

Capítulo 2

Modelos exactamente solubles

Los modelos de partículas interactuantes exactamente solubles en Mecánica Estadística son escasos, mas aún en el caso de sistemas que presentan transición de fase. El disponer de soluciones exactas de modelos es siempre de gran utilidad en cualquier área de la ciencia, ya que permite poner a prueba las diferentes teorías de acerca de un fenómeno. Esto es válido aún cuando los modelos no representan ningún sistema real, en tanto respeten algunos axiomas básicos de la teoría, tales como la conservación de la energía, segundo principio de la termodinámica, causalidad, etc. Esto ha llevado a la formulación de diversos modelos ad hoc cuya única finalidad es profundizar en la comprensión de una determinada teoría; a menudo se los llama “modelos de juguete” (toy models).

Veremos ahora algunos ejemplos de modelos exactamente solubles en Mecánica Estadística. La mayoría de los modelos solubles en esta área son unidimensionales y con interacciones de corto alcance, con lo cual no presentan transición de fase. Porque estudiarlos entonces? Por varios motivos. Por un lado hemos visto que la dimensión espacial tiene una importancia fundamental en los fenómenos críticos. Resulta entonces importante entender primero que ocurre en el caso de menor dimensión. Por otra parte, las técnicas a desarrollar en el caso unidimensional en muchos casos sirven como base para el desarrollo de métodos de cálculo aproximado en dimensiones mayores. Además, existen muchos sistemas en la naturaleza que

presentan comportamientos que pueden ser descritos por modelos unidimensionales tal como el modelo de Ising, con lo cual estas soluciones pueden resultar de gran utilidad. Finalmente, estos cálculos son un ejercicio interesante de Mecánica Estadística.

Antes de presentar los modelos vamos a considerar un detalle matemático que nos será de utilidad.

2.1 El método de Laplace

Este es un método para aproximar integrales del tipo

$$I_N = \int_0^{\infty} e^{Nf(x)} dx$$

cuando $N \gg 1$, en el caso en que $f(x)$ tiene un máximo en $x_0 > 0$. Para $N \gg 1$ la mayor contribución a la integral estará concentrada en un intervalo pequeño en torno de x_0 . Supongamos que $f(x)$ es dos veces diferenciable. Desarrollando $f(x)$ en serie de Taylor en torno de x_0 y tomando en cuenta que $f'(x_0) = 0$ y $f''(x_0) = -A < 0$, podemos aproximar

$$I_N \sim e^{Nf(x_0)} \int_0^{\infty} e^{-\frac{NA}{2}(x-x_0)^2} dx$$

Haciendo el cambio de variable $y = \sqrt{AN/2}(x - x_0)$ tenemos

$$\begin{aligned} I_N &\sim e^{Nf(x_0)} \sqrt{\frac{2}{AN}} \int_{-x_0(AN/2)^{1/2}}^{\infty} e^{-y^2} dy \\ &\sim e^{Nf(x_0)} \sqrt{\frac{2}{AN}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy \\ &\sim e^{Nf(x_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{AN}} \end{aligned} \tag{2.1}$$

De este último resultado se obtiene que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln I_N = f(x_0) \tag{2.2}$$

Para este último resultado en realidad solo se necesita que $f(x)$ sea continua (para el resultado (2.1) se requiere que f sea dos veces diferenciable). Podemos demostrar esto expresando

$$I_N = e^{N f(x_0)} J_N$$

con

$$J_N = \int_0^\infty e^{N[f(x)-f(x_0)]} dx$$

Dado que $f(x) - f(x_0) \leq 0$ la integral J_N es una función decreciente de N . Así

$$\frac{1}{N} \ln I_N - f(x_0) = \frac{1}{N} \ln J_N \leq \frac{1}{N} \ln J_1$$

Dado que J_1 es una constante independiente de N se sigue que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln I_N \leq f(x_0) \quad (2.3)$$

Por otra parte, dado que $f(x)$ es continua, tenemos que para todo $\epsilon > 0$ existe $\delta > 0$ tal que $|x - x_0| < \delta$ implica que

$$|f(x) - f(x_0)| < \epsilon \Rightarrow f(x) - f(x_0) > -\epsilon$$

Así, tenemos que

$$J_N \geq \int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta} e^{N[f(x)-f(x_0)]} dx > \int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta} e^{-N\epsilon} dx = 2\delta e^{-N\epsilon}$$

Así,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln I_N = f(x_0) + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln J_N \geq f(x_0) - \epsilon$$

y

$$f(x_0) - \epsilon \leq \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln I_N \leq f(x_0)$$

Dado que ϵ es arbitrario se sigue el resultado (2.2).

