

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

SISTEMAS DE ESPIN EN PRESENCIA
DE CAMPOS MAGNETICOS

INSTITUTO DE FISICA



BIBLIOTECA
JUAN B. DE OTAZU

T E S I S

que para obtener el título de:

DOCTOR EN FISICA

p r e s e n t a

JORGE JOSE VALENZUELA

México, D. F.

Septiembre 1976



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

INDICE

i	AKNOLEDGMENTS	i
	AGRADECIMIENTOS	ii
CAPITULO 1		
	PREFACIO	1
1.1	EXPONENTES CRITICOS	8
1.2	PARAMETRO DE ORDEN	13
1.3	TEORIA DEL CAMPO PROMEDIO (T.C.P.)	14
1.4	EL MODELO DE ISING	17
1.5	ESCALAMIENTO ("SCALING")	21
1.6	HIPOTESIS DE UNIVERSALIDAD	25
1.7	GRUPO DE RENORMALIZACION	29
CAPITULO 2		
2.1	SISTEMAS MAGNETICOS UNIDIMENSIONALES	34
2.2	TEOREMA DE MERMIN-WAGNER	36
2.3	EL MODELO VECTORIAL CLASICO	40
2.4	MATRIZ DE TRANSFERENCIA	43
2.5	CADENA CLASICA EN AUSENCIA DE UN CAMPO MAGNETICO -	47
2.6	MODELO VECTORIAL CLASICO A BAJAS TEM- PERATURAS	52
2.7	EL TEOREMA DE KAC	57
2.8	PROPIEDADES TERMODINAMICAS DEL MODELO X-Y A BAJAS TEMPERATURAS	60
2.9	FUNCIONES DE CORRELACION	64

2.10 MODELO X-Y A BAJAS TEMPERATURAS CON CAMPO MAGNETICO Y ANISOTROPIA IONICA	67
2.11 PROPIEDADES TERMODINAMICAS DEL MODELO DE HISENBERG ($d=1$) CON CAMPO MAGNETICO APLICA- DO	71
CONCLUSIONES	78
REFERENCIAS	81

Este trabajo está dedicado a mis padres, hermanos y sobrinos.

Aknowledgments:

Within the last two years I have had the opportunity to be advised and directed in my research by Professor Leo P. Kadanoff from Brown University. It is a pleasure to thank the encouragement, support and teachings that I have received from him.

I would like to thank helpful discussions and comments from Professor S. Coleman, Professor M. Blume, Dr. A. de Fonzo, Professor J. Guralnik, Professor A. Luther, Professor H. Maris, Professor Stiles and Professor Williams Jr.

Agradecimientos:

En la primera etapa de mis estudios de postgrado, recibí apoyo invaluable de la Asociación Nacional de Universidades e Institutos de Enseñanza Superior a través del Centro de Investigación de Materiales, por conducto del Doctor Ariel Valladares.

Al Doctor Leopoldo García-Colín por su apoyo y valiosos consejos, que han permitido mi estancia en la Universidad de Brown.

A la Facultad de Ciencias de la U.N.A.M., que a través de su programa de formación de profesores, por medio del Banco de México, S. A., me apoyaron económicamente.

A los señores Dr. Rubén Barrera, Dr. Leopoldo García-Colín, Dr. Elpidio Chacón, Dr. Salvador Godoy, Dr. Alfonso Mondragón, Dr. Ariel A. Valladares y Dr. Theodore Will, por haber aceptado fungir como sinodales de este trabajo.

A Martha Póms por la traducción y mecanografiado de este trabajo, así como a Jorge Soto por el dibujo de las gráficas que aquí se presentan.

P R E F A C I O

La teoría moderna de las transiciones de fase (T.M.F.) está basada en soluciones a modelos simplificados no triviales - de los cuales se extrae información relevante. A pesar de la sim plicidad aparente de los modelos sus soluciones son, en muchos - casos, difíciles de obtener. Se han encontrado sistemas físicos que poseen las características de los modelos teóricos y la con- cordancia entre las predicciones teóricas y los resultados expe- rimentales tiene un alto grado de precisión.

En el caso estático (de equilibrio) la base de la - - T.M.F. es la Mecánica Estadística a la Gibbs. La cantidad funda- mental es la función de partición, o suma sobre estados Z . La evaluación de Z es en general un problema extremadamente difí- cil. Calcular Z es análogo a resolver la ecuación de movimien- to en mecánica clásica o mecánica cuántica. De tal manera que - al mismo nivel de generalidad, podemos considerar a Z como la "ecuación de movimiento" de un sistema termodinámico.

Se han desarrollado métodos y algoritmos para evaluar Z , en la mayoría de los casos aproximadamente. El método o al- goritmo que ilumina la interpretación física y que parece el más prometedor, es el llamado "Grupo de Renormalización", del cual - discutiremos brevemente en el primer capítulo.

La estructura no analítica de Z en las cercanías del punto crítico se considera como una de las pruebas cruciales en la validez de la M.E. a la Gibbs.

La época moderna en la teoría de transiciones de fase fue iniciada por Onsager, con su solución monumental exacta al problema dos dimensional, en ausencia de un campo magnético externo aplicado, propuesto por Lenz y llamado de Ising. ¹

Mucho se ha aprendido del modelo de Ising dos dimensional, y el tener su solución exacta ha jugado un papel muy importante, no sólo en la T.M.F., sino también recientemente en la teoría cuántica del campo. Otros modelos más complicados y/o más realistas han sido estudiados, sin embargo, para dimensiones ≥ 2 ninguno ha sido resuelto satisfactoriamente.

Soluciones exactas, por tanto, son raras y de gran utilidad en el campo de las transiciones de fase. Ellas permiten "probar" los métodos y algoritmos para evaluar Z aproximadamente. Esto es, si el método falla, por ejemplo, en el modelo de Ising bidimensional, esperaremos que falle en casos más complicados y generales.

