Para estudiar la estabilidad de la solución réplicas simétricas, se expande la energía libre hasta segundo orden alrededor de la solución R.S., para llegar a la condición:

$$1 = \chi_0 \equiv \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau d\tau' \langle \hat{\sigma}^z(t) \hat{\sigma}^z(t') \rangle. \quad (5.5)$$

Esta relación determina la transición de segundo orden entre la fase paramagnética y la fase vítrea. Es importante señalar que para obtener esta ecuación *no es preciso utilizar la condición estática*. Si ahora asumimos la aproximación estática, obtenemos una ecuación integral para la línea crítica [108].

$$\int_0^\infty (x^2 - 2) \exp\left(-\frac{x^2}{2} \cosh(\beta_c J x^2 + (\Gamma_c \beta_c)^2)\right) dx = 0 \quad (5.6)$$

En particular, $\Gamma_c = 2J$ para $T_c = 0$ y, como cabía esperar, $T_c = J$ para $\Gamma_c = 0$. Obviamente, en ausencia de campo transverso, el multiplicador $R(\tau, \tau')$ se hace independiente del tiempo y la aproximación estática es exacta.

No se puede esperar que la aproximación estática sea correcta en general. Para mejorar esta aproximación, Yamamoto e Ishii (1987) [108] utilizaron un método perturbativo. A partir de la función de correlación determinan la susceptibilidad lineal y la no lineal. Utilizan que esta última diverge en el punto crítico para determinarlo. Determinan un valor finito para el valor del campo crítico, $\Gamma_c = 1.506J$ a $T = 0$. Esto muestra que la aproximación estática sobreestima el valor de la transición, al menos en el caso del S.K.

Thirumalai, Qiang Li y Kirkpatrick (1989) [115] examinaron la validez de la aproximación estática. Encontraron que sus resultados llevaban al resultado erróneo de $S \neq 0$ para $T = 0$. Notaron también que *la aproximación estática debía ser correcta para los multiplicadores de fuera de la diagonal* $R_{a,b}(t, t')$ con $a \neq b$ 5.4, debido a la invariancia translacional en tiempos y a la simetría con respecto al intercambio de los índices de las réplicas.

Otra indicación de que la aproximación estática es incorrecta es el valor finito de $\frac{d\Gamma_c(T)}{dT}$. Samara y Terauchi [96] resaltaron que cuando $T \rightarrow 0$, $\frac{d\Gamma_c(T)}{dT} \rightarrow -\infty$, tanto para transiciones de primer como de segundo orden.

Miller y Huse [116] diseñaron un procedimiento para analizar las ecuaciones autoconsistentes de Bray y Moore 5.4. Este método permite obtener el mismo orden de precisión que el de Yamamoto e Ishii de manera más simple y la corrección logarítmica en la divergencia de la susceptibilidad no lineal.

Se basa en reescribir nuestros operadores de espín como operadores fermiónicos (ver Apéndice II). Con esta formulación del problema, es posible construir un desarrollo diagramático en términos de la *polarizabilidad irreducible*. Dada la relación de consistencia en el caso de SK $D(\tilde{w}) = R(\tilde{w})$ y la ecuación de Dyson, $D(\tilde{w}) = \frac{\tilde{\Pi}^*(w)}{1 - R(w)\tilde{\Pi}^*(w)}$, llegamos a

$$2D(\tilde{w}) = \frac{1}{\tilde{\Pi}^*(w)} - \left(\left(\frac{1}{\tilde{\Pi}^*(w)} \right)^2 - 4 \right)^{1/2} \quad (5.7)$$

La polarizabilidad irreducible viene definida por los diagramas del propagador de $\hat{\sigma}^x$ múltiplemente conexos. Notese que esta transformación es exacta y que la dificultad se esconde en que la polarizabilidad a su vez depende del término de interacción $\tilde{R}(w)$ (5.7).

El estudio de la analiticidad de la polarizabilidad lleva a predecir un comportamiento singular para la susceptibilidad lineal,

$$\chi_2^B \sim \left(\frac{|\ln(\Gamma - \Gamma_c)|}{(\Gamma - \Gamma_c)} \right)^{1/2} \quad (5.8)$$

mientras que la susceptibilidad lineal es finita y toma valor 1.

Miller y Huse notaron que para determinar el valor del campo crítico era preciso recurrir a un análisis perturbativo. Este consiste en partir de una aproximación para la polarizabilidad irreducible y estimar el propagador $\tilde{D}(w)$. A partir de éste, se puede mejorar la

aproximación para la polarizabilidad irreducible y recomenzar el cálculo. Notaron que en este cálculo es esencial que $\tilde{D}(w)$ esté correctamente normalizado en cada paso del método perturbativo, $D(0) = s^2$. Para conseguirlo, introducen un desplazamiento en energías que debe ser calculado autoconsistentemente.

Este método de cálculo se muestra muy eficiente, dando a primer orden un valor de $\Gamma_c = \frac{9s\pi^2}{64} \sim 0.694$ y a segundo orden $\Gamma_c \sim 0.731 \pm 0.005$, para $s = \frac{1}{2}$; que se convierte en $\Gamma_c \sim 1.46 \pm 0.01$, para $s = 1$,

Se han realizado distintos estudios numéricos del modelo S.K. cuántico usando Monte Carlo Cuántico y *Finite Size Scaling* a $T > 0$ y extrapolando los resultados a $T = 0$ [117], integrando la ecuación de Schrödinger a $T = 0$ [118], mediante métodos de diagonalización exacta a $T = 0$ [119] y mediante el uso de la descomposición de Trotter y Suzuki y análisis de las componentes de Fourier [120]. Todos los métodos encuentran un acuerdo razonable en el valor de Γ_c y del exponente dinámico, z .

El trabajo de Miller y Huse no aborda el problema de cuál es la estructura de la solución en la fase vítrea. Read, Sachdev y Ye [122] estudiaron el problema construyendo un funcional efectivo de Landau (Landau-Ginzburg-Wilson). Encontraron que, en la fase vítrea, en el límite $T \rightarrow 0$; se recupera la simetría de las réplicas, aunque el *ansatz* necesario es distinto del utilizado en altas temperaturas o campos transversos.

5.2 Transiciones de Fase Cuánticas en Sistemas con Desorden Congelado.

Como ya se ha mencionado en la introducción a esta tesis, ciertos modelos con desorden congelado, se consideran como apropiados para estudiar la transición vítrea: el p -espín con $p > 2$, el Potts y el R.O.M. Todos ellos presentan una transición dinámica semejante a la presentada por las TAM y la anulación de la entropía configuracional a temperaturas mas bajas, tal y como se espera de los trabajos de Kauzmann [3] y Adams y Gibbs [2]. Estas propiedades parecen estar conectadas con una solución de la fase de bajas temperaturas que requiere ruptura de la simetría de las réplicas a un orden [12][16][17].

Fluctuaciones cuánticas suficientemente importantes, pueden llevar la temperatura de la transición vítrea ideal y de la transición dinámica a cero. En este capítulo nos centraremos

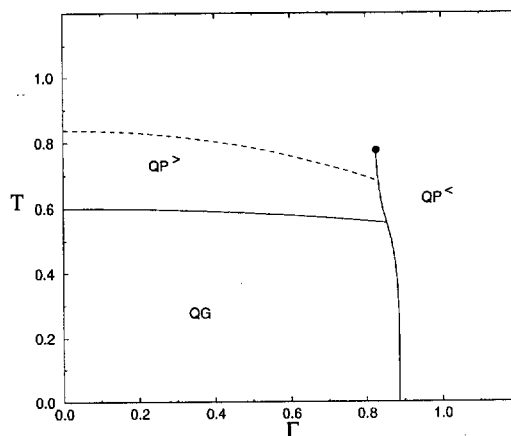


Figura 5.1: Diagrama de fases en el modelo p -espín $p = 10$ cuántico. La línea discontinua marca la transición dinámica. De [127]. $QP^>$ es la fase que Goldschmidt llamó paramagneto clásico y $QP^<$ denota el paramagneto cuántico.

en el estudio de las nuevas transiciones que aparece a temperatura cero.

El caso más simple estudiado es el p -espín con $p \rightarrow \infty$ [124]. En este caso, la *aproximación estática* resulta ser exacta, los multiplicadores son independientes de t , y una información muy completa puede obtenerse de este modelo. Dependiendo de los valores del campo transversal y de la temperatura, el sistema puede encontrarse en una de las tres fases posibles: el paramagneto clásico, el cuántico, donde los espines se alinean en la dirección del campo transversal, y la fase vítrea, donde aparece un valor finito del parámetro de E.-A., mostrando la congelación del movimiento de los espines. Mientras que la transición entre el paramagneto clásico y la fase vítrea posee un salto en el parámetro de E.-A., pero no posee calor latente; la transición entre el paramagneto cuántico y la fase vítrea sí que lo tiene, al igual que la transición entre el paramagneto clásico y el cuántico.

Los estudios perturbativos [125] [126] para $p \gg 1$ y numéricos [127] para valores finitos de p , confirman este comportamiento. La variación más importante es la aparición de un punto crítico a temperatura finita donde se termina la línea de primer orden que separa el paramagneto cuántico del clásico.

A pesar de los estudios realizados, aún no ha quedado establecido cual es la estructura de la fase de bajas temperaturas, ni si las fluctuaciones cuánticas modifican la transición dinámica.

Las dificultades de este cálculo están relacionadas con el hecho de que el método de las réplicas implica que la energía libre efectiva es la de n sistemas acoplados a través de un campo externo. Esto complica el problema variacional.

Vamos a centrar nuestro análisis en el R.O.M. Veremos que este modelo es especialmente apropiado para el cálculo autoconsistente de Miller y Huse y, por tanto, para el estudio de la fase de bajas temperaturas.

La estructura del resto del capítulo es la siguiente. Comenzaremos describiendo los resultados existentes sobre el ROM clásico y cuántico. En el primer apartado, describiremos los resultados originales de esta tesis. Mostraremos el cálculo y análisis de la energía libre y de las ecuaciones autoconsistentes para los multiplicadores en el ansatz de *réplicas simétricas*. Mostraremos, con un análisis general, no perturbativo, que la transición esta caracterizada por la divergencia de la susceptibilidad lineal. Después utilizaremos un método perturbativo para calcular el valor de Γ_c , el valor del campo crítico, y mostraremos la conexión entre la aproximación estática y este método. En un segundo apartado, mostraremos el cálculo de la energía libre en el ansatz de *ruptura de la simetría de las réplicas a un orden* y mostraremos las nuevas ecuaciones autoconsistentes. Discutiremos después la posibilidad de una transición de fase de primer orden.

5.2.1 El R.O.M. clásico.

El modelo clásico viene definido por el Hamiltoniano

$$H_{ROM} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j \quad (5.9)$$

donde la matrix $J_{i,j}$ es una matriz escogida aleatoriamente de un colectivo de matrices ortogonales y simétricas. Este modelo es especialmente interesante porque su fase de alta temperatura coincide con la de otros modelos [17] que carecen de desorden, aunque no de frustración. Sin embargo la termodinámica de bajas temperaturas no es la misma, debido a que los modelos carentes de desorden poseen un estado *crystalino* que los modelos desordenados no tienen.

Este modelo ha sido tratado mediante el método de las réplicas [17] y mediante las ecuaciones T.A.P. [131]. Su resolución requiere el uso de la técnica que nos permite calcular el promedio sobre un colectivo de matrices ortogonales.

$$\int \mathcal{D}\mathbf{J} \exp(\text{Tr} \frac{\mathbf{J}\mathbf{A}}{2}) = \exp(N \text{Tr} G(\frac{\mathbf{A}}{N})) \quad (5.10)$$

$$G(x) = -\frac{1}{2} \log\left(\frac{\sqrt{1+4x^2}+1}{2}\right) + \frac{1}{2} \sqrt{1+4x^2} - \frac{1}{2} \quad (5.11)$$

Esta técnica inicialmente diseñada para matrices unitarias [133] fué modificada para matrices ortogonales en [134]. En [17] se generalizaron las técnicas usadas en el S.K para obtener la energía libre,

$$f = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{(\langle Z^n \rangle_J - 1)}{n} \quad (5.12)$$

$$\langle Z^n \rangle_J = \int dQ d\Lambda \exp(-N A(Q, \Lambda)) \quad (5.13)$$

$$A(Q, \Lambda) = -\frac{1}{2} \text{Tr} G(2\beta Q) + \text{Tr}(\Lambda Q) - F(\Lambda) \quad (5.14)$$

$$F(\Lambda) = \ln \sum_{\sigma^a} \exp\left(\sum_{a,b} \Lambda_{a,b} \sigma^a \sigma^b\right) \quad (5.15)$$

Notese que el problema queda formulado en términos de sendas matrices Q y Λ de dimensión $(n \times n)$, que deben verificar las ecuaciones autoconsistentes,

$$Q_{a,b} = \langle \sigma^a \sigma^b \rangle \quad \Lambda_{a,b} = \beta [G'(2\beta Q)]_{a,b} \quad (5.16)$$

A temperaturas o campos suficientemente altos, es de esperar que las réplicas sean equivalentes o simétricas, puesto que la ruptura de la simetría de las réplicas esta asociada a un cierto tipo de ruptura de la ergodicidad y esta debe restaurarse a temperaturas suficientemente altas. Este *ansatz* se conoce como el de réplicas simétricas (R.S.)

$$Q_{a,b} = \begin{cases} q & \text{para } a = b \\ q_2 & \text{para } a \neq b \end{cases} \quad \Lambda_{a,b} = \begin{cases} \lambda & \text{para } a = b \\ \lambda_2 & \text{para } a \neq b \end{cases} \quad (5.17)$$

Además, como se espera que el solapamiento $Q_{a,b}$ entre dos réplicas distintas sea cero, $\lambda_2 = q_2 = 0$. El estudio de la energía libre indica que la solución R.S. es estable para todas las

temperaturas. No obstante, esta solución no es aceptable para temperaturas por debajo de $T = 0.26$, debido a que la entropía se hace negativa.