2.2 Modelos unidimensionales para fluidos

Como ya mencionamos anteriormente, no es necesaria una descripción a nivel cuántico para explicar una transición de fase. Así, asumiremos un gas de partículas clásicas cuyo Hamiltoniano tiene la forma:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \quad (2.4)$$

donde el primer término representa la energía cinética y el segundo una energía potencial de interacción entre pares de partículas. La función partición viene dada por

$$Z(V, N, T) = \frac{1}{N!} \int e^{-\beta H} dp dq$$

donde el factor $1/N!$ nos da el conteo correcto de Boltzmann y la integral en $dp dq$ se realiza sobre los $6N$ grados de libertad correspondientes a los momentos y posiciones de las N partículas. Los términos de energía cinética y potencial del Hamiltoniano (2.5) dan lugar a dos factores en la función de partición. El término correspondiente a la energía cinética se integra fácilmente dando como resultado λ^N , con

$$\lambda = (2\pi m k_B T)^{3/2}$$

Para $\phi = 0$ este término nos lleva a la ecuación de estado de un gas ideal $Pv = k_B T$. Dado que este término dará lugar a una contribución aditiva completamente regular a la energía libre, resulta completamente irrelevante desde el punto de vista de las transiciones de fase y lo ignoraremos de aquí en más.

Como ya vimos en la sección anterior, la existencia del límite termodinámico impone que $\phi(r) < 1/r^\sigma$ con $\sigma > d$, sumado a la condición de “carozo duro”, que impone que el potencial debe ser ∞ para distancias menores que cierto valor $a > 0$. La formulación de modelos para fluidos se basa entonces en proponer diferentes formas para el potencial de interacción $\phi(r)$ que respeten las condiciones anteriores. Veremos a continuación algunos modelos unidimensionales. En este caso, el Hamiltoniano de interacción puede escribirse como

$$H = \sum_{1 \leq i < j \leq N} \phi(|x_i - x_j|) \quad (2.5)$$

donde x_i, x_j representan las posiciones en una cadena lineal de longitud L .

2.2.1 El gas de Tonks

Tal vez el modelo mas simple que podemos proponer despues del gas ideal es un gas de esferas rígidas no interactuantes, esto es, esferas que solo interactúan cuando se tocan. Este sistema esta descrito por un potencial de la forma

$$\phi(r) = \begin{cases} \infty & \text{si } 0 \leq r \leq a \\ 0 & \text{si } r > a \end{cases} \quad (2.6)$$

Para este potencial el factor de Boltzmann en la función partición resulta

$$e^{-\beta \phi(r)} = \Theta(r - a)$$

donde

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq 0 \\ 1 & \text{si } x > 0 \end{cases}$$

es una función escalón. La función partición no depende de la temperatura en este modelo.

En una dimensión este problema corresponde a ordenar N barras rígidas de longitud a en un intervalo L . Este problema fué resuelto por Tonks (1936). En dimensiones mayores no se conoce su solución. La función de partición de N barras en el intervalo $0 \leq x \leq L$ es

$$Z = \frac{1}{N!} \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \cdots \int_0^L dx_N \exp \left(-\beta \sum_{1 \leq i < j \leq N} \phi(|x_i - x_j|) \right)$$

Dado que el potencial es simétrico ante el intercambio de partículas, la integral anterior es igual a $N!$ veces la integral en la región

$$R : 0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_N < L$$

Una vez que tenemos las barras ordenadas, es claro que si $x_{i+1} - x_i > a$ esto implica que $x_j - x_i > a$ para todo $j = i + 1, i + 1, \dots, N$. Tenemos entonces

$$Z = \int_{(N-1)a}^L dx_N \cdots \int_{(n-1)a}^{x_{n+1}-a} dx_n \cdots \int_{2a}^{x_4-a} dx_3 \int_a^{x_3-a} dx_2 \int_0^{x_2-a} dx_1 \quad (2.7)$$