A pesar de que un gran esfuerzo se ha dedicado para encontrar soluciones exactas en modelos tridimensionales, éstas no han sido fructíferas. La única solución exacta para 1-2-3-dimensiones en presencia de un campo magnético, es la del "modelo esférico" de Berlin y F c que fue resuelto por ellos mismos en 1952 ². Tiene la desventaja de que no se le ha encontrado hasta la fecha, ningún sistema físico asociado. En dos dimensiones existe la solución de Onsager, más la solución de Baxter al modelo de 8-vértices en ausencia de un campo magnético ³. A pesar de que el modelo de Baxter se supone ser una generalización al modelo de Ising, su comportamiento no es "universal", o

en el lenguaje del grupo de renormalización, tiene asociado un operador marginal. La solución de Baxter ha sido de poca utilidad en las transiciones de fase continuas, pero de gran utilidad para resolver el problema de la cadena unidimensional - del modelo de espín $\frac{1}{2}$ x-y-z que a su vez se conecta con el modelo masivo de Thirring, la teoría cuántica de "sine-Gordon" y el modelo del sistema electrónico unidimensional con dispersión de retroceso, que ha sido de interés reciente ^{4, 5, 6}.

La situación es mejor en una dimensión. La gran mayoría de las soluciones exactas conocidas hasta la fecha son unidimensionales. La solución de Ising en su Tesis Doctoral (1925) incluye la presencia de un campo magnético externo aplicado. Fisher, McCoy, Joyce, Katsura, Stanley y Griffiths han resuelto exactamente el modelo x-y y el de Heisenberg, en ausencia de un campo magnético. El tener un campo magnético aplicado, introduce muchas complicaciones al usar las técnicas de solución usuales. La simetría rotacional que posee la Hamiltoniana se rompe al introducir el campo externo. Existen solamente dos modelos que han sido resueltos en la presencia de un campo magnético, el modelo esférico y el modelo de Ising unidimensional.

La característica común de todos los sistemas unidimensionales con interacciones de corto alcance es de que no tienen una transición de fase para toda temperatura $T > 0$. Sin embargo, cuando $T \rightarrow 0$ el sistema tiende a ordenarse y a $T = 0$ tiene una "transición de fase". Desde luego, la transición de fase en este caso no posee todas las características usuales de una transición de fase, por ejemplo, como en el mo-

delo de Ising bidimensional. A pesar de esto, se pueden definir exponentes críticos y relaciones de escalamiento entre ellos y son por tanto, de interés en la teoría de fenómenos críticos. En este trabajo estaremos interesados en calcular las propiedades de sistemas unidimensionales cerca de la región crítica, esto es, cuando $T \rightarrow 0$.

Los modelos a considerarse, son los modelos ferromagnéticos x - y y de Heisenberg clásicos. Para el primero daremos una solución exacta para un campo magnético aplicado arbitrario⁸. Para el segundo, una solución asintótica para la energía libre como función del campo magnético⁸. Las soluciones están restringidas a la vecindad del punto crítico. Estas soluciones se obtienen al hacer uso de la representación de la función de partición como una integral funcional del tipo Wiener-Feynman. Sobre la base del teorema llamado de Kac, la evaluación de Z se reduce a la solución de un problema de Sturm-Liouville (S-L). Esto desde luego, es válido sólo para sistemas unidimensionales y bajo ciertas circunstancias. Para el modelo x - y clásico, el problema de S-L se reduce a la ecuación de Mathieu con condiciones de frontera periódicas. La ecuación de Mathieu ha sido estudiada extensivamente y su solución es exacta. Por ende, la solución al modelo x - y clásico resulta ser exacto a sí mismo.

Para el modelo de Heisenberg clásico, el problema de S-L asociado, es la ecuación que resulta al considerar un rotor en presencia de un campo eléctrico externo en mecánica cuántica. La solución exacta de esta ecuación no es conocida en la

literatura. Sin embargo, por argumentos físico se muestra una conexión asintótica de esta ecuación, con la ecuación de Mathieu entonces, se encuentra la solución asintótica al modelo de Hy- senberg clásico en presencia de un campo magnético aplicado en la vecindad del punto crítico.

La formulación funcional del problema permite, conociendo las eigenfunciones del problema de S-L asociado, obtener las funciones de correlación espín-espín y por ende, el comportamiento asintótico crítico de la longitud de coherencia. Para el modelo x-y esta información es conocida y por tanto, el resultado se presenta aquí también ⁹.

Los sistemas unidimensionales no tienen solamente interés teórico, sino que pueden encontrarse en la naturaleza, de tal manera que se pueden comparar los resultados obtenidos teóricamente con los resultados experimentales.

Los sistemas físicos encontrados en la naturaleza a menudo tienen impurezas que cambian el comportamiento de las propiedades físicas asociadas. Una de las impurezas encontradas a menudo en sistemas unidimensionales, es la de anisotropía iónica ³. Este caso resulta poder tratarse, haciendo uso de la representación funcional. La ecuación diferencial resultante es la llamada ecuación de Hill con 3 términos o ecuación de Whittaker. Desafortunadamente la información conocida de esta ecuación no es tan completa como para la ecuación de Mathieu, a pesar de que pertenece a la misma clase y solamente se presenta una solución numérica aproximada de este problema ⁹.

El programa de este trabajo es el siguiente: En el primer capítulo se recapitularán las ideas centrales y esenciales de la teoría moderna de transiciones de fase. Se incluye la definición de los exponentes críticos, cuyo cálculo es el fin principal de la T.M.F. El concepto de parámetro de orden introducido por Landau" y central en la descripción de la fase ordenada. La teoría del campo promedio, el modelo de Ising, escalamiento y la hipótesis de universalidad para las transiciones de fase. Se incluye también una discusión breve de las ideas básicas del Grupo de Renormalización. Todos estos tópicos se presentan desde el punto de vista del autor y pueden tener especulaciones aventuradas, por tanto, se previene al lector de este hecho.

El segundo capítulo está concentrado exclusivamente en sistemas unidimensionales. La definición "experimental" de un sistema unidimensional es dada en la Sección 1. El teorema de Mermin y Wagner se presenta brevemente, así como la discusión heurística de Landau. El método de la matriz de transferencia discreta para conectar con la solución general de Stanley para el modelo vectorial clásico con n componentes en ausencia de un campo magnético y la generalización a la matriz de transferencia continua o representación funcional de la función de partición.

A continuación se presentan las soluciones mencionadas anteriormente. En el caso del modelo x - y se emplea la representación angular. Esto permite conectar la teoría de sine-Gordon con la región de bajas temperaturas del modelo x - y en presencia de un campo magnético aplicado. En el caso del modelo de Heisenberg, se utilizó la versión cartesiana del modelo. El teorema de Kack se presenta heurísticamente.

