

2.6 El modelo de Ising en $d = 2$

El modelo de Ising bidimensional a campo nulo fue resuelto por primera vez usando la técnica de matriz de transferencia por L. Onsager ¹, quien obtuvo la energía libre. Posteriormente C. N. Yang ² obtuvo una expresión analítica para la magnetización espontánea. Vamos a considerar aquí una versión más simple de una solución alternativa obtenida varios años después por Shultz, Mattis y Lieb³.

2.6.1 Construcción de la matriz de transferencia

Consideremos una red cuadrada con m filas y n columnas, tal que $N = m \times n$. Podemos denotar los spines como $S_{i,j}$, con $i = 1, 2, \dots, m$ y $j = 1, 2, \dots, n$. Vamos a asumir interacciones solo entre primeros vecinos, condiciones de contorno periódicas en las columnas y $B = 0$.

Así, podemos escribir el Hamiltoniano como

$$H = -J \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n S_{i,j} S_{i+1,j} - J \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n S_{i,j} S_{i,j+1}$$

El primer término en el Hamiltoniano toma en cuenta las interacciones *entre filas* y el segundo las interacciones entre columnas. Vamos a denotar por

$$\vec{S}_j = (S_{1,j}, S_{2,j}, \dots, S_{m,j})$$

al vector de m componentes que representa los spines en la columna j -ésima, donde por las condiciones de contorno periódicas $\vec{S}_{j+n} = \vec{S}_j$. La energía de interacción dentro de la columna j -ésima puede escribirse entonces como

$$U(\vec{S}_j) = -J \sum_{i=1}^m S_{i+1,j} S_{i,j}$$

mientras que la energía de interacción entre dos columnas adyacentes j y $j+1$ como $-J \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1}$. La función partición puede escribirse entonces como

¹L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944); B. Kaufman, Phys. Rev. **76**, 1232 (1949); B. Kaufman y L. Onsager, Phys. Rev. **76**, 1244 (1949).

²C. N. Yang, Phys. Rev. **85**, 809 (1952).

³T. D. Schultz, D. C. Mattis y E. H. Lieb, Rev. Mod. Phys. **36**, 856 (1964).

$$Z = \sum_{\{\vec{S}_j\}} \exp \left(-\beta \sum_{j=1}^n [U(\vec{S}_j) - J\vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1}] \right)$$

Podemos ahora aplicar el formalismo de matriz de transferencia definiendo

$$T_2(\vec{S}_j, \vec{S}_{j+1}) = \exp [-\beta U(\vec{S}_j)] \times \exp [\beta J \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1}], \quad (2.32)$$

de tal manera que

$$Z = \text{Tr } T_2^n.$$

Los índices de la matriz (2.32) corren sobre todas las posibles configuraciones de spines en una columna (esto es, de los m spines en ella) las cuales totalizan 2^m . Así, la dimensión de la matriz de transferencia es $2^m \times 2^m$, a diferencia del caso unidimensional donde la dimensión es independiente del tamaño del sistema. La matriz (2.32) es independiente del par de columnas adyacentes de spines $(\vec{S}_j, \vec{S}_{j+1})$ de manera que podemos escribir:

$$T_2(\vec{S}, \vec{S}') = \exp \left[K \sum_{i=1}^m S_{i+1} S_i \right] \times \exp [K \vec{S} \cdot \vec{S}'], \quad (2.33)$$

done $K \equiv \beta J$. El procedimiento que vamos a utilizar consta de tres etapas: primero vamos a mapear el problema bidimensional de spines clásicos a un problema unidimensional de spines cuánticos, luego transformaremos este en un problema de fermiones sin spin para finalmente proceder a diagonalizar este último.

Comenzamos reanalizando el método de la matriz de transferencia en el caso unidimensional. La matriz de transferencia en $d = 1$ (2.25) a campo nulo resulta

$$T_1 = \begin{pmatrix} e^K & e^{-K} \\ e^{-K} & e^K \end{pmatrix}, \quad (2.34)$$

y puede expresarse en términos de la matriz de Pauli σ^x como sigue

$$\begin{aligned}
T_1 &= e^K + e^{-K} \sigma^x = e^K (1 + e^{-2K} \sigma^x) \\
&= e^K (1 + \tanh(K^*) \sigma^x) = e^K (\cosh(K^*))^{-1} e^{K^* \sigma^x} \\
&= g(K) e^{K^* \sigma^x}.
\end{aligned} \tag{2.35}$$

donde K^* se define a través de la ecuación

$$e^{-2K} = \tanh(K^*) \tag{2.36}$$

y

$$g(K) = \frac{e^K}{\cosh(K^*)} = \sqrt{2 \sinh(2K)} \tag{2.37}$$

Podemos pensar que construimos la cadena de spines añadiendo los sitios de a uno. El efecto de esta matriz de transferencia es entonces añadir una nueva interacción entre el extremo de la cadena y cada nuevo sitio agregado, como se muestra esquemáticamente en la Fig.2.2. Consideremos ahora el análogo en el caso bidimensional, en el cual el efecto de la matriz (2.33) es extender un sistema pre-existente, añadiendo una nueva columna de spines. Dicho proceso puede descomponerse en dos operaciones sucesivas, que llamaremos V_1 y V_2 , las cuales se muestran esquemáticamente en la Fig.2.3: en V_1 se añaden las interacciones horizontales entre los sitios de la última columna pre-existente y la nueva columna, mientras que en V_2 se añaden las interacciones entre los sitios de la nueva columna. Notamos entonces que la adición de interacciones horizontales puede ser realizada para cada sitio independientemente, cada una de las cuales resulta realizada por una matriz de transferencia unidimensional del tipo (2.35). Vamos a introducir entonces un conjunto de pseudo-spines cuánticos, es decir, un conjunto de operadores σ_i^α , con $i = 1, \dots, m$ y $\alpha = x, y, z$. Sea $|\vec{S}\rangle$ el espacio producto directo de los m spines, es decir,

$$|\vec{S}\rangle = |S_1\rangle |S_2\rangle \dots |S_m\rangle \tag{2.38}$$

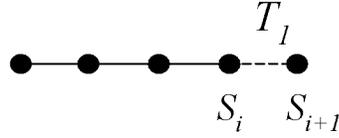


Figura 2.2: El producto por la matriz de transferencia T_1 añade un nuevo spin a la cadena.

donde

$$\sigma_i^z |S_i\rangle = S_i |S_i\rangle \quad i = 1, \dots, m$$

con $S_i = \pm 1$. Operando en dicho espacio los operadores σ_i^α son representados por las matrices de dimensión $2^m \times 2^m$

$$\sigma_1^\alpha = \sigma^\alpha \otimes I \otimes I \otimes \dots \otimes I \quad (2.39)$$

$$\sigma_2^\alpha = I \otimes \sigma^\alpha \otimes I \otimes \dots \otimes I \quad (2.40)$$

$$\vdots = \vdots \quad (2.41)$$

$$\sigma_m^\alpha = I \otimes I \otimes I \otimes \dots \otimes \sigma^\alpha \quad (2.42)$$

donde σ^α ($\alpha = x, y, z$) son las matrices de Pauli e I es la identidad 2×2 . La adición de las interacciones horizontales puede entonces expresarse a través de la matriz

$$V_1 = g(K)^m \exp\left(K^* \sum_{i=1}^m \sigma_i^x\right) \quad (2.43)$$

La adición de las interacciones verticales, es decir, entre spines de la misma columna puede llevarse a cabo multiplicando por la matriz

$$V_2 = \exp\left(K \sum_{i=1}^m \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z\right) \quad (2.44)$$

Es fácil verificar que efectivamente

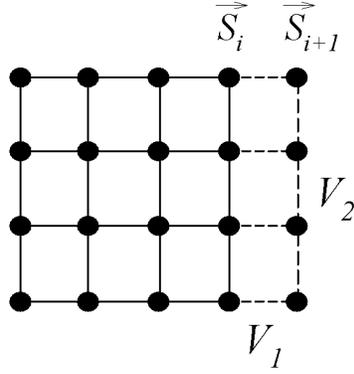


Figura 2.3: El añadido de una nueva columna de espines en $d = 2$ se ejecuta por el producto de las matrices V_1 y V_2 .

$$\langle \vec{S} | V_2 V_1 | \vec{S}' \rangle = T_2(\vec{S}, \vec{S}') \quad (2.45)$$

donde el lado derecho de esta última ecuación viene dada por la Ec.(2.33). La función partición viene dada entonces por

$$Z = \text{Tr} (V_2 V_1)^n = \text{Tr} (V_2^{1/2} V_1 V_2^{1/2})^n = \text{Tr} V^n \quad (2.46)$$

donde hemos introducido la matriz de transferencia simetrizada $V = V_2^{1/2} V_1 V_2^{1/2}$, ya que esto facilita el procedimiento de diagonalización posterior.

2.6.2 Representación en términos de operadores de Majorana

Vamos a introducir a continuación el conjunto de operadores $\psi_1(i)$, $\psi_2(i)$ con $i = 1, \dots, m$ definidos por

$$\psi_1(j) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sigma_1^x \sigma_2^x \cdots \sigma_{j-1}^x \sigma_j^y \quad (2.47)$$

$$\psi_2(j) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sigma_1^x \sigma_2^x \cdots \sigma_{j-1}^x \sigma_j^z \quad (2.48)$$

Estos operadores son hermitianos, ya que están expresados en términos de los operadores de Pauli. A partir de las propiedades de conmutación de las matrices de Pauli es simple verificar

$$\{\psi_a(j), \psi_b(l)\} = \psi_a(j)\psi_b(l) + \psi_b(l)\psi_a(j) = \delta_{a,b}\delta_{j,l}. \quad (2.49)$$

Un conjunto de operadores que satisfacen estas propiedades se conocen como *Operadores de Majorana*.