Haciendo el cambio de variables $y_n = x_n - (n-1)a$ ($y_1 = x_1$, $y_2 = x_2 - a$, etc.) tenemos

$$\begin{aligned} Z &= \int_0^{L-(N-1)a} dy_N \int_0^{y_N} dy_{N-1} \cdots \int_0^{y_3} dy_2 \int_0^{y_2} dy_1 \\ &= \frac{l^N}{N!} \end{aligned} \quad (2.8)$$

donde $l = L - (N-1)a$. Tomando ahora el límite $N \rightarrow \infty$, $L \rightarrow \infty$ manteniendo $v = L/N$ constante y usando la fórmula de Stirling $N! \sim N^N e^{-N}$ tenemos

$$\ln Z = N \ln(L - (N-1)a) - \ln(N!) \sim N \ln(L - Na) - N \ln N + N$$

de donde

$$-\beta f = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z = \ln(v - a) + 1 \quad (2.9)$$

Calculando la presión del gas obtenemos la ecuación de estado:

$$P = -\frac{\partial f}{\partial v} = \frac{k_B T}{v - a}$$

que es igual a la ecuación de estado para un gas ideal, con la corrección del volumen excluido. Para $v < a$ este modelo no está definido, ya que esto implica que una o más de las barras se superponen. Excepto la singularidad para $v = a$ (condición de “empaquetamiento compacto”), la termodinámica de este modelo es totalmente regular y no presenta transición de fase, tal como esperado, ya que es un sistema unidimensional con interacciones de corto alcance. En dimensiones mayores, el problema de esferas rígidas no interactuantes no posee solución exacta. Ha sido conjeturado que en dos dimensiones este modelo presenta una singularidad para

algún valor de $v > a$ correspondiente a una transición de fase. Esta, no obstante, sería una transición del tipo gas-sólido. Simulaciones numéricas corroboran esta conjetura.

2.2.2 Derivación microscópica del modelo de Van der Waals

La siguiente es una derivación heurística de la ecuación de Van der Waals propuesta por Ornstein (1908), en un intento de justificar microscópicamente dicha ecuación. El modelo propuesto por Ornstein consiste en un gas de esferas rígidas las cuales interactúan todas con todas con igual intensidad. Esto es, si tenemos N partículas en un volumen V , el potencial entre dos partículas a una distancia r viene dado por

$$\phi(r) = q(r) - \frac{\alpha}{V}$$

donde

$$q(r) = \begin{cases} \infty & \text{si } 0 \leq r \leq r_0 \\ 0 & \text{si } r > r_0 \end{cases} \quad (2.10)$$

es un potencial de esferas rígidas. El factor $1/V$ en el potencial tiene un carácter no físico cuya única justificación es asegurar la existencia del límite termodinámico. Podemos ver el porqué de esto si recordamos que la energía del estado fundamental de un sistema de partículas que interactúan con un potencial que decae como $1/r^\sigma$ en un sistema esférico de radio R va como $\sim R^{d+\sigma}$. El potencial constante es un caso particular del anterior con $\sigma = 0$, con lo cual la energía se comporta como $\sim R^d \propto V$. La función de partición para este potencial esta dada por

$$\begin{aligned} Z(V, N, T) &= \frac{1}{N!} \int_V d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \exp \left(-\beta \sum_{1 \leq i < j \leq N} (q(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) - \alpha/V) \right) \\ &= \exp(\beta \alpha N(N-1)/2V) Z_{er}(V, N) \end{aligned}$$

donde

$$Z_{er}(V, N) = \frac{1}{N!} \int_V d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \exp \left(-\beta \sum_{1 \leq i < j \leq N} q(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \right) \quad (2.11)$$

es la función partición de un gas de esferas rígidas de diámetro r_0 . En el caso unidimensional esta es la función partición del gas de Tonks (2.8)

$$Z_{er}(V, N) = \frac{1}{N!} [V - (N - 1)v_0]^N$$

donde $v_0 = r_0$ es ahora la longitud de las barras (“volumen excluido”). Tomando el límite $N, V \rightarrow \infty$ con $V/N = v = cte$ tenemos

$$-\beta f(v, T) = 1 + \ln(v - v_0) + \frac{\beta\alpha}{2v}$$

de donde

$$P = -\frac{\partial f}{\partial v} = \frac{k_B T}{v - v_0} - \frac{\alpha}{2v^2}$$

que es la ecuación de Van der Waals. Si bien esta última expresión es estrictamente válida en una dimensión, provee una aproximación razonable si v_0 es interpretado como el volumen de una partícula.

