

Máster Fisymat  
Modelos físico-matemáticos de la actividad  
neuronal

Joaquín J. Torres

**Programa**

- Modelos de “Vidrios de Espines” y difusión de iones magéticos
- Memoria asociativa: Modelo de Hopfield
- Redes neuronales fuera del equilibrio
- Modelos de conductancia: Hodgkin-Huxley
- Reducción del modelo de Hodgkin-Huxley: El modelo de FitzHugh-Nagumo
- El modelo de integración y disparo y su reducción a neuronas binarias
- Modelos biofísicos de transmisión sináptica: depresión y facilitación sinápticas
- Dinámicas de calcio
- Redes complejas en neurociencia

# 1. Modelos de vidrios de espines y difusión de iones magnéticos

## 1.1. Introducción

Ciertos materiales como las soluciones diluidas de impurezas magnéticas en metales nobles, por ejemplo el CuMn, son un caso típico en el que el estado a temperaturas bajas difiere del que presentan los materiales *ferromagnéticos* y *antiferromagnéticos*:

- No presentan correlaciones de largo alcance ferromagnéticas ( $m \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{x}} s_x = 0$ ), ni antiferromagnéticas ( $M_{\mathbf{K}} \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}} m_{\mathbf{x}} = 0$ ), aunque si presentan magnetización espontánea local,  $m_{\mathbf{x}} \neq 0$ . Experimentalmente, esto se manifiesta en que la susceptibilidad medida es menor que la que debería haber cuando  $m_{\mathbf{x}} = 0$ .
- En experimentos de *scattering* de neutrones, no se observan picos de *Bragg* que indicarían la presencia de orden *antiferromagnético*.

Dichos materiales con este comportamiento extraño, reciben el nombre de *vidrios de espines*. Desde un punto de vista microscópico, este comportamiento macroscópico puede interpretarse de la siguiente forma:

- Supongamos que las impurezas se encuentran distribuidas espacialmente de forma aleatoria en el material.
- Cada uno de estos espines interactúa con el resto mediante un término de intercambio  $J_{\mathbf{xy}} \equiv J(r_{\mathbf{xy}})$ , con  $r_{\mathbf{xy}} \equiv |\mathbf{x} - \mathbf{y}|$ . Esta interacción tiene un comportamiento ondulatorio y decrece con la distancia en la forma

$$J(r_{\mathbf{xy}}) \propto \frac{\cos(2k_F r_{\mathbf{xy}})}{r_{\mathbf{xy}}^3}, \quad k_F r_{\mathbf{xy}} \gg 1. \quad (1)$$

- Suponiendo que las impurezas magnéticas no se difunden por el metal, el que tengamos espines en posiciones aleatorias hace que  $J_{\mathbf{xy}}$  pueda ser positiva o negativa dependiendo de su posición con respecto a las demás, adquiriendo el sistema una distribución espacial aleatoria de interacciones magnéticas positivas o negativas. Esto provoca que haya configuraciones de espines que no puedan satisfacer todas las interacciones y, por lo tanto, no se consiga el estado de mínima energía. A este hecho se le llama *frustración estática*.

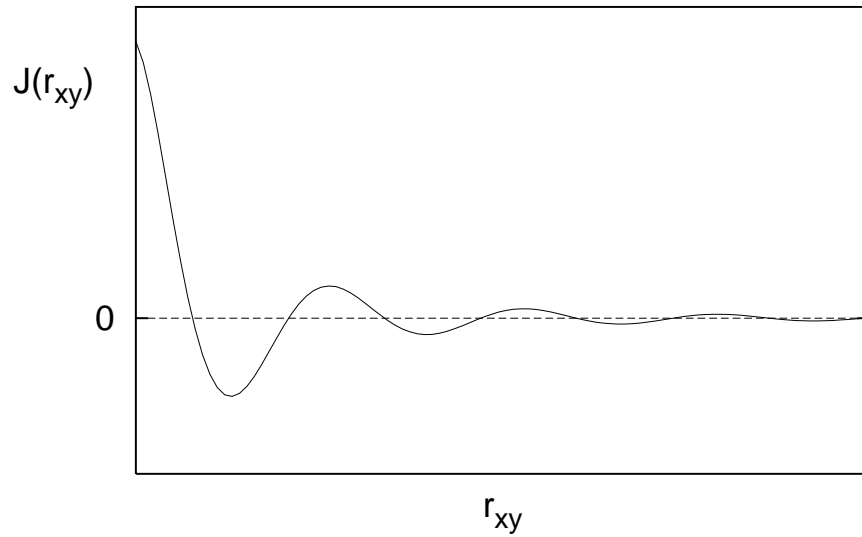


Figura 1: Interacción de intercambio  $J_{xy}$  como función de la distancia entre espines.

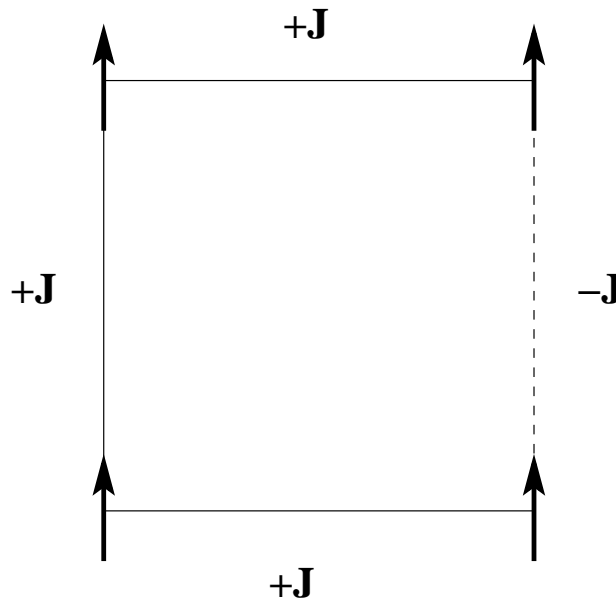


Figura 2: La figura muestra un dominio de espines frustrado. La interacción de la derecha no puede ser satisfecha al ser de tipo antiferromagnética y estar los dos espines en posición paralela.

- La existencia de estos dominios frustrados, distribuidos al azar por el metal, podría explicar la no presencia de orden de largo alcance como

el que se observa incluso a temperaturas muy bajas.

- A parte de soluciones metálicas con impurezas magnéticas, existen otros sistemas que presentan comportamiento *vidrio de espines*, como las mezclas ferroeléctricas-antiferroeléctricas, en las que el momento dipolar eléctrico haría el papel de espín, y ciertos cristales moleculares desordenados, en los que el papel del espín lo haría el momento cuadrupolar eléctrico.

## 1.2. Interacción RKKY

- En una mezcla de impurezas metálicas con metales nobles (CuMn) la interacción entre los momentos magnéticos de las impurezas (Mn) se produce porque cada una de ellas polariza el nivel de Fermi de los electrones de conducción del metal (Cu).
- En el marco de la teoría de apantallamiento de *Lindhard*, [1] para un espín sencillo, dicha polarización varía en la forma:

$$\langle \mathbf{s}_{\mathbf{x}}(\mathbf{r}) \rangle = \sum_{\mathbf{q}} \chi_0(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{x})} \mathbf{s}_{\mathbf{x}} \quad (2)$$

alrededor de las impureza en  $\mathbf{x}$ .

- $\chi_0(\mathbf{q})$  es la susceptibilidad ( $\partial m_{\mathbf{x}} / \partial h_{\mathbf{x}}$ ) del gas de electrones de conducción,

$$\chi_0(\mathbf{q}) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \quad (3)$$

donde

$$f_{\mathbf{k}} = \frac{1}{1 + e^{\beta(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - \mu)}}, \quad (4)$$

es la función de Fermi y  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  es la energía de banda de un electrón de momento  $\mathbf{k}$ .

- En aproximación de electrones libres, se tiene para ( $r \rightarrow \infty$ ):

$$\chi_0(r) \propto \frac{\cos(2k_F r)}{r^3}, \quad (5)$$

donde  $\chi_0(r)$  es la transformada de Fourier de  $\chi_0(q)$ .

- De forma efectiva, la interacción entre momentos magnéticos de espín de las impurezas es debida a esta polarización y posee este comportamiento, es decir,

$$J_{\mathbf{x},\mathbf{y}}(r) = J \frac{\cos(2k_F r + \phi)}{r^3}, \quad r \rightarrow \infty. \quad (6)$$

Aquí,  $J$  y  $\phi$  son característicos de la mezcla magnética.