Es fácil verificar que las matrices V_1 y V_2 pueden ser expresadas como sigue en términos de los operadores de Majorana:

$$V_1 = g(K)^m \exp\left(-2iK^* \sum_{i=1}^m \psi_1(i)\psi_2(i)\right) \quad (2.50)$$

$$V_2 = \exp\left(2iK \sum_{i=1}^m \psi_1(i)\psi_2(i+1)\right) \quad (2.51)$$

Un punto algo sutil, pero importante a considerar, son las condiciones contorno a imponer a los operadores en esta representación. Necesitamos escoger un valor de $\psi_2(m+1)$ en la Ec.(2.51) tal que nos reproduzca el término $\sigma_m^z \sigma_1^z$ correspondiente a las condiciones periódicas en la Ec.(2.44). La primera tendencia es a tomar condiciones periódicas también los operadores de Majorana $\psi_2(m+1) = \psi_2(1)$. En ese caso es fácil ver que

$$2i\psi_1(m)\psi_2(1) = -\sigma_{prod} \sigma_m^z \sigma_1^z,$$

donde

$$\sigma_{prod} = \sigma_1^x \sigma_2^x \cdots \sigma_m^x \quad (2.52)$$

Ahora bien, es claro que el operador σ_{prod} tiene solo dos autovalores múltiplemente degenerados, ± 1 . Además, es simple ver que

$$[\sigma_{prod}, \psi_1(i)\psi_2(i)] = [\sigma_{prod}, \psi_1(i)\psi_2(i+1)] = 0 \quad \forall i.$$

Por lo tanto, σ_{prod} y V_1V_2 pueden diagonalizarse simultaneamente. Eligiendo entonces que los autovectores de la matriz de transferencia sean a la vez autovectores de σ_{prod} , estos perteneceran a uno de los dos subespacios U_{\pm} correspondientes a los dos autovalores ± 1 de σ_{prod} respectivamente. Por lo tanto, si el autovector correspondiente a mayor autovalor cae en el subespacio U_+ elegiremos la condición de contorno *antiperiodica* $\psi_2(m+1) = -\psi_2(1)$, mientras que si cae en el subespacio U_- elegiremos la condición de contorno *periodica* $\psi_2(m+1) = \psi_2(1)$. Así, a la condición de contorno periodica para los spines le corresponden dos posibles condiciones de contorno en la representación de Majorana.

2.6.3 Representación de Fourier en términos de operadores de Fermi

Dado que el sistema es invariante ante traslaciones, conviene transformar Fourier a fin de desacoplar los grados de libertad. Vamos a introducir entonces la siguiente representación de los operadores de Majorana:

$$\psi_a(j) = \frac{1}{\sqrt{m}} \sum_{q \geq 0} \left(e^{iqj} C_a(q) + e^{-iqj} C_a^\dagger(q) \right) \quad a = 1, 2 \quad (2.53)$$

donde los operadores $C_a(q)$, $C_a^\dagger(q)$ son operadores fermionicos, esto es, satisfacen las relaciones de conmutación:

$$\{C_a(q), C_b(q')\} = 0$$

$$\{C_a^\dagger(q), C_b^\dagger(q')\} = 0$$

$$\{C_a(q), C_b^\dagger(q')\} = \delta_{a,b} \delta_{q,q'}.$$

A partir de estas relaciones es facil demostrar que los operadores de Majorana cumplen con las relaciones (2.49). La elección de los valores de q en la suma de la Ec.(2.53) corresponde a aquellos que satisfacen $e^{iqm} = \pm 1$, dependiendo de la condición de contorno utilizada para los operadores de Majorana, esto es:

$$U_+ : \quad q = \pm \frac{\pi}{m}, \pm \frac{3\pi}{m}, \dots, \pm \frac{m-1}{m} \pi$$

$$U_- : \quad q = 0, \pm \frac{2\pi}{m}, \pm \frac{4\pi}{m}, \dots, \pm \frac{m-2}{m} \pi, \pi$$

donde hemos asumido por simplicidad que m es par. En la suma de la Ec.(2.53) solo entran los valores positivos de⁴ q , de uno u otro grupo. Reemplazando la Ec.(2.53) en las Ecs.(2.50) y (2.51) obtenemos

$$V_1 = g(K)^m \exp \left[-2iK^* \sum_{q \geq 0} \left(C_1(q)C_2^\dagger(q) + C_1^\dagger(q)C_2(q) \right) \right] \quad (2.54)$$

$$V_2 = \exp \left[2iK \sum_{q \geq 0} \left(e^{-iq} C_1(q)C_2^\dagger(q) + e^{iq} C_1^\dagger(q)C_2(q) \right) \right] \quad (2.55)$$

Las formas cuadráticas en los exponentes conmutan entre si para diferentes valores de q y por lo tanto podemos descomponer la matriz $V = V_2^{1/2} V_1 V_2^{1/2}$ en un producto de matrices como

$$V = g(K)^m \prod_{q \geq 0} V(q) \quad (2.56)$$

donde

$$V(q) = V_2(q)^{1/2} V_1(q) V_2(q)^{1/2} \quad (2.57)$$

$$V_1(q) = \exp \left[-2iK^* \left(C_1(q)C_2^\dagger(q) + C_1^\dagger(q)C_2(q) \right) \right] \quad (2.58)$$

$$V_2(q) = \exp \left[2iK \left(e^{-iq} C_1(q)C_2^\dagger(q) + e^{iq} C_1^\dagger(q)C_2(q) \right) \right] \quad (2.59)$$

El problema se ha reducido así a la diagonalización de $V(q)$.

⁴Los valores negativos repiten los factores de fase. De ahí es posible ver que los términos con q negativo no producen nuevos operadores fermiónicos independientes

2.6.4 Autovalores y energía libre

Es conveniente representar las matrices $V_1(q)$ y $V_2(q)$ en la base de autovalores de los operadores número de ocupación $n_1(q) = C_1^\dagger(q)C_1(q)$ y $n_2(q) = C_2^\dagger(q)C_2(q)$, a los cuales llamaremos $|n_1 n_2\rangle$, donde $n_1 = 0, 1$, $n_2 = 0, 1$ son los correspondientes autovalores. Este subespacio tiene por lo tanto dimensión 4.

Consideremos primero el subespacio expandido por los vectores $|00\rangle$ y $|11\rangle$. Todos los elementos de matriz de los operadores que aparecen en los exponentes de las Ecs.(2.58) y (2.59) son nulos

$$C_1(q)C_2^\dagger(q)|00\rangle = C_1(q)C_2^\dagger(q)|11\rangle = 0$$

$$C_1^\dagger(q)C_2(q)|00\rangle = C_1^\dagger(q)C_2(q)|11\rangle = 0.$$

Por lo tanto, $|00\rangle$ y $|11\rangle$ son ambos autovectores de $V_1(q)$ y $V_2(q)$ (y por ende de $V(q)$) con autovalores iguales a 1. $V(q)$ tiene entonces un autovalor igual a 1 doblemente degenerado en este subespacio.

Solo nos resta encontrar los autovalores de $V(q)$ en el subespacio expandido por los autovectores $|10\rangle$ y $|01\rangle$, a los cuales denominaremos

$$|-\rangle \equiv |10\rangle \quad |+\rangle \equiv |01\rangle$$

Tenemos las siguientes propiedades:

$$-C_1(q)C_2^\dagger(q)|+\rangle = 0 \quad -C_1(q)C_2^\dagger(q)|-\rangle = |+\rangle$$

$$C_1^\dagger(q)C_2(q)|-\rangle = 0 \quad C_1^\dagger(q)C_2(q)|+\rangle = |-\rangle$$

.

Por lo tanto los operadores $-C_1(q)C_2^\dagger(q)$ y $C_1^\dagger(q)C_2(q)$ actúan como los operadores de subida y bajada en el espacio de dos estados $|\pm\rangle$ y podemos introducir un nuevo conjunto de matrices de Pauli τ^x, τ^y, τ^z en este espacio como

$$-C_1(q)C_2^\dagger(q) = \tau^+ = \frac{\tau^x + i\tau^y}{2} \quad (2.60)$$

$$C_1^\dagger(q)C_2(q) = \tau^- = (\tau^+)^\dagger = \frac{\tau^x - i\tau^y}{2} \quad (2.61)$$

De esta manera, si llamamos $\hat{V}_1(q)$ y $\hat{V}_2(q)$ a la restricción de los operadores $V_1(q)$ y $V_2(q)$ al subespacio expandido por los vectores $|\pm\rangle$, tenemos

$$\hat{V}_1(q) = \exp [2iK^* (\tau^+ - \tau^-)] = \exp (-2K^*\tau^y) \quad (2.62)$$

$$\hat{V}_2(q) = \exp \left[-2iK (\tau^+ e^{-iq} - \tau^- e^{iq}) \right] = \exp [2K (\tau^y \cos q - \tau^x \sin q)] \quad (2.63)$$