Siguiendo trabajos previos [77] [130], se propuso en este modelo un nuevo *ansatz*, el de un paso de ruptura de la simetría de las réplicas (1pRSR). Este *ansatz* es suficiente para encontrar una solución aceptable a bajas temperaturas.

Esta consiste en dividir las n réplicas en $\frac{n}{m}$ grupos de m elementos cada uno y suponer que el solapamiento entre elementos del mismo grupo es distinto del solapamiento entre elementos de distintos grupos [77]. Definimos B_m , como el conjunto de pares de réplicas que pertenecen al m -ésimo conjunto de réplicas. La forma de los multiplicadores será ahora,

$$Q_{a,b} = \begin{cases} 1 & \text{para } a = b \\ q & \text{para } a \neq b \text{ y } (a,b) \in B_m \\ 0 & \text{para } (a,b) \notin B_m \end{cases} \quad \Lambda_{a,b} = \begin{cases} 0 & \text{para } a = b \\ \lambda & \text{para } a \neq b \text{ y } (a,b) \in B_m \\ 0 & \text{para } (a,b) \notin B_m \end{cases} \quad (5.18)$$

Introduciendo este *ansatz*, podemos calcular la energía libre de esta fase. La transición entre ambas fases viene determinada por el cruce de la energías correspondientes a los diferentes *ansatz*. La temperatura encontrada es $T = 0.26$. Nótese que debido a las peculiaridades del límite $n \rightarrow 0$, debemos escoger la solución con *mayor* energía libre. La entropía de esta nueva fase es muy próxima a cero, 0.0004, el valor de q salta desde 0 hasta 0.9998 y $\lambda \sim 10$. El parámetro que define el tamaño de cada bloque de réplicas es aproximadamente proporcional a la temperatura y $m = 1$ en la transición.

Como se ha mencionado en la introducción, existe una segunda transición a una temperatura más alta que la anterior. Típicamente esta transición se puede determinar mediante la dinámica, aunque en modelos discretos es más simple calcularla mediante la condición de *marginalidad* [17]. Utilizando esta condición llegamos a una temperatura para la transición dinámica $T_D = 0.535$.

5.2.2 La Versión Cuántica del R.O.M.

La versión cuántica de este modelo, se obtiene sustituyendo las variables de espín anteriores por operadores de espín con las reglas de conmutación habituales y añadiendo un campo transversal [136].

$$H = \sum_{i < j} J_{i,j} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z - \Gamma \sum_i \hat{\sigma}_i^x \quad (5.19)$$

Este modelo fué estudiado en el formalismo de Trotter-Suzuki antes mencionado. Se obtiene mediante este formalismo un modelo clásico equivalente, que añade una dimensión discreta de longitud β y dividida en M puntos. La descripción solo es exacta en el límite $M \rightarrow \infty$ [89]. En el mismo trabajo se estudian simultáneamente el S.K. y el R.O.M. Las diferencias en el desorden se puede absorber en una cierta función generatriz evaluada sobre uno de los multiplicadores. Esta función, que llamaremos G , vale $G(x) = x^2$ en el caso del S.K y

$$G(x) = -\frac{1}{2} \log\left(\frac{\sqrt{1+4x^2}+1}{2}\right) + \frac{1}{2} \sqrt{1+4x^2} - \frac{1}{2} \quad (5.20)$$

en el R.O.M. El procedimiento para tratar este problema es análogo al explicado para el modelo clásico. Hemos de introducir el promedio sobre el desorden y, posteriormente, para obtener una energía libre a 'una partícula' introducimos multiplicadores de Lagrange. La diferencia más importante reside en que, debido a la transformación de Trotter-Suzuki, aparece una nueva dimensión que permite tener en cuenta los efectos de las fluctuaciones cuánticas.

Igual que en el problema clásico, introducimos el ansatz de réplicas simétricas y de ruptura de la simetría de las réplicas a un orden. El cruce de ambas energías libres permite determinar la transición. En el caso de ruptura de la simetría de las réplicas, se hace la suposición de que nuestra transición es de segundo orden. Esta suposición implica que m , el parámetro que determina el tamaño de cada uno de los bloques de (5.18), cambia de manera continua desde $m=1$ (réplicas simétricas) a valores mayores que 1. Este cambio continuo entre una fase y otra en el parámetro m , permite expandir cerca de la transición la energía libre: $f = f_0 + (m-1)f_1$, donde f_0 será la correspondiente a la fase R.S. Esto nos determinará la transición termodinámica.

El estudio numérico de una posible transición de fase de primer orden dentro de la aproximación estática ha dado una respuesta negativa [137].

Al igual que sucede en el modelo clásico, aparece un tiempo de correlación divergente y, por tanto, una transición dinámica debida a la aparición de estados metaestables. La

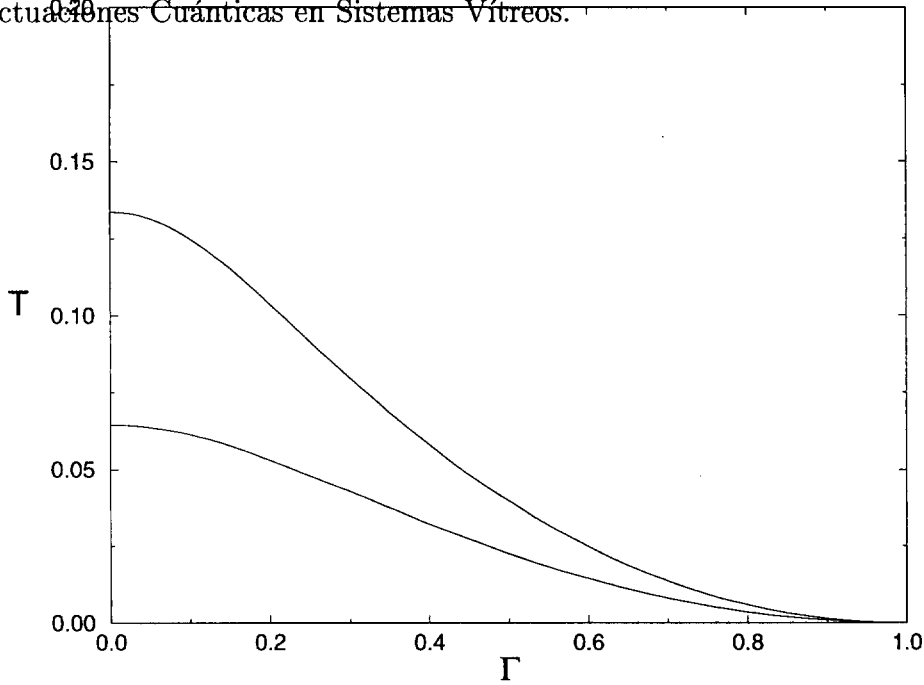


Figura 5.2: Diagrama de Fases. $T_d(\Gamma)$ transición dinámica, curva superior. $T_g(\Gamma)$ transición vítrea ideal. A $\Gamma = 0$, $T_d = 0.1336$ y $T_g = 0.0646$. [136]

temperatura a la cual aparecen estos estados viene determinada por la aparición de una solución con un autovalor cero en la matriz Hessiana asociada su estabilidad (*condición de marginalidad*). Esta condición en nuestro caso es equivalente a estudiar,

$$\left(\frac{\partial^2 f_1}{\partial q^2}\right)\left(\frac{\partial^2 f_1}{\partial \lambda^2}\right) - \left(\frac{\partial^2 f_1}{\partial q \partial \lambda}\right)^2 = 0. \quad (5.21)$$

Calculadas ambas transiciones el resultado más llamativo es que a $T = 0$ ambas transiciones coinciden: el valor del campo crítico es el mismo, $\Gamma_c = 1$, como se muestra en la figura (5.2). Dentro de la aproximación estática, se puede obtener la condición sobre la susceptibilidad lineal para determinar la transición vítrea a $T = 0$,

$$\chi_0^2 G'''(\chi_0) = 1 \quad (5.22)$$

que, en el caso del S. K., se reduce a la condición $\chi_0 = 1$, que sabemos que es válida en general, (ver 5.5 y la discusión precedente). Mientras que en el caso del R.O.M., implica la divergencia de las susceptibilidad lineal.

5.3 El R.O.M. más allá de la aproximación estática.

Recurriendo a la imagen de interacción, podemos escribir la función de partición,

$$Z = Tr e^{-\beta H} = Tr e^{-\beta H_0} \mathcal{U}(\beta, 0) \quad (5.23)$$

donde,

$$\mathcal{U}(\beta, 0) \equiv e^{\beta H_0} e^{-\beta H} = P \exp\left(-\int_0^\beta H_J^{(I)}(t) dt\right) \quad (5.24)$$

donde \mathcal{U} es el operador de evolución temporal y $H_J^{(I)}$ es la parte perturbativa del Hamiltoniano en la imagen de interacción, $H_J^{(I)}(t) = e^{H_0 t} H_J^{(S)} e^{-H_0 t}$ ($H_J^{(S)}$, es el Hamiltoniano en la imagen de Schrödinger) y P representa el operador de ordenación temporal. El operador de evolución temporal está evaluado sobre tiempos imaginarios. De manera convencional se introduce aquí la representación de Matsubara que permite tratar a la vez las integrales procedentes de la teoría de perturbaciones y los promedios termodinámicos a la vez ([112],[113]). Para analizar el comportamiento crítico de nuestro modelo, comenzamos generalizando el procedimiento de Bray y More para promediar sobre el desorden y obtener un problema *a una sola partícula*.

5.3.1 La Energía Libre y las Relaciones de Consistencia en Réplicas Simétricas.

La energía libre vendrá dada por $F = \langle \log(Z) \rangle_J$, donde $\langle \cdot \rangle_J$ representa el promedio sobre el desorden. Para calcular este promedio utilizamos el truco de las réplicas y las técnicas desarrolladas en el modelo clásico [17]

$$F = \langle \log(Z) \rangle_J = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\log \langle Z^n \rangle_J}{n} \quad (5.25)$$

$$\langle Z^n \rangle_J = \langle Tr_{\sigma^a} e^{(-\sum_{a=1}^n \int_0^\beta H_0^{(a),I}(t) dt)} P e^{(Tr(\frac{\hat{\Omega}}{2}))} \rangle_J \quad (5.26)$$

$$\hat{\Omega}_{i,j} = \sum_a \int_0^\beta \hat{\sigma}_i^{z,(a)}(t) \hat{\sigma}_j^{z,(a)}(t) dt \quad (5.27)$$

Con Tr_{σ^a} representamos el valor esperado (cuántico). Observese que, como parte fundamental del método de las réplicas, consideramos ahora n sistemas idénticos desconectados, cada

uno de ellos etiquetado con un nuevo índice, a. El resultado del promedio sobre el desorden es,

$$\langle Z^n \rangle_J = \langle e^{-\sum_{a=1}^n \int_0^\beta H_0^{(a),I}(t) dt} \text{Pexp}\left(\frac{N}{2} \text{Tr} G\left(\frac{\hat{\Omega}}{N}\right)\right) \rangle \quad (5.28)$$

donde $G(x) = -\frac{1}{2} \log\left(\frac{\sqrt{1+4x^2}+1}{2}\right) + \frac{1}{2} \sqrt{1+4x^2} - \frac{1}{2}$ para el ROM.

La obtención de una energía libre apropiada para el cálculo variacional requiere generalizar las técnicas utilizadas en el caso clásico [17] y de los resultados obtenidos para el caso cuántico en la aproximación de Trotter y Suzuki [136]. Los detalles del cálculo se pueden ver en el Apéndice I.