Sobre la base del teorema de Kac se calculan exactamente, tanto la función de partición como la función de correlación de espín-espín para el modelo X-Y. Asimismo, se trata el límite de bajas temperaturas del modelo X-Y en presencia de un campo magnético aplicado aunado a la anisotropía producida por un ión en la red. Este caso es de interés en las corroboraciones de los resultados teóricos con los obtenidos experimentalmente en CsNiF_3 .

En la sección II-10 se obtienen las propiedades termodinámicas del modelo de Heisenberg bajo las mismas condiciones físicas que las tomadas para el modelo X-Y clásico. Los resultados aquí son de naturaleza asintótica. Finalmente se presentan las conclusiones obtenidas a partir de este trabajo.

C A P I T U L O I

I.1 EXPONENTES CRITICOS:

En esta sección definiremos los objetivos principales de la T.M.F. En la mayoría de los sistemas físicos que presentan transiciones de fase, cuando la temperatura T del sistema es cercana a su valor crítico, " T_c ", una o varias de las propiedades físicas del material tienen un comportamiento anómalo. En el caso de un ferromagneto el calor específico C y la susceptibilidad magnética κ , tienden a crecer rápidamente cuando $T \rightarrow T_c^+$.

La región crítica queda definida por el intervalo de temperaturas en el que el comportamiento de C y X comienzan a diverger bruscamente. La "rapidez" y forma de estas divergencias es característica de cada "clase" de sistemas físicos. Por ejemplo, en ^4He cerca de T_λ el calor específico diverge logarítmicamente. En contraste en las transiciones líquido gas $C \sim (T-T_c)^{-0.1}$. Entonces, el fin o propósito principal de la teoría de transiciones de fase, es la de explicar el por qué de las divergencias y predecir con precisión la forma particular de las divergencias mismas.

En un material ferromagnético ¹⁰ cuando $T \gg T_c$ los espines electrónicos del sistema apuntan en direcciones completamente al azar. Al bajar la temperatura, el movimiento de la red empieza a ser más lento y la energía de interacción de intercambio entre los espines electrónicos, comienza a ser

relevante. En la mayoría de los sistemas magnéticos "ideales", la interacción de intercambio es de corto alcance y la interacción dipolar es despreciable. Cuando $T \rightarrow T_C^+$ el sistema comienza a estar correlacionado. La medida del ordenamiento en el sistema está relacionado con la magnitud de la longitud de coherencia ξ . Cuando $T \rightarrow T_C^+$ regiones enteras del sistema comienzan a fluctuar de \uparrow a \downarrow . Un gran número de espines vecinos tienden a apuntar en la misma dirección. En otras palabras cuando el sistema está cerca de su punto crítico, tiende a comportarse preferencialmente de manera colectiva. ξ mide la distancia de separación promedio para la cual dos espines apuntan en la misma dirección. La temperatura crítica T_C está caracterizada por $\xi \rightarrow \infty$. La forma específica en que $\xi \rightarrow \infty$ a T_C es también típica de cada sistema y se puede escribir como:

$$\xi \approx \epsilon^{-\nu} \quad (1)$$

en donde ϵ es la temperatura reducida definida por:

$$\epsilon = \frac{T - T_C}{T} \quad (2)$$

y ν es el primer exponente crítico que definimos; ν es igual con 1 para el modelo de Ising bidimensional, 0.638 ± 0.002 para el tridimensional 0.67 para el x - y en 3-dimensiones y 0.7 para el de Heisenberg tridimensional.

La descripción completa del comportamiento termodinámico de un sistema requiere exclusivamente del conocimiento de -

la energía libre o de algún otro de los potenciales termodinámicos. Experimentalmente¹² se encuentra que la descripción de las propiedades termodinámicas de un sistema en la vecindad del punto crítico se pueden expresar como potencias de ϵ . En un sistema magnético, la energía libre F es en general función de ϵ , del campo magnético aplicado H y de la integral de intercambio J . El comportamiento del calor específico cuando $T \rightarrow T_C$ se encuentra ser:

$$C \sim \begin{cases} (\epsilon)^{-\alpha} & T > T_C \\ (\epsilon)^{-\alpha'} & T < T_C \end{cases} \quad (3)$$

cuando $H = 0$. Los exponentes críticos α y α' caracterizan el comportamiento del calor específico cerca de T_C . La región crítica es usualmente de $10^{-4} < \epsilon < 10^{-1}$. Análogamente la susceptibilidad magnética con $H \rightarrow 0$ se comporta como:¹²

$$\chi_{H \rightarrow 0} \sim \begin{cases} (\epsilon)^{-\gamma} & T > T_C \\ (\epsilon)^{-\gamma'} & T < T_C \end{cases} \quad (4)$$

Con interpretaciones análogas para γ y γ' .

Por otro lado, la magnetización tiende a cero cuando $T \rightarrow T_C^-$ como:¹²

$$M \sim |\epsilon|^\beta \quad (5)$$

β define otro exponente crítico.

Cuando $H \neq 0$ la ecuación de estado $g(M, H, T) = 0$ se puede representar cerca de T_c en términos de una función de escalamiento f tal que:

$$M \sim |\epsilon|^\beta f(H/\epsilon^\Delta) \quad (6)$$

con el exponente crítico Δ . La función f se puede inferir experimentalmente y en algunos casos se puede calcular teóricamente.

Las cantidades (3), (4), (5) y (6) caracterizan el comportamiento macroscópico del sistema y pueden ser obtenidas como derivadas de la energía libre $F(H, \epsilon, J)$ con respecto de H y T .

El comportamiento microscópico del sistema se obtiene a partir de las funciones de correlación espín-espín. Estas miden la probabilidad de dado el espín $\underline{S}(0)$ en el origen, encontrar el espín $\underline{S}(\underline{r})$ en el punto \underline{r} . La información está contenida en la función de correlación de dos puntos.

$$g_2(\underline{0}, \underline{r}) = \langle \underline{S}(0) \cdot \underline{S}(\underline{r}) \rangle - \langle \underline{S}(0) \rangle \langle \underline{S}(\underline{r}) \rangle \quad (7)$$

Experimentalmente se puede medir la transformada de Fourier $\chi(\underline{r})$ (7) que está relacionado con el espectro de dispersión de neutrones.¹³

El comportamiento de (7) está dado usualmente como:

$$g_2(\underline{r}' - \underline{r}) \approx \begin{cases} |\underline{r} - \underline{r}'|^{2-d-\eta} & \text{cuando } |\underline{r} - \underline{r}'| \rightarrow \infty \text{ a } T_c \\ e^{-|\underline{r}-\underline{r}'|/\xi} & T > T_c \end{cases} \quad (8)$$

en donde η es otro exponente crítico difícil de medir experimentalmente. η toma valores entre 0.03 y 0.1. El decaimiento exponencial de g_2 para $T > T_c$ denota la falta de orden de largo alcance.