A fin de facilitar la diagonalización de $\hat{V}_2(q)^{1/2}$ vamos a rotar el espacio de los pseudospines $\vec{\tau}$ un ángulo q alrededor del eje z obteniendo

$$\hat{V}_1(q) = \exp [-2K^* (\tau^y \cos q + \tau^x \sin q)] \quad (2.64)$$

$$\hat{V}_2(q) = \exp (2K\tau^y), \quad (2.65)$$

y a continuación producimos una rotación de $\pi/2$ alrededor del eje x , de manera que $(\tau^x, \tau^y, \tau^z) \rightarrow (\tau^x, -\tau^z, \tau^y)$, con lo cual

$$\hat{V}_1(q) = \exp [2K^* (\tau^z \cos q - \tau^x \sin q)] \quad (2.66)$$

$$\hat{V}_2(q) = \exp (-2K\tau^z), \quad (2.67)$$

Desarrollando la exponencial en (2.66) y utilizando que $(\tau^z \cos q - \tau^x \sin q)^2 = 1$ obtenemos las expresiones:

$$\begin{aligned}\hat{V}_1(q) &= \cosh(2K^*) + \sinh(2K^*) (\tau^z \cos q - \tau^x \sin q) \\ &= \begin{pmatrix} \cosh(2K^*) + \sinh(2K^*) \cos q & -\sinh(2K^*) \sin q \\ -\sinh(2K^*) \sin q & \cosh(2K^*) - \sinh(2K^*) \cos q \end{pmatrix} \\ \hat{V}_2(q)^{1/2} &= \begin{pmatrix} e^{-K} & 0 \\ 0 & e^K \end{pmatrix},\end{aligned}$$

De donde finalmente

$$\hat{V}(q) = \begin{pmatrix} e^{-2K}(\cosh(2K^*) + \sinh(2K^*) \cos q) & -\sinh(2K^*) \sin q \\ -\sinh(2K^*) \sin q & e^{2K}(\cosh(2K^*) - \sinh(2K^*) \cos q) \end{pmatrix} \quad (2.68)$$

La ecuación característica de esta matriz resulta, luego de algún álgebra.

$$\lambda^2 - 2\lambda [\cosh(2K^*) \cosh(2K) - \cos q] + 1 = 0$$

donde hemos utilizado la Ec.(2.36). Por lo tanto, los autovalores λ_{\pm} satisfacen

$$\lambda_+ \lambda_- = 1 \quad (2.69)$$

$$\lambda_+ + \lambda_- = 2 [\cosh(2K^*) \cosh(2K) - \cos q] \quad (2.70)$$

De la Ec.(2.69) podemos expresar los autovalores como $\lambda_{\pm} = e^{\pm\epsilon(q,K)}$ y reemplazando en la Ec.(2.70) obtenemos

$$\cosh(\epsilon(q,K)) = \cosh(2K^*) \cosh(2K) - \cos q = \cosh(2K) \coth(2K) - \cos q \quad (2.71)$$

donde $\epsilon(q,K)$ es la raíz positiva de la Ec.(2.71).

Los cuatro autovalores de $V(q)$ son entonces $1, 1, e^{\epsilon(q,K)}, e^{-\epsilon(q,K)}$. La función partición resulta entonces

$$Z = g(K)^{mn} \prod_{q \geq 0} \text{Tr } V(q)^n = g(K)^{mn} \prod_{q \geq 0} \left(2 + e^{n \epsilon(q, K)} + e^{-n \epsilon(q, K)} \right) \quad (2.72)$$

En el límite $n \rightarrow \infty$ el único autovalor que sobrevive es $e^{n \epsilon(q, K)}$. Así

$$\frac{1}{N} \ln Z \sim \ln g(K) + \frac{1}{m} \sum_{q \geq 0} \epsilon(q, K)$$

Recordando que, para cualquiera de las dos condiciones de contorno utilizadas, $\Delta q = 2\pi/m$, podemos reemplazar la suma por una integral obteniendo finalmente

$$-\beta f = \frac{1}{2} \ln(2 \sinh(2K)) + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \epsilon(q, K) dq \quad (2.73)$$

2.6.5 Análisis de la solución

Utilizando la identidad

$$|z| = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi dx \ln(2 \cosh z - 2 \cos x) \quad (2.74)$$

podemos escribir la energía libre (2.73) como

$$\begin{aligned} -\beta f &= \frac{1}{2} \ln(2 \sinh(2K)) + \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi dq \int_0^\pi dx \ln(2 \cosh \epsilon(q, K) - 2 \cos x) \\ &= \frac{1}{2} \ln(2 \sinh(2K)) + \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi dq \int_0^\pi dx \ln(2 \cosh(2K) \coth(2K) - 2 \cos q - 2 \cos x) \\ &= \frac{1}{2} \ln(2 \cosh(2K)) + \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi dq \int_0^\pi dx \ln \left[1 - \kappa \cos \left(\frac{q+x}{2} \right) \cos \left(\frac{q-x}{2} \right) \right] \\ &= \frac{1}{2} \ln(2 \cosh(2K)) + \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi d\omega_1 \int_0^{\pi/2} d\omega_2 \ln [1 - \kappa \cos \omega_1 \cos \omega_2] \end{aligned} \quad (2.75)$$

donde

$$\kappa = \frac{2 \sinh(2K)}{\cosh^2(2K)} \quad (2.76)$$

Podemos reducir aún mas la expresión (2.75) utilizando nuevamente la Ec.(2.74) y que $\cosh^{-1}(x) = \ln [x + \sqrt{x^2 - 1}]$, obteniendo finalmente (luego de algún álgebra)

$$\beta f(T) = -\ln(2 \cosh 2\beta J) - \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\phi \ln \left[\frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \kappa^2 \text{sen}^2 \phi} \right) \right]$$

La energía interna por spin viene dada por

$$u(T) = \frac{\partial(\beta f(T))}{\partial \beta} = -2J \tanh(2\beta J) + \frac{\kappa}{2\pi} \frac{d\kappa}{d\beta} \int_0^\pi d\phi \frac{\text{sen}^2 \phi}{\Delta(1 + \Delta)} \quad (2.77)$$

donde $\Delta(\phi) = \sqrt{1 - \kappa^2 \text{sen}^2 \phi}$. Se verifica facilmente que

$$\int_0^\pi d\phi \frac{\text{sen}^2 \phi}{\Delta(1 + \Delta)} = \frac{1}{\kappa^2} \int_0^\pi \frac{d\phi}{\Delta(\phi)} - \frac{\pi}{\kappa^2} \quad (2.78)$$

Reemplazando en la Ec.(2.77) obtenemos, con algo de trabajo, que

$$u(T) = -J \coth(2\beta J) \left[1 + \frac{2}{\pi} \kappa' K_1(\kappa) \right] \quad (2.79)$$

donde

$$K_1(\kappa) \equiv \int_0^{\pi/2} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - \kappa^2 \text{sen}^2 \phi}}$$

es una integral elíptica completa de primera especie y

$$\kappa' \equiv 2 \tanh^2(2\beta J) - 1$$

$$\kappa^2 + \kappa'^2 = 1$$

Derivando la Ec.(2.79) podemos obtener, con cierto trabajo, el calor específico

$$c(T) = \frac{du(T)}{dT} = \frac{2k_B}{\pi} (\beta J \coth(2\beta J))^2 \left\{ 2K_1(\kappa) - 2E_1(\kappa) - (1 - \kappa') \left[\frac{\pi}{2} + \kappa' K_1(\kappa) \right] \right\} \quad (2.80)$$

donde

$$E_1(\kappa) \equiv \int_0^{\pi/2} d\phi \sqrt{1 - \kappa^2 \text{sen}^2 \phi}$$

es una integral elíptica completa de segunda especie.

Si analizamos el comportamiento de κ (Ec.(2.76) en función de β , veremos que $0 \leq \kappa \leq 1 \forall \beta > 0$ y que la misma presenta un máximo $\kappa = 1$ para β tal que $\sinh(2\beta J) = 1$. La integral elíptica $K_1(\kappa)$ tiene una singularidad en $\kappa = 1$ ($\kappa' = 0$), en cuyo entorno tenemos que

$$K_1(\kappa) \sim \ln \frac{4}{|\kappa'|}$$

$$E_1(\kappa) \sim 1$$

En dicho punto todas las funciones termodinámicas son no-analíticas. La temperatura crítica resulta entonces de la condición

$$\kappa = \frac{2 \sinh(2\beta_c J)}{\cosh^2(2\beta_c J)} = 1$$

o bien de $\kappa' = 0$

$$2 \tanh^2(2\beta_c J) = 1$$

de donde resulta

$$k_B T_c / J = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})}.$$

Otras relaciones satisfechas por T_c son

$$\sinh(2\beta_c J) = 1.$$

$$\cosh^2(2\beta_c J) = 2.$$

En el entorno de T_c tenemos entonces que

$$c(T) \sim -\frac{2k_B}{\pi} \left(\frac{2J}{k_B T_c} \right)^2 \ln |\kappa'| \quad (2.81)$$

Pero

$$\kappa' = 2 \tanh^2(2\beta J) - 1 = 2 \tanh^2(2\beta J) - 2 \tanh^2(2\beta_c J) \sim D(T - T_c)$$

donde D es una constante. Así

$$c(T) \sim -\frac{2k_B}{\pi} \left(\frac{2J}{k_B T_c} \right)^2 \ln \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right| \quad (2.82)$$

esto es, $c(T)$ presenta una singularidad logarítmica.