Utilizando el valor para $\langle Z^n \rangle_J$, obtenido en el *ansatz de réplicas simétricas* (5.17), podemos obtener la energía libre a $T = 0$,

$$f = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{-1 \langle Z^n \rangle_J - 1}{\beta n} = \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dw R(w) \Lambda(-w) - \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dw G(\Lambda(w)) \\ - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \log \text{Tre}^{\int_{-\beta/2}^{\beta/2} \Gamma \hat{\sigma}(t)^z dt} \text{Pexp}\left(\frac{1}{4\pi} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dw R(w) \tilde{\sigma}^x(w) \tilde{\sigma}^x(-w)\right) \quad (5.29)$$

Esta energía libre es la que se espera que describa la fase dominante para valores suficientemente altos del campo transverso. Los multiplicadores se determinan con la condición de que deben dar valores extremales de la energía libre.

$$\frac{\delta f}{\delta \tilde{R}(w)} = 0 \quad \frac{\delta f}{\delta \Lambda(w)} = 0; \quad (5.30)$$

que implican:

$$\Lambda(-w) = \tilde{D}(w) \quad \tilde{R}(w) = G'(\Lambda(w)) \quad (5.31)$$

donde,

$$\tilde{D}(w) = \int_{-\infty}^{\infty} D(t) e^{-iwt} dt \quad D(t-t') = \langle \hat{\sigma}(t) \hat{\sigma}(t') \rangle_{\text{Heff}} \quad (5.32)$$

$$D(t) = \frac{\text{Tre}^{\Gamma \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\sigma}^z(w)} \text{Pexp}\left(\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} R(\tau - \tau') \hat{\sigma}^x(\tau) \hat{\sigma}^x(\tau') d\tau d\tau'\right) \hat{\sigma}^x(t) \hat{\sigma}^x(t')}{\text{Tre}^{\Gamma \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\sigma}^z(w)} \text{Pexp}\left(\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} R(\tau - \tau') \hat{\sigma}^x(\tau) \hat{\sigma}^x(\tau') d\tau d\tau'\right)} \quad (5.33)$$



5.3.2 Análisis y Solución de las Ecuaciones Autoconsistentes.

El método de Miller y Huse se basa en dos pasos esenciales. El primero es expresar los operadores de espín en función de operadores fermiónicos (ver Apéndice II). A partir de estos operadores se puede desarrollar una teoría diagramática (ver Apéndice III) que puede ser analizada de manera mucho más provechosa que la expresada en términos de los operadores de espín. Los diagramas resultantes pueden ser clasificados como simplemente o múltiplemente conexos. El segundo paso consiste en reescribir la función de correlación en función de los términos múltiplemente conexos mediante la ecuación de Dyson [113],

$$\tilde{D}(w) = \frac{\tilde{\Pi}^*(w)}{1 - \tilde{R}(w)\tilde{\Pi}^*(w)} \quad (5.34)$$

Pero, $\tilde{D}(w)$ y $\tilde{R}(w)$ están ligados por las relaciones de consistencia (5.30), $G'(\tilde{D}(w)) = \tilde{R}(w)$ con $G'(x) = \frac{\sqrt{1+4x^2}-1}{2x}$. Notamos que $[G']^{-1}(y) = \frac{y}{1-y^2}$ nos lleva a la siguiente relación entre $\tilde{D}(w)$ y $\tilde{R}(w)$,

$$\tilde{D}(w) = [G']^{-1}(\tilde{R}(w)) = \frac{\tilde{R}(w)}{1 - \tilde{R}(w)^2} \quad (5.35)$$

que, al compararla con la ecuación de Dyson, nos da:

$$\tilde{\Pi}^*(w) = R(w) \quad (5.36)$$

Aquí debemos comentar la singularidad de este resultado al compararlo con lo que Miller y Huse obtenían en el S.K, que sabemos que es válida en general. Mientras que en el S.K., $2R(w) = \frac{1}{\tilde{\Pi}^*(w)} - ((\frac{1}{\tilde{\Pi}^*(w)})^2 - 4)^{1/2}$, implicando que $R(w)$ era una función no analítica para el valor crítico del campo; en el R.O.M., $R(w) = \tilde{\Pi}^*(w)$ y por tanto, la función que define la interacción efectiva es analítica. La razón inmediata de esto es la semejanza funcional entre la fórmula de Dyson y la relación de consistencia (5.35).

Estimación del Comportamiento Crítico.

Como se ha visto en el apartado anterior (5.35)(5.36), la función de correlación y la polarizabilidad irreducible están relacionadas por:

$$D(w) = \frac{\frac{1}{\tilde{\Pi}^*}}{(\frac{1}{\tilde{\Pi}^*})^2 - 1}. \quad (5.37)$$

Donde, $\frac{1}{\Pi^*}$, como en el caso del S.K. se espera que sea una función analítica de la frecuencia para valores suficientemente grandes del campo transversal. Para campos bajos, $D(w)$ tiene la forma,

$$D(w) = \frac{\frac{\Gamma}{s} + \frac{w^2}{4s^2}}{\left(\frac{\Gamma}{s} + \frac{w^2}{4s^2}\right)^2 - 1}. \quad (5.38)$$

En el apartado dedicado al cálculo aproximado de la función de correlación, notaremos que aproximaciones sucesivas tienen el efecto de renormalizar la función de correlación, el valor del espín y del campo transversal, pero no modifican la dependencia funcional de la frecuencia. Consideramos, por tanto, la validez general o, al menos, para frecuencias suficientemente bajas de la ecuación

$$D(w) = \frac{A + Bw^2}{(A + Bw^2)^2 - 1}. \quad (5.39)$$

La condición de normalización a tiempo cero de la función de correlación, $D(0) = s^2$, implica (para $B > 0$ y $A > 1$)

$$\frac{1}{\sqrt{B(A+1)}} + \frac{1}{\sqrt{B(A-1)}} = 4s^2, \quad (5.40)$$

donde la singularidad viene determinada por los valores del campo transversal que hacen que $A = 1$. Es preciso, además, que para que (5.40) tenga solución, $A \sim 1 + \Delta$ y que $B \sim \frac{b_c}{\Delta}$ ($b_c = \frac{1}{16s^4}$), donde $\Delta \rightarrow 0$ cuando $\Gamma \rightarrow \Gamma_c$.

Así, para valores de Γ próximos a Γ_c ($\Delta \ll 1$), encontramos tres regiones en el dominio de frecuencias de comportamiento diferenciado,

$$1 \gg \Delta \gg \frac{b_c w^2}{\Delta}, \quad D(w) \sim \frac{1}{2\Delta} \quad (5.41)$$

$$1 \gg \frac{b_c w^2}{\Delta} \gg \Delta, \quad D(w) \sim \frac{\Delta}{2b_c w^2} \quad (5.42)$$

$$\frac{b_c w^2}{\Delta} \gg 1 \gg \Delta, \quad D(w) \sim \frac{\Delta}{b_c w^2}. \quad (5.43)$$

El tercer régimen podría verse afectado por correcciones importantes a frecuencias altas, pero esto no es importante para la argumentación siguiente. Si las funciones de correlación están apropiadamente normalizadas para todo $\Delta(\Gamma)$,

$$\int_{-\infty}^{\infty} D_{\Delta}(w) dw = 2\pi s^2 \quad (5.44)$$

$$\int_0^{\Gamma} (D_{\Delta_1}(w) - D_{\Delta_2}(w)) dw + \int_{\Gamma}^{\infty} (D_{\Delta_1}(w) - D_{\Delta_2}(w)) dw = 0 \quad (5.45)$$

$$(5.46)$$

Como la segunda integral no contiene ninguna no-analiticidad, podemos suponer que su valor tiende a cero como $\Gamma_1 - \Gamma_2$. Si suponemos, además, $\Delta \sim (\Gamma - \Gamma_c)^{\beta}$ con $\beta > 0$, esto nos lleva a que $\beta = 1$.

Cálculo de la susceptibilidad lineal.

Para calcular la función de correlación usando la ecuación de Dyson, es preciso conocer la polarizabilidad irreducible, $\tilde{\Pi}^*(w)$. La aproximación más simple para esta consiste en tomar $\tilde{\Pi}^*(w) = D^0(w) = G_{S_x}^0(w)$. Para espín arbitrario,

$$D^0(w) = \frac{\Gamma s}{\Gamma^2 + \frac{w^2}{4s^2}}. \quad (5.47)$$

que al introducirla en las expresiones (5.7) y (5.35), nos da,

$$2D(w) = \frac{\Gamma^2 + \frac{w^2}{4s^2}}{\Gamma s} - \left(\left(\frac{\Gamma^2 + \frac{w^2}{4s^2}}{\Gamma s} \right)^2 - 4 \right)^{1/2} \quad (5.48)$$

para el SK y

$$D(w) = \frac{\frac{\Gamma}{s} + \frac{w^2}{4s^2}}{\left(\frac{\Gamma}{s} + \frac{w^2}{4s^2} \right)^2 - 1} \quad (5.49)$$

para el ROM. A partir de la función de Green, podemos obtener el valor de la susceptibilidad, $\chi = D(0)$,

$$\chi^{SK} = \frac{1}{2} \left(\frac{\Gamma}{s} - \left(\left(\frac{\Gamma}{s} \right)^2 - 4 \right)^{1/2} \right) \quad (5.50)$$

$$\chi^{ROM} = \frac{\frac{\Gamma}{s}}{\left(\frac{\Gamma}{s} \right)^2 - 1} \quad (5.51)$$

para el SK y el ROM respectivamente. Las no analiticidades de (5.50) y (5.51) determinan el valor del campo crítico. Es importante notar que, con nuestra aproximación de resumir los términos utilizando la aproximación más sencilla para la polarizabilidad irreducible (llamada R.P.A., random phase approximation) recuperamos el resultado de la aproximación estática [136].

5.4 Cálculo perturbativo de la Temperatura de Transición.

Si bien podemos, mediante argumentos generales, estimar cual es el comportamiento crítico, no resulta posible con estos mismos argumentos conocer el valor de campo crítico. Para calcularlo seguimos el mismo procedimiento que Miller y Huse y que ya ha sido avanzado en la introducción. Empezamos añadiendo un desplazamiento en la energía para garantizar la normalización de la función de correlación, que calculamos aproximando la polarizabilidad irreducible por el propagador en el vacío, $\tilde{D}^0(w)$. Una vez calculada la función de correlación a primer orden, utilizamos esta para calcular una nueva aproximación para la polarizabilidad irreducible y, a partir de ésta, una nueva aproximación de la función de correlación. En este segundo paso, debemos recalculamos el desplazamiento en la energía para que se verifique la condición de normalización.

Cálculo aproximado de la temperatura de transición a primer orden.

Cuando introducimos un valor aproximado para la polarizabilidad en lugar del exacto, la función de correlación ya no verifica la normalización. Para corregirlo, introducimos un desplazamiento del origen de energías $\tilde{R}(w) = \tilde{R}(w) - \lambda$. Este nuevo término modifica las relaciones de recurrencia

$$G'(D(w)) = R(w) - \lambda. \quad (5.52)$$

Esta ecuación junto con la de Dyson, nos da el valor de la función de correlación en términos de la polarización irreducible aproximada.

$$D(w) = \frac{\frac{1}{\tilde{\Pi}^*(w)} - \lambda}{\left(\frac{1}{\tilde{\Pi}^*(w)} - \lambda\right)^2 - 1}. \quad (5.53)$$

La aproximación más sencilla consiste en tomar como aproximación para la polarizabilidad irreducible el propagador libre de la función de correlación (5.47), obteniendo,

$$D^{(1)}(w) = \frac{\frac{\Gamma}{s} - \lambda + \frac{w^2}{4s^3\Gamma}}{\left(\frac{\Gamma}{s} - \lambda + \frac{w^2}{4s^3\Gamma}\right)^2 - 1} \quad (5.54)$$

Utilizando la ecuación (5.118) del Apéndice (IV), podemos obtener los valores de λ y Γ que verifican la normalización. Obtenemos,

$$\Gamma = \frac{4s}{3}(\lambda - 1) \quad (5.55)$$

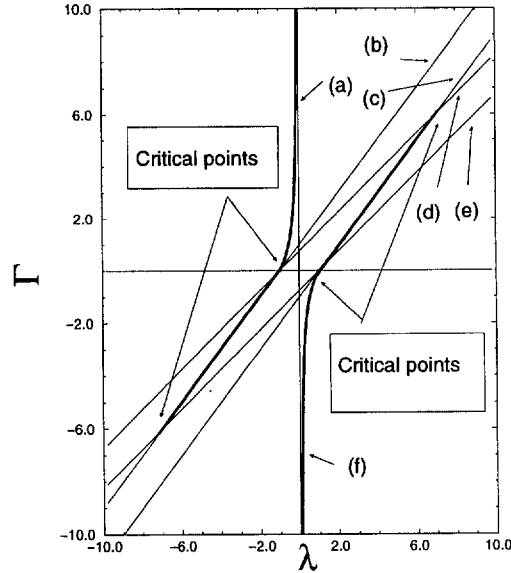


Figura 5.3: Normalización de la función de correlación a primer orden. Caso $s = 1$.

válida para $\frac{\Gamma}{s} - \lambda < 1$. (Representada en la curva (c) de la gráfica 5.3). Utilizando de nuevo 5.118, obtenemos la ecuación

$$\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{s(\lambda-1)}{\Gamma}}} + \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{s(\lambda+1)}{\Gamma}}} = 2 \quad (5.56)$$

para $\frac{\Gamma}{s} - \lambda > 1$. (Representada en la curva (a) de la gráfica 5.3). Los puntos críticos deben verificar la condición $\frac{\Gamma}{s} - \lambda = \pm 1$, (Curva (b) y (d) de la gráfica 5.3, los puntos críticos se encuentran en las intersecciones entre (a), (c) y (b), (d))

Aparecen dos puntos críticos, en $\Gamma_c = 0$ y $\Gamma_c = 8$, que se alcanzan tan solo como valor límite. En el rango $0 - 8$ del campo transversal Γ , encontramos que para cada valor de este existen dos valores de λ . Notar además que las ecuaciones de normalización son invariantes frente al cambio $(\Gamma, \lambda \rightarrow -\Gamma, -\lambda)$, lo que explica la curvas de la curvas (e) y (f) que aparecen en la figura para $\Gamma < 0$ 5.3.