El conjunto de exponentes críticos:

$$\Gamma = \{ \alpha, \alpha', \gamma, \gamma', \beta, \nu, \Delta, \eta, \delta, \dots, \} \quad (9)$$

caracterizan completamente la región crítica de un sistema magnético. El fin principal de la T.M.F. es el de calcular y predecir sus valores de acuerdo con los resultados experimentales. Por medio de las relaciones de escalamiento el número de exponentes críticos de 9 se reducen a 2. En las secciones subsecuentes de este capítulo, trataremos de presentar de manera autocontenida los avances y entendimientos presentes en la T.M.F.

I.2 PARAMETRO DE ORDEN ¹¹ :

Una de las ideas más fructíferas en la caracterización de una transición de fase es el concepto del "Parámetro de Orden". Introducido por Landau en su teoría fenomenológica de transiciones de fase, se ha convertido en una parte esencial en la T.M.F.

El parámetro de orden ψ , puede ser un escalar, un vector o un tensor. Tiene la propiedad de que para $T > T_c$ es idénticamente cero. Para $T < T_c$ es una función continua de las variables termodinámicas y tiende a cero monotónicamente cuando $T \rightarrow T_c^*$. Las simetrías de la fase ordenada están representadas por las simetrías de ψ .

En un sistema ferromagnético el parámetro de orden está dado por la magnetización espontánea. Es una cantidad en general vectorial y se denota por $\psi \rightarrow M$. Para un superfluido $\psi \rightarrow \langle \phi \rangle$ en donde ϕ es la función de onda en el estado condensado. En un superconductor $\psi \rightarrow \Delta$ con $\Delta = \langle \psi^+ \psi^+ \rangle$ el "gap" de energía entre el estado normal y el superconductor. $\langle \phi \rangle$ y Δ no son cantidades medibles directamente pero Δ se puede inferir de las medidas de calor específico. Existen muchas otras transiciones de fase para las cuales se puede definir ψ con las propiedades mencionadas arriba. Sin embargo, en algunos casos la definición de ψ no es única, ni bien caracterizada.

* Al pasar por la línea de transición de primera especie ψ presenta un salto discontinuo, que se hace más pequeño al aproximarnos a T_c por debajo.

TEORIA DEL CAMPO PROMEDIO (T.C.P.):

La TCP es un nombre genérico que denota una serie de aproximaciones destinadas a diferentes problemas que, sin embargo, son asintóticamente equivalentes. En la descripción de la transición líquido-gas, la TCP es la teoría de Van Der Waals. - Para un sistema magnético es la TCP de Weiss. En la teoría de superconductividad es la teoría de Ginsburg-Landau.

La idea central en la TCP es la de reducir el número de grados de libertad. De un número muy grande de partículas interactuantes, la descripción se sustituye por la de un conjunto de partículas no interactuantes en presencia de un "campo promedio" producido por todas las partículas restantes del sistema. Es claro que el rango de las interacciones en esta aproximación son de largo alcance.

A pesar de ser una aproximación cruda da resultados muy satisfactorios. Sin embargo, muy cerca de T_c falla cuantitativamente. A pesar de esto, la TCP debe considerarse como una muy buena aproximación en la descripción "gruesa" del sistema. También da resultados razonables para transiciones de fase de primera especie.

La idea básica en la TCP es suponer la analiticidad de la energía libre en la vecindad de T_c como función del parámetro de orden. Para valores pequeños de ψ cerca de T_c Landau supone ¹¹ .

$$F(\epsilon, \psi) = \alpha_1(\epsilon) + \alpha_2(\epsilon)\psi^2 + \alpha_3(\epsilon)\psi^4 + \dots \quad (10)$$

En donde $\{\alpha_i\}$ son funciones analíticas de ϵ . Los términos con potencias impares no aparecen por razones de simetría. Si los coeficientes $\alpha_2, \alpha_3 > 0$ la gráfica de F vs. ψ es una parábola cóncava hacia arriba modificada por el término ψ^4 . Si $\alpha_3 \ll 1$ la modificación de la parábola es pequeña y el sistema será débilmente anarmónico.

El estado de equilibrio termodinámico está dado por el valor mínimo de $F = F\{\psi\}$. Cuando $\alpha_2, \alpha_3 > 0$ el mínimo es único y se localiza en $\psi = 0$. Esta configuración caracteriza la región $T > T_C$ para la cual existe solamente la fase desordenada.

Cuando $\alpha_2 > 0$ y $\alpha_3 < 0$ la gráfica F vs. ψ tiene dos mínimos y un máximo. La altura de la barrera entre los dos mínimos depende de la razón $-|\alpha_2/\alpha_3|$. Esta región caracteriza la posibilidad de dos posibles fases correspondientes a los dos valores de ψ para los cuales F tiene un mínimo. Esta región corresponde a $T < T_C$.

En el caso de un sistema magnético $\Psi \rightarrow M$. Para $T < T_C$ $M = 0$ cuando $\underline{H} = 0$. Entonces $\alpha_2, \alpha_3 > 0$. Por debajo de T_C $\underline{M} \neq 0$ ($\underline{H} = 0$) y existen dos posibilidades para la magnetización \uparrow o \downarrow . En este caso $\alpha_2 > 0$ y $\alpha_3 < 0$. De tal manera que (10) representa cualitativamente la existencia de las dos regiones $T > T_C$ y $T < T_C$ para los cuales $\psi_{\min} = 0$ y $\psi_{\min} \neq 0$ respectivamente.

La teoría del campo promedio predice los exponentes críticos erróneamente. Los valores son $\beta = 1/2$, $\gamma = 1$. Mientras que los valores experimentales son¹³ $\beta \in \{0,31, 0,36\}$ - - $\gamma \in \{1,22, 1,36\}$.