El parámetro de orden, esto es, la magnetización espontánea es

$$m(T) = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ \left\{ 1 - [\sinh(2\beta J)]^{-4} \right\}^{1/8} & T \leq T_c \end{cases} \quad (2.83)$$

En el entorno del punto crítico tenemos que

$$m(T) \sim \left[\sinh^4(2\beta J) - \sinh^4(2\beta_c J) \right]^{1/8} \sim A(T_c - T)^{1/8} \quad (2.84)$$

donde A es una constante. El exponente crítico del parámetro de orden resulta entonces $\beta = 1/8$. Se ha demostrado por métodos indirectos (i.e., sin calcular explícitamente la función partición) que: $\gamma = 7/4$, $\delta = 15$, $\nu = 1$ y $\eta = 1/4$. Notemos que las desigualdades de Griffiths y Rushbrooke entre exponentes críticos (derivadas de las condiciones de estabilidad termodinámica)

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2$$

$$\alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2$$

se cumplen en este caso como *igualdades*. Este hecho no trivial se observó también en muchos otros fenómenos críticos y, como veremos más adelante, constituyó una de las piezas claves que condujo a la comprensión de los mecanismos subyacentes en este tipo de fenómenos. Finalmente, cabe mencionar que los valores mencionados para los exponentes son los mismos para cualquier red cristalina en $d = 2$ (universalidad). Las únicas cantidades que cambian al cambiar de red son la temperatura crítica y los prefactores en los comportamientos asintóticos.

2.7 Los modelos gaussiano y esferico

Vamos a considerar un Hamiltoniano general de la forma

$$H = - \sum_{\vec{r} \neq \vec{r}'} J(|\vec{r} - \vec{r}'|) S_{\vec{r}} S_{\vec{r}'} - B \sum_{\vec{r}} S_{\vec{r}}$$

donde los vectores \vec{r} apuntan a los sitios de una red hipercúbica Ω en d dimensiones, con parámetro de red unitario, conteniendo $N = L^d$ sitios, esto es, $\vec{r} = \sum_{j=1}^d n_j \hat{e}_j$, siendo \hat{e}_j vectores coordenados y $n_j = 0, 1, \dots, L-1$. Las variables $S_{\vec{r}}$ son reales y vamos a asumir condiciones de contorno periódicas, esto es:

$$S_{\vec{r}+mL\hat{e}_j} = S_{\vec{r}} \quad m : \text{entero} \quad j = 1, \dots, d$$

Vamos a considerar ademas una versión un poco mas general del modelo gaussiano que la vista en la sección anterior:

$$\begin{aligned} Z_G &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{\vec{r}} e^{-b S_{\vec{r}}^2} dS_{\vec{r}} \right] e^{-\beta H} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{\vec{r}} dS_{\vec{r}} \right] \exp \left\{ \beta \sum_{\vec{r} \neq \vec{r}'} J(|\vec{r} - \vec{r}'|) S_{\vec{r}} S_{\vec{r}'} + h \sum_{\vec{r}} S_{\vec{r}} - b \sum_{\vec{r}} S_{\vec{r}}^2 \right\} \end{aligned} \quad (2.85)$$

donde $h = \beta B$ y $b > 0$.

Vamos a introducir ahora la transformada de Fourier:

$$S_{\vec{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} S_{\vec{k}} \quad (2.86)$$

donde los vectores de onda $\vec{k} = \sum_{j=1}^d k_j \hat{e}_j$ tienen la propiedad

$$k_j = \frac{2\pi l_j}{L} \quad l_j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm(L-1)/2, L/2 \quad (2.87)$$

Los vectores de onda con $l_j = -L/2$ no se incluyen en la suma, ya que repiten los factores de fase con $l_j = L/2$; notemos, de paso, que el factor de fase con $l_j = L/2 \forall j$ es real ya que $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = (-1)^{\sum_j n_j}$. Es facil comprobar entonces que:

$$\sum_{\vec{r} \in \Omega} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} = N \delta_{\vec{k},0} \quad (2.88)$$

Usando la Ec.(2.88) obtenemos la transformada inversa

$$S_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{r}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} S_{\vec{r}}$$

Usando las Ecs.(2.86) y (2.88) es facil ver que el exponente de la Ec.(2.85) puede escribirse como

$$\sum_{\vec{k}} [\beta \hat{J}(k) - b] S_{\vec{k}} S_{-\vec{k}} + h \sqrt{N} S_{\vec{k}=0}$$

donde

$$\hat{J}(k) = \sum_{\vec{r} \neq 0} J(r) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

y $k = |\vec{k}|$. Ahora bien, la variables $S_{\vec{k}}$ son en principio complejas, lo cual daría la impresión de que tenemos $2N$ variables independientes. No obstante, dado que las variables $S_{\vec{r}}$ tienen que ser reales tenemos que $S_{-\vec{k}} = S_{\vec{k}}^*$. De esta manera, al transformar la integral (2.85) tenemos que elegir N variables independientes. Podemos elegir entonces la mitad de las variables complejas y tomar sus partes reales e imaginarias como variables independientes, excepto $S_{\vec{k}=0}$ y la variable correspondiente a $l_j = L/2 \forall j$ que son reales. Escribiendo $R_{\vec{k}} \equiv \Re(S_{\vec{k}})$, $I_{\vec{k}} \equiv \Im(S_{\vec{k}})$ tenemos

$$\begin{aligned} S_{\vec{r}} &= \frac{1}{\sqrt{N}} S_{\vec{k}=0} + \frac{2}{\sqrt{N}} \sum'_{\vec{k} \neq 0} \Re[e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} S_{\vec{k}}] + \frac{1}{\sqrt{N}} R_N \cos(\vec{k}_N \cdot \vec{r}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} S_{\vec{k}=0} + \frac{2}{\sqrt{N}} \sum'_{\vec{k} \neq 0} (R_{\vec{k}} \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}) - I_{\vec{k}} \text{sen}(\vec{k} \cdot \vec{r})) + \frac{1}{\sqrt{N}} S_N \cos(\vec{k}_N \cdot \vec{r}) \end{aligned}$$

donde $\sum'_{\vec{k} \neq 0}$ corre sobre la mitad de los vectores \vec{k} en el volúmen, $\cos(\vec{k}_N \cdot \vec{r}) = (-1)^{\sum_j n_j}$ y S_N es la amplitud correspondiente . Tenemos asi

$$S_{\vec{k}} S_{-\vec{k}} = |S_{\vec{k}}|^2 = R_{\vec{k}}^2 + I_{\vec{k}}^2$$

La transformación (2.89) puede verse (queda como ejercicio para el lector) que tiene determinante jacobiano igual a $2^{N/2}$. De esta manera

$$\begin{aligned}
Z_G &= 2^{N/2} \int_{-\infty}^{\infty} dS_{\vec{k}=0} \exp \left\{ (\beta \hat{J}(0) - b) S_{\vec{k}=0}^2 + h\sqrt{N} S_{\vec{k}=0} \right\} \times \\
&\quad \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod'_{\vec{k} \neq 0} dR_{\vec{k}} dI_{\vec{k}} \right] \exp \left\{ 2 \sum'_{\vec{k} \neq 0} (\beta \hat{J}(k) - b) (R_{\vec{k}}^2 + I_{\vec{k}}^2) \right\} \times \\
&\quad \int_{-\infty}^{\infty} dS_N \exp \left\{ (\beta \hat{J}(k_N) - b) S_N^2 \right\} \\
&= 2^{N/2} \int_{-\infty}^{\infty} dS_{\vec{k}=0} \exp \left\{ - (b - \beta \hat{J}(0)) S_{\vec{k}=0}^2 + h\sqrt{N} S_{\vec{k}=0} \right\} \times \\
&\quad \prod'_{\vec{k} \neq 0} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -2 (b - \beta \hat{J}(k)) x^2 \right\} dx \right)^2 \times \\
&\quad \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ - (b - \beta \hat{J}(k_N)) x^2 \right\} dx \tag{2.89}
\end{aligned}$$

donde la productoria $\prod'_{\vec{k} \neq 0}$ corre sobre la mitad de los vectores \vec{k} . Recordando que

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

tenemos

$$Z_G = 2^{N/2} \exp \left(\frac{h^2 N}{4(b - \beta \hat{J}(0))} \right) \sqrt{\frac{\pi}{b - \beta \hat{J}(0)}} \left(\prod'_{\vec{k} \neq 0} \frac{\pi}{2(b - \beta \hat{J}(k))} \right) \sqrt{\frac{\pi}{(b - \beta \hat{J}(k_N))}}$$

Dado que $\hat{J}(k)$ depende solo del módulo de \vec{k} podemos levantar la restricción en la productoria y reagrupar todos los términos, obteniendo:

$$Z_G = \exp \left(\frac{h^2 N}{4(b - \beta \hat{J}(0))} \right) \left[\prod_{\vec{k}} \frac{\pi}{b - \beta \hat{J}(k)} \right]^{1/2}$$

de donde, para $N \gg 1$

$$\frac{1}{N} \ln Z_G = \frac{h^2}{4(b - \beta \hat{J}(0))} + \frac{1}{2} \ln \pi - \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}} \ln (b - \beta \hat{J}(k))$$

y en el límite termodinámico tenemos finalmente:

$$\begin{aligned}
-\beta f &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_G \\
&= \frac{h^2}{4(b - \beta \hat{J}(0))} + \frac{1}{2} \ln \pi - \frac{1}{2(2\pi)^d} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \cdots \int_{-\pi}^{\pi} dk_d \ln(b - \beta \hat{J}(k))
\end{aligned}$$