Corrección a segundo orden de la polarizabilidad irreducible. Los diagramas correspondientes a este orden vienen definidos por todos aquellos diagramas multiplemente conexos que contienen una vez el término $R(t, t')$.

$$\Pi(t, t')_1 = \left\langle \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt'_1 R(t_1 - t'_1) \hat{\sigma}^x(t_1) \hat{\sigma}^x(t'_1) \hat{\sigma}^x(t) \hat{\sigma}^x(t) \right\rangle_{H_0} \quad (5.57)$$

Primero evaluamos el promedio

$$\begin{aligned} & \langle P \hat{\sigma}^x(t_1) \hat{\sigma}^x(t'_1) \hat{\sigma}^x(t) \hat{\sigma}^x(t) \rangle_{H_0} = \\ & \frac{1}{2^4} T \langle (\hat{c}_\uparrow^\dagger(t_1) \hat{c}_\downarrow(t_1) + \hat{c}_\downarrow^\dagger(t_1) \hat{c}_\uparrow(t_1)) (\hat{c}_\uparrow^\dagger(t'_1) \hat{c}_\downarrow(t'_1) + \hat{c}_\downarrow^\dagger(t'_1) \hat{c}_\uparrow(t'_1)) \\ & (\hat{c}_\uparrow^\dagger(t) \hat{c}_\downarrow(t) + \hat{c}_\downarrow^\dagger(t) \hat{c}_\uparrow(t)) (\hat{c}_\uparrow^\dagger(t') \hat{c}_\downarrow(t') + \hat{c}_\downarrow^\dagger(t') \hat{c}_\uparrow(t')) \rangle_{H_0} = \end{aligned} \quad (5.58)$$

De todos los sumandos posibles, solo contribuyen aquellos en los que aparece el mismo número de veces el operador de aniquilación y de creación de cada tipo de espín. Es decir, aquellos términos de la forma:

$$\frac{1}{2^4} T \langle (\hat{c}_\uparrow^\dagger(t_1) \hat{c}_\downarrow(t_1) \hat{c}_\uparrow^\dagger(t'_1) \hat{c}_\downarrow(t'_1) \hat{c}_\downarrow^\dagger(t) \hat{c}_\uparrow(t) \hat{c}_\downarrow^\dagger(t') \hat{c}_\uparrow(t')) \rangle_{H_0} = \quad (5.59)$$

Utilizando el teorema de Wick,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2^4} \left(G_\uparrow^0(t - t_1) \tilde{G}_\downarrow^0(t_1 - t) G_\uparrow^0(t' - t'_1) G_\downarrow^0(t'_1 - t') + G_\uparrow^0(t' - t_1) G_\downarrow^0(t_1 - t') G_\uparrow^0(t - t'_1) G_\downarrow^0(t'_1 - t) \right. \\ & \left. - G_\uparrow^0(t - t_1) G_\downarrow^0(t_1 - t') G_\uparrow^0(t' - t'_1) G_\downarrow^0(t'_1 - t) - G_\uparrow^0(t' - t_1) G_\downarrow^0(t_1 - t) G_\uparrow^0(t - t'_1) G_\downarrow^0(t'_1 - t') \right) = \end{aligned}$$

Donde, los dos primeros términos representan diagramas simplemente conexos, mientras que los dos siguientes son multiplemente (doblemente) conexos y son los que debemos considerar para calcular la polarizabilidad irreducible. Notar que el tercer y cuarto términos son idénticos salvo el intercambio de t y t' , por tanto, en el espacio de Fourier son uno el complejo conjugado del otro. Un ejemplo del tipo de diagramas conectados considerados se da en la figura (5.4,b). Para calcular su contribución a la polarizabilidad irreducible 5.57, usamos que $R(w) = \Pi^*(w)$, aproximando el valor de ésta por su valor en ausencia de interacción, $\Pi^*(w) \sim \Pi^{w,0}(w)$

Encontramos en este apartado que los nuevos diagramas contribuyen a la función de correlación con una corrección que es funcionalmente semejante al propagador en el vacío. De esta manera, la polarizabilidad irreducible considerada hasta primer orden, tiene la forma,

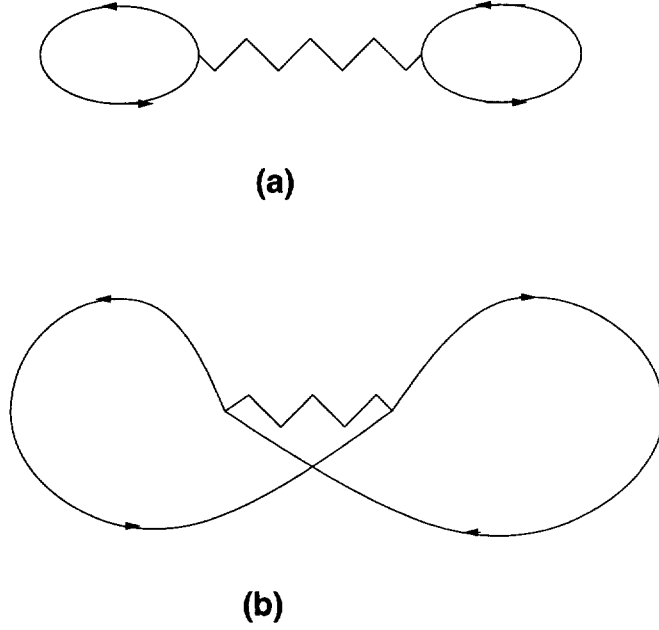


Figura 5.4: (a) Ejemplo de diagrama simplemente conexo, considerado en primer orden. (b) Ejemplo de diagrama múltiplemente conexo considerado en segundo orden.

$$\tilde{\Pi}^*(w) = \tilde{\Pi}_0^*(w) + \tilde{\Pi}_1^*(w) = \frac{\Gamma s}{\Gamma^2 + \frac{w^2}{4s^2}} \left(1 - \frac{1}{2^3 \Gamma^2}\right) = \frac{\tilde{\Gamma} s}{\tilde{\Gamma}^2 + \frac{\tilde{w}^2}{4s^2}} \quad (5.60)$$

$$\tilde{w} = \frac{w}{1 - \frac{1}{2^3 \Gamma^2}} \quad \tilde{\Gamma} = \frac{\Gamma}{1 - \frac{1}{2^3 \Gamma^2}} \quad (5.61)$$

Observamos, que el efecto de añadir un nuevo orden es el de renormalizar el campo transverso y la escala de frecuencias, pero la forma funcional permanece la misma: los argumentos utilizados en el primer orden de aproximación se pueden repetir aquí.

Corrección a Segundo Orden de la Función de Correlación.

Con este valor para la polarizabilidad irreducible y usando (5.53), podemos calcular una nueva aproximación para la función de correlación.

$$D_2(w) = \frac{\frac{\tilde{\Gamma}}{s} - \lambda + \frac{\tilde{w}^2}{4s^3 \Gamma}}{\left(\frac{\tilde{\Gamma}}{s} - \lambda + \frac{\tilde{w}^2}{4s^3 \Gamma}\right)^2 - 1} \quad (5.62)$$

El valor crítico del campo viene determinado por la divergencia a frecuencia cero de la susceptibilidad lineal. $\frac{\tilde{\Gamma}_c}{x} - \lambda = \pm 1$. Unida a la condición de normalización, nos lleva a un

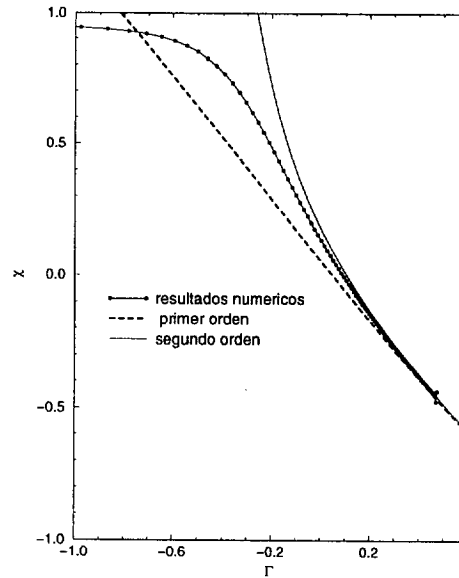


Figura 5.5: Resultados numéricos y analíticos a primer y segundo orden para la susceptibilidad.

valor finito para el campo crítico: $\Gamma_c = 1/2^{3/2}$.

En la figura, se muestran los resultados a primer y segundo orden en la teoría de perturbaciones para la susceptibilidad y los resultados numéricos obtenidos en un sistema de 13 espines. El método numérico utilizado se ha descrito en [118]. Este método numérico ha mostrado ser muy eficiente para el cálculo de la temperatura crítica y los exponentes en el caso del modelo S.K. cuántico, incluso para un número de espines tan pequeño como 13. Consiste en estudiar la ecuación de Schrödinger cuando cambiamos adiabáticamente el campo externo y estudiamos como cambia el estado fundamental y su energía. Con este método también es posible calcular la susceptibilidad lineal. La manera más sencilla es aplicar un campo magnético longitudinal, que conmuta con el Hamiltoniano de interacción, y estudiar como varía la magnetización del estado fundamental en presencia de este campo. Notese que, puesto que no hemos introducido disipación, este método solo es válido a temperatura cero.

5.5 Transiciones de Fase de Primer Orden en el R. O. M.

Hemos mostrado ya la existencia de una transición de fase de segundo orden para un valor del campo transversal distinto de cero. La pregunta es si esta es la transición relevante a bajas temperaturas. La similitud entre el p-espín clásico y el R.O.M. clásico nos lleva a preguntarnos sobre la existencia de una transición de fase de primer orden [124] en el R.O.M. cuántico [126] [127], como de hecho sucede en el p-espín. Aquí conviene precisar a que tipo de transiciones nos referimos. En la literatura de las transiciones de fase en sistemas desordenados se habla frecuentemente de transiciones de fase de primer orden refiriéndose a transiciones en las cuales el parámetro de Edwards-Anderson (E.-A.) cambia de manera discontinua. Sin embargo, esto no implica que esta sea una transición de fase termodinámica de primer orden: puede no haber calor latente en la transición. Esto se debe a que en este tipo de modelos, la fase de baja temperatura viene descrita por una función definida en el soporte $[0, 1]$ en lugar de por un escalar. El parámetro de E.-A. representa el valor de $q(1)$. Se ha encontrado que cambios sustanciales en este parámetro pueden no significar cambio alguno en las variables termodinámicas. Es el segundo tipo de transiciones el que nos interesa en este apartado.

Las dificultades de este cálculo están relacionadas con el hecho de que el método de las réplicas implica que la energía libre efectiva es la de n sistemas acoplados a través de un campo externo. Esto complica el problema variacional.

Empezaremos notando como, en el caso de la fase *réplicas simétricas*, la energía libre se puede calcular de manera muy sencilla a partir de la función de correlación.

Después calcularemos la energía libre para la fase *con ruptura de la simetría de las réplicas a un orden* y las ecuaciones autoconsistentes para determinar los multiplicadores en el límite de $T \rightarrow 0$ y analizaremos los resultados.

Después expondremos algunas ideas para tratar las ecuaciones autoconsistentes. Proponemos una aproximación que haría más tratable el problema y un método para generalizar la aproximación de la polarizabilidad irreducible para el caso en el cual un campo externo está presente, como es el caso en la solución *1pRSR*.

Cálculo de la energía libre en función de la correlación.

Es bien conocido [139] como se puede utilizar la función de correlación calculada en los apartados anteriores para determinar la energía libre. En el caso de sistemas de interacción

de largo alcance, podemos obtener una expresión simplificada

Para su demostración es preciso generalizar un poco el Hamiltoniano de interacción.

$$H_I(\lambda) = \lambda \int_0^\beta dt \int_0^\beta dt' R(t, t') \hat{\sigma}^z(t) \hat{\sigma}^z(t') dt dt' \quad (5.63)$$

Consideramos ahora la expansión perturbativa de la función de correlación y de la energía libre.

$$\beta F_\lambda - \beta F_0 = - \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\lambda^l}{l} P \int_0^\beta dt_1 dt'_1 \dots dt_l dt'_l R(t_1 - t'_1) \dots R(t_l - t'_l) \langle \hat{\sigma}^z(t_1) \hat{\sigma}^z(t'_1) \dots \hat{\sigma}^z(t_l) \hat{\sigma}^z(t'_l) \rangle_{0, con-dif} \quad (5.64)$$

$$P \int_0^\beta dt dt' D(t, t', \lambda) R(t, t') = \sum_{l=0}^{\infty} \lambda^l P \int_0^\beta dt dt' dt_1 dt'_1 \dots dt_l dt'_l R(t, t') R(t_1 - t'_1) \dots R(t_l - t'_l) \langle \hat{\sigma}^z(t) \hat{\sigma}^z(t') \hat{\sigma}^z(t_1) \hat{\sigma}^z(t'_1) \dots \hat{\sigma}^z(t_l) \hat{\sigma}^z(t'_l) \rangle_{0, con-dif} \quad (5.65)$$

donde la etiqueta *con-dif* indica que vamos a sumar sobre los diagramas conectados diferentes.

Comparando ambas expresiones es fácil llegar a que:

$$\beta F_\lambda - \beta F_0 = - \int_0^\lambda d\eta P \int_0^\beta dt dt' D(t, t', \eta) R(t, t') \quad (5.66)$$

donde $D(t, t', \lambda)$, depende de λ a través del Hamiltoniano de interacción.

5.5.1 Energía libre y relaciones de consistencia para la fase 1pRSR.

Partiendo de la función de partición obtenida por el método de las réplicas (5.105) y del *ansatz 1pRSR* podemos calcular la energía libre. Este resultado es consistente con el obtenido en el formalismo de Trotter y Suzuki en [136].

$$F = \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dw \tilde{q}(w) (\tilde{\mu}(-w) + \Lambda) + \frac{1}{2} q (\tilde{\mu}(0) + \Lambda) + \frac{1}{2} \mu \tilde{q}(0) + \frac{\alpha}{2} \mu q \quad (5.67)$$

$$- \frac{1}{2\alpha} G(\tilde{q}(0) + \alpha q) + \frac{1}{2\alpha} G(\tilde{q}(0)) - \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dw G(\tilde{q}(w)) - \frac{1}{\alpha} \log \int dp_x H^\alpha(x) \quad (5.68)$$

$$H(x) = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \left(Tr e^{\beta(\Gamma \hat{\sigma}^z + x \mu^{1/2} \hat{\sigma}^x)} P exp \left(\frac{1}{4\pi} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dw (\tilde{\mu}(w) + \Lambda) \hat{\sigma}^x(w) \hat{\sigma}^x(-w) \right) \right)^{\frac{1}{\beta}} \quad (5.69)$$



Hemos introducido una cantidad Λ para garantizar la correcta normalización de la función de correlación. Se define además el parámetro $\alpha = \beta m$. Notar que en el límite $T \rightarrow 0$, ($\beta \rightarrow \infty$), para que la expresión anterior tenga sentido es preciso que $m \rightarrow 0$. *Este resultado es de gran importancia.* Reservamos su comentario para las conclusiones.