2.3 El método de matriz de transferencia

Este es un método para resolver sistemas definidos en redes con variables discretas, el cual se utiliza fundamentalmente para resolver problemas unidimensionales, aunque puede en algunos casos extenderse a dimensiones mayores.

Supongamos un sistema definido en una red unidimensional de N sitios con condiciones de contorno periódicas y variables discretas σ_i , $i = 1, 2, \dots, N$, las cuales pueden tomar M valores diferentes y satisfacen:

$$\sigma_{i+N} = \sigma_i$$

Supongamos además interacciones solo entre primeros vecinos, con lo cual el Hamiltoniano del sistema puede ser escrito de manera genérica como

$$H(\{\sigma\}) = \sum_{i=1}^N [U(\sigma_i) + V(\sigma_i, \sigma_{i+1})] \quad (2.12)$$

donde, por las condiciones periódicas $\sigma_{N+1} = \sigma_1$. La función de partición viene dada por

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[-\beta \sum_{i=1}^N \{U(\sigma_i) + V(\sigma_i, \sigma_{i+1})\} \right] \\ &= \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{i=1}^N T(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \end{aligned} \quad (2.13)$$

con

$$T(\sigma, \sigma') = \exp \left[-\beta \{U(\sigma)/2 + V(\sigma, \sigma') + U(\sigma')/2\} \right]$$

donde hemos simetrizado el exponente, por motivos que quedarán claros inmediatamente. Las funciones $T(\sigma, \sigma')$ pueden ser pensadas como los elementos de una matriz $M \times M$, que llamaremos T , la cual se conoce como **matriz de transferencia**.

Tenemos entonces

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_1\}} \sum_{\{\sigma_3\}} \cdots \sum_{\{\sigma_N\}} \left(\sum_{\{\sigma_2\}} T(\sigma_1, \sigma_2) T(\sigma_2, \sigma_3) \right) T(\sigma_3, \sigma_4) \cdots T(\sigma_N, \sigma_1) \quad (2.14)$$

$$= \sum_{\{\sigma_1\}} \sum_{\{\sigma_4\}} \cdots \sum_{\{\sigma_N\}} \left(\sum_{\{\sigma_3\}} T^2(\sigma_1, \sigma_3) T(\sigma_3, \sigma_4) \right) T(\sigma_4, \sigma_5) \cdots T(\sigma_N, \sigma_1) \quad (2.15)$$

$$\vdots \quad (2.16)$$

$$= \sum_{\{\sigma_1\}} T^N(\sigma_1, \sigma_1) \quad (2.17)$$

$$= \text{Tr} \left(T^N \right) \quad (2.18)$$

La matriz T es simétrica por construcción y por lo tanto sus autovalores son reales.

Si llamamos λ_j , $j = 1, 2, \dots, M$ a los autovalores de T entonces

$$Z = \sum_{j=1}^M \lambda_j^N \quad (2.19)$$

Teorema de Perron-Frobenius: Dada una matriz simétrica $M \times M$ ($M < \infty$) \mathbf{A} , con elementos de matriz $A_{ij} > 0$ para todo i, j , el mayor autovalor es:

1. real y positivo,
2. no-degenerado,
3. una función analítica de los elementos de matriz A_{ij} .

Podemos entonces ordenar los autovalores de T de manera que

$$\lambda_1 > \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \dots \geq \lambda_M$$

donde λ_1 por el teorema anterior es una función analítica de β ($T > 0$) y otros parámetros incluidos en el Hamiltoniano, ya que asumimos M finito. De esta manera, la energía libre resulta

$$\begin{aligned} -\beta f &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left[\lambda_1^N \left(1 + \sum_{i=2}^M (\lambda_i / \lambda_1)^N \right) \right] \\ &= \ln \lambda_1 + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left[1 + \sum_{i=2}^M (\lambda_i / \lambda_1)^N \right] \\ &= \ln \lambda_1 \end{aligned} \tag{2.20}$$

Dado que λ_1 es una función analítica de todos sus parámetros, esto constituye una demostración alternativa de que en un sistema unidimensional con interacciones de primeros vecinos no existe transición de fase a temperatura finita.