- Esta interacción fue estudiada por *Ruderman y Kittel* (1954) [2] y posteriormente por *Kasuya* (1956) [3] y *Yosida* (1957), [4] y es conocida como la interacción RKKY (*vidrios RKKY*).

- Las oscilaciones de  $J_{\mathbf{xy}}$  son las responsables de la competencia de interacciones en los *vidrios de espines*, y la aleatoriedad en las posiciones de las impurezas da el carácter de interacciones aleatorias típico de los *vidrios de espines*.

### 1.3. Promedios en sistemas desordenados

- Basados en las dos propiedades anteriores, competencia de interacciones y aleatoriedad de las mismas, en la últimas décadas se han desarrollado multitud de modelos físico-matemáticos para entender el comportamiento *vidrio de espin*.
- Aquí estamos interesados en modelos mecánico-estadísticos. Éstos definen un *vidrio de espines* como un sistema de  $N$  espines localizados en los nudos de una red  $d$ -dimensional  $\Lambda$ , interactuando mediante  $J_{\mathbf{xy}}$  (aleatorias) y rodeados de un baño térmico a temperatura  $T$ .
- La aleatoriedad introduce problemas teóricos en el marco de la Mecánica Estadística, incluso en el caso de equilibrio. No podemos considerar un hamiltoniano concreto  $H_{\mathbf{J}}(\mathbf{s})$  con una configuración concreta de  $\mathbf{J}$ 's y de  $\mathbf{s}$ 's, puesto que no existe configuración única que minimice la energía a  $T = 0$ . Debemos considerar un conjunto de hamiltonianos, cada uno de los cuales constituye una muestra particular o *réplica* de nuestro sistema físico.
- En sistemas macroscópicos ( $N \rightarrow \infty$ ), el promedio estadístico nos ayuda a solucionar este problema pues las fluctuaciones relativas de la energía entorno a su valor medio son  $O(N^{-1/2})$ . Sería conveniente que las fluctuaciones en la energía, debidas a la posibilidad de tener diferentes réplicas, también fuesen nulas en  $N \rightarrow \infty$ . Cuando ocurre esto se dice que la energía del sistema (u otra magnitud extensiva que fluctúa) *auto-promedia* (permiten derivaciones teóricas de ese valor medio)
- En Mecánica Estadística de sistemas aleatorios podemos distinguir dos tipos de promedios:
  - Promedio térmico, que se realiza sobre cada muestra macroscópica del sistema.
  - Promedio sobre la distribución de parámetros aleatorios (desorden) que caracteriza cada sistema. En el caso de los *vidrios de espines* estos parámetros son las interacciones  $J_{\mathbf{xy}}$ . Este último promedio lo denotamos por  $\langle\langle \cdot \rangle\rangle$  que puede llevarse a cabo de dos formas diferentes, dependiendo de la naturaleza de la interacción de intercambio  $J_{\mathbf{xy}}$ .
- Las cantidades físicas que queremos promediar se expresan en términos de derivadas de la energía libre con respecto a campos auxiliares. El cálculo de la energía libre involucra promediar sobre la distribución

de los parámetros aleatorios. Este promedio sobre el desorden puede llevarse a cabo de dos formas diferentes, dependiendo de la naturaleza de la interacción de intercambio  $J_{\mathbf{x}\mathbf{y}}$ :

- Si las  $J_{\mathbf{x}\mathbf{y}}$  varían muy rápidamente, comparado con el tiempo de observación, pueden ser consideradas como variables termodinámicas, tratadas de igual forma que los espines, de forma que la función de partición sería:

$$Z_a = \langle\langle Z_{\mathbf{J}} \rangle\rangle \equiv \int d\mathbf{J} \sum_{\mathbf{s}} P(\mathbf{J}) e^{-\beta H_{\mathbf{J}}(\mathbf{s})} \quad (7)$$

y la energía libre del sistema sería

$$F_a = -K_B T \ln Z_a. \quad (8)$$

Las variables interacciones están en equilibrio con las variables espines, y ambas tienen la libertad de tomar cualquier valor que tienda a minimizar  $H_{\mathbf{J}}(\mathbf{s})$ . Este promedio recibe el nombre de *promedio de recocido*.

- Esto no ocurre en los *vidrios de espines*, en los que las  $\mathbf{J}$ 's están fijas para cada muestra macroscópica del sistema. Los espines pueden variar en respuesta a esas interacciones, pero no al revés. Se dice entonces que las  $\mathbf{J}$ 's son variables *fijas*. En este caso se promedian cantidades macroscópicas como la energía libre sobre la distribución de parámetros aleatorios:

$$F_q = \langle\langle F_{\mathbf{J}} \rangle\rangle = -K_B T \langle\langle \ln Z_{\mathbf{J}} \rangle\rangle. \quad (9)$$

Sin embargo, desde un punto de vista matemático, el promediar la energía libre es mucho más difícil que promediar la función de partición. Para solucionar esto se utiliza la técnica de réplicas.[10]

- Otro problema que tenemos en los *vidrios de espines* es el problema de la *ergodicidad*. Los *vidrios de espines* son sistemas no ergódicos por la existencia de un gran número de estados fundamentales degenerados que no están relacionados unos con otros a través de una simetría sencilla.



## 1.4. Modelo de Edwards-Anderson

Incluso con los métodos más potentes de la Mecánica Estadística, es difícil estudiar modelos realistas de materiales magnéticos aleatorios, excepto cuando hacemos simulación numérica.

Edwards y Anderson [5] propusieron un modelo simplificado de *vidrio de espines* de equilibrio, una de cuyas versiones, al menos, puede resolverse exactamente.

- Sea un conjunto de  $N$  espines en un red  $\Lambda$ , con energía configuracional

$$H(\mathbf{J}, \mathbf{s}) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} J_{\mathbf{xy}} s_{\mathbf{x}} s_{\mathbf{y}} - h \sum_{\mathbf{x}} s_{\mathbf{x}} \quad (10)$$

donde las interacciones  $J_{\mathbf{xy}}$  son variables aleatorias independientes distribuidas espacialmente por la red, por ejemplo distribución  $P(\mathbf{J})$ , que puede ser gaussiana:

$$P(\mathbf{J}) = \prod_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{\mathbf{J}}^2}} e^{-\frac{(J_{\mathbf{xy}} - \bar{J}_{\mathbf{xy}})^2}{2\sigma_{\mathbf{J}}^2}} \right\} \quad (11)$$

Si  $\bar{J}_{\mathbf{xy}} = J_0$ ,  $\forall(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ , independiente de la distancia entre espines, tenemos el modelo SK, [10] o modelo de *vidrio de espines* de rango infinito, que puede resolverse. Se calcula la energía libre del sistema en la forma

$$F = -k_B T \langle \langle \ln Z \rangle \rangle \quad (12)$$

utilizando la técnica de réplicas. Consiste en hacer la aproximación

$$\ln Z = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z^n - 1}{n}$$

y promediar sobre el desorden  $Z^n$  (Ejercicio). Para  $T \rightarrow 0$ , en el contexto de simetría de réplicas, se encuentra un cambio de fase desde una fase *ferromagnética* a una fase *vidriosa*. El parámetro de orden que caracteriza la fase *vidriosa* es

$$q = \langle \langle s_{\mathbf{x}} \rangle^2 \rangle, \quad (13)$$

y el orden ferromagnético viene dado por el parámetro

$$m = \langle \langle s_{\mathbf{x}} \rangle \rangle. \quad (14)$$

- En el límite termodinámico ( $N \rightarrow \infty$ ), usando el método del punto de silla se puede evaluar la energía libre por espín obteniendo

$$f = kT \left( (\tilde{J}_0 m^2 / 2kT) - [\tilde{J}^2 (1 - q)^2 / 4(kT)^2] - (2\pi)^{-1/2} \int dz \exp(-\frac{1}{2}z^2) \ln(2 \cosh \Xi) \right) \quad (15)$$

con  $\Xi = \tilde{J}_0 m + \tilde{J} q^{1/2} z + h$ , y

$$\begin{aligned} m &= \int dz (2\pi)^{-1/2} \exp(-\frac{1}{2}z^2) \tanh \Xi, \\ q &= \int dz (2\pi)^{-1/2} \exp(-\frac{1}{2}z^2) \tanh^2 \Xi. \end{aligned} \quad (16)$$