Para determinar los multiplicadores, tomamos la variación de la energía libre con respecto a cada uno de ellos. Tomamos $\frac{\delta F}{\delta \tilde{q}(w)} = 0$,

$$\frac{1}{2\pi}(\tilde{\mu}(-w) + \Lambda) + \mu\delta(w) - \frac{1}{\alpha}G'(\tilde{q}(w) + \alpha q)\delta(w) + \frac{1}{\alpha}G'(\tilde{q}(w))\delta(w) - \frac{1}{2\pi}G'(\tilde{q}(w)) = \text{(5.70)}$$

De la ecuación anterior obtenemos las siguientes:

$$(I) \quad \tilde{\mu}(-w) + \Lambda = G'(\tilde{q}(w)) \quad (w \neq 0) \quad (5.71)$$

$$(II) \quad \mu = \frac{1}{\alpha} \left(G'(\tilde{q}(0) + \alpha q) - G'(\tilde{q}(0)) \right). \quad (5.72)$$

Tomando la variación $\frac{\delta F}{\delta q} = 0$, tenemos

$$(III) \quad \tilde{\mu}(0) + \Lambda = G'(\tilde{q}(0) + \alpha q) - \alpha\mu. \quad (5.73)$$

Tomando la variación de $\frac{\delta F}{\delta \tilde{\mu}(w)} = 0$,

$$\tilde{q}(-w) + 2\pi q\delta(w) = \frac{\int dp_x H^\alpha(x) \tilde{D}(w, x)}{\int dp_x H^\alpha(x)} \quad (5.74)$$

$$\tilde{D}(w) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iw(t-t')} \langle \hat{\sigma}^x(t) \hat{\sigma}^x(t') \rangle dt. \quad (5.75)$$

Debido a que $q \neq 0$, debe aparecer una componente divergente en $\tilde{D}(w) = \delta(w)\tilde{D}^{singular}(x) + \tilde{D}^{regular}(w, x)$. Así, de la ecuación anterior obtenemos dos nuevas ecuaciones:

$$(IV) \quad \tilde{q}(-w) = \frac{\int dp_x H^\alpha(x) \tilde{D}^{regular}(w, x)}{\int dp_x H^\alpha(x)} \quad (w \neq 0) \quad (5.76)$$

$$(V) \quad q = \frac{1}{2\pi} \frac{\int dp_x H^\alpha(x) \tilde{D}^{singular}(x)}{\int dp_x H^\alpha(x)} \quad (5.77)$$

Tomando la variación de $\frac{\delta F}{\delta \mu} = 0$,

$$(VI) \quad \tilde{q}(0) = (\mu)^{-1/2} \frac{\int dp_x x H^\alpha(x) \langle \hat{\sigma}^x \rangle}{\int dp_x H^\alpha(x)} - \alpha q \quad (5.78)$$

Finalmente, tomando $\frac{\delta F}{\delta \alpha} = 0$,

$$(VII) \quad G(\tilde{q}(0) + \alpha q) - G(\tilde{q}(0)) - \alpha q G'(\tilde{q}(0)) + \quad (5.79)$$

$$2 \log \int dp_x H^\alpha(x) - 2\alpha \frac{\int dp_x H^\alpha(x) \log(H(x))}{\int dp_x H^\alpha(x)} = 0 \quad (5.80)$$

El coeficiente Λ se determina imponiendo la correcta normalización de la función de correlación: $q(0) + q = s^2$.

$$(VIII) \quad \frac{1}{2\pi} \int \tilde{q}(w) dw + q = s^2 \quad (5.81)$$

No todas las ecuaciones son independientes, las ecuaciones (III) y (VI), puede demostrarse que son redundantes con las anteriores.

Aproximación para las ecuaciones autoconsistentes para la función de correlación.

A estas ecuaciones debemos añadir la de Dyson. La ecuación de Dyson junto a la ecuación (IV), nos permitía en el caso de réplicas simétricas obtener una expresión de la función de correlación $\tilde{q}(w)$ en función de la polarizabilidad irreducible. *En este caso, debido a la integral sobre dp_x , es imposible obtener la ecuación equivalente a (5.35).* Si queremos ir más lejos, necesitamos recurrir a una aproximación.

Se puede proponer la siguiente aproximación: sustituimos dentro de la ecuación de Dyson la polarizabilidad irreducible por su promedio con respecto a la medida $H^\alpha(x) dp_x$. Esto es:

$$\tilde{D}(w, x) = \frac{\tilde{\Pi}(w, x)}{1 - \tilde{\mu}(w) \tilde{\Pi}(w, x)} \rightarrow \overline{\tilde{D}(w)} = \frac{\overline{\tilde{\Pi}(w)}}{1 - \tilde{\mu}(w) \overline{\tilde{\Pi}(w)}} \quad (5.82)$$

$$\overline{f(x)} = \frac{\int dp_x H^\alpha(x) f(x)}{\int dp_x H^\alpha(x)}. \quad (5.83)$$

En esta aproximación, la ecuación (IV), se convierte en:

$$(IV') \quad \tilde{q}(w) = \overline{\tilde{D}(w)} \quad (5.84)$$

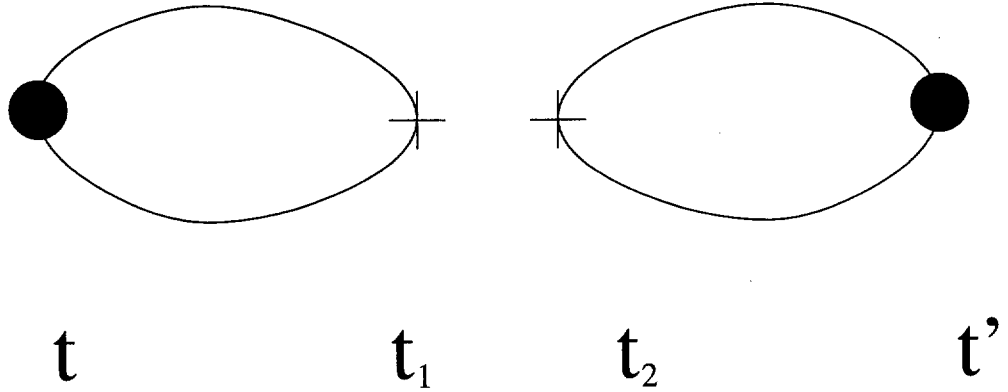


Figura 5.6: Diagramas responsables de la magnetización del sistema.

$\tilde{D}^{regular}(w, x)$ y $\tilde{D}^{singular}(x)$ en primera aproximación.

Como primera aproximación para $\tilde{D}^{regular}(w, x)$ tomamos el correlador:

$$D(t, t')_0 = \frac{Tr e^{\beta(\Gamma\hat{\sigma}^z + x\mu^{1/2}\hat{\sigma}^x)} \hat{\sigma}^x(t) \hat{\sigma}^x(t')}{Tr e^{\beta(\Gamma\hat{\sigma}^z + x\mu^{1/2}\hat{\sigma}^x)}} \quad (5.85)$$

$$\tilde{D}_0(w) = \delta(w) \tilde{D}_0^{singular}(x) + \tilde{D}_0^{regular}(w, x) = \frac{s^2 \lambda^2}{\gamma^2} 2\pi \delta(w) + \frac{s^2}{\gamma^2} \frac{4\Gamma s \gamma}{w^2 + 4\Gamma s^2 \gamma^2} \quad (5.86)$$

El término proporcional a $\delta(w)$, se debe a la aparición de un valor no nulo para la magnetización. Desde el punto de vista de la teoría de perturbaciones se puede ver que proviene de los diagramas en los que t y t' están desconectados, tal y como sucede en el diagrama de la figura 5.6: son estos diagramas y solo estos los que contribuyen de manera proporcional a $\delta(w)$. (Los extremos indicados con un signo +, son los debidos a la interacción con el campo magnético.)

Ecuaciones de Dyson en el caso de encontrar un término singular en el propagador libre.

La ecuación de Dyson en el caso en el cual aparece un término singular en el propagador libre debe ser generalizada pues no es directamente aplicable. Como siempre se considera

tan solo los términos simplemente conexos, dentro de los cuales podemos distinguir dos tipos distintos: unos los de la correlación y otros en los que los tiempos t y t' están desconectados y que nos dan los diagramas de la magnetización. Este segundo tipo de diagramas contribuyen a la función de correlación con un valor proporcional a $\delta(w)$. Teniendo esto en cuenta, las ecuaciones de Dyson para cada una de las componentes se generalizan de la siguiente manera:

$$\tilde{D}^{regular}(w, x) = \frac{\tilde{\Pi}^*(w)}{1 - \mu(w)\tilde{\Pi}^*(w)} \quad (5.87)$$

$$\tilde{D}^{singular}(x) = \left(\int_{-\infty}^{\infty} dw \frac{\tilde{M}^*(w)}{1 - \mu(w)\tilde{\Pi}^*(w)} \right)^2, \quad (5.88)$$

donde $\tilde{M}^*(w)$ es el equivalente a la polarizabilidad irreducible para el caso de la magnetización, que llamaremos *parte irreducible de la magnetización*.

A primer orden de aproximación, tenemos:

$$\tilde{D}_1^{regular}(w, x) = \frac{\tilde{D}_0^*(w)}{1 - \mu(w)\tilde{D}_0^*(w)} \quad (5.89)$$

$$\tilde{D}_1^{singular}(x) = \left(\int_{-\infty}^{\infty} dw \left(\frac{\tilde{M}_0^*(w)}{1 - \mu(w)\tilde{D}_0^*(w)} \right)^2 \right) \quad \tilde{M}_0^*(w) = \tilde{G}_\uparrow^0(w)\tilde{G}_\downarrow^0(-w) \quad (5.90)$$

$$\tilde{G}_a^0(w) = \langle \hat{c}_a^+(t)\hat{c}_a(t') \rangle_{H_{zz}} \quad H_{zx} = -\Gamma\hat{\sigma}^z - x\mu^{1/2}\hat{\sigma}^x \quad a = (\uparrow, \downarrow) \quad (5.91)$$

Notar que la aproximación de orden más bajo para $D_0^{singular}(x) = \left(\int_{-\infty}^{\infty} dw \tilde{G}_\uparrow^0(w)\tilde{G}_\downarrow^0(-w) \right)^2 = \langle \hat{\sigma}^x \rangle_{H_{zx}}^2$.

5.6 Conclusiones

Hemos estudiado un modelo de desorden congelado que ha sido poco estudiado hasta el momento. Este modelo posee interés para el estudio de la transición vítrea.

Utilizando las técnicas para el estudio de sistemas con desorden congelado desarrolladas por Bray y Moore, y Miller y Huse, hemos mostrado la existencia de una transición de segundo orden en la cual diverge la susceptibilidad lineal como $(\Gamma - \Gamma_c)^{-1}$. El valor crítico estimado fluctúa grandemente debido probablemente al cambio de orden de la transición. Es interesante observar que, mientras que se espera que $\frac{d\Gamma_c(T)}{dT} \rightarrow -\infty$, en la aproximación estática su valor está próximo a cero. Así, mientras que la aproximación estática da un valor de $\Gamma_c = 1$, la primera corrección da un valor bien distinto: $\Gamma_c = 0$. Sin embargo, el segundo orden de la teoría de perturbaciones y las simulaciones numéricas nos hacen pensar en que el resultado correcto es $\Gamma_c \neq 0$, aproximadamente $\Gamma_c = \frac{1}{2^{3/2}}$

Hemos notado que la aproximación estática, usada muy frecuentemente en modelos desordenados, coincide con la aproximación R.P.A en la teoría fermiónica equivalente, al menos a efectos del cálculo de la susceptibilidad.

Como hemos mencionado existe la posibilidad de una transición de fase de *primer orden*. Aunque obviamente a temperatura cero el calor latente debe ser cero, esperamos que este comportamiento venga marcado por un cambio no continuo en m (la magnitud que mide el tamaño de los bloques en el procedimiento de *ruptura de la simetría de las réplicas*).

Mostramos que el escalado apropiado en el límite de temperatura cero de las ecuaciones lleva a que $m \rightarrow 0$ con $\alpha = \beta m$ finito. El límite $m \rightarrow 0$ implica que se recupera la simetría de las réplicas para $T \rightarrow 0$. Todavía es preciso probar que existen valores de los multiplicadores que verifican las relaciones de consistencia (I)-(VIII). Es preciso mostrar, además, que la energía de estas fase es *mayor* que la de la solución R.S. Este resultado sería coincidente con el obtenido para el modelo S.K., mediante un modelo efectivo [122].