2.4 El modelo de Ising unidimensional

Vamos analizar ahora la solución del modelo de Ising unidimensional con interacción a primeros vecinos. Antes de aplicar el método anterior, vamos a resolver el problema con condiciones de contorno libres a campo nulo, para el cual

$$-\beta H = K \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1}$$

$$Z(N, T) = \sum_{S_1=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \prod_{i=1}^{N-1} \exp(K S_i S_{i+1})$$

Sumemos primero sobre S_N :

$$\begin{aligned} \sum_{S_N=\pm 1} \exp(K S_{N-1} S_N) &= \exp(K S_{N-1}) + \exp(-K S_{N-1}) \\ &= 2 \cosh(K S_{N-1}) \\ &= 2 \cosh(K) \end{aligned} \tag{2.21}$$

ya que $\cosh(x)$ es una función par. Tenemos entonces

$$Z(N, T) = 2 \cosh(K) Z(N-1, T)$$

Iterando esta ecuación obtenemos

$$Z(N, T) = \sum_{S_1=\pm 1} [2 \cosh(K)]^{N-1} = 2 [2 \cosh(K)]^{N-1}$$

de donde la energía libre resulta

$$-\beta f(T) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z(N, T) = \ln(2 \cosh K) \tag{2.22}$$

La derivación anterior se basa en el hecho de que el resultado de la suma sobre S_N es independiente de S_{N-1} . En presencia de campo externo esto ya no se cumple. Vamos a entonces a calcular la función partición a campo no nulo, pero usando condiciones de contorno periódicas mediante el método de matriz de transferencia. En este caso podemos escribir

$$Z(N, B, T) = \sum_{S_1=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \exp \left[K \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} + \frac{h}{2} \sum_{i=1}^N (S_i + S_{i+1}) \right] \tag{2.23}$$

con $h \equiv \beta B$ y $S_{N+1} = S_1$. La matriz de transferencia en este caso es 2×2 y sus elementos tienen la forma

$$T(S, S') = \exp \left[K S S' + \frac{h}{2} (S + S') \right] \quad (2.24)$$

con $S, S' = \pm 1$, esto es

$$T = \begin{pmatrix} T(+1, +1) & T(+1, -1) \\ T(-1, +1) & T(-1, -1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{K+h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-h} \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

Los autovalores resultan

$$\lambda_{1,2} = e^K \left[\cosh(h) \pm \sqrt{\cosh^2(h) - 2 e^{-2K} \sinh(2K)} \right] \quad (2.26)$$

A campo nulo $h = 0$ tenemos

$$\lambda_1 = 2 \cosh(K) > \lambda_2 = 2 \sinh(K) > 0$$

y en general $\lambda_1 > \lambda_2 \geq 0$. La energía libre por partícula resulta entonces

$$f(T, B) = -J - k_B T \ln \left\{ \cosh(\beta B) + \sqrt{\cosh^2(\beta B) - 2 e^{-2\beta J} \sinh(2\beta J)} \right\} \quad (2.27)$$

que es una función analítica de T y B . Notemos que a campo nulo esta expresión se reduce a la Ec.(2.22), tal como esperado. La magnetización por spin está dada por

$$m(T, B) = - \left(\frac{\partial f}{\partial B} \right)_T = \frac{\sinh(\beta B)}{\sqrt{\cosh^2(\beta B) - 2 e^{-2\beta J} \sinh(2\beta J)}} \quad (2.28)$$

Vemos que $m \rightarrow 0$ cuando $B \rightarrow 0$, para toda $T \neq 0$, y por lo tanto este sistema no presenta transición de fase a temperatura finita, esto es, se comporta como un paramagneto a toda temperatura. Para $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) tenemos que

$$\sinh(\beta B) \sim \operatorname{sgn}(B) \frac{1}{2} e^{\beta|B|} \quad \cosh(\beta B) \sim \frac{1}{2} e^{\beta|B|}$$

con lo cual $m(T, B) \rightarrow \operatorname{sgn}(B)$ (ver Fig.2.1).