Como se ve del argumento presentado arriba, la TCP no distingue la dimensionalidad del sistema ni el número de componentes del parámetro de orden que son los elementos esenciales en la descripción de una transición de fase en la T.M. F.

I.4 EL MODELO DE ISING ¹²:

Una teoría a partir de primeros principios, debe de contener dos elementos:

- i) La dinámica microscópica del sistema, o en términos técnicos, la Hamiltoniana que describe las interacciones entre los componentes del sistema. El análisis puede llevarse a cabo a nivel clásico o a nivel cuántico. Más adelante veremos que uno de los resultados más importantes de la T.M.F. continuas, es la irrelevancia de los aspectos clásicos o cuánticos de la dinámica microscópica para describir el comportamiento asintótico del sistema en la vecindad de T_c .
- ii) Siendo un sistema de "muchos cuerpos" un análisis estadístico de las propiedades microscópicas del sistema debe resultar en la predicción de las propiedades observadas experimentalmente. En equilibrio termodinámico, la mecánica estadística a la Gibbs proporciona el marco teórico necesario para llevar a cabo este fin. El problema teórico se reduce a la evaluación de la energía libre a través del conocimiento de la función de partición Z dada la Hamiltoniana H como función de las variables estadísticas $\{\alpha\}$ la función de partición está definida como:

$$Z(\{x\}) = \int_{\{\alpha(\underline{r})\}} e^{-H(\{\alpha(\underline{r})\}, \{x\})} \quad (11)$$

En donde $\{x\}$ es el conjunto de constantes de aco-

plamiento en la Hamiltoniana. En el caso de un sistema magnético ideal $\{x\} = \{T, J, H, \dots\}$ con T la temperatura, J la integral de intercambio, y H el campo magnético externo. T_r denota de manera genérica, el promedio estadístico. Puede representar la suma sobre todos los valores descritos de $\{\alpha(\underline{r})\}$, integración sobre los valores continuos de $\{\alpha(\underline{r})\}$, o la traza en el sentido de la teoría de matrices. $\{\underline{r}\}$ denota los puntos en la red cristalina o una función vectorial continua para modelos continuos. A partir de ahora usaremos cantidades reducidas adimensionales definidas por:

$$X/T = X_r \quad (12)$$

con la constante de Boltzman $K = 1$.

Ambos problemas i) y ii) por separado, son en general muy difíciles de resolver. Cuando se atacan rigurosamente - aunados, el problema es en principio, y en práctica, imposible de tratarse. Al menos una generación de físicos interesados en este problema, dedicaron sus esfuerzos en esta dirección y llegaron a la conclusión de que es mejor proponer modelos solubles para aprender y entender las características esenciales del problema, a pesar de la aparente irracionalidad física de los modelos en sí.

Los primeros intentos en esta dirección recibieron muchas críticas,¹⁾ sin embargo, mucho se ha aprendido con esta filosofía y la T.M.F. está enteramente basada en ella.

La era moderna de la T.M.F. se inició prácticamente con la solución de Onsager al modelo de Ising bidimensional. Su solución se considera como uno de los cálculos más intrincados y monumentales llevados a cabo en la Física.

El modelo sugerido por Lenz y llamado de Ising está definido por la Hamiltoniana: †

$$- H_I = - \sum_j j \sigma_i \sigma_{i+1} + \sum_i h \sigma_i \quad (13)$$

En donde h es el campo magnético reducido.

Los "espines" σ_i pueden adquirir únicamente dos valores ± 1 . El modelo es altamente anisotrópico. En la Sección I.6, discutiremos una Hamiltoniana más general de la que (13) es un caso particular. A pesar de parecer un sistema altamente idealizado, resolverlo es no-trivial y se encuentran experimentalmente sistemas físicos que se pueden describir por él.

La solución de Onsager da para la energía libre el resultado ($h=0$).

$$F(\epsilon) = F_0 + a_0 \epsilon + b \epsilon^2 \ln \epsilon + \dots \quad (14)$$

F_0 es una constante independiente de ϵ así como a_0 y b . El resultado (14) es de importancia ya que contradice la hipótesis básica de la T.C.P. Esto es, cerca de T_C la energía libre no es una función analítica de ϵ . El calor específico en lugar de tener una discontinuidad finita como predice TCP tiene una divergencia logarítmica. Los resultados

experimentales se encuentran más cerca de los predichos por Onsager que por la TCP.¹² Entonces, a pesar de la simplicidad conceptual del modelo de Ising, la información que se extrae de él es de gran relevancia. El modelo de Ising bidimensional ha sido estudiado extensivamente.⁴⁹ La riqueza que este modelo encierra, ha resultado ser de gran ayuda en el desarrollo de la TMF. A tal punto que si aparece una idea, concepto o técnica de - - aproximación novedoso, si falla al aplicarse al modelo de Ising se espera que falle en general.

Los valores de los exponentes críticos predicho para el modelo de Ising son:

$$d = 2, \quad \nu = 1, \quad \alpha = 0, \quad \beta = 0.125, \quad \gamma = 1.75, \quad \delta = 15.04 \pm 0.07, \\ \eta = 0.25$$

$$d = 3, \quad \alpha = 0.013 \pm 0.01, \quad \beta = 0.312 \pm 0.002, \quad \gamma = 1.25 \pm 0.002, \quad \delta = 5.0 \pm 0.05 - \\ -0.005$$

$$\nu = 0.638 + 0.002$$

$$-0.001$$

que pueden compararse con los dados para la TCP de la sección anterior.

I. 5 ESCALAMIENTO ("SCALING"):

La medida de los exponentes críticos es una labor complicada que requiere de gran ingenio y cuidado. Usualmente, para una sustancia dada, sólo se pueden medir uno o dos de los exponentes críticos. La definición unívoca de la región crítica para dos exponentes críticos de una misma sustancia en ocasiones no coinciden exactamente.¹³

Un gran avance se logró con la hipótesis de "escalamiento" "e". La primera formulación concreta de esta idea fue presentada por Widom¹⁴. Aproximadamente al mismo tiempo esta idea fue propuesta con argumentos distintos y complementarios por Iadanoff¹⁵ Patashinskii¹⁶ y Fisher¹⁷.