5.7 Apéndice I: $\langle Z^n \rangle_J$ en el R. O. M.

Siguiendo el mismo procedimiento que en trabajos previos, [105], [109],..., vamos a transformar $\langle Z^n \rangle_J$ dado por 5.28 hasta convertir nuestro problema en el de *una sola partícula*. Comenzamos notando que,

$$Tr\left(\left(\frac{\hat{\Omega}}{N}\right)^k\right) = \frac{1}{N^k} tr\left(\int_0^\beta dt_1 \dots \int_0^\beta dt_k \hat{\Sigma}(t_k, t_1) \hat{\Sigma}(t_1, t_2) \dots \hat{\Sigma}(t_{k-1}, t_k)\right) \quad (5.92)$$

$$\hat{\Sigma}_{a,b}(t, s) = \sum_i \hat{\sigma}_i^{(a),x}(t) \hat{\sigma}_i^{(b),x}(s) \quad (5.93)$$

Y $\hat{\Sigma}(t, s)$ es una matriz de dimensiones $(n \times n)$. A **temperatura distinta de cero** podemos recurrir a expandir Σ en serie de Fourier. Introduciendo $\hat{\Sigma}_{a,b}(t, t') = \sum_{n,m=0}^{\infty} \hat{\Sigma}_{a,b}(\omega_n, \omega_m) e^{i(\omega_n t + \omega_m t')}$ con $\omega_k = \frac{2\pi k}{\beta}$, logramos que,

$$Tr\left(\left(\frac{\hat{\Omega}}{N}\right)^k\right) = tr\left(\left(\frac{\hat{\Sigma}}{N}\right)^k\right) \quad (5.94)$$

donde la traza de $\hat{\Sigma}$ se refiere tanto a la suma sobre los índices de las réplicas como a los de las frecuencias. A **temperatura cero**, las frecuencias que definen nuestra función se convierten en un continuo y vuelven a aparecernos las integrales.

$$Tr\left(\left(\frac{\hat{\Omega}}{N}\right)^k\right) = tr\left(\int_{-\infty}^{\infty} dw_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dw_k \hat{\Sigma}(w_k, w_1) \hat{\Sigma}(w_1, w_2) \dots \hat{\Sigma}(w_{k-1}, w_k)\right) \quad (5.95)$$

Para simplificar esta ecuación hacemos uso explícito de la invariancia translacional del valor esperado de $\hat{\Sigma}(t, t')$. Sustituimos los operadores por sus valores esperados, Λ .

$$e^{\frac{N}{2} Tr\left(\frac{\hat{\Omega}}{N}\right)^k} = P \int \mathcal{D}\Lambda(\tau, \tau') \delta(N\Lambda(\tau, \tau') - \hat{\Sigma}(\tau, \tau')) \quad (5.96)$$

$$\exp\left(\frac{N}{2} tr_a \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta d\tau_k \Lambda(\tau_k, \tau_1) \Lambda(\tau_1, \tau_2) \dots \Lambda(\tau_{k-1}, \tau_k)\right). \quad (5.97)$$

Introduciendo la representación exponencial de la delta Dirac,

$$e^{\frac{N}{2} Tr\left(\frac{\hat{\Omega}}{N}\right)^k} = \int \mathcal{D}\Lambda(\tau, \tau') \mathcal{D}\mathbf{Q}(\tau, \tau') P e^{\int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' \mathbf{Q}(\tau, \tau') (N\Lambda(\tau, \tau') - \hat{\Sigma}(\tau, \tau'))} \quad (5.98)$$

$$\exp\left(\frac{N}{2} tr_a \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta d\tau_k \Lambda(\tau_k, \tau_1) \Lambda(\tau_1, \tau_2) \dots \Lambda(\tau_{k-1}, \tau_k)\right). \quad (5.99)$$

La expresión se puede simplificar usando la transformada de Fourier.

$$e^{\frac{N}{2} \text{Tr}(\frac{\hat{\mathbf{Q}}}{N})^k} = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \int \mathcal{D}\Lambda(w) \mathcal{D}\mathbf{Q}(w) \exp\left(\frac{N\beta}{4\pi} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dw \text{tr}_{\{a\}} \Lambda^k(w)\right) \quad (5.100)$$

$$P \exp\left(\frac{\beta N}{2\pi} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dw \mathbf{Q}(w) \Lambda(-w) - \frac{1}{2\pi} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dw \mathbf{Q}(w) \tilde{\Sigma}(w, -w)\right). \quad (5.101)$$

Y, en general, tendremos,

$$e^{\frac{N}{2} \text{Tr}G(\frac{\hat{\mathbf{Q}}}{N})} = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \int \mathcal{D}\Lambda(w) \mathcal{D}\mathbf{Q}(w) \exp\left(\frac{N\beta}{4\pi} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dw \text{tr}_{\{a\}} G(\Lambda(w))\right) \quad (5.102)$$

$$P \exp\left(\frac{\beta N}{2\pi} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dw \mathbf{Q}(w) \Lambda(-w) - \frac{1}{2\pi} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dw \mathbf{Q}(w) \tilde{\Sigma}(w, -w)\right). \quad (5.103)$$

Y la función de partición de n réplicas promediada sobre el desorden vendrá dada por:

$$\langle Z^n \rangle_J = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \int \mathcal{D}\Lambda(w) \mathcal{D}\mathbf{Q}(w) \exp\left(\frac{N\beta}{4\pi} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dw \text{tr}_{\{a\}} G(\Lambda(w)) - \frac{\beta N}{4\pi} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dw \mathbf{Q}(w) \Lambda(-w)\right) \\ + N \log \text{Tr} e^{\int_{-\beta/2}^{\beta/2} \sum_{a=1}^n \Gamma^{\hat{\sigma}(t)^z} dt} P \exp\left(\frac{1}{4\pi} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dw \sum_{a,b=1}^n Q_{a,b}(w) \tilde{\sigma}(w)^{x,a} \tilde{\sigma}(-w)^{x,b}\right). \quad (5.104)$$

donde hemos reescalado el multiplicador con $\mathbf{Q} \rightarrow \frac{-1}{2}\mathbf{Q}$. A continuación hacemos el ansatz *réplicas simétricas*, $Q_{a,b}(w) = \delta_{a,b} R(w)$, $\Lambda_{a,b}(w) = \delta_{a,b} \Lambda(w)$, para obtener:

$$\langle Z^n \rangle_J = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \int \mathcal{D}\Lambda(w) \mathcal{D}R(w) \exp\left(\frac{Nn\beta}{4\pi} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dw G(\Lambda(w)) - \frac{\beta Nn}{4\pi} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dw R(w) \Lambda(-w)\right) \\ + Nn \log \text{Tr} e^{\int_{-\beta/2}^{\beta/2} \Gamma^{\hat{\sigma}(t)^z} dt} P \exp\left(\frac{1}{4\pi} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dw R(w) \tilde{\sigma}^x(w) \tilde{\sigma}^x(-w)\right) \quad (5.105)$$

5.8 Apéndice II: Paso a variables fermiónicas.

El cambio a variables fermiónicas ([138]) permite aplicar las técnicas de la teoría cuántica de campos. Consiste en:

(1) sustituir los operadores de spin por operadores fermiónicos.

$$\hat{S}_i^z = \frac{1}{2}(\hat{c}_{\uparrow,i}^+ \hat{c}_{\uparrow,i} - \hat{c}_{\downarrow,i}^+ \hat{c}_{\downarrow,i}) \quad \hat{S}_i^x = \frac{1}{2}(\hat{c}_{\uparrow,i}^+ \hat{c}_{\downarrow,i} + \hat{c}_{\downarrow,i}^+ \hat{c}_{\uparrow,i}) \quad \hat{S}_i^y = \frac{i}{2}(\hat{c}_{\downarrow,i}^+ \hat{c}_{\uparrow,i} - \hat{c}_{\uparrow,i}^+ \hat{c}_{\downarrow,i}) \quad (5.106)$$

con las relaciones de conmutación para los operadores fermiónicos,

$$\{\hat{c}_{i,a}^+, \hat{c}_{j,b}\} = \delta_{i,j} \delta_{a,b} \quad \{\hat{c}_{i,a}^+, \hat{c}_{j,b}^+\} = \{\hat{c}_{i,a}, \hat{c}_{j,b}\} = 0 \quad a, b = \uparrow, \downarrow \quad (5.107)$$

donde i , indica la posición sobre la red. Las relaciones definidas anteriormente preservan las propiedades de conmutación de los operadores de spin (\hat{S}_i^z, \hat{S}_i^x y \hat{S}_i^y) y verifican $(\hat{S})^2 = (\hat{S}_i^z)^2 + (\hat{S}_i^x)^2 + (\hat{S}_i^y)^2 = S(S+1)$.

(2) cambio del espacio de estados: pasamos de los autoestados del operador \hat{S}^z , $|\frac{1}{2}\rangle_z, |\frac{-1}{2}\rangle_z$ a los estados $|10\rangle \equiv |1\rangle_\uparrow |0\rangle_\downarrow$ y $|01\rangle \equiv |0\rangle_\uparrow |1\rangle_\downarrow$ ($\langle 01| \equiv \langle 1|_\downarrow \langle 0|_\uparrow$ y $\langle 10| \equiv \langle 0|_\downarrow \langle 1|_\uparrow$). Utilizaremos la notación $Tr_{i\dots} \equiv \langle 01|\dots|10\rangle + \langle 10|\dots|01\rangle$

5.9 Apéndice III: Cálculo de los propagadores libres

En ausencia de perturbaciones, las funciones de Green de nuestro sistema se denominan propagadores libres y vienen dados por:

$$G_\uparrow^0(t-t') = -T\langle \hat{c}_\uparrow(t) \hat{c}_\uparrow^+(t') \rangle_{H_0} \quad (5.108)$$

$$G_\downarrow^0(t-t') = -T\langle \hat{c}_\downarrow(t) \hat{c}_\downarrow^+(t') \rangle_{H_0} \quad (5.109)$$

$$G_{S_x}^0(t-t') = -T\langle \hat{S}_x(t) \hat{S}_x^+(t') \rangle_{H_0} \quad (5.110)$$

donde T representa el operador de ordenación temporal para operadores fermiónicos. Los valores de los dos primeros propagadores son:

$$G_\uparrow^0(\tau) = \begin{cases} \frac{e^{\Gamma_s(-\beta+\tau)}}{e^{\Gamma_s\beta} + e^{-\Gamma_s\beta}}, & \tau > 0 \\ \frac{e^{\Gamma_s(\beta+\tau)}}{e^{\Gamma_s\beta} + e^{-\Gamma_s\beta}}, & \tau < 0 \end{cases} \quad G_\downarrow^0(\tau) = \begin{cases} \frac{e^{\Gamma_s(\beta-\tau)}}{e^{\Gamma_s\beta} + e^{-\Gamma_s\beta}}, & \tau > 0 \\ \frac{e^{\Gamma_s(-\beta+\tau)}}{e^{\Gamma_s\beta} + e^{-\Gamma_s\beta}}, & \tau < 0 \end{cases} \quad (5.111)$$

que en el límite $T=0$,

$$G_\uparrow^0(\tau) = e^{\Gamma_s\tau} \theta(-\tau) \quad G_\downarrow^0(\tau) = -e^{-\Gamma_s\tau} \theta(\tau) \quad (5.112)$$

$$\tilde{G}_\uparrow^0(w) = \frac{1}{\Gamma_s - iw} \quad \tilde{G}_\downarrow^0(w) = \frac{-1}{\Gamma_s + iw} \quad (5.113)$$

utilizando los propagadores así calculados, es posible calcular el propagador para S_x

$$G_{S_x}^0(t-t') = -T\langle \hat{S}_x(t) \hat{S}_x^+(t') \rangle_{H_0} = s^2 T \langle (\hat{c}_\uparrow^+(t) \hat{c}_\downarrow(t) + \hat{c}_\downarrow^+(t) \hat{c}_\uparrow(t)) (\hat{c}_\uparrow^+(t') \hat{c}_\downarrow(t') + \hat{c}_\downarrow^+(t') \hat{c}_\uparrow(t')) \rangle \quad (5.114)$$

utilizando el teorema de Wick, llegamos a que:

$$G_{S_x}^0(t-t') = -s^2(G_{\uparrow}^0(t'-t)G_{\downarrow}^0(t-t') + G_{\downarrow}^0(t'-t)G_{\uparrow}^0(t-t')) = s^2 e^{2s\Gamma|t-t'|} \quad (5.115)$$

$$\tilde{G}(w) = \frac{\Gamma s}{\Gamma^2 + \frac{w^2}{4s^2}} \quad (5.116)$$

Observamos que ambos sumandos son idénticos salvo un cambio de signo en el tiempo. Esto implica que la transformada de Fourier será la compleja conjugada de la otra.

5.10 Apéndice IV. La normalización de la función de correlación.

Como ya se ha dicho, resulta indispensable que la función de correlación este bien normalizada para fijar con precisión la transición de fase. La función de Green a tiempos iguales ha de verificar $D(0) = s^2$ y, su transformada de Fourier,

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} D(w) dw = s^2 \quad (5.117)$$

Nos va a resultar útil estudiar el valor de la integral,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{A + Bw^2}{(A + Bw^2)^2 - 1} dw = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{(A + Bw^2) - 1} + \frac{1}{(A + Bw^2) + 1} \right) dw = \frac{\pi}{2} \left(\frac{\theta((A+1)B)}{\sqrt{(A+1)B}} + \frac{\theta((A-1)B)}{\sqrt{(A-1)B}} \right) \quad (5.118)$$

Donde θ es la función escalón o la función de Heaviside, que es 1 para valores positivos del argumento y cero para los negativos. Dependiendo del signo de B, $(A+1)$ y $(A-1)$, encontramos diferentes ecuaciones para la normalización de la función de correlación.