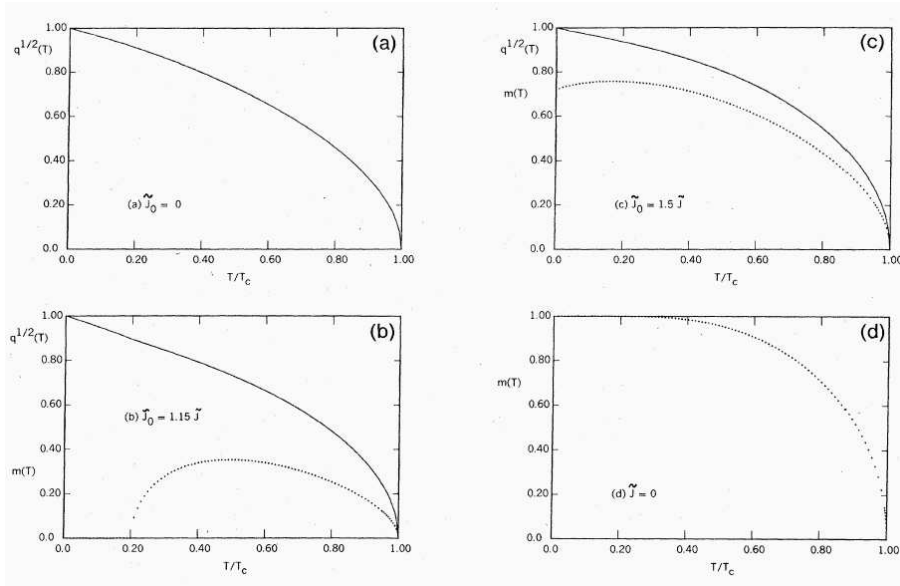


Figura 3: Comportamiento del parámetro de orden ferromagnético ( $m$ ) y del parámetro de orden  $q$  en función de la temperatura para diferentes valores de  $\tilde{J}_0 \equiv NJ_0$  y  $\tilde{J} = N^{1/2}\sigma_J$ .

- El modelo de EA y su version de rango infinito (modelo SK) tiene una serie de limitaciones:
  1. El desorden está congelado (no hay posibilidad de difusión de impurezas magnéticas en el metal)

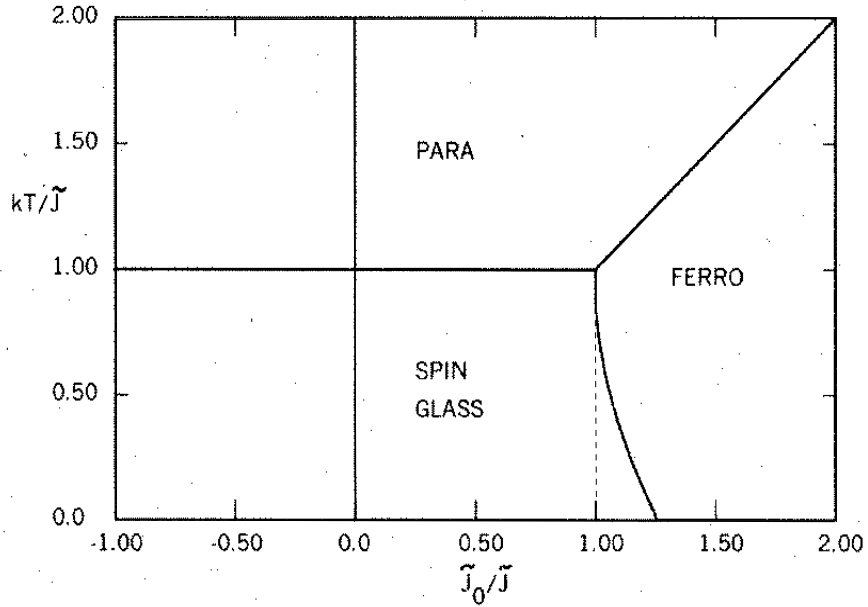


Figura 4: Diagrama de fases del modelo SK. La fase vidrio de espín se observa a bajas temperaturas para todo valor de  $\tilde{J}_0$  negativo.

2. La solución del modelo SK con simetría de réplicas es inestable a bajas temperaturas (Almeida and Thouless 1978).
3. Esto se traduce en que la entropía se hace negativa ( $S/N \rightarrow -k/2\pi$   $T \rightarrow 0$ ).
4. Es necesario trabajar con la solución no simétrica de réplicas que implica la existencia de toda una categoría de parámetros de orden ( $q^{\alpha\beta}$ ) caracterizando la fase vidrio de espín. Esto ocurre porque a bajas temperaturas hay una ruptura de la ergodicidad que da lugar a la aparición de múltiples mínimos locales separados por barreras  $O(N)$  ( $N \rightarrow \infty$ ) (a diferencia de lo que ocurre en un material ferromagnético donde solo hay dos mínimos locales) y dentro de cada uno de estos mínimos tenemos otros mínimos separados por barreras finitas (estados metaestables).
5. Si estudiamos la ruptura de la ergodicidad como un problema dinámico podemos utilizar el parámetro de orden de EA

$$q_{EA} = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \langle s_i(t_0) s_i(t_0 + t) \rangle \rangle$$

6. Si el sistema es ergódico (fase paramagnética)  $q_{EA} = 0$  y será no nulo cuando el sistema esté en un mínimo local.  $q_{EA}$  mide el

valor medio cuadrático de las magnetizaciones locales de cada valle promediado sobre el conjunto de todos los valles. En términos de promedios térmicos queda:

$$q_{EA} = \langle \sum_a P_a (m_i^a)^2 \rangle$$

La diferencia  $\Delta = q_{EA} - q$  mide el grado de ruptura de ergodicidad en el sistema.

$$q = \langle \langle s_i \rangle^2 \rangle = \langle (\sum_a P_a m_i^a)^2 \rangle$$

7. Si hay muchos valles hay que preguntarse por la correlación entre diferentes valles  $q^{ab} \equiv \frac{1}{N} \sum_i m_i^a m_i^b$ .

## 1.5. Difusión de iones magnéticos

- El modelo Ising de vidrio de espines [5, 10] es un sistema sencillo que presenta desorden microscópico que consiste en un red regular  $d$ -dimensional que tiene asociado el hamiltoniano

$$H_{\mathbf{J}}(\mathbf{s}) = - \sum_{\mathbf{x}, \mathbf{y} \in Z^d} J_{xy} s_{\mathbf{x}} s_{\mathbf{y}} - h_e \sum_{\mathbf{x} \in Z^d} s_{\mathbf{x}}, \quad (17)$$

donde  $J_{xy}$  es una variable aleatoria caracterizada por una cierta distribución de probabilidad, y  $h_e$  es una constante que representa un campo magnético sobre los espines. Cada configuración de las variables de espín  $\mathbf{s} = \{s_{\mathbf{x}} = \pm 1; \mathbf{x} \in Z^d\}$ , tiene una energía potencial (17) para cada posible distribución de desorden,  $\mathbf{J} = \{J_{xy} \in \mathfrak{R}; \mathbf{x}, \mathbf{y} \in Z^d\}$ .

- El hecho de que  $J_{xy}$ , cambien al azar de una pareja de espines a otra, como vimos trata de simular la situación en sistemas reales, donde los iones magnéticamente activos están distribuidos espacialmente al azar, y las energías de intercambio tienen un comportamiento oscilatorio con la distancia entre los iones.
- Una característica esencial de este modelo es que  $\mathbf{J}$  es fija en el tiempo para cada realización particular del sistema (*desorden congelado*), es decir, las impurezas están *congeladas*, fijas en el tiempo. Interesa entonces promediar sobre la distribución estacionaria de las configuraciones de espines,  $P_{st}(\mathbf{s})$ , y sobre el peso,  $f(\mathbf{J})$ , de diferentes realizaciones de desorden [11, 12, 13, 14].
- Esta situación ha sido recientemente generalizada al caso en que la distribución espacial de desorden,  $\mathbf{J}$ , varía con el tiempo [61]. En este caso, se argumenta que, como un paso adicional, los modelos más realistas deberían considerar la posibilidad de variaciones temporales de  $J_{xy}$  para tener en cuenta los efectos debidos a la difusión iónica. Ésta constantemente modifica la distancia,  $\mathbf{x} - \mathbf{y}$ , entre cada par específico de espines y, por lo tanto, hace que  $J_{xy}$  varíe en la práctica también con el tiempo, dado el carácter oscilatorio de la interacción RKKY con la distancia.
- Como una primera aproximación para entender el posible efecto debido a la difusión iónica, se ha modelado la difusión rápida y aleatoria de impurezas [15]. En este caso, se asume que  $P_t(\mathbf{s})$ , satisface la ecuación maestra

$$\frac{\partial P_t(\mathbf{s})}{\partial t} = \sum_{\mathbf{x} \in Z^d} [c(\mathbf{s}^{\mathbf{x}}; \mathbf{x})P_t(\mathbf{s}^{\mathbf{x}}) - c(\mathbf{s}; \mathbf{x})P_t(\mathbf{s})], \quad (18)$$

donde la probabilidad por unidad de tiempo (*rate*) para el cambio (*spin-flip*) de la configuración  $\mathbf{s} = \{\dots, s_{\mathbf{x}-1}, s_{\mathbf{x}}, s_{\mathbf{x}+1}, \dots\}$  a la configuración  $\mathbf{s}^{\mathbf{x}} = \{\dots, s_{\mathbf{x}-1}, -s_{\mathbf{x}}, s_{\mathbf{x}+1}, \dots\}$  es una superposición de procesos más elementales de la forma

$$c(\mathbf{s}; \mathbf{x}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{J} f(\mathbf{J}) c_{\mathbf{J}}(\mathbf{s}; \mathbf{x}). \quad (19)$$

La probabilidad de transición elemental  $c_{\mathbf{J}}(\mathbf{s}; \mathbf{x})$  está asociada a una distribución particular de desorden  $\mathbf{J}$  y, por lo tanto, a un valor particular de la energía  $H_{\mathbf{J}}(\mathbf{s})$ .