"e" reduce el número de exponentes críticos (usualmente 9) a solamente 2 por medio de relaciones entre ellos. De tal manera que al medir dos de los exponentes críticos, los demás quedan automáticamente determinados. "e" ha sido comprobada experimentalmente con un alto grado de precisión.¹³ Anterior al advenimiento del Grupo de Renormalización - (G R) todas las demostraciones teóricas estaban basadas en argumentos de plausibilidad fenomenológicos o heurísticos. "e" es una de las piedras angulares de la T.M.F.

Por medio de argumentos puramente termodinámicos, se pueden obtener algunas desigualdades entre los exponentes críticos. Por ejemplo, para un punto crítico simétrico, Roshbrook obtuvo:¹⁸

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' \geq 2 \quad (15)$$

sobre la base de "e" (15) resulta ser estrictamente una igualdad. Existen varias igualdades predichas por "e" (ver 13,18). En esta sección, presentaremos a grandes razgos la deducción de la igualdad en base a la hipótesis de homogeneidad para los potenciales termodinámicos propuesto por Widom. La "demostración" de esta hipótesis, más la correspondiente para las funciones de correlación fue presentada por Kadanoff, basada en su construcción de "bloques de espín", que resulta ser la idea básica en el Grupo de Renormalización.

Dado el potencial termodinámico ϕ como función de ϵ y H , Widom propone que cerca de T_c ($\epsilon \rightarrow 0$) ϕ se puede escribir como:

$$\phi(\epsilon, H) = \phi_r(\epsilon) + \phi_s(\epsilon, H) \quad (15')$$

en donde ϕ_r es la parte regular de ϕ , función exclusivamente de la temperatura reducida ϵ . ϕ_s es la parte singular de ϕ de donde se extrae todo el comportamiento crítico de ϕ . - Widom propone que ϕ_s es una función homogénea generalizada - que satisface cerca de T_c

$$\phi_s(\epsilon, H) = |\epsilon|^{2-\alpha} g_{\pm}(H/|\epsilon|^{\Delta}) \quad (16)$$

g es una función continua diferenciable de su argumento

to. \pm representa $T > T_c$ o $T < T_c$ respectivamente. Derivando (16) dos veces con respecto de T , y tomando $H = 0$, encontramos el calor específico:

$$C_S \sim |\epsilon|^{-\alpha} g_{\pm}''(0) \quad (17)$$

La magnetización es proporcional a la primera derivada de ϕ con respecto de H . La parte singular da:

$$m_S \sim -|\epsilon|^{2-\alpha-\Delta} g_{\pm}'(H/|\epsilon|^{\Delta}) \quad (18)$$

De donde se demuestra:

$$\beta + \alpha + \Delta = 2 \quad (19)$$

La susceptibilidad κ es proporcional a la derivada de m con respecto de H , de donde:

$$\kappa_S \sim -|\epsilon|^{2-\alpha-2\Delta} g_{\pm}''(H/|\epsilon|^{\Delta}) \quad (20)$$

con lo cual

$$2 + \gamma = 2\Delta + \alpha \quad (21)$$

De (19) y (21) resulta la igualdad en (15). Argumentos más complicados se emplean para demostrar otras igualdades entre exponentes críticos, pero ninguno a este nivel es

riguroso. Dado que "e" se ha confirmado experimentalmente¹³ una teoría de transiciones de fase, debe de predecir "e" y sus correcciones. Esto último se ha logrado sobre la base - del grupo de Renormalización propuesto por Wilson y extendido y reinterpretado por Wegner.

I.6. HIPOTESIS DE UNIVERSALIDAD:

En la teoría de gases reales las propiedades termodinámicas de por ejemplo X_e , N_e , H_e y R_{dn} se pueden expresar como funciones universales de dos parámetros; la temperatura reducida $T^* = T/\epsilon$, en donde ϵ es la profundidad del pozo atractivo en el potencial de interacción interatómico, y el volumen reducido $v^* = V/N r_m$, con N el número de partículas, r_m el radio atómico y V el volumen atómico total promedio. De tal manera que diferentes gases pueden ser ordenados en clases distintas por las mismas funciones universales. Este resultado se le conoce como la "ley de estados correspondientes". Si los gases pertenecen a la misma clase, sólo se necesitan conocer las propiedades de uno de ellos para inferir la de los otros. Esta idea de "universalidad" ha sido utilizada en diferentes formas desde el siglo pasado.

En la T.M.F. se puede invocar un razonamiento análogo. En este caso la definición y caracterización de las diferentes "clases" de "universalidad" resulta ser menos obvia. La hipótesis de universalidad "U" es otra de las piedras angulares en la T.M.F. y fue propuesta independiente y casi simultáneamente por Kadanoff ¹⁹ y Griffiths ²⁰.

A continuación trataremos con más detalle el significado de "U". En mecánica estadística, el ingrediente esencial para calcular Z es la Hamiltoniana H asociada con el problema físico dado. H puede ser clásico o cuántico. En general H se puede expresar como:

$$H = - \sum_{\langle xx \rangle} \mathcal{N} (\{\phi_n (xx)\}, \{\lambda_i\}) \quad (22)$$

Con ϕ_n los operadores estadísticos que caracterizan el comportamiento microscópico del sistema, pueden ser clásicos o cuánticos. n denota el número de componentes de ϕ_n . En el caso cuántico, el conjunto $\{\phi_n\}$ tienen propiedades de conmutación bien definidas y se especifican para cada caso. Por ejemplo, en el caso de un sistema con fermiones ϕ_n tiene dos componentes $\phi_1 = \psi$ y $\phi_2 = \psi^+$ con

$$\left[\psi(\vec{x}), \psi^+(\vec{x}^1) \right]_+ = i \delta(\vec{x} - \vec{x}^1) \quad (23)$$

ψ^+ es el operador de creación de un fermión en el punto \vec{x} y $\psi(\vec{x}^1)$ lo destruye en \vec{x}^1 . En el caso clásico ϕ son "c" números. $\{x_i\}$ es el conjunto de constantes termodinámicas de acoplamiento. \vec{x} es el vector de posición con dimensión d .