En el caso $A = 1$, $A = -1$ o $B = 0$, el integrando se comporta como $\frac{1}{w^2}$ para $w \ll 1$ y, por tanto, diverge.

Capítulo 6

Conclusiones y Trabajo Futuro.

Finalmente, presentamos las conclusiones de esta Tesis y discutimos los problemas abiertos.

Puesto que al final de cada capítulo ya hemos discutido las consecuencias de los argumentos presentados, aquí simplemente destacaremos los resultados más importantes.

- En el *capítulo II*, hemos presentado la dinámica de Langevin de un gas de red y analizado la dinámica de equilibrio y de fuera del equilibrio. Se encuentra que la dinámica de equilibrio es semejante a la encontrada en la TAM, salvo que el parámetro de ruptura de la ergodicidad cambia de manera continua.

Con respecto a la dinámica de fuera del equilibrio, se encuentra una relajación en dos pasos, que es muy semejante a la encontrada en equilibrio y fuera del equilibrio para modelos de vidrios estructurales (simulaciones en gases de Lennard-Jones...) y en el p -espín.

El análisis de la distribución de densidades nos muestra una evolución caracterizada por la formación y crecimiento de dominios. Por analogía con el equilibrio, podemos proponer una temperatura de fuera del equilibrio, que muestra un comportamiento muy distinto si la medimos en una escala de longitud más grande o más pequeña que el tamaño típico de los dominios. Si la escala de medida es mucho más grande que el tamaño de los dominios la temperatura efectiva es la de equilibrio, pero cuando la escala de medida es comparable con el tamaño de los dominios, la temperatura efectiva del sistema diverge.

Esta imagen coincide con la obtenida del estudio del parámetro de fluctuación y disipación. Éste vale aproximadamente 1, indicando que el sistema está en equilibrio estacionario con el baño, cuando la escala de tiempos en que se realiza la medida, t , es pequeña comparada con el tiempo que hace que se realizó el enfriamiento, t_w , y se sacó al sistema del equilibrio. Para escalas de tiempo mayores, el parámetro fluctuación y disipación apunta a una temperatura efectiva infinita.

A pesar del trabajo ya realizado sobre este modelo, quedan abiertas numerosas preguntas. Queda por realizar un estudio mucho más cuidadoso de la evolución del sistema a temperaturas próximas a cero, donde hemos mostrado la existencia de un grandísimo número de estados casi estacionarios (sólo son estacionarios a $T = 0$). Cabría estudiar, por ejemplo, dadas las condiciones iniciales apropiadas, el crecimiento de dominios metaestables.

Este modelo, podría utilizarse para analizar el problema del *damage spreading*, donde se estudia la evolución de dos réplicas de un sistema separadas por una cierta distancia en el espacio de las fases, evolucionando bajo la misma realización del ruido. Recientemente se ha encontrado la presencia de una transición dinámica que podría aparecer incluso en ausencia de estados metaestables [88].

La pregunta más importante, es qué tipo de procesos o restricciones son necesarios para que un gas de red muestre un comportamiento dinámico discontinuo tal y como lo presenta la TAM y cuáles son sus consecuencias. Es muy probable que sea necesario introducir algún tipo de restricciones no cuadráticas sobre la dinámica del sistema. Es posible abordar en este modelo el estudio de la dependencia espacial de $X(t, t')$. Éste resultado debería completar nuestra imagen de como se viola en este modelo el TFD.

- En el *capítulo III*, hemos estudiado la dinámica MC de un colectivo de osciladores armónicos. La idea que preside este trabajo es que en determinadas condiciones físicas, la dinámica de fuera del equilibrio, podría estar mejor modelada mediante una dinámica que involucre dos pasos bien diferenciados: selección del cambio de configuración y aceptación o no del cambio. En la dinámica de Langevin, el cambio siempre es aceptado. Para este modelo y a temperatura finita, no se encuentran diferencias importantes entre ambas, pero a temperatura cero encontramos fuertes diferencias. Las más destacables son la aparición de un tiempo de relajación que diverge como $e^{1/T}$

y la aparición de *envejecimiento*. Estas características ya se habían apuntado en un modelo más complicado [21].

La divergencia del tiempo de relajación es un resultado interesante. Normalmente se asocia este comportamiento con la presencia de barreras de energía que deben ser sobrepasadas por activación térmica. Sin embargo, en este modelo, no es ésta la explicación. Esta divergencia del tiempo de relajación está asociado a la presencia de barreras de entropía.

También resulta interesante la presencia de *envejecimiento*. Sirve para corroborar que la sola presencia de barreras de entropía es un mecanismo suficiente para su aparición.

Gracias a la sencillez del modelo, es posible calcular una gran cantidad de observables dinámicos. Encontramos *envejecimiento*, no solo en la función de correlación, sino también en la función respuesta y la magnetización remanente. Este efecto es característico de los sistemas magnéticos [25] (ver introducción).

Quizás, la propiedad más sorprendente de este modelo es que podemos definir de manera consistente una temperatura de fuera del equilibrio. Esto es, podemos definir una temperatura efectiva de fuera del equilibrio a través del ratio de fluctuación y disipación y otra a través de las relaciones termodinámicas entre la temperatura y la energía y ambas coinciden.

Este modelo ya ha despertado alguna atención como modelo de referencia para probar algunas hipótesis sobre la dinámica de fuera del equilibrio [70].

En los últimos años ha habido numerosas ideas sobre el comportamiento de los vidrios y la posibilidad de extender el marco de la termodinámica de fuera del equilibrio. Un aspecto básico es la transferencia de energía entre dos sistemas vítreos [53]. Sería interesante estudiar en este sistema la transferencia de calor entre sistemas fuera del equilibrio, pero que parecen tener definida una temperatura efectiva. Sería interesante, además, ver si es posible generalizar la ley de Fourier a las temperaturas efectivas.

Otra aplicación interesante de estos resultados sería el análisis de distintos algoritmos que se han venido proponiendo para la dinámica en sistemas que relajan lentamente al equilibrio, tales como el *simulated annealing*, *simulated tempering*.

- En el *capítulo IV*, estudiamos nuevamente los efectos de modelar la dinámica de un

sistema mediante dinámica MC. Consideramos un modelo más complejo que el considerado en el capítulo *III*: el modelo de S.K esférico. Éste es una versión notablemente más sencilla que el modelo de SK, que está originalmente definido sobre variables discretas.

Hemos comparado estos resultados con los obtenidos en la dinámica de Langevin. Encontramos que para tiempos largos, ambas dinámicas coinciden, salvo un reescalado del tiempo con la tasa de aceptación. Para tiempos cortos se encuentran regimenes en los cuales esto no es así. La dinámica a temperatura finita esta controlada por la tasa de aceptación. Si esta cantidad es de orden 1, ambas dinámicas coinciden; pero si la aceptación es muy baja, cuando, por ejemplo, escogemos un paso MC muy grande, encontramos un nuevo regimen. Este regimen es distinto de los encontrados en la dinámica Langevin y se caracteriza por un decaimiento a una meseta y, a la vez, *envejecimiento*. Este comportamiento es semejante al encontrado en sistemas con ruptura de la ergodicidad a un orden, donde la dinámica se congela para valores de la correlación por encima de los de equilibrio.

A temperaturas bajas y para tiempos suficientemente largos, la aceptación siempre se hace muy pequeña. En el límite $T \rightarrow 0$, la aceptación tiende a cero y las dinámicas de Langevin y MC, dan resultados completamente distintos, tal y como sucedía en el OA. Encontramos que la energía relaja muy lentamente al equilibrio, como $1/\log(t)$, de manera semejante a lo encontrado en el OA, en el modelo Backgammon o en simulaciones en medios granulares. La función de correlación decae como $\log(t')/\log(t)$. En este resultado el modelo esférico difiere del OA, pero se asemeja a lo obtenido en simulaciones en medios granulares [29]

La extrema lentitud de la relajación nos permite argumentar que la jerarquía de ecuaciones dinámicas encontradas se puede cerrar con una hipótesis adiabática. Tenemos éxito cualitativo en la aproximación, aunque no cuantitativo, puesto que es preciso introducir un valor efectivo de la masa del oscilador.

Para futuros trabajos, sería interesante comprender mejor la aproximación adiabática y en general los métodos que nos permitirían cerrar la jerarquía de ecuaciones para la dinámica. También sería interesante comprender como ampliar estos argumentos a la función de correlación.

Sería también muy interesante utilizar estos métodos para calcular la función repuesta, el parámetro de fluctuación y disipación y otras magnitudes a dos tiempos. A la vista de los resultados del OA, esperamos resultados interesantes.

- En el capítulo V, abordamos el problema de la transición vítrea desde una perspectiva diferente. En este capítulo tratamos un modelo desordenado, el ROM, que a diferencia de lo que sucede con el SK esférico, posee, además, frustración.

Aunque el comportamiento clásico de éste y otros modelos semejantes es bien conocido; la influencia de fluctuaciones cuánticas ha sido escasamente estudiada. Por otra parte, salvo excepciones, las fluctuaciones cuánticas en estos modelos han sido estudiadas siempre en la aproximación estática. Hemos abordado el estudio del ROM más allá de la aproximación estática a $T = 0$. Las técnicas utilizadas en este capítulo son de una relativa complejidad y los resultados solo se pueden considerar como preliminares.

Hemos notado que la aproximación estática, es a efectos de la susceptibilidad, equivalente al orden más bajo para la polarizabilidad irreducible o RPA.

Encontramos la presencia de una transición de segundo orden a $T = 0$ y con $\Gamma_c = 2^{-3/2}$, en la cual la fase con réplicas simétricas se hace inestable y diverge la susceptibilidad ineal.

La presencia de una transición de fase de segundo orden no agota el comportamiento crítico de este modelo. Existe aún la posibilidad de una transición de fase de primer orden semejante a la encontrada en el p-espín con $p \rightarrow \infty$. Hemos formulado las ecuaciones necesarias para el estudio de la energía libre y las hemos analizado. El escalado de la energía muestra que para valores pequeños del campo transversal podría haber una fase RS (réplicas simétricas) distinta de la de alto campo.

Es preciso un análisis completo de las ecuaciones resultantes antes de poder afirmar la existencia de esta transición de primer orden.

Para la comprensión completa de este modelo, queda aún por entender el comportamiento de la transición dinámica a $T = 0$. Dentro de la aproximación estática se ha encontrado que la transición dinámica y estática coinciden en el mismo valor del campo crítico; pero aún no se sabe como puede verse afectado este resultado por las correcciones a la aproximación estática.

Referencias

- [1] C. A. Angell, *Science*, **267**, 1924 (1995).
- [2] G. Adam y J.H.Gibbs, *J. Chem. Phys.* **43**, 1, 139 (1965).
- [3] W. Kauzmann, *Chem. Rev.* **43**, 219 (1948).
- [4] M.L.Williams, R.F.Landel y J.D.Ferry, *J. Am. Chem. Soc.* **77**, 3701 (1955).
- [5] G.P.Johari; *J.Chem.Phys.* **58**, 1766 (1973).
- [6] E. Leutheusser, *Phys. Rev. A* **31**, 939 (1985).
- [7] W. Götze, *Liquid, freezing and the Glass transition*, Les Houches (1989) J. P. Hansen, D. Levesque, J. Zinn-Justin editors, North Holland; W. Götze y L. Sjogren, *Rep. Prog. Phys.* **55**, 241 (1992);
- [8] Resultados recientes cuestionan esta idea: C.Bennemann, C.Donati, J.Baschnagel y S.C.Glotzer; *Nature* **399**, 246 (1999)
- [9] W. Kob, *Phys. Rev. E*, **51**, 5, 4626, (1995); *ibid* **52**, 4, 4134, (1995); M. Nauroth y W. Kob *Phys. Rev. E* **55**, 1, 657, (1997).
- [10] S. Kämmerer, W. Kob y R. Schilling, *Phys. Rev E*, **58**,2, 2131 (1998).
- [11] W. van Meegen y S.M.Underwood; *Phys. Rev. E* **49**,5 (1994).
- [12] T.R.Kirkpatrick y P.G.Wolynes, *Phys. Rev. A* **35**, 7, 3072 (1987).
- [13] T.R.Kirkpatrick y P.G.Wolynes, *Phys. Rev. B* **36**, 16, 8552 (1987)

- [14] M. Mezard, G. Parisi y M.A. Virasoro *Spin Glasses an Beyond*, World Scientific Lecture Notes in Phys Vol. 9 (1993).
- [15] K.H. Fischer y J.A. Hertz *Spin Glasses*, Cambridge University Press (1993).
- [16] S. Sastry, P.G. Debenedetti y F. Stillinger, *Nature* **393**, 554 (1998).
- [17] T.R. Kirkpatrick y D. Thirumalai, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 20, 2091 (1987); *Phys. Rev. B* **36**, 10, 5388 (1987)
- [18] E. Marinari, G. Parisi y F. Ritort, *J. Phys. A (Math. Gen.)* **27** 7615 (1994); *J. Phys. A (Math. Gen.)* **27** 7647 (1994);
- [19] M. Goldstein, *J. Chem. Phys.* **51**, 9, 3728 (1969).
- [20] J. J. Brey y A. Prados, *Physica A*, **197**, 569 (1993); J. J. Brey, A. Prados y M. J. Ruiz-Montero, *J. Non-Cryst. Solids*, **172-174**, 371 (1994); J. J. Brey y A. Prados, *Phys. Rev. E*, **53**, 1, 458 (1996)
- [21] J.P. Bouchaud, *J. Physique I* **4**, 139 (1994); C. Monthus y J.P. Bouchaud, *J. Phys. A*, **29**, 14, 3847 (1996).
- [22] F. Ritort, *Phys. Rev. Lett* **75**, 1190 (1995); S. Franz y F. Ritort, *Europhys. Lett.* **31**, 507 (1995);
- [23] G. H. Fredrickson y H. C. Andersen, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1244 (1984); E. Follana y F. Ritort, *Phys. Rev. B* **54**, 930 (1996).
- [24] I.M. Hodge, *Science*, **267**, 1945 (1995).
- [25] L. Lundgren, P. Svedlindh, P. Norblad y O. Beckman; *Phys. Rev. Lett* **51**, 911 (1983)
- [26] M. Ocio, M. Alba y J. Hammann; *J. Physique Lett. (France)* **46**, L-1101 (1985); M. Alba, M. Ocio y J. Hammann; *Europhys. Lett.* **2**, 45 (1986).
- [27] A. J. Bray, *Adv. Phys.* **43**, 357 (1994)
- [28] M. Kroon, G.H. Wegdam y R. Sprik; *Phys. Rev. E* **54**, 1 (1996).