Vemos que la energía libre solo esta definida para

$$b > \beta \max_{\vec{k}} \hat{J}(k)$$

Para el caso de interacciones solo entre primeros vecinos

$$J(\vec{r}) = \begin{cases} J & \text{si } |\vec{r}| = 1 \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases}$$

tenemos

$$\hat{J}(k) = 2J \sum_{j=1}^d \cos(k_j) \quad (2.90)$$

la cual tiene claramente su máximo absoluto en $\vec{k} = 0$ en el cual $\hat{J}(0) = 2dJ$, de donde el modelo presenta una singularidad en

$$\beta_c = b/2dJ$$

Vamos a analizar ahora el modelo esférico, cuya función de partición es

$$Z_N(\beta, B) = \int_{\Omega} \left[\prod_i dS_i \right] \exp \left[\beta \sum_{\vec{r} \neq \vec{r}'} J(|\vec{r} - \vec{r}'|) S_{\vec{r}} S_{\vec{r}'} + h \sum_{\vec{r}} S_{\vec{r}} \right] \quad (2.91)$$

donde Ω representa en este caso la hiperesfera N -dimensional de radio \sqrt{N} :

$$\sum_i S_i^2 = N$$

Este modelo puede resolverse de manera directa, aunque resulta mucho mas sencillo el siguiente procedimiento. Supongamos que en lugar de imponer el vínculo esférico de manera estricta imponemos que el mismo se cumpla *en promedio*, esto es

$$\left\langle \sum_i S_i^2 \right\rangle = N$$

Esto resulta equivalente a cambiar del ensemble canónico a uno en el cual tanto el valor medio de la energía como el valor medio de $\sum_i S_i^2$ sean constantes. La maximización de la entropía con estos vínculos nos lleva a una función de partición del modelo gaussiano (2.85) donde el parámetro b ahora juega el rol de un multiplicador de Lagrange, estando por lo tanto determinado por la ecuación

$$\left\langle \sum_i S_i^2 \right\rangle = -\frac{\partial}{\partial b} \ln Z_G(N, \beta, h, b) = N$$

Este modelo constituye la versión “gran canónica” del modelo esférico, y se lo denomina *modelo esférico promedio*, por motivos obvios. Al igual que en otros casos, ambos ensembles resultan equivalentes. Para N grande las fluctuaciones de $\sum_i S_i^2$ en torno del valor N serán despreciables y por lo tanto

$$Z_G(N, \beta, h, b) \sim Z_N(\beta, B) e^{-bN}$$

En el límite termodinámico tenemos entonces que

$$-\beta f(T, B) = b - \beta f_G(\beta, B, b)$$

con b que resulta de la ecuación

$$\frac{\partial(\beta f_G(\beta, B, b))}{\partial b} = \frac{h^2}{4(b - \beta \hat{J}(0))^2} + \frac{1}{2(2\pi)^d} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \cdots \int_{-\pi}^{\pi} dk_d [b - \beta \hat{J}(k)]^{-1} = 1$$

Definiendo la variable $\zeta = b/\beta$ tenemos finalmente que

$$\begin{aligned} -\beta f(T, B) &= \beta \zeta(\beta, B) + \frac{\beta B^2}{4(\zeta(\beta, B) - \hat{J}(0))} + \frac{1}{2} \ln \pi - \\ &- \frac{1}{2(2\pi)^d} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \cdots \int_{-\pi}^{\pi} dk_d \ln [\beta(\zeta(\beta, B) - \hat{J}(k))] \end{aligned} \quad (2.92)$$

donde $\zeta(\beta, B)$ es solución de

$$\beta = R(\zeta) + \frac{\beta B^2}{4(\zeta - \hat{J}(0))^2}$$

y

$$R(\zeta) = \frac{1}{2(2\pi)^d} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \cdots \int_{-\pi}^{\pi} dk_d [\zeta - \hat{J}(k)]^{-1} \quad (2.93)$$

La energía libre resulta analítica entonces para

$$\zeta > \max_{\vec{k}} \hat{J}(k) = \zeta_c$$

Consideremos el caso ferromagnético con interacciones a primeros vecinos, en el cual $\hat{J}(k)$ viene dado por la Ec.(2.90). En este caso $\zeta_c = \hat{J}(0) = 2dJ$ y tenemos que

$$\begin{aligned} -\beta f(T, B) &= \beta \zeta(\beta, B) + \frac{\beta B^2}{4(\zeta(\beta, B) - \zeta_c)} + \frac{1}{2} \ln \pi - \\ &- \frac{1}{2(2\pi)^d} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \cdots \int_{-\pi}^{\pi} dk_d \ln [\beta(\zeta(\beta, B) - \hat{J}(k))] \end{aligned} \quad (2.94)$$

$$\beta = R(\zeta) + \frac{\beta B^2}{4(\zeta - \zeta_c)^2} \quad (2.95)$$

Notemos que el integrando de las ecuaciones (2.93) y (2.94) es singular en $k = 0$ cuando $\zeta = \zeta_c$. Las propiedades analíticas de la energía libre van a depender de que esta singularidad sea o no integrable. Comencemos con el caso unidimensional $d = 1$. Tenemos que

$$R(\zeta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{dk}{\zeta - 2J \cos k} = \frac{1}{2\sqrt{\zeta^2 - \zeta_c^2}}$$

A campo nulo $B = 0$ vemos que para toda $\beta < \infty$ existe una solución $\zeta(\beta) > \zeta_c$ (ver Fig.2.4). Así, la singularidad no se alcanza nunca para cualquier temperatura finita; solo se alcanza en el límite $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$). La energía libre es una función analítica para toda β y el modelo no presenta transición de fase a temperatura finita, tal como era de esperar.

En el caso $d = 2$ la función $R(\zeta)$ puede calcularse también analíticamente y el resultado es similar al del caso unidimensional: la singularidad ζ_c solo se alcanza

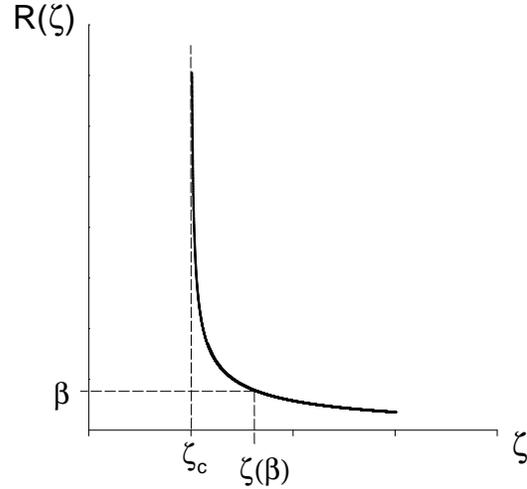


Figura 2.4: Función $R(\zeta)$ en el caso $d = 1$.

en el límite $\beta \rightarrow \infty$ (la forma de la función $R(\zeta)$ es semejante a la mostrada en la Fig.2.4). La ausencia de transición de fase en dos dimensiones es un resultado de la simetría continua del modelo (recordemos que el modelo esférico es el límite $n \rightarrow \infty$ del modelo n -vectorial).

En el caso $d = 3$ la situación cambia completamente. Mientras en los dos casos anteriores la singularidad en el integrando de la Ec.(2.93) no es integrable ($R(\zeta)$ diverge para $\zeta \rightarrow \zeta_c$) en el caso tridimensional *si* es integrable y puede verse que $R(\zeta_c)$ toma un valor finito para $\beta_c \approx 0.2527/J$ (ver Fig.2.5). Tenemos entonces que para $\beta < \beta_c$ la energía libre es analítica y presenta una singularidad en $\beta = \beta_c$. Que ocurre para $\beta > \beta_c$ ($T < T_c$)? En principio para $B = 0$ la Ec.(2.95) nos da un valor de $\zeta < \zeta_c$ para el cual la energía libre no está definida. Sin embargo, sabemos que para observar orden de largo alcance tenemos que provocar una ruptura espontánea de simetría, esto es, analizar el límite $B \rightarrow 0$ para $T < T_c$. Supongamos $B > 0$. En este caso el lado derecho de la Ec.(2.95) diverge en $\zeta = \zeta_c$ y tenemos que la singularidad no se alcanza para ningún valor de β , con lo cual la energía libre es analítica para cualquier temperatura y $B \neq 0$ (ver Fig.2.5). De la Fig.2.5 vemos

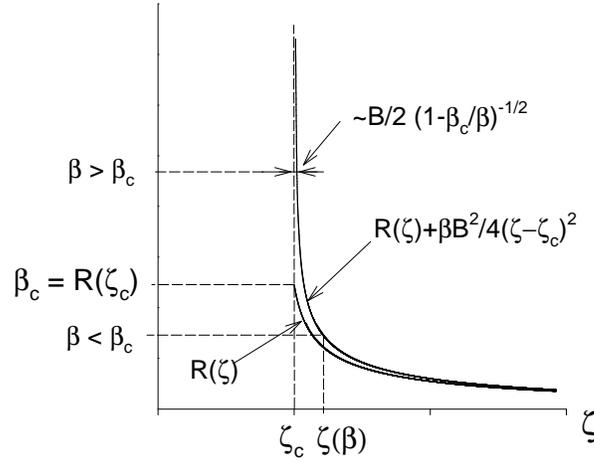


Figura 2.5: Función $R(\zeta)$ y soluciones de la Ec.(2.95) en el caso $d = 3$.