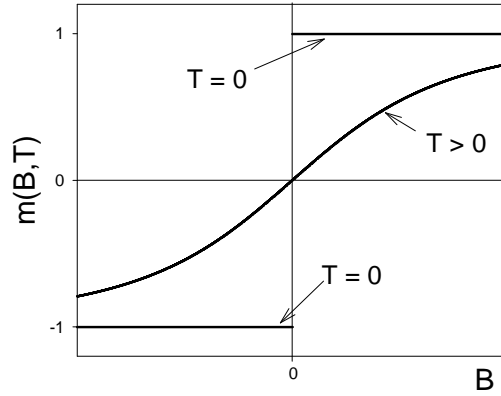


Figura 2.1: Magnetización vs. campo para el modelo de Ising en $d = 1$.

Podemos calcular también la susceptibilidad a campo nulo

$$\chi = \left. \frac{\partial m}{\partial B} \right|_{B=0} = \frac{e^{2J/k_B T}}{k_B T}$$

Para $T \gg 1$ tenemos que $\chi \sim 1/k_B T$, lo cual se conoce como *ley de Curie* (comportamiento típico de paramagnetos). Podemos calcular también la entropía por spin $s(T, B) = -(\partial f / \partial T)_B$, y mediante esta el calor específico a campo constante

$$C_{B=0} = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_{B=0} = -T \left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \right)_{B=0} = \frac{J^2}{k_B T^2} \frac{1}{\cosh^2 \left(\frac{J}{k_B T} \right)} \quad (2.29)$$

que es también una función analítica para toda $T > 0$. Notemos que χ *diverge* cuando $T \rightarrow 0$.

Podemos utilizar la matriz de transferencia para calcular también funciones de correlación. Para ello calculemos primero

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{S_1} \cdots \sum_{S_N} T(S_1, S_2) \cdots T(S_{i-1}, S_i) S_i T(S_i, S_{i+1}) \cdots T(S_N, S_1)$$

Analicemos primero la suma en S_i :

$$\sum_{S_i=\pm 1} T(S_{i-1}, S_i) S_i T(S_i, S_{i+1})$$

es simple verificar que la misma es igual al elemento de matriz $A(S_{i-1}, S_{i+1})$ de la matriz

$$A = T\sigma^z T$$

donde

$$\sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

es una de las matrices de Pauli. Usando la propiedad cíclica de la traza de un producto de matrices tenemos que

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} [T^i \sigma^z T^{N-i}] = \frac{1}{Z} \text{Tr} [\sigma^z T^N]$$

Sea ahora C la matriz de la transformación unitaria que diagonaliza T , esto es

$$C^{-1}TC = T' = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$$

y llamemos

$$C^{-1}\sigma^z C = \begin{pmatrix} e & g \\ f & k \end{pmatrix}$$

Los elementos de matriz (e, f, g, k) son funciones analíticas de (B, T, J) y pueden calcularse sin esfuerzo. Tenemos entonces que

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} [C^{-1}\sigma^z C T'^N] = \frac{e\lambda_1^N + k\lambda_2^N}{\lambda_1^N + \lambda_2^N}$$

de donde $\langle S_i \rangle = e$ en el límite $N \rightarrow \infty$. Calculemos ahora la función de correlación:

$$\begin{aligned}
\langle S_i S_{i+r} \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[T^i \sigma^z T^r \sigma^z T^{N-r-i} \right] \\
&= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[\sigma^z T^r \sigma^z T^{N-r} \right] \\
&= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[(C^{-1} \sigma^z C) T^{r'} (C^{-1} \sigma^z C) T'^{N-r} \right] \tag{2.30}
\end{aligned}$$

Puede verse entonces que en el límite $N \rightarrow \infty$:

$$\langle S_i S_{i+r} \rangle = e^2 + f g \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^r$$

La función de correlación conectada resulta entonces

$$C_c^{(2)}(r) = f g \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^r = f g e^{-r/\xi}$$

donde la longitud de correlación

$$\xi = \frac{1}{\ln(\lambda_1/\lambda_2)}$$

se mide en unidades del parámetro de red. A campo nulo tenemos que

$$\xi = \frac{1}{\ln[\coth(\beta J)]}$$

Vemos que las correlaciones decaen exponencialmente para toda $T > 0$. Notemos que ξ *diverge* para $T \rightarrow 0$. Esta divergencia, al igual que la χ y de la susceptibilidad nos muestran que el modelo presenta una transición de fase a *temperatura cero*.