\mathcal{N} es en general una función continua de los operadores y los campos y debe de ser deducida o propuesta sobre la base de argumentos físicos. La mayoría de los cálculos llevados a cabo en la T.M.F. han estado basados en la función \mathcal{N} dada por

$$\mathcal{N}(\{\phi_n (xx)\}, \{x_i\}) = \lambda_1 \sum_{\vec{x}} \sum_{\vec{x}^1} \phi_n(\vec{x}) \phi_n(\vec{x}^1) + \lambda_2 \sum_{\vec{x}} \sum_{\vec{x}^1} \hat{e}_n \cdot \phi_n(\vec{x}) + \dots \quad (24)$$

con la distancia de separación

$$|\vec{x} - \vec{x}^1| = 1 \quad (25)$$

\hat{e}_n es un vector unitario en la dirección n . Para sistemas magnéticos λ_1 es J y $\lambda_2 = H$. Sobre la base de un gran número de cálculos, se ha encontrado¹⁹ que el comportamiento crítico descrito por (24) depende exclusivamente de los parámetros n y d . Esto es, la estructura interna de la red cristalina (cúbica, romboidal, poligonal) es irrelevante. El carácter clásico o cuántico de los operadores no cambia el valor de los exponentes críticos. Estos resultados expresados formalmente constituyen la hipótesis de universalidad.

Valores distintos de n , para una misma dimensión d definen sistemas y modelos físicos diferentes. Para $n = 1$ (24) corresponde al modelo de Ising del que ya se habló en la sección I-4. El modelo de Ising no presenta transición de fase para una dimensión, pero sí en dos y tres dimensiones.

El $n = 2$ es el modelo x - y o planar. Este tiene simetría rotacional circular continua y no presenta orden de largo alcance para $d = 1, 2$, $n = 3$ es conocido como el modelo de Heisenberg, que posee simetría rotacional esférica continua.

El modelo de Ising describe el comportamiento físico de aleaciones binarias, transición líquido-gas, sistemas magnéticos anisotrópicos y se ha encontrado recientemente de utilidad, así mismo, en Teoría Cuántica de Campo TCC.²¹ El modelo x - y describe el comportamiento de ^4He superfluido y sistemas magnéticos, también se han encontrado conexiones entre el sistema vectorial y teorías de norma en $d = 4$.⁴⁷ El límite cuando $n \rightarrow \infty$ coincide con el Modelo esférico de Berlin-Kac.

La hamiltoniana dada en la ecuación (24) representa un modelo en el cual la dinámica microscópica del sistema ha sido "promediada". Esto es, la interacción electrón-electrón, - electrón-fonón, la estructura de bandas y otras interacciones presentes en un sistema magnético están "escondidas" en (24). Los resultados obtenidos bajo esta suposición han mostrado¹³ que el incluir estas interacciones explícitamente, es irrelevante en la región crítica. La T.M.F. postula que las divergencias en las propiedades termodinámicas está enteramente relacionada a las fluctuaciones en el parámetro de orden cerca de T_c y representadas por el hecho de que $\xi \rightarrow \infty$ cuando $\varepsilon \rightarrow 0$.

I.7 GRUPO DE RENORMALIZACION ²¹ :

¿Quién no se ha preguntado alguna vez, al ver hervir agua por ejemplo, cuál será el comportamiento microscópico de los átomos que la forman, tal que la hacen evaporarse? Cambios o transiciones de fase aparecen en tantas y tan variadas formas en la naturaleza, que por sí mismos han pasado a formar un campo independiente de investigación en la física.

Una de las características esenciales de la física es que es una ciencia cuantitativa. La definición de escalas de medida es entonces de importancia primera. Tenemos escalas de medida bien determinadas para distancias, tiempo y masa y como unidad derivada la energía. La mayoría de los problemas tratados en la física desde astrofísica, hasta física atómica, tienen la característica de que están definidos para un rango determinado en las magnitudes de las escalas de medida. Esto es, por ejemplo, en astrofísica es irrelevante considerar magnitudes de importancia a nivel atómico, en estado sólido variaciones a nivel nuclear son despreciados y por cierto que los resultados son más que satisfactorios.

¿Cuál es el elemento común en la mayoría de estas teorías? Una de las ideas más importantes ha sido la idea del campo promedio, también conocida como aproximación de Hartree, Hartree-Fock, Cuasi-Gaussiana o aproximación de la fase estocástica por mencionar algunas. El elemento común en todas estas aproximaciones es el de reducir un problema de muchos cuerpos y un número grande o muy grande de grados de libertad esencialmente al problema con un grado de libertad. Así mismo, la aproximación se aplica a una escala dada. Lo mejor de esta aproximación, es

que cuando se puede aplicar los resultados son excelentes. Debemos preveer al lector en el sentido de que la aplicación de este procedimiento, en muchos casos dista de ser trivial, aún cuando la filosofía general sea fácil de presentar.

¿Pero qué sucede cuando tenemos una transición de fase, un campo cuántico o turbulencia?. En este caso resulta que todas las escalas en el problema son relevantes. El comportamiento del sistema visto a 10^{-8} cms. tiene influencia en el comportamiento del sistema a 10^{-7} cms., el de 10^{-7} cms. en el de 10^{-6} cms. y así hasta ~ 1 cms. De tal manera que todas las escalas del sistema parecen estar "tejidas" en su comportamiento. Resulta entonces que este problema posee un número infinito de grados de libertad que no se pueden reducir por el método de la TCP. En el caso de las transiciones de fase, existe como distancia fundamental el espaciamento de la red cristalina. En turbulencia se espera que exista una distancia fundamental así mismo. Sin embargo, en TCC no existe una distancia fundamental y la mayoría de las divergencias que aparecen están asociadas con este hecho.

En los últimos 5 años ha surgido un esquema en la teoría de fenómenos críticos, que pretende resolver este tipo de problemas. El trabajo fundamental de Wilson con su "Grupo de Renormalización" basado en las ideas intuitivas de Kadanoff ha venido a unificar y en cierto sentido culminar un período de más de 10 años con lo que se conoce como la T.M.F. La idea central del G-R es la de tratar individualmente cada una de las escalas relevantes por separado, y resolver el problema para cada una hasta llegar al punto en donde el comportamiento del siste-

ma es independiente del cambio de escala. En términos técnicos esto se logra al alcanzar un punto fijo (más detalles serán dados a continuación). El G-R es esencialmente un algoritmo para tratar problemas con un número infinito de grados de libertad. En la mayoría de los casos es un procedimiento aproximado que requiere de gran ingenio. La última palabra de los alcances del G-R no se ha dicho, pero es evidente que representa una contribución importante a la Física en general. Las aplicaciones del G-R no se han restringido exclusivamente a la teoría de fenómenos críticos, trabajos en la dirección de turbulencia y teorías de campo cuántico con invariancias de norma locales y globales han sido desarrollados sobre la base del G-R - así como la solución del problema de Kondo por Wilson mismo.