- En la práctica, resulta conveniente tratar con funciones  $c_{\mathbf{J}}(\mathbf{s}; \mathbf{x})$  que satisfagan la condición de balance detallado, es decir,

$$c_{\mathbf{J}}(\mathbf{s}; \mathbf{x}) = c_{\mathbf{J}}(\mathbf{s}^{\mathbf{x}}; \mathbf{x}) \exp[\beta H_{\mathbf{J}}(\mathbf{s}^{\mathbf{x}}) - \beta H_{\mathbf{J}}(\mathbf{s})].$$

Para  $f(\mathbf{J}) = \prod_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} \delta(J_{\mathbf{x}\mathbf{y}} - J)$ , la condición de balance detallado implica que el sistema evoluciona con el tiempo hacia un estado de equilibrio correspondiente al inverso de la temperatura  $\beta = (k_B T)^{-1}$  y energía  $H_{\mathbf{J}}(\mathbf{s})$ .

- En general, la expresión (19) describe una competición entre diferentes tendencias cuyo resultado neto en el límite asintótico  $t \rightarrow \infty$  es en general un estado estacionario fuera del equilibrio. Por lo tanto, el estudio de este modelo tiene interés no sólo para el estudio de sistemas desordenados, sino también para el estudio de fenómenos fuera del equilibrio.
- Los modelos que estudiaremos difieren conceptualmente del modelo de vidrio de espines con *desorden recocido* (*annealed*) [16] (en el que las impurezas han alcanzado el estado de equilibrio junto con los espines, situación que usualmente ha sido reconocida como poco realista). Veremos que nos aparecen comportamientos nuevos como cierta *frustración dinámica* —o conflicto durante la evolución temporal— que induce interesantes fenómenos, muchos de ellos semejantes a los que aparecen en los vidrios de espines reales, por ejemplo, el efecto de la frustración en la no saturación de la magnetización a bajas temperaturas y la existencia de fases *reentrant* [17, 18, 19]

## 1.6. Definición del modelo

- El estudio del sistema representado por las expresiones (18)-(19) es, en general, difícil. Por lo tanto, vamos a suponer que un conjunto grande de grados de libertad puede ser reemplazado por la acción de un campo. Esto es, sólo vamos a tener en cuenta los detalles, incluyendo correlaciones entre espines, en un dominio compacto de nudos de la red relativamente pequeño,  $\Lambda_C = \Lambda_I \cup \Lambda_F$ ,  $\Lambda_I \cap \Lambda_F = \emptyset$ , donde  $\Lambda_I$  es el dominio interior y  $\Lambda_F$  es la *frontera*, definida como el subconjunto de todos los nudos de  $\Lambda_C$  que tienen al menos un *vecino próximo* fuera de  $\Lambda_C$ ; cf. figura 5.

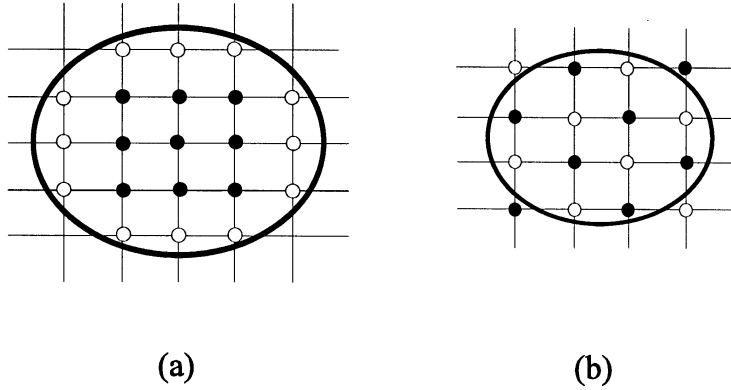


Figura 5: (a) La figura ilustra un dominio genérico de nudos en la red  $Z^d$ ,  $\Lambda_C \equiv \{\bullet, \circ\}$ ; el dominio interior,  $\Lambda_I \equiv \{\bullet\}$ ; y la frontera,  $\Lambda_F \equiv \{\circ\}$ . (b) Se ilustra un dominio específico para  $d = 2$ , que consta de doce espines, como se considera en el texto; aquí se hace una distinción entre dos subredes,  $\Lambda_A \equiv \{\bullet\}$ , y  $\Lambda_B \equiv \{\circ\}$ .

- Las probabilidades asociadas con las configuraciones,  $\mathbf{s}_C = \{s_{\mathbf{x}}; \mathbf{x} \in \Lambda_C\}$ , de  $\mathbf{s}_I = \{s_{\mathbf{x}}; \mathbf{x} \in \Lambda_I\}$ , y de  $\mathbf{s}_F = \{s_{\mathbf{x}}; \mathbf{x} \in \Lambda_F\}$  pueden ser relacionadas mediante la ecuación [20]

$$P_t(\mathbf{s}_C) = P_t(\mathbf{s}_I/\mathbf{s}_F)P_t(\mathbf{s}_F), \quad (20)$$

donde  $P_t(\mathbf{s}_I/\mathbf{s}_F)$  es la probabilidad condicional de tener la configuración  $\mathbf{s}_I$  en el interior supuesto que se tiene la configuración  $\mathbf{s}_F$  en la frontera, y donde asumimos las normalizaciones  $\sum_{\mathbf{s}_I} P_t(\mathbf{s}_I/\mathbf{s}_F) = 1$ , y  $\sum_{\mathbf{s}_F} P_t(\mathbf{s}_F) = 1$ ,

- Una característica principal de este modelo es que, para cualquier configuración particular de la frontera  $\mathbf{s}_F$ , la probabilidad  $P_t(\mathbf{s}_I/\mathbf{s}_F)$  satisface

la ecuación maestra:

$$\frac{\partial P_t(\mathbf{s}_I/\mathbf{s}_F)}{\partial t} = \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda_I} [c(\mathbf{s}_I^{\mathbf{x}}; \mathbf{x}) P_t(\mathbf{s}_I^{\mathbf{x}}/\mathbf{s}_F) - c(\mathbf{s}_I; \mathbf{x}) P_t(\mathbf{s}_I/\mathbf{s}_F)], \quad (21)$$

donde  $c(\mathbf{s}_I; \mathbf{x})$  es una superposición similar a (19), es decir,

$$c(\mathbf{s}_I; \mathbf{x}) = [[c_{\mathbf{J}}(\mathbf{s}_I; \mathbf{x})]] \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{J} f(\mathbf{J}) c_{\mathbf{J}}(\mathbf{s}_I; \mathbf{x}). \quad (22)$$