ademas que al disminuir B (esto es, en el límite $B \rightarrow 0^+$) la solución $\zeta(\beta, B) \rightarrow \zeta_c$ $\forall \beta > \beta_c$. Para $\beta > \beta_c$ fijo y $0 < B \ll 1$ tenemos que $R(\zeta) \sim R(\zeta_c) = \beta_c$ y podemos aproximar en la Ec.(2.95)

$$\beta \sim \beta_c + \frac{\beta B^2}{4(\zeta - \zeta_c)^2}$$

de donde

$$\zeta(\beta, B) \sim \zeta_c + \frac{B}{2} \left(1 - \frac{\beta_c}{\beta}\right)^{-1/2} \quad (2.96)$$

De esta manera, la solución con ruptura espontánea de simetría es $\zeta = \zeta_c$ para toda $\beta > \beta_c$. La singularidad en la Ec.(2.94) es integrable para $\zeta = \zeta_c$ y la energía libre es continua para $|B| \rightarrow 0$ y $\beta > \beta_c$ tomando el valor

$$\lim_{|B| \rightarrow 0} -\beta f(T, B) = \beta \zeta_c + \frac{1}{2} \ln \pi - \frac{1}{2(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \int_{-\pi}^{\pi} dk_2 \int_{-\pi}^{\pi} dk_3 \ln \left[\beta(\zeta_c - 2J \sum_{j=1}^3 \cos k_j) \right]$$

Calculemos ahora la magnetización a campo nulo. Para ello tenemos que derivar la energía libre respecto del campo magnético B y evaluar en $B \rightarrow 0$. Es facil

ver (usando la Ec.(2.95)) que el término que multiplica a $\partial\zeta(\beta, B)/\partial B$ se anula idénticamente para toda β . Así

$$m(\beta, 0) = \lim_{B \rightarrow 0^+} -\frac{\partial f}{\partial B} = \lim_{B \rightarrow 0^+} \frac{B}{2(\zeta(\beta, B) - \zeta_c)}$$

De la Ec.(2.96) tenemos que la magnetización espontanea es

$$m_0 = \lim_{B \rightarrow 0^+} m(\beta, B) = \begin{cases} 0 & \text{si } T > T_c \\ \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{1/2} & \text{si } T < T_c \end{cases}$$

de donde el exponente crítico $\beta = 1/2$, el cual, como veremos mas adelante, corresponde a un comportamiento clásico (esto es, asociado a las teorías de campo medio). Aparte de este comportamiento clásico en la magnetización espontánea, el modelo esférico presenta una serie de anomalías, tales como una susceptibilidad infinita para $T < T_c$ y un calor específico continuo en $T = T_c$, pero con una discontinuidad en su derivada, tal como se muestra en la Fig.2.6. Mas aún, puede verse que para $T > T_c$ la susceptibilidad diverge con un exponente crítico $\gamma = 2$ mientras que el calor específico presenta el comportamiento asintótico $C(T_c) - C(T) \sim A(T_c - T)$. Este último comportamiento puede asociarse a un exponente crítico *negativo* $\alpha = -1$; este tipo de comportamiento suele denominarse una *singularidad de "cúspide"* (cusp singularity). Finalmente, puede verse que $\delta = 5$. Notemos que con estos valores las desigualdades de Rushbrooke y Griffiths nuevamente se cumplen como igualdades, al igual que en el modelo de Ising bidimensional. De hecho, puede verse que esto es válido en el modelo esférico para toda $d > 2$.

2.8 El modelo de Curie-Weiss para el ferromagnetismo

Este modelo es una generalización del modelo de Ising, propuesto de manera heurística para explicar el ferromagnetismo, en el mismo espíritu que el argumento de Ornstein para el caso de un gas. Como veremos, ambos modelos dan los mismos exponentes críticos y forman la base de las llamadas Teorías de Campo Medio ó Teorías Clásicas de los fenómenos críticos, las cuales analizaremos en detalle en la próxima sección.

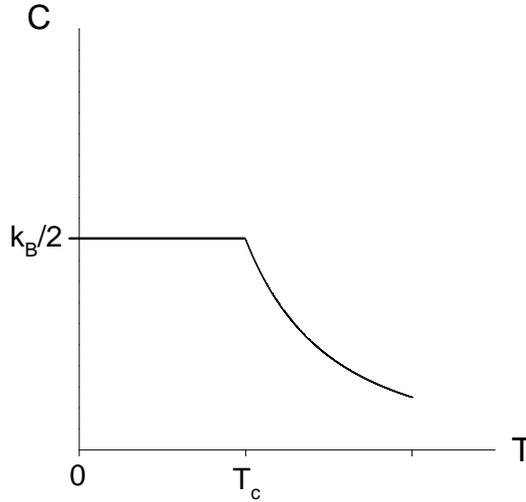


Figura 2.6: Calor específico a campo nulo en el modelo esférico en $d = 3$.

El modelo de Curie-Weiss asume un Hamiltoniano de la forma

$$H = -\frac{J}{N} \sum_{1 \leq i < j \leq N} S_i S_j - B \sum_{i=1}^N S_i \quad (2.97)$$

con $J > 0$ y $S_i = \pm 1$. El hecho de que todas las interacciones entre pares de spines sean iguales hace que la estructura cristalina de la red sea irrelevante. El factor (no físico) $1/N$ en el Hamiltoniano se impone, al igual que en el argumento de Ornstein, para asegurar la existencia del límite termodinámico. Usando el hecho de $S_i^2 = 1$ podemos reescribir el Hamiltoniano (2.97) como

$$H = -\frac{J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 + \frac{J}{2} - B \sum_{i=1}^N S_i$$

La función partición puede ser escrita entonces como

$$Z(\beta, B) = e^{-K/2} \sum_{\{S_i\}} \exp \left[\frac{K}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 + h \sum_{i=1}^N S_i \right]$$

donde $K = \beta J$ y $h = \beta B$. Usando la identidad gaussiana

$$e^{a^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2+ax} dx$$

podemos transformar el término cuadrático en los spines de la expresión anterior en uno lineal (esto se conoce a veces como *transformación de Hubbard-Stratonovich*) eligiendo

$$a = \sqrt{\frac{K}{N}} \sum_{i=1}^N S_i$$

De esta manera, tenemos que

$$Z(N, \beta, B) = e^{-K/2} \sum_{\{S_i\}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-x^2/2 + \left(x\sqrt{\frac{K}{N}} + h \right) \sum_{i=1}^N S_i \right] dx$$

El término en los spines puede ahora ser sumado facilmente obteniendo

$$\begin{aligned} Z(N, \beta, B) &= e^{-K/2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} \left[2 \cosh \left(x\sqrt{\frac{K}{N}} + h \right) \right]^N dx \\ &= e^{-K/2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-x^2/2 + N \ln 2 \cosh \left(x\sqrt{\frac{K}{N}} + h \right) \right] dx \end{aligned}$$

Haciendo el cambio de variables $\eta = x(KN)^{-1/2}$ tenemos que

$$Z(N, \beta, B) = e^{-K/2} \sqrt{\frac{KN}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{Ng(\eta)} d\eta \quad (2.98)$$

donde

$$g(\eta) = -K\eta^2/2 + \ln 2 \cosh(K\eta + h)$$

En el límite $N \rightarrow \infty$ podemos evaluar la integral en la ecuación (2.98) usando el método de Laplace y la energía libre resulta

$$-\beta f(\beta, B) = \max_{\eta} g(\eta)$$

Igualando la derivada de $g(\eta)$ a cero encontramos que el máximo de $g(\eta)$ es solución de la ecuación

$$\eta = \tanh(K\eta + h)$$

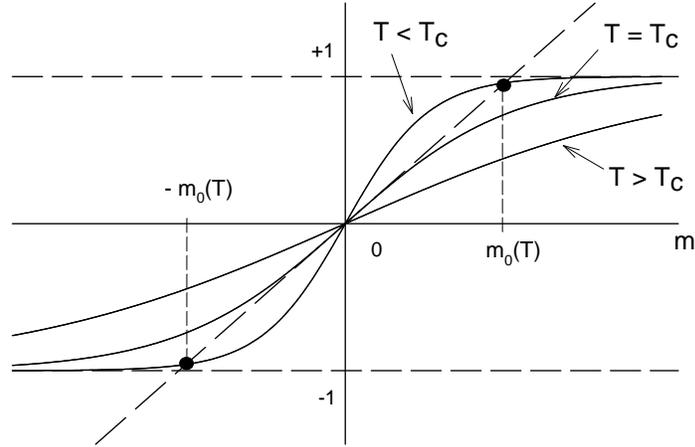


Figura 2.7: Solución gráfica de la ecuación de Curie-Weiss (2.99).