2.5 El modelo n -vectorial unidimensional

Consideremos el modelo n -vectorial con $|\vec{S}_i| = 1$ a campo nulo, en una dimensión y con condiciones de contorno libres. La función de partición tiene la forma

$$Z(N, T) = \int \exp \left(K \sum_{i=1}^{N-1} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \right) d\vec{S}_1 \cdots d\vec{S}_N$$

donde cada una de las integrales esta restringida a una hipersfera de radio unidad $|\vec{S}_i| = 1$. Al igual que en el modelo de Ising con condiciones de contorno libres,

vamos a ir resolviendo las integrales de a una, comenzando por la integral en \vec{S}_N .

Esta integral tiene la forma

$$\int_{|\vec{S}|=1} e^{\vec{\alpha} \cdot \vec{S}} d\vec{S}$$

donde $\vec{\alpha}$ es un vector n -dimensional. Para resolver esta integral consideremos una función de la forma

$$F_n(r) = \int_{|\vec{S}|=r} e^{\vec{\alpha} \cdot \vec{S}} d\sigma_r$$

donde $d\sigma_r$ es el elemento de área sobre una hipersfera n dimensional de radio r .

Tenemos que

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-sr^2} F_n(r) dr &= \int_{-\infty}^\infty \cdots \int_{-\infty}^\infty \exp\left(-s \sum_{i=1}^n S_i^2 + \sum_{i=1}^n \alpha_i S_i\right) dS_1 \cdots dS_n \\ &= \left(\frac{\pi}{s}\right)^{n/2} \exp(\alpha^2/4s) \end{aligned} \quad (2.31)$$

donde hemos usado que

$$\int_{-\infty}^\infty dx e^{-ax^2+bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp(b^2/4a)$$

y $\alpha \equiv |\vec{\alpha}| = \sqrt{\sum_{i=1}^n \alpha_i^2}$. Haciendo el cambio de variable $r^2 = x$ en la integral del lado izquierdo de la Ec.(2.31) tenemos que la misma resulta igual a la transformada de Laplace de la función $F_n(x^{1/2})/2x^{1/2}$:

$$\int_0^\infty e^{-sr^2} F_n(r) dr = \int_0^\infty e^{-sx} F_n(x^{1/2}) dx / 2x^{1/2}$$

De tablas obtenemos que

$$\mathcal{L} \left[\left(\frac{t}{k}\right)^{\frac{\nu-1}{2}} I_{\nu-1}(2\sqrt{kt}) \right] = \frac{1}{s^\nu} e^{k/s} \quad \nu > 0$$

donde I_ν es una función de Bessel modificada de primer tipo de orden ν , la cual posee la representación integral:

$$I_\nu(y) = (y/2)^\nu \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \exp(p + y^2/4p) p^{-(\nu+1)} dp$$

donde c es una constante real arbitraria $c > 0$. Haciendo todos los reemplazos apropiados obtenemos finalmente

$$F_n(r) = (2\pi)^{n/2} \alpha^{1-n/2} r^{n/2} I_{\frac{n}{2}-1}(\alpha r)$$

y así

$$\int_{|\vec{S}|=1} e^{\vec{\alpha} \cdot \vec{S}} d\vec{S} = F_n(1) = (2\pi)^{n/2} \alpha^{1-n/2} I_{\frac{n}{2}-1}(\alpha)$$

En nuestro caso $\vec{\alpha} = K \vec{S}'$ donde \vec{S}' es un vector unitario, la integral es independiente de \vec{S}' y por lo tanto

$$Z(N, T) = Z(N-1, T) \left\{ (2\pi)^{n/2} K^{1-n/2} I_{\frac{n}{2}-1}(K) \right\}$$

Iterando esta ecuación $N-1$ veces obtenemos

$$Z(N, T) = \left\{ (2\pi)^{n/2} K^{1-n/2} I_{\frac{n}{2}-1}(K) \right\}^{N-1} \int_{|\vec{S}_1|=1} dS_1 = \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)} \left\{ (2\pi)^{n/2} K^{1-n/2} I_{\frac{n}{2}-1}(K) \right\}^{N-1}$$

Esta es una función analítica para K finito y por lo tanto el modelo no presenta transición de fase con orden de largo alcance a temperatura finita, tal como esperado.