- Las características del modelo representadas por las expresiones (21)-(22) han sido completadas con una elección para  $P_t(\mathbf{s}_F)$ , que necesita incluir un campo coherente apropiado para tener en cuenta la relación entre espines en  $\Lambda_F$  y en el resto de la red  $Z^d$ . Esto es, la probabilidad total de tener en el sistema original una determinada configuración de espines  $P_t(\mathbf{s})$  está sustituida aquí por la probabilidad asociada al dominio  $P_t(\mathbf{s}_C)$ , probabilidad que incluye un campo que debe ser calculado de forma autoconsistente.
- Este hecho implica que tenemos sólo un conjunto de  $2^{N_I}$  ecuaciones acopladas a resolver, ecuación (21), (en vez de las  $2^N$ ,  $N \gg N_I$ , que tendría el problema original) cuya solución se puede encontrar para valores de  $N_I = \text{card}(\Lambda_I)$  no demasiado grandes.
- El estado estacionario del sistema descrito por la ecuación (21) está definido como la solución de  $\partial P_{st}(\mathbf{s}_I/\mathbf{s}_F)/\partial t = 0$ . Se puede escribir de forma bastante general que  $P_{st}(\mathbf{s}_I/\mathbf{s}_F) \equiv \exp\{-\beta \mathcal{H}(\mathbf{s}_I, \mathbf{s}_F) - \Gamma(\mathbf{s}_F)\}$ , que define  $\mathcal{H}(\mathbf{s}_I, \mathbf{s}_F)$  y donde  $\Gamma(\mathbf{s}_F)$  se determina a partir de la normalización de  $P_{st}(\mathbf{s}_I/\mathbf{s}_F)$ . De forma sencilla se sigue

$$\mathcal{H}(\mathbf{s}_I, \mathbf{s}_F) = \frac{1}{2^{N_I}} \ln \left[ \prod_{\mathbf{s}_I} P_{st}(\mathbf{s}_I/\mathbf{s}_F) \right] - \ln P_{st}(\mathbf{s}_I/\mathbf{s}_F), \quad (23)$$

donde el productorio es sobre todas las configuraciones del interior del dominio  $\mathbf{s}_I$ . Para obtener (23) hemos asumido que  $\mathcal{H}(\mathbf{s}_I, \mathbf{s}_F)$  puede ser escrito como una combinación de productos de espines dentro del dominio, es decir,

$$\mathcal{H}(\mathbf{s}_I, \mathbf{s}_F) = \sum_{k=1}^{N_I} \sum_{(\mathbf{j}_1 \dots \mathbf{j}_k)} J_{\mathbf{j}_1 \dots \mathbf{j}_k}^{(k)} s_{\mathbf{j}_1} \dots s_{\mathbf{j}_k}, \quad (24)$$

donde  $J_{\mathbf{j}_1 \dots \mathbf{j}_k}^{(k)}$  son números reales.



- La energía configuracional del dominio es

$$H_{\mathbf{J}}(\mathbf{s}_C) = - \sum_{\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Lambda_C} J_{xy} s_{\mathbf{x}} s_{\mathbf{y}} - h_e \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda_C} s_{\mathbf{x}}. \quad (25)$$

Si escribimos la probabilidad en la frontera como

$$P_{st}(\mathbf{s}_F) \propto \exp \left\{ \Gamma(\mathbf{s}_F) + \beta h \sum_{\mathbf{y} \in \Lambda_F} s_{\mathbf{y}} \right\}, \quad (26)$$

donde  $h$  es el campo medio coherente, se obtiene después de usar (20) que

$$P_{st}(\mathbf{s}_C) = \frac{1}{\mathcal{N}} \exp \left\{ -\beta \mathcal{H}(\mathbf{s}_I, \mathbf{s}_F) + \beta h \sum_{\mathbf{y} \in \Lambda_F} s_{\mathbf{y}} \right\}, \quad (27)$$

con

$$\mathcal{N} = \sum_{\mathbf{s}_C} \exp \left\{ -\beta \mathcal{H}(\mathbf{s}_I, \mathbf{s}_F) + \beta h \sum_{\mathbf{y} \in \Lambda_F} s_{\mathbf{y}} \right\}. \quad (28)$$

- El campo  $h$  en la frontera se calcula de forma autoconsistente, imponiendo el requisito de que la magnetización por espín en  $\Lambda_I$  debe ser la misma que en  $\Lambda_F$ . Este formalismo se puede generalizar de forma sencilla, en el sentido de que podemos incluir varios campos diferentes, que son necesarios para estudiar ciertos tipos de orden, como se hace de forma explícita en la próxima sección.

## 1.7. Algunos casos particulares del modelo

- Consideremos en primer lugar el caso más simple, concretamente  $\Lambda_I = \{\mathbf{x}_0\}$ . El dominio está constituido por un espín central  $s_{\mathbf{x}_0}$  y una frontera constituida por los  $q$  vecinos próximos de éste.
- Consideremos *rates* elementales tales que  $c_{\mathbf{J}}(\mathbf{s}_I; \mathbf{x}) = \phi(\beta \Delta H_{\mathbf{J}}^{\mathbf{x}}(\mathbf{s}_C))$ , con  $\Delta H_{\mathbf{J}}^{\mathbf{x}}(\mathbf{s}_C) \equiv H_{\mathbf{J}}(\mathbf{s}_I^{\mathbf{x}}, \mathbf{s}_F) - H_{\mathbf{J}}(\mathbf{s}_I, \mathbf{s}_F)$ ,  $\phi(X) = \phi(-X) \exp(-X)$  (balance detallado),  $\phi(0) = 1$ , y  $\phi(\infty) = 0$ : por ejemplo,  $\phi(X) = \exp(-X/2)$  (*rate V*),  $\phi(X) = 2(1 + e^X)$  (*rate K*), y  $\phi(X) = \min\{1, e^{-X}\}$  (*rate M*).
- La probabilidad estacionaria condicional se sigue entonces de forma sencilla a partir de  $\partial P_{st}(\mathbf{s}_I/\mathbf{s}_F)/\partial t = 0$  como

$$P_{st}(s_{\mathbf{x}_0}/\mathbf{s}_F) = \frac{c(s_{\mathbf{x}_0}; \mathbf{x}_0)}{c(s_{\mathbf{x}_0}; \mathbf{x}_0) + c(-s_{\mathbf{x}_0}; \mathbf{x}_0)}, \quad (29)$$

después de usar (20) y (27). Se puede comprobar que

$$\frac{P_{st}(-s_{\mathbf{x}_0}/\mathbf{s}_F)}{P_{st}(s_{\mathbf{x}_0}/\mathbf{s}_F)} = \frac{c(-s_{\mathbf{x}_0}; \mathbf{x}_0)}{c(s_{\mathbf{x}_0}; \mathbf{x}_0)}, \quad (30)$$

es decir, éste es un caso muy simple en el que la competición de dinámicas —no sólo la *rate* elemental— también satisface la condición de balance detallado. Se obtiene a partir de (23) y (29) que

$$\beta \mathcal{H}(s_{\mathbf{x}_0}, \mathbf{s}_F) = -\frac{1}{2} s_{\mathbf{x}_0} \ln \frac{[[\phi \{\beta \Delta_{\mathbf{J}}^{\mathbf{x}_0}(\mathbf{s}_F)\}]]}{[[\phi \{-\beta \Delta_{\mathbf{J}}^{\mathbf{x}_0}(\mathbf{s}_F)\}]]} \quad (31)$$

con  $\Delta_{\mathbf{J}}^{\mathbf{x}_0}(\mathbf{s}_F) = 2 \left\{ \sum_{\mathbf{y} \in \Lambda_F} J_{\mathbf{x}_0 \mathbf{y}} s_{\mathbf{y}} + h_e \right\}$ . Por lo tanto,

$$\mathcal{H}(s_{\mathbf{x}_0}, \mathbf{s}_F) = - \sum_{\mathbf{y} \in \Lambda_F} J_{\mathbf{x}_0 \mathbf{y}} s_{\mathbf{y}} s_{\mathbf{x}_0}, \quad (32)$$

donde

$$\beta \sum_{\mathbf{y} \in \Lambda_F} J_{\mathbf{x}_0 \mathbf{y}} s_{\mathbf{y}} = -\frac{1}{2} \ln \frac{[[\phi \{\beta \Delta_{\mathbf{J}}^{\mathbf{x}_0}(\mathbf{s}_F)\}]]}{[[\phi \{\beta \Delta_{\mathbf{J}}^{\mathbf{x}_0}(\mathbf{s}_F)\}]]}, \quad (33)$$

es un *hamiltoniano efectivo* tipo Ising [62] asociado al dominio.

- La restricción de estas ecuaciones a  $\Lambda_I = \{\mathbf{x}_0\}$  (dominio insuficiente para describir el orden antiferromagnético) aconseja considerar un único campo coherente,  $h$ , en (26). La solución final es entonces (27) con (31), donde  $h$  se obtiene mediante la relación de autoconsistencia

$$\langle s_{\mathbf{x}_0} \rangle = \left\langle \frac{1}{q} \sum_{\mathbf{y} \in \Lambda_F} s_{\mathbf{y}} \right\rangle \quad (34)$$

con  $\langle \dots \rangle$  representando un promedio con respecto a  $P_{st}(\mathbf{s}_C)$ . Esta relación de autoconsistencia puede ser transformada (Ejercicio) en

$$\sum_{n=0}^q \binom{q}{n} y^n \Theta(n) = 0, \quad (35)$$

donde  $y \equiv e^{2\beta h}$ , y

$$\Theta(n) \equiv 2n \left[ \left[ \frac{A(n)}{B(n)} \right]^{\frac{1}{2}} + \left[ \frac{B(n)}{A(n)} \right]^{\frac{1}{2}} \right] - 2q \left[ \frac{B(n)}{A(n)} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (36)$$

con  $A(n) = [[\phi(2\beta J(2n - q) + 2\beta h_e)]]$  y  $B(n) = [[\phi(-2\beta J(2n - q) - 2\beta h_e)]]$ .