La magnetización resulta

$$m(\beta, B) = -\frac{\partial f}{\partial B} = \frac{\partial(-\beta f)}{\partial h} = \tanh(K\eta + h) = \eta$$

de donde el valor del parámetro variacional que maximiza $g(\eta)$ resulta la propia magnetización, la cual satisface por lo tanto la llamada *ecuación de Curie-Weiss*:

$$m = \tanh(Km + h) \quad (2.99)$$

Para $B = 0$ esta ecuación tiene una única solución $m = 0$ para $K < K_c = 1$, mientras que para $K > K_c$ presenta dos soluciones simétricas $\pm m_0$ (ver Fig.(2.7)) y la solución $m = 0$ que es inestable (mínimo de $g(\eta)$ o máximo de la energía libre). De la solución gráfica vemos que para $0 < B \ll 1$ las tres soluciones se mantienen pero la solución $m = 0$ se reemplaza por una segunda solución negativa. Puede verificarse que la solución positiva en este caso es un mínimo absoluto de la energía libre (máximo absoluto de $g(\eta)$), de manera que en el límite $B \rightarrow 0^+$ esta es la magnetización espontánea. Para temperaturas levemente menores que T_c tenemos que $m_0 \ll 1$, de manera que podemos desarrollar la Ec.(2.99) con $h = 0$:

$$m_0 = Km_0 - (Km_0)^3/3 + \mathcal{O}(m_0^5) = m_0K \left[1 - (Km_0)^2/3 \right]$$

de donde

$$m_0 \sim \left[3 \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) \right]^{1/2}$$

y por lo tanto el exponente crítico $\beta = 1/2$. Mediante un análisis semejante puede verse que $\gamma = 1$ y $\delta = 3$. La energía libre a campo nulo tiene la forma

$$-\beta f(\beta, 0) = \begin{cases} \ln 2 & \text{si } T \geq T_c \\ -\beta J m_0^2/2 + \ln 2 \cosh(\beta J m_0) & \text{si } T < T_c \end{cases}$$

de donde la energía interna resulta

$$u(\beta, 0) = \frac{\partial(\beta f)}{\partial \beta} = \begin{cases} 0 & \text{si } T \geq T_c \\ -J m_0^2/2 & \text{si } T < T_c \end{cases}$$

la cual también es continua en $T = T_c$. El calor específico a campo nulo resulta entonces

$$C(T) = \frac{du(T)}{dT} = \begin{cases} 0 & \text{si } T \geq T_c \\ -\frac{J}{2} \frac{dm_0^2}{dT} & \text{si } T < T_c \end{cases}$$

Puede verse (queda como ejercicio para el lector) que $\lim_{T \rightarrow T_c^-} C(T) = 3k_B/2$, de donde el calor específico presenta una discontinuidad en $T = T_c$ y por lo tanto $\alpha = 0_{dis}$. Una vez más, notemos que con estos valores las desigualdades de Rushbrooke y Griffiths se cumplen como igualdades.

2.9 Caminatas aleatorias y la transición de polimerización

Los polímeros son macromoléculas compuestas a partir de una cantidad grande de unidades mas simples llamadas monómeros. En el caso de polímeros lineales los monómeros se ordenan en forma de largas cadenas flexibles. En condiciones de

equilibrio químico un sistema de monómeros puede sufrir una transición a un estado polimerizado, esto es, un estado con una fracción macroscópica de polímeros. Un ejemplo bien conocido de esto último es el azufre. A temperaturas relativamente bajas el azufre es un líquido de color amarillo, compuesto microscópicamente por anillos de azufre, predominando los de 8 átomos (S_8) (monómeros). A una temperatura cercana a los 160 °C el líquido se oscurece y se torna viscoso, ya que los anillos de azufre rompen una de sus ligaduras y se recombinan formando cadenas del orden de 10^6 átomos. Esta transición es de segundo orden, ya que se observa que la densidad de polímeros es nula en la temperatura crítica y aumenta rápidamente con la temperatura. Si el azufre se diluye en ciertos solventes orgánicos, la temperatura de transición aumenta con la dilución, hasta que para cierta concentración del solvente la transición se torna de primer orden. Este punto del diagrama de fases se conoce como punto Θ y es un punto tricrítico.

Si bien una descripción detallada de la termodinámica de polímeros es altamente compleja, la universalidad de los fenómenos críticos permite, en dicha región, el uso de modelos en redes (relativamente sencillos) para su descripción. Estos modelos se conocen como *Caminatas aleatorias Mutua y Auto-Excluyentes* (Self-Avoiding Random Walks, SAW). El principio de estos modelos es el mismo que el del Gas de Red. Supongamos un gas de monómeros en presencia de un “buen solvente”, esto es, un sustancia tal que la interacción entre los átomos del solvente y los monómeros pueda despreciarse. En este caso, las interacciones entre monómeros pertenecientes a diferentes polímeros son predominantemente repulsivas y se representan por una interacción de volumen excluido. Suponemos entonces el volumen del sistema discretizado, de manera que el volumen de cada celda corresponda al volumen excluido de un monómero. Cada sitio en la red puede estar vacío (correspondiendo a un átomo del solvente) u ocupado por un monómero que puede ligarse a uno o dos monómeros localizados en sitios primeros vecinos de la red. En estas condiciones un polímero resulta representado por una sucesión de n sitios primeros vecinos (cadenas), donde las ligaduras entre monómeros están representadas por los bonds en la

al potencial químico de resulta de incorporar un monómero en el medio de una cadena. y tiene un significado semejante a x , solo que se considera que la actividad de un monómero que se liga a la punta de una cadena tiene una actividad diferente a la de un monómero que se incorpora dentro de la cadena; de esta manera, la actividad de un monómero en la punta es $(2y)^{1/2}$, donde el factor 2 viene de las dos posibles orientaciones del monómero. Así, el peso de Boltzmann de una cadena de M monómeros ($M - 1$ bonds) es $2yx^{(M-1)}$ si $M > 1$. El factor $1/2^l$ corrige el hecho de que en monómeros aislados ambas orientaciones son equivalentes. El factor $\Gamma_N(m, n, l)$ da el número de configuraciones de m polímeros con exactamente l monómeros aislados, compatibles con la condición de caminatas mutua y auto excluyentes, esto es, caminatas cerradas y que se cruzan tienen un peso $\Gamma_N = 0$. El límite superior ∞ en las sumas no presenta incompatibilidad con el sistema finito, ya que configuraciones con valores de estos índices incompatibles con N tendrán un peso $\Gamma_N = 0$. La fracción de volúmen ocupada por polímeros viene entonces dada por

$$\rho_N = \frac{\langle n \rangle}{N}$$

donde

$$\langle n \rangle = x \frac{\partial \ln \mathcal{Z}_N}{\partial x}$$

El conteo de caminos para la evaluación de \mathcal{Z}_N es un problema formidable. No obstante, el mismo se simplifica enormemente a partir del mapeo en el límite $n \rightarrow 0$ del modelo n -vectorial, propuesto por primera vez por DeGennes⁵ y posteriormente extendido por diversos autores, entre otros Wheeler y Pfeuty⁶. Consideremos un modelo n -vectorial con Hamiltoniano

$$-\bar{\beta}H = K \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \vec{h} \cdot \sum_i \vec{S}_i$$

donde \vec{S} es un vector de n componentes normalizado a \sqrt{n} , esto es

⁵P. G. DeGennes, Phys. Lett A **38**, 339 (1972)

⁶J. G. Wheeler and P. Pfeuty, Phys. Rev. A **24**, 1050 (1981)

$$|\vec{S}|^2 = \sum_{l=1}^n (S^{(l)})^2 = n$$

\vec{h} es un campo magnético externo que apunta en una dirección arbitraria que llamaremos la dirección 1. Escribimos $\bar{\beta}$ como la inversa de la temperatura en el modelo magnético, ya que la misma no corresponde a la inversa de la temperatura β del problema de polímeros. La función partición del problema magnético viene dada por

$$Z = \text{Tr} e^{-\bar{\beta}H} = \prod_i \int d\Omega_i^n e^{-\bar{\beta}H}$$

donde Ω_i^n es un diferencial de ángulo sólido en n dimensiones. Introduciendo ahora los promedios

$$\langle\langle g(\Omega^n) \rangle\rangle \equiv \frac{\prod_i \int d\Omega_i^n g(\{\Omega_i^n\})}{\prod_i \int d\Omega_i^n}$$

tenemos que

$$Z = \langle\langle e^H \rangle\rangle \left[\int d\Omega^n \right]^N \quad (2.101)$$

El segundo factor en la ecuación anterior da una contribución constante a la energía libre por sitio y podemos ignorarlo. Introducimos ahora la función característica

$$\Phi(\vec{k}) \equiv \langle\langle e^{i\vec{k} \cdot \vec{S}} \rangle\rangle$$

donde \vec{k} es un vector arbitrario de n componentes. Conociendo $\Phi(\vec{k})$ podemos obtener cualquier promedio sobre el ángulo sólido a través de

$$\langle\langle S^{(\alpha_1)} \dots S^{(\alpha_j)} \rangle\rangle = (i)^j \frac{\partial^j \Phi}{\partial k^{(\alpha_1)} \dots \partial k^{(\alpha_j)}} \Big|_{\vec{k}=0}$$

Derivando dos veces $\Phi(\vec{k})$ obtenemos

$$\nabla_n^2 \Phi(\vec{k}) = - \langle\langle \vec{S} \cdot \vec{S} e^{i\vec{k} \cdot \vec{S}} \rangle\rangle = -n\Phi(\vec{k})$$

esto es, Φ satisface la ecuación

$$\left[\nabla_n^2 + n \right] \Phi(\vec{k}) = 0 \quad (2.102)$$

Por simetría, $\Phi(\vec{k}) = \Phi(k)$; además, $\Phi(0) = 1$ y

$$\left\langle \left\langle (S^{(\alpha)})^2 \right\rangle \right\rangle = - \frac{\partial^2 \Phi}{\partial (k^{(\alpha)})^2} \Big|_{\vec{k}=0} = 1$$