- [29] W. Kob y J.L.Barrat Phys. Rev. Lett. **78**, 24, 4581 (1997).
- [30] M.Nicodemi y A.Coniglio; Phys. Rev. Lett **82**, 5, 916 (1999).
- [31] S. Ciuchi y F. de Pasquale, Nul. Phys. B **300** 31 (1988)
- [32] L. F. Cugliandolo y D. S. Dean, J. Phys. A (Math. Gen.) **28**, 4213 (1995);
- [33] A. Crisanti,H. Horner y H.-J.Sommers, Z. Phys. B **92**, 257 (1993).
- [34] L. F. Cugliandolo y J. Kurchan, Phys. Rev. Lett. **71** 173 (1993); J. Phys. A (Math. Gen.) **27** 5649 (1994);
- [35] A. Prados, J.J.Brey y B.Sánchez-Rey, Europhys. Lett. **40**, 1, 13 (1997).
- [36] *Tunneling Systems in Amorphous and Crystalline Solids*, ed. P. Esquinazi, Springer-Verlag, Berlin y Heidelberg (1998).
- [37] P.W.Anderson, B.Halperin y S. Varma, Phil. Mag. **25**,1 (1972); Phillips, J. Low. Temp. Phys., **7**, 351 (1972).
- [38] R. Kühn, en los *Proceedings of the XV Sitges Conference, Junio 1996*, ed. J.M.Rubí y C. Pérez-Vicente, Springer, Berlin (1997).
- [39] H. Rieger, Annual Reviews of Computational Physics II, p.295 (World Scientific, Singapore 1995); J. P. Bouchaud, L. F. Cugliandolo, J. Kurchan y M. Mezard, Phys. A **226**, 3-4, 243 (1996).
- [40] J. P. Bouchaud y M. Mezard, J. Physique I (Paris) **4**, 1109 (1994);
- [41] J. L. Lebowitz y J. K. Percus, Phys. Rev. **144**, 251 (1966).
- [42] J. Zinn-Justin. *Quantum field theory and critical phenomena*. Oxford. Claredon Press, 1989, chap. 3.
- [43] Th. M. Nieuwenhuizen, Phys. Rev. Lett. **74** 4293 (1995).
- [44] S. Franz y M. Mézard, Europhys. Lett. **26**, 209 (1994); Physica **A210**, 48 (1994).
- [45] T. H. Berlin y M. Kac, Phys. Rev. **86**, 821 (1952).

- [46] J. M. Kosterlitz, D. J. Thoules y R. C. Jones; Phys. Rev. Lett. **36** 1217 (1976).
- [47] Observese que difiere en un factor T de la definición habitual de la función respuesta.
- [48] Hemos definido este k_{max} como el valor de k en el cual la temperatura efectiva es 10% más grande que el valor promedio en la zona plana.
- [49] W. Götze, J. Stat. Phys. **83**, 1183 (1996).
- [50] S. Franz y F. Ritort, J. Phys. A (Math. Gen.) **30** L359 (1997).
- [51] A. Barrat, R. Burioni y M. Mezard, J. Phys. A (Math. Gen.) **29**, 1311 (1996); A. Barrat, Ph. D. Thesis (Universite Paris VI), 1996.
- [52] L.F.Cugliandolo, J.Kurchan y L.Peliti; Phys. Rev. E **55**, 4, 3898 (1997)
- [53] E.Marinari, G.Parisi,F.Ricci-Tersenghi y J.J. Ruiz-Lorenzo; J. Phys. A: Math and Gen. **31**, 2611 (1998).
- [54] G.Parisi,F.Ricci-Tersenghi y J.J. Ruiz-Lorenzo; cond-mat/9903095.
- [55] L.Berthier, J.L.Barrat y J.Kurchan; cond-mat/9903091 (1999).
- [56] J.Kurchan, L.Peliti y M.Sellitto; Europhys. Lett. **39**,4, 365 (1997). M. Sellitto, Europ. Phys. J. B **4** , 2, 135 (1998).
- [57] E. Vincent, J. Hammann y M. Ocio, en *Recent progress in Random Magnets*, ed. D. H. Ryan (Singapore: World Scientific) (1992), y las referencias allí citadas;L. C. E. Struik, *Physical aging in amorphous polymers and other materials* (Elsevier, Houston, 1978)
- [58] S. Franz y M. Mézard, Europhys. Lett. **26** 209 (1994); Physica A **209** 1 (1994);
- [59] A. Barrat y M. Mezard, J. Physique I (France) **5** (1995) 941.
- [60] P.C.Martin, E.D.Siggia y H.A.Rose; Phys. Rev A **8**, 423 (1973).
- [61] N. G. Van Kampen, *Stochastical Process in Physics and Chemistry* North Holland (1981);
- [62] S. Franz y M. Mézard, Physica A **210** 48 1994;



- [63] Estos resultados se pueden obtener para la dinámica Langevin, S. Franz y F. Ritort (unpublished)
- [64] J. W. Evans, Rev. Mod. Phys. **65**, 1281 (1993).
- [65] E. Caglioti, V. Loreto, H. J. Herrmann y M. Nicodemi, Phys. Rev. Lett. **79**, 8 (1997).
- [66] Th. M. Nieuwenhuizen, Phys. Rev. Lett. **80** 5580 (1998); Phys. Rev. E (enviado) y Preprint cond-mat/**9907161**
- [67] C. Godrèche y J. M. Luck, J. Phys. A (Math. Gen.) **29** 1915 (1996); ibid **30**, 18, 6245 (1997).
- [68] M. L. Mehta, *Random Matrices and the Statistical theory of Energy levels* (Academic, New York, 1967)
- [69] La dinámica M.C. crítica da los mismos resultados que la dinámica Langevin.
- [70] E. Gardner, Nucl. Phys. **B257** (1985) 747.
- [71] D. J. Gross, I. Kanter y H. Sompolinsky, Phys. Rev. Lett. **55** (1985) 304;
- [72] H. Rieger, J. Phys. A (Math. Gen.) (1993) L615 .
- [73] L. F. Cugliandolo, J. Kurchan y F. Ritort, Phys. Rev. **B49** (1994) 6331
- [74] J. Bernasconi, J. Physique **48** 559.
- [75] L. F. Cugliandolo, J. Kurchan, G. Parisi y F. Ritort, Phys. Rev. Lett. **74** 1012 (1995).
- [76] E. Marinari, G. Parisi y F. Ritort J. Phys A: Math. and Gen. **28**, 327 (1995).
- [77] A. Crisanti y H.-J. Sommers, J. Physique I **5**, 7, 806 (1995).
- [78] W. Krauth y M. Mezard, Zeit. fur Phys B **97**, 1, 127 (1995); W. Krauth y O. Pluchery, J. Phys. A (Math. Gen.) **27** (1994) L715.
- [79] G. Migliorini y F. Ritort, J. Phys. A (Math. Gen.) **27** (1994) 7669 .

- [80] A.C.C. Coolen y D. Sherrington, Phys. Rev. E **49** 1921 (1994); J. Phys. A **27**, 7687 (1994); S.N.Laughton, A.A.C. Coolen y D. Sherrington, J. Phys. A **29**, 763 (1996)
- [81] M. Heerema y F. Ritort, J. Phys A **31**, 42, 8423 (1998).
- [82] M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **56**,5, 1455, (1976).
- [83] H. F. Trotter, Proc. Am. Math. Soc. **10**, 545 (1959).
- [84] J. Hertz, Phys. Rev. B, **14**, 3, 1165, (1976).
- [85] D. Belitz y T. R. Kirkpatrick, Rev. Mod. Phys., **66**, 261, (1994).
- [86] A. D. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
- [87] B. K. Chakrabarti, A. Dutta y Parongama Sen, *Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Models.*, Lectures Notes in Physics M41, Springer Verlag, Heidelberg (1996).
- [88] G.A. Samara y H. Terauchi, Phys. Rev. Lett. **59**, 3, 347 (1987).
- [89] R. B. Griffiths, Phys. Rev Lett. **23**, 383 (1969)
- [90] B. M. McCoy, Phys. Rev. Lett. **23**, 383 (1969); Phys. Rev. Lett. **188**, 1014 (1969).
- [91] D. S. Fisher, Phys. Rev Lett. **69**, 534 (1992); Phys. Rev. B **51**, 6411 (1995).
- [92] H. Rieger y P. Young, Phys. Rev. Lett. **72**,26, 4141 (1994).
4137 (1994).
- [93] T. Senthil y S. N. Majumdar, Phys. Rev. Lett., **76**, 16 3001 (1996).
- [94] D. Sherrington y S. Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett. **35**, 26, 1792 (1975); S. Kirkpatrick y D. Sherrington Phys. Rev. B **17**, 11, 4384 (1978).
- [95] G. Parisi J.Phys A, **13**, L115, (1980); J.Phys A, **13**, 1101, (1980); J.Phys A, **13**, 1887, (1980).
- [96] H. Ishii, T. Yamamoto, J. Phys. C **18** 6225 (1985); T. Yamamoto, H. Ishii, J. Phys. C **20** 6053 (1987).



- [97] A. J. Bray, M. A. Moore, J. Phys. C **13** L655 (1985).
- [98] T. K. Kopec, J. Phys. C, **21** 6053 (1988).
- [99] Gerald D. Mahan, *Many-Particle Physics*. New York. Plenum Press 1990 (Second Edition).
- [100] Alexander L. Fetter, John D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. McGraw-Hill 1971.
- [101] D. Thirumali, Quiang Li y T. R. Kirkpatrick, J. Phys. A **22**, 3339 (1989).
- [102] J. Miller y D. A. Huse, Phys. Rev Lett., **70**, 20, (1993).
- [103] J.V.Álvarez y F.Ritort, J.Phys.A **29** 7355 (1996).
- [104] D.Lancaster y F.Ritort, J.Phys A **30** L41 (1997).
- [105] P.Sen, P. Ray y B.K.Chakrabarti, Preprint cond-mat/9705297 (1997).
- [106] M.Rozemberg y D.R.Grepel, Phys. Rev. Lett. **81**, 12, 2550 (1998).
- [107] N. Read, S. Sachdev y J. Ye, Phys. Rev. B **52**,1, 384, (1995); J. Ye, S. Sachdev y N. Read, Phys. Rev. Lett. **70**, 4011 (1993).
- [108] Y. Y. Goldschmidt, Phys. Rev. B, **41**, 4858, (1990).
- [109] V. Dobrosavljević y D. Thirumalai, J. Phys. A, **23** L767-L774 (1990).
- [110] L. De Cesare, K. Lukierska-Walasek, I. Rabuffo y K. Walasek, J. Phys. A, **29** 1605 (1996)
- [111] Th. M. Nieuwenhuizen y F. Ritort, Physica A **240**, 8, (1998).
- [112] G. Cwilich y T. R. Kirkpatrick, J. Phys. A **22** 4971 (1989).
- [113] G. Parisi y M. Potters, J. Phys. A: Math. and Gen. **28** 5267 (1995).
- [114] D. J Thoules, P. W. Anderson y R. G. Palmer, Phil. Mag. **35**, 593, (1977)
- [115] C. Itzykson y J. -B. Zuber, J. Math. Phys. **21**, 411 (1980).

- [116] E.Brezin, C. Itzykson, G.Parisi y J.-B. Zuber, *J. Math. Phys.* **59**, 35, (1978).
- [117] F. Ritort, *Phys. Rev. B*, **55**, 21, (1997).
- [118] F.G.Padilla y F.Ritort, sin publicar.
- [119] Alexei M. Tsvelik. *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics*. Cambridge. Cambridge University Press, 1995, ch 15.
- [120] A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov,I.E. Dzyaloshinski. *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics..* New York. Dover 1963
- [121] L.F.Cugliandolo y G.Lozano, *Phys. Rev. Lett*, **80**, 22, 4979 (1998); *Phys. Rev. B* **59**, 2, 915 (1999).
- [122] L. L. Bonilla, F. G. Padilla, G. Parisi y F. Ritort, *Eur. Phys. Lett.* **34**, 3, 159 (1996).
- [123] L. L. Bonilla, F. G. Padilla, G. Parisi y F. Ritort, *Phys. Rev. B* **54**, 6, 4170 (1996).
- [124] F. G. Padilla y F. Ritort, *J of Phys A* **30**, 20, 7089, (1997).
- [125] L. L. Bonilla, F. G. Padilla y F. Ritort, *Physica A* **250**, 1-4, 315 (1998).