- Para un dominio de espines más grande vamos a considerar dimensión  $d = 2$  con  $\Lambda_C$  definido como aparece en la figura 5 (b), es decir, nos restringimos al estudio de un dominio que contiene cuatro espines en el interior rodeados por ocho espines en la frontera. En dicho dominio definimos dos subredes,  $\Lambda_A$  y  $\Lambda_B$ , con  $\Lambda_C = \Lambda_A \cup \Lambda_B$ ,  $\Lambda_A \cap \Lambda_B = \emptyset$ , como se representa en la figura 5 (b), y

$$m \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda} s_{\mathbf{x}}, \quad \mu \equiv \frac{1}{N_A} \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda_A} s_{\mathbf{x}} - \frac{1}{N_B} \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda_B} s_{\mathbf{x}}. \quad (37)$$

Resulta necesario el considerar ahora dos campos coherentes,  $h_A$  y  $h_B$ , actuando sobre los espines de la frontera en  $\Lambda_A$  y  $\Lambda_B$ , respectivamente. Esto es, la probabilidad asociada al dominio es ahora

$$P_{st}(\mathbf{s}_C) = \frac{1}{\mathcal{N}} \exp \left\{ -\beta \mathcal{H}(\mathbf{s}_I, \mathbf{s}_F) + \beta h_A \sum_{\mathbf{y} \in \Lambda_{FA}} s_{\mathbf{y}} + \beta h_B \sum_{\mathbf{y} \in \Lambda_{FB}} s_{\mathbf{y}} \right\} \quad (38)$$

con

$$\mathcal{N} = \sum_{\{\mathbf{s}_C\}} \exp \left\{ -\beta \mathcal{H}(\mathbf{s}_I, \mathbf{s}_F) + \beta h_A \sum_{\mathbf{y} \in \Lambda_{FA}} s_{\mathbf{y}} + \beta h_B \sum_{\mathbf{y} \in \Lambda_{FB}} s_{\mathbf{y}} \right\}. \quad (39)$$

Las correspondientes relaciones de autoconsistencia son:

$$2 \left\langle \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda_I} s_{\mathbf{x}} \right\rangle = \left\langle \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda_F} s_{\mathbf{x}} \right\rangle \quad (40)$$

$$2 \left\langle \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda_{IA}} s_{\mathbf{x}} - \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda_{IB}} s_{\mathbf{x}} \right\rangle = \left\langle \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda_{FA}} s_{\mathbf{x}} - \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda_{FB}} s_{\mathbf{x}} \right\rangle.$$

Se puede escribir esto de forma esquemática como

$$g_1(x, y) = 0, \quad g_2(x, y) = 0, \quad (41)$$

donde  $x \equiv e^{2\beta h_A}$ ,  $y \equiv e^{2\beta h_B}$ , y las funciones  $g_i$  dependen de la elección particular de  $f(\mathbf{J})$ .

## 1.8. Resultados

- En lo referente a la situación en que se tiene  $\Lambda_I = \{\mathbf{x}_0\}$ , la solución viene dada por (27) con (31) y (35). Para  $h_e = 0$  y en ausencia de competición entre diferentes tendencias dinámicas, como ocurre para  $f(\mathbf{J}) = \prod_{\mathbf{x} \neq \mathbf{y}} \delta(J_{xy} - J_0)$ , se tiene que  $P_{st}(\mathbf{s}_C) = Z_{BP}^{-1} \exp\{-\beta H_{BP}(\mathbf{s}_C)\}$ , donde  $H_{BP}(\mathbf{s}_C) = -J_0 \sum_{\mathbf{y} \in \Lambda_F} s_{\mathbf{x}_0} s_{\mathbf{y}} - h \sum_{\mathbf{y} \in \Lambda_F} s_{\mathbf{y}}$  es el hamiltoniano de Bethe-Peierls. Esto es, se reproduce la teoría de campo medio para un sistema en equilibrio. De hecho, (35) en estas condiciones se reduce a

$$y = \left\{ \frac{1 + ye^{2\beta J_0}}{y + e^{2\beta J_0}} \right\}^{q-1}, \quad (42)$$

que tiene soluciones distintas de cero para  $T < T_c$ , donde  $J_0/k_B T_c = \frac{1}{2} \ln(q/(q-2))$  señala un cambio de fase de una fase paramagnética a otra fase ferromagnética con magnetización espontánea no nula.

- En presencia de competición, para dimensión  $d = 2$ , la expresión (35) se reduce a la condición  $\Theta(0)y^2 + 4\Theta(1)y + \Theta(0) = 0$ , que tiene dos soluciones distintas de cero:

$$y_{\pm} = -\frac{2\Theta(1)}{\Theta(0)} \pm \sqrt{\left\{ \frac{2\Theta(1)}{\Theta(0)} \right\}^2 - 1}. \quad (43)$$

Estas dos soluciones se transforman en una única solución para  $\Theta(1)/\Theta(0) = \frac{1}{2}$ , condición que define el valor de la temperatura crítica para el cambio de fase de segundo orden. El valor de  $T_c$  depende de  $f(\mathbf{J})$  y de  $\phi(X)$  como se deduce de forma sencilla a partir de (36).

- Consideremos una distribución de desorden gaussiana

$$f(\mathbf{J}) = \prod_{\substack{\mathbf{x}, \mathbf{y} \\ \mathbf{x} \neq \mathbf{y}}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\tilde{J}}} \exp\left\{ -\frac{(J_{xy} - J_0)^2}{2\tilde{J}^2} \right\}. \quad (44)$$

Para la *rate*  $V$ , el cambio de fase es similar al de equilibrio descrito anteriormente; en particular,  $k_B T_c/J_0 = 2,88$  for  $d = 2$ , independientemente de los parámetros que aparecen en (44). Esto es, la competición de dinámicas no induce efectos que sean remarcables. Por contraste, para la *rate*  $K$  y para la *rate*  $M$ ,  $T_c$  depende de la anchura  $\tilde{J}$  de la distribución. Cuando  $\tilde{J}/J_0 \rightarrow 0$ , se observa que la magnetización a temperatura cero,  $m(T = 0)$ , tiende a la saturación; esto es, el efecto de las impurezas

decrece cuando la distribución gaussiana tiende a una función delta y, eventualmente, se recupera la situación de equilibrio (en la que no hay competición de dinámicas). Por otra parte,  $m(T) \rightarrow 0$ , para cualquier  $T$ , cuando  $\tilde{J}/J_0 \rightarrow 1,0336$ ; este valor último se obtiene como solución a la ecuación  $\text{erf}\left(J_0/\sqrt{2}\tilde{J}\right) = \frac{2}{3}$ . Esto es, una distribución ancha para

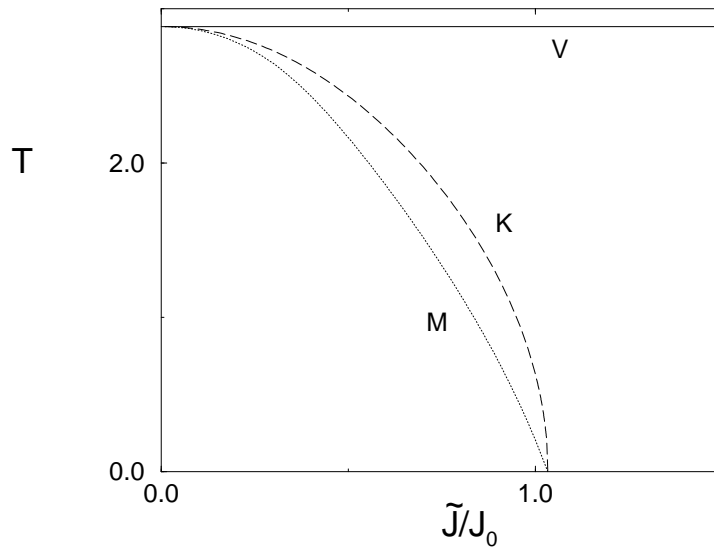


Figura 6: Diagrama de fases para dimensión  $d = 2$ , para un dominio que tiene un único espín en el interior, y evoluciona con una competición de dinámicas gaussiana, (44), y (de arriba a abajo, como se indica en la figura) *rates*  $V$ ,  $K$ , y  $M$ , definidas en la sección 1.7. (La temperatura está dada en unidades  $J_0/k_B$ .)

el desorden hace tan fuerte la aleatoriedad que cualquier tipo de orden de largo alcance desaparece; es interesante el que esto ocurra de forma repentina para un valor de  $\tilde{J}/J_0$  bien definido. En la figura 6 se representa el diagrama de fases para varias elecciones de las *rates* cuando la competición de dinámicas es gaussiana, (44). El hecho de que la *rate* influya tan fuertemente en el estado estacionario del sistema es una característica distintiva del sistema cinético (18)-(19) [61].