La parte radial del Laplaciano en n dimensiones tiene la forma

$$-\frac{1}{k^{n-1}} \frac{\partial}{\partial k} \left(k^{n-1} \frac{\partial}{\partial k} \right)$$

Para $n = 0$ la Ec.(2.102) se transforma en

$$k^{-1} \frac{\partial \Phi}{\partial k} = cte$$

que usando las condiciones anteriores para Φ tiene como solución:

$$\Phi(\vec{k}) = 1 - \frac{1}{2} k^2$$

pero implica que

$$\left\langle \left\langle (S^{(\alpha)})^m \right\rangle \right\rangle = \delta_{m,0} + \delta_{m,2} \quad (2.103)$$

Ahora podemos retomar la evaluación de la función partición (2.104):

$$\begin{aligned} Z &= \left\langle \left\langle \exp \left(K \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right) \exp \left(h \sum_i S_i^{(1)} \right) \right\rangle \right\rangle \\ &= \left\langle \left\langle \prod_{\langle i,j \rangle} \exp \left(K \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right) \prod_i \exp \left(h S_i^{(1)} \right) \right\rangle \right\rangle \end{aligned}$$

Desarrollando las exponenciales

$$Z = \left\langle \left\langle \prod_{\langle i,j \rangle} \left(1 + K \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \frac{K^2}{2} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2 \right) \prod_i \left(1 + h S_i^{(1)} + \frac{h^2}{2} (S_i^{(1)})^2 \right) \right\rangle \right\rangle \quad (2.104)$$

donde los términos de mayor orden en (2.104) se anulan en el límite $n \rightarrow 0$ debido a (2.103). Los únicos términos no nulos de la Ec.(2.104) son aquellos que contienen productos de factores de la forma

$$\left\langle \left\langle \prod_{\alpha} (S^{(\alpha)})^{m_{\alpha}} \right\rangle \right\rangle \quad \text{con } m_{\alpha} = 0, 2$$

En particular, los términos que contienen factores $(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2$ se anulan todos ya que

$$\left\langle \left\langle (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2 \right\rangle \right\rangle = \left\langle \left\langle \left(\sum_{m=1}^n S_i^{(m)} S_j^{(m)} \right)^2 \right\rangle \right\rangle = \left\langle \left\langle \sum_{m=1}^n (S_i^{(m)})^2 \right\rangle \right\rangle = n \rightarrow 0$$

y productos que contienen mas de un factor de este tipo se anulan por (2.103). Para analizar los restantes términos podemos utilizar una expansión gráfica. Asociamos una línea a cada bond entre dos sitios primeros vecinos relacionados por un término de interacción $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$, colocamos una cruz en cada sitio asociado a un término lineal en el campo $S_i^{(1)}$ y un cuadrado en los sitios cuadráticos en el campo $(S_i^{(1)})^2$. Estos términos van a tener por lo tanto asociados conjuntos de caminos en la red y sitios aislados con cruces y cuadrados. Los términos asociados a gráficos con cruces aisladas van a promediar a cero, mientras que los gráficos con cuadrados solo van a contribuir si los mismos estan aislados (ver figura 2.9). Gráficos que se cruzan en un sitio i (ver gráfico C en Fig.2.9) promedian a cero ya que son proporcionales a $\left\langle \left\langle (S_i^{(m)})^4 \right\rangle \right\rangle$.

Analicemos un gráfico cerrado como el que se muestra en la Fig.2.9 (gráfico B). El término correspondiente será proporcional a

$$\begin{aligned} \left\langle \left\langle (\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2) (\vec{S}_2 \cdot \vec{S}_3) (\vec{S}_3 \cdot \vec{S}_4) (\vec{S}_4 \cdot \vec{S}_1) \right\rangle \right\rangle &= \sum_{i,j,k,l=1}^n \left\langle \left\langle S_1^{(i)} S_2^{(i)} S_2^{(j)} S_3^{(j)} S_3^{(k)} S_4^{(k)} S_4^{(l)} S_1^{(l)} \right\rangle \right\rangle \\ &= \sum_{i,j,k,l=1}^n \delta_{i,j} \delta_{j,k} \delta_{k,l} \delta_{l,i} = n \rightarrow 0 \end{aligned}$$

y en general, caminos cerrados no van a contribuir. Analicemos ahora un gráfico abierto sin campo como el que se muestra en la Fig.2.9 (gráfico F). El término correspondiente será proporcional a

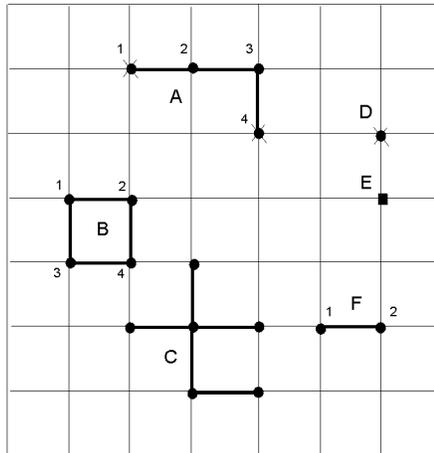


Figura 2.9: Representación gráfica de diferentes tipos de términos en la Ec.(2.104). A: caminos abiertos con campo en los extremos; B: caminos cerrados; C: caminos abiertos que se cruzan; D: sitios aislados lineales en el campo; E: sitios aislados cuadráticos en el campo; F: caminos abiertos sin campo. Solo gráficos del tipo A y contribuyen a (2.104).

$$\langle\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle\rangle = \sum_{i=1}^n \langle\langle S_1^{(i)} \rangle\rangle \langle\langle S_2^{(i)} \rangle\rangle = 0$$

y en general cualquier camino abierto sin campo promedia a cero. Los gráficos que dan una contribución no nula son los caminos abiertos con campo lineal en los extremos, tal como el A en la Fig.2.9. El término correspondiente será proporcional a

$$\begin{aligned} \langle\langle S_1^{(1)} (\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2) (\vec{S}_2 \cdot \vec{S}_3) (\vec{S}_3 \cdot \vec{S}_4) S_4^{(1)} \rangle\rangle &= \sum_{i,j,k,l=1}^n \langle\langle S_1^{(1)} S_1^{(i)} S_2^{(i)} S_2^{(j)} S_3^{(j)} S_3^{(k)} S_4^{(k)} S_4^{(1)} \rangle\rangle \\ &= \sum_{i,j,k,l=1}^n \delta_{1,i} \delta_{i,j} \delta_{j,k} \delta_{k,1} = 1 \end{aligned}$$

La contribución de este término será $h^2 K^3$. Notemos que caminos abiertos con cruces en el medio promedian a cero, ya que serán proporcionales a $\langle\langle (S_1^{(1)})^3 \rangle\rangle$. De esta manera, vemos que en el límite $n \rightarrow 0$ la función partición del modelo n -vectorial produce un conteo de todas las posibles caminatas aleatorias auto y mutuamente excluyentes (polímeros) incluyendo los monómeros aislados, los cuales corresponden a los términos cuadráticos en el campo. Así, si tenemos una configuración incluyendo m caminatas en total, de las cuales m' corresponden a polímeros con un total de n bonds y l monómeros ($m = m' + l$), esta tendrá un peso

$$(h^2)^{m'} \left(\frac{h^2}{2}\right)^l K^n = \frac{1}{2^l} (h^2)^m K^n$$

y la función partición del modelo n -vectorial resulta idéntica a (2.100) con la identificación

$$x = K \quad y = \frac{1}{2} h^2$$

Notemos que la temperatura del problema magnético no es la temperatura del problema de polímeros, sino que están relacionadas por

$$K = \bar{\beta} \bar{J} = e^{\beta \mu}$$

dando una relación exponencial entre ambas temperaturas.

Si bien el modelo n vectorial no puede resolverse de manera exacta para n arbitrario en dimensiones mayores que $d = 1$, el presente mapeo posibilita trasladar todo el conocimiento acerca del comportamiento crítico en sistemas magnéticos (así como el uso de técnicas aproximadas de resolución) al problema de polímeros. Por ejemplo, sabemos que la transición de fase solo puede ocurrir a campo nulo. En relación al mapeo anterior, esto significa que ningún camino contribuye (la función de partición da una constante). No obstante, sabemos que para observar la transición de fase debemos producir una ruptura de simetría, esto es, tomar primero el límite termodinámico y luego el límite de campo nulo. Una manera alternativa y equivalente de producir la ruptura de simetría, que resulta mas conveniente en nuestro caso, es colocar un campo no nulo en una dirección arbitraria (la dirección 1 en nuestro caso) *solamente en el contorno*. En el límite termodinámico tendremos un sistema infinito a campo nulo, pero en el cual la presencia de campo en el contorno habra roto la simetría durante el proceso de límite. En el problema de caminatas aleatorias autoexcluyentes, esto equivale a contar únicamente aquellas caminatas que comienzan y terminan en el contorno. Esto equivale a tratar la función de partición

$$Y_N(x) = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \Gamma_N(n)$$

donde x , n tienen el mismo significado que antes; $\Gamma_N = 0$ en este caso para todas aquellas caminatas con una punta dentro de la red. Este problema es considerablemente mas sencillo y tratable que el problema general de polímeros con dilución.

Finalmente, el modelo de SAW puede generalizarse a diversos modelos incluyendo interacciones entre polímeros, interacciones entre monómeros y solvente, etc, y en mucho de estos casos puede obtenerse un mapeo a un problema magnético equivalente utilizando la misma técnica anterior.