- Consideremos una distribución bimodal

$$f(\mathbf{J}) = \prod_{\substack{x,y \\ x \neq y}} \{p\delta(J_{xy} - J_0) + (1 - p)\delta(J_{xy} + J_0)\}, \quad (45)$$

es decir,  $J_{xy}$  es igual a  $J_0$  ( $J_0 > 0$ ) con probabilidad  $p$  (tanto durante el tiempo en que el sistema evoluciona como espacialmente en cualquier configuración del estado estacionario) y  $J_{xy}$  es igual a  $-J_0$  con probabilidad  $(1 - p)$ . El estado estacionario en esta situación resulta ser independiente de la *rate* (para los casos considerados), a diferencia de lo que ocurría para la distribución (44). De cualquier forma, la probabilidad  $p$  de que el acoplamiento  $J_{xy}$  sea positivo juega un papel similar al papel que juega la anchura de la gaussiana  $\tilde{J}$  que hemos introducido anteriormente. En particular, el sistema exhibe un cambio de fase de segundo orden a una temperatura crítica  $T_c(p)$ , de tal forma que, para que la magnetización alcance la saturación, se requiere que  $p \rightarrow 1$ , y cuando  $p < p_0$  dicho cambio de fase no tiene lugar. Se tiene que  $p_0 = \frac{5}{6}$  para  $d = 2$ . La figura 7 ilustra la situación que acabamos de describir y muestra una comparación con datos correspondientes a una simulación por ordenador del sistema (18)-(19) con la *rate*  $M$  [21].

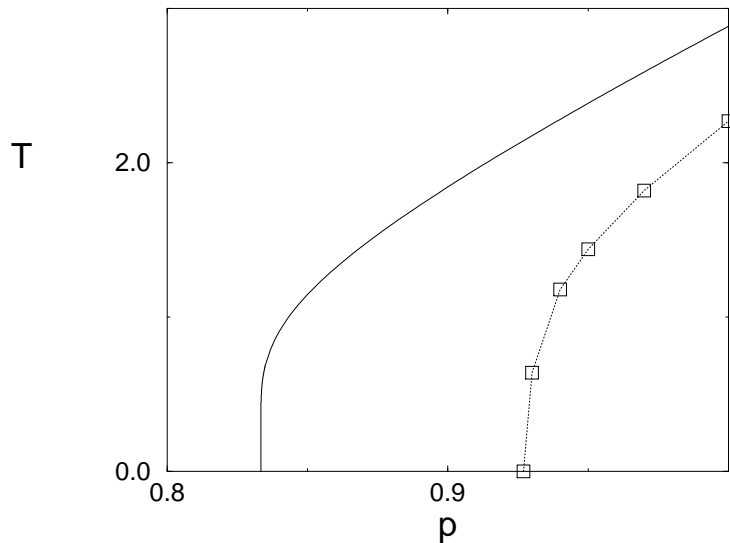


Figura 7: Diagrama de fases para dimensión  $d = 2$ , para un dominio que tiene un único espín central en su interior, y evoluciona mediante una competición de dinámicas bimodal, (45); el resultado es independiente de la *rate* elemental para las rates  $V$ ,  $K$ , y  $M$ . Los símbolos corresponden a resultados correspondientes a una simulación por ordenador en Ref. [21] para el sistema (18)-(19) con la *rate*  $M$ . (La temperatura está dada en unidades  $J_0/k_B$ .)

- La solución para el dominio bidimensional que viene representado en la

figura 5 (b) es (38) con los campos medios coherentes verificando (41). Consideremos ahora explícitamente la situación en que la evolución temporal ocurre de acuerdo a la distribución bimodal, es decir, con probabilidades de transición dadas por (22) con  $f(\mathbf{J})$  dada por (45). Para esta situación particular, las funciones que aparecen en (41) tienen la forma

$$\begin{aligned}
g_1(x, y) &= a_1(1 - x^4y^4) + a_2(y + x - x^4y^3 - y^4x^3) \\
&\quad + a_3(y^2 + x^2 - x^4y^2 - x^2y^4) + a_4(y^3 + x^3 - x^4y - xy^4) \\
&\quad + a_5(xy - x^3y^3) + a_6(xy^2 + x^2y - x^3y^2 - x^2y^3),
\end{aligned} \tag{46}$$

y

$$\begin{aligned}
g_2(x, y) &= b_1(y - x - x^4y^3 + x^3y^4) + b_2(y^2 - x^2 + x^2y^4 - x^4y^2) \\
&\quad + b_3(y^3 - x^3 + xy^4 - x^4y) + b_4(y^4 - x^4) \\
&\quad + b_5(xy^2 - x^2y - x^3y^2 + x^2y^3) + b_6(xy^3 - x^3y),
\end{aligned} \tag{47}$$

donde los coeficientes,  $a_i$  y  $b_i$ ,  $i = 1, \dots, 6$ , dependen de  $T$ ,  $p$ , y de la función  $\phi(X)$ . Estas ecuaciones han sido resueltas numéricamente obteniendo como principal resultado el siguiente: Para  $p = 1$  y  $0$ , —situación en la que no hay competición de dinámicas y por lo tanto el estado estacionario es de equilibrio— la temperatura crítica (para cambios de fase de una fase paramagnética a una fase ferromagnética y a una fase antiferromagnética, respectivamente) es  $k_B T_c / J_0 = 2,8309$ , ligeramente más pequeña que el correspondiente resultado de la teoría de campo medio de Bethe-Peierls, descrita anteriormente, que da para dicha temperatura crítica un valor de  $2,88$ ; además, esta versión del modelo da como resultado curvas de magnetización  $m(T)$  que son muy parecidas a las que da la solución de Bethe-Peierls. Para el caso en que  $p \in (0, 1)$ , el comportamiento del sistema depende fuertemente de la elección de la función  $\phi(X)$ . En particular, con las *rates*  $K$  y  $M$  se obtiene un valor de  $T_c(p)$ , que es diferente para cada *rate* y que se hace cero para  $p < p_0$ , con  $p_0 = 0,8636$ , y  $0,8664$ , respectivamente. Este último valor puede ser comparado con el valor de  $p_0$  que dan otras aproximaciones de campo medio; en concreto, con el valor de  $p_0 = 0,8649$  que se obtiene con la aproximación de pares [22, 23], y con el valor de  $p_0 = 0,928$  que se obtiene mediante simulación por ordenador [21], ambos resultados correspondientes al mismo sistema original. La figura 8 ilustra el diagrama de fases correspondiente. Aquí,  $p_1$  y  $p_2$  son los valores anteriores de  $p_0$  para el caso de las *rates*  $K$  y  $M$ , respectivamente; con la excepción de que ahora la forma de la *ra-*

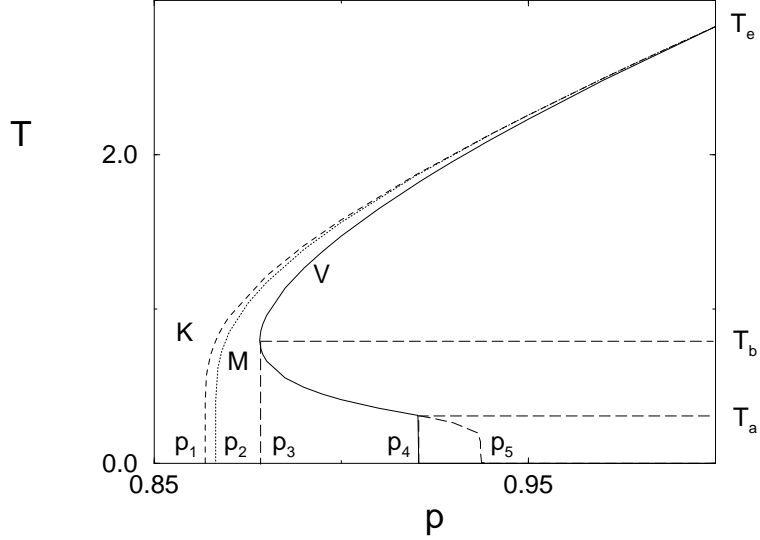


Figura 8: Diagrama de fases para el dominio bidimensional representado en la figura 5 (b), y para la competición de dinámicas bimodal, (45). Las diferentes curvas que aparecen son, de arriba a abajo, respectivamente, para las *rates*  $K$ ,  $M$ , y  $V$ . Obsérvese para el caso  $V$  la aparición de una fase reentrante y la existencia de un punto tricrítico en  $(p_4, T_a)$ . (Aquí las unidades de  $T$  son  $J_0/k_B$ .)

$te$  determina el estado estacionario del sistema, las diferencias con la situación descrita en la figura 7 son pequeñas. La figura 8 muestra el comportamiento del sistema para  $p > \frac{1}{2}$ , valores para los que el cambio de fase es entre una fase paramagnética y una fase ferromagnética; la situación es similar para el caso en la que la fase ordenada es antiferromagnética,  $p < \frac{1}{2}$ . La figura 9 ilustra la variación con  $p$  del campo coherente  $h$  a tres temperaturas diferentes para el caso particular de *rate*  $K$ .

En ella aparecen claramente definidas las regiones en la que hay fase ferromagnética y fase antiferromagnética; esto último se pone de manifiesto porque se observa la simetría esperada para los dos campos involucrados, es decir  $h_A = h_B$  en la fase ferromagnética y  $h_A = -h_B$  en la fase antiferromagnética.

La situación para la *rate*  $V$  resulta bastante diferente, como se muestra en la figura 8. Como antes, hay un cambio de fase de segundo orden de una fase paramagnética a una fase ferromagnética y a una fase antife-



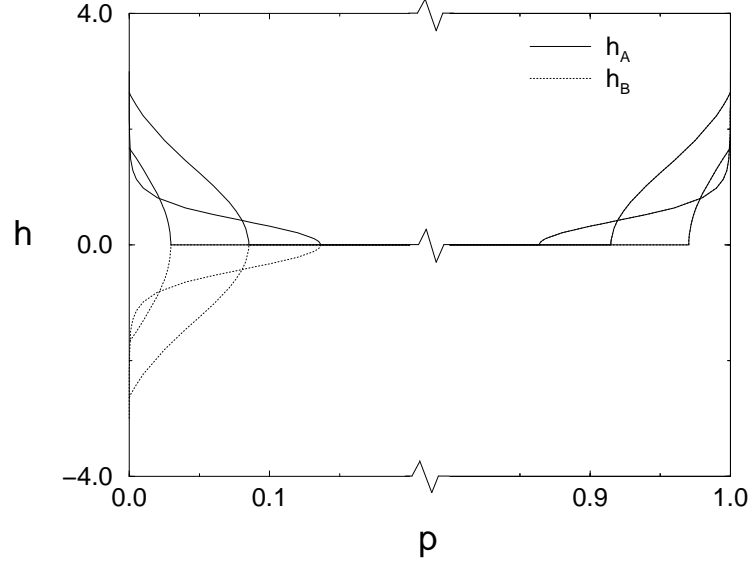


Figura 9: Tres isothermas ilustrativas mostrando la variación del campo coherente  $h$  con  $p$  para el sistema representado en la figura 8 con la *rate*  $K$ .

romagnética, a una temperatura crítica  $T_c = T_1(p) > T_b$ ; cf. figura 8. Cuando la temperatura es baja, a diferencia de lo que ocurría con las otras dos *rates*, aparece un segundo cambio de fase a  $T_c = T_2(p) < T_b$ , entre la fase ferromagnética o antiferromagnética y una fase en la que no existe ningún tipo de orden de largo alcance. Esto puede ser interpretado suponiendo que el sistema, a temperaturas inferiores a  $T_2(p)$ , presenta un tipo de orden diferente del típico orden de largo alcance, lo que podría sugerir la existencia de una fase vidrio de espines. Este segundo cambio de fase aparece de forma continua para  $p > p_3 = 0,8782$  y  $T_2(p) < T_b$ . Para  $p > p_4 = 0,9206$  y  $T_2(p) < T_a$  (cf. figura 8), este segundo cambio de fase se hace discontinuo como en un cambio de fase de primer orden, correspondiendo el punto  $(p_4, T_a)$  del diagrama de fases  $(p, T)$  a un punto tricrítico. El cambio de fase de primer orden tiene lugar para valores de  $p < p_5 = 0,9375$ . Para valores de  $p > p_5$ , el único cambio de fase que tiene lugar es el correspondiente a  $T_1(p)$ . La fase que acabamos de describir se llama reentrante y es típica de sistemas desordenados como los vidrios de espines. El comportamiento reentrante se aprecia claramente en la figura 10, en la que se muestran diferentes curvas de magnetización en función de la temperatura, para diferentes valores de  $p$  y para la *rate*  $V$ . La curva en la que la mag-

netización espontánea satura corresponde a  $p = 1$ , y es equivalente al comportamiento de equilibrio que da la teoría de Bethe, pero a una temperatura de equilibrio  $k_B T_e / J_0 = 2,8309$ , ligeramente inferior a la temperatura de Bethe. Para valores de  $p$  más pequeños se observa el comportamiento descrito más arriba, apareciendo para determinados valores de  $p$  curvas de magnetización reentrantes, semejantes a las que aparecen en ciertos materiales reales; cf. Refs. [17, 18, 19].

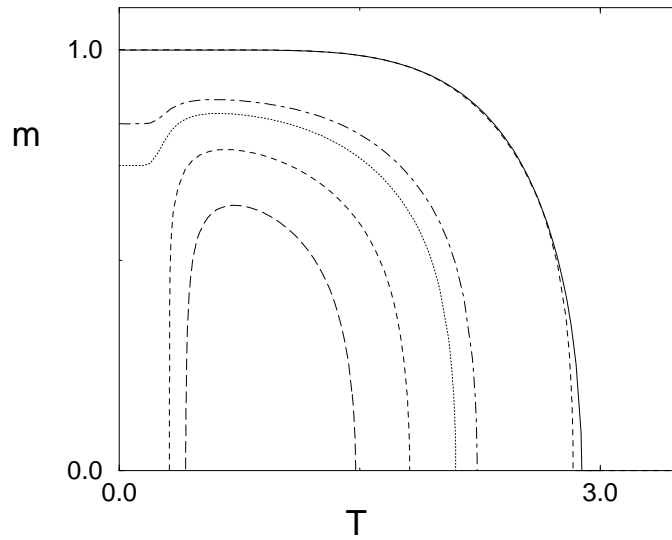


Figura 10: Variación con la temperatura de la magnetización para diferentes situaciones, para el dominio bidimensional representado en la figura 5 (b) y *rate V*. Las curvas son para la solución de equilibrio de Bethe (línea continua), y para el sistema cinético con  $p = 1$  (equilibrio), 0,95, 0,94, 0,92, y 0,90, respectivamente, de arriba a abajo de la figura. La situación es similar para  $p < \frac{1}{2}$  en la fase antiferromagnética y para el parámetro de orden  $\mu$ ; cf. (1.7). (Aquí  $T$  está dada en unidades de  $J_0/k_B$ .)

- En cuanto a la estabilidad de las soluciones, se tiene que para cualquier configuración de la frontera  $\mathbf{s}_F$ , ya sea para el dominio con un único espín central, como para el caso del dominio en dimensión  $d = 2$  que se representa en la figura 5 (b), las soluciones estacionarias a la ecuación (21) son estables. Esto se puede ver de forma sencilla en el caso del dominio con un sólo espín, donde los coeficientes de Lyapunov son uno negativo y el otro nulo —correspondiente a la solución estacionaria—.

En  $d = 2$ , para el dominio representado en 5 (b), hay que diagonalizar la matriz dinámica asociada a dicha ecuación maestra, obteniendo que todos los autovalores son negativos, excepto el asociado a la solución estacionaria que es nulo, y todo esto para cualquier configuración de la frontera. Por lo tanto, los estados solución a las ecuaciones de autoconsistencia son estables.

- Lo anterior es consecuencia de la existencia del hamiltoniano efectivo (23), que implica la condición de balance detallado para las *rates* definidas en (22), condición que hace que las soluciones a la ecuación maestra sean estables; cf. Ref. [24].