A continuación presentamos las ideas principales del G-R. Antes de comenzar vemos que una teoría de fenómenos críticos debe de predecir escalamiento y universalidad, así como los valores de los exponentes críticos. Así mismo, debe de ser capaz de encontrar las limitaciones y correcciones a "e" y a "u". El G-R da respuesta a todas estas preguntas.

El primer paso en el programa del G-R es el de, dado un sistema físico con un número N de grados de libertad "sumar" parcialmente sobre N' ($< N$) de los grados de libertad, - tal que si la Hamiltoniana original es \mathcal{H}_N , por medio de la operación " \mathcal{R} " obtenemos:

$$\mathcal{R} \mathcal{H}_N(\{\lambda_i\}) = \mathcal{H}'_{N-N'}(\{\lambda'_i\}) \quad (26)$$

Para mantener la "densidad" de las variables termodinámicas, debemos de reescalar las dimensiones en nuestro sistema por $\underline{x} \rightarrow x' = x \delta^d$ en donde δ es la magnitud del reescalamiento (> 1) y d es la dimensionalidad del sistema. En (26) escribimos explícitamente el hecho de que al sumar sobre N' de los grados de libertad, las constantes de acoplamiento cambian. Esta es una de las características esenciales del grupo de Renormalización. Debemos de conservar la información física contenida en \mathcal{H}_N . Esto se garantiza exigiendo que las funciones de partición correspondientes, sean iguales, esto es:

$$Z_N \left(\mathcal{H}_N (\{\lambda_i\}) \right) = Z_{N-N'} \left(\mathcal{H}'_{N-N'} (\{\lambda'_i\}) \right) \quad (27)$$

Las energías libres correspondientes por medio de un análisis dimensional, están relacionados como:

$$F_N \left(\mathcal{H}_N (\{\lambda_i\}) \right) = \delta^d F_{N-N'} \left(\mathcal{H}'_{N-N'} (\{\lambda'_i\}) \right) \quad (28)$$

La operación \mathcal{R} se puede aplicar de nuevo, una vez que se ha obtenido $Z_{N-N'}$, para obtener $Z_{N-N'-N''}$ y así se continúa el proceso hasta que se llega a un punto fijo para la Hamiltoniana resultante. El punto fijo queda determinado por la ecuación:

$$\mathcal{R} \mathcal{H}^* (\{\lambda_i^*\}) = \mathcal{H}^* (\{\lambda_i^*\}) \quad (29)$$

Esto es, cuando aplicar R a g no cambia ni las características ni las constantes de acoplamiento de ella. Este punto fue identificado por Wilson como representativo del punto crítico en una transición de fase. Sobre la base de (27) (28) y (29) se puede probar la validez de las hipótesis de escalamiento "e", universalidad "U" y de valores para los exponentes críticos de acuerdo con los resultados experimentales con una precisión hasta ahora de 5%. El lector interesado se le recomienda dirigirse al artículo de Wilson y Kogout para más detalles ²¹.

CAPITULO II

II.1 SISTEMAS MAGNETICOS UNIDIMENSIONALES:

A pesar de que la mayoría de las sustancias en la naturaleza son tridimensionales se pueden encontrar materiales en los cuales el comportamiento de algunas de sus propiedades físicas es esencialmente uno o dos dimensional. En años recientes la búsqueda y estudio de estas sustancias se ha intensificado ³³ Por cierto que, en muchos casos, es más fácil encontrar sistemas que se comportan como 1 ó 2 dimensionales que tridimensionales ³⁰.

La existencia de sistemas magnéticos con geometrías restringidas está relacionado esencialmente a la anisotropía de la interacción de intercambio. Para un sistema de espines en ausencia de un campo magnético, la Hamiltoniana modelo se puede escribir como:

$$\begin{aligned}
 -\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} & f(x-x') \vec{S}_i^x \vec{S}_j^{x'} + f(y-y') \vec{S}_i^y \vec{S}_j^{y'} + \\
 & + f(z-z') \vec{S}_i^z \vec{S}_j^{z'} \qquad (1)
 \end{aligned}$$

$f(x)$, $f(y)$ y $f(z)$ son las constantes de acoplamiento reducidas dadas por las integrales de intercambio en las direcciones (x,y,z) respectivamente. Si $|f_x| \sim |f_y| \sim |f_z|$ el comportamiento del sistema es tridimensional. Cuando $|f_x| \sim |f_y| \gg |f_z|$ el acoplamiento en la dirección z es débil y por tanto dominante en el plano $x-y$. En este caso el sistema

se comporta como bidimensional. Claramente cuando $|f_x| \sim |f_y| \ll |f_z|$ el sistema es unidimensional en sus propiedades magnéticas. Este argumento es válido para una temperatura dada ya que $\{f\}$ son funciones de la temperatura. Esto es, si el sistema tiene un acoplamiento débil en la dirección Z , las superficies bidimensionales son, a primer orden, no interactuantes. Al variar la temperatura la interacción de intercambio en la dirección Z aumenta y el sistema pasa de bidimensional a tridimensional en su comportamiento. Este fenómeno se le conoce como de "cruzamiento" (cross over) y cerca de T_c (3-d) se pueden definir exponentes críticos y funciones de escalamiento que caracterizan este hecho. Aquí nos restringiremos a la región de temperaturas bajas en el que el carácter unidimensional del sistema se encuentra bien definido.

Sistemas magnéticos que satisfacen esta condición son $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{N C}_5\text{H}_5$, TMMC y CsNiF_3^* . Este último compuesto presenta interacciones ferromagnéticas a lo largo de las cadenas unidimensionales e interacción antiferromagnética entre cadenas. Usualmente $|f_z| \sim 10^3 \sim |f_x| = |f_y|$ para temperaturas del orden de algunos grados Kelvin.

La mayoría de las cadenas unidimensionales encontradas hasta ahora, son de carácter antiferromagnético. Esto es debido a que es más fácil encontrar antiferromagnetismo en la naturaleza que, "ferromagnetismo".

* El primero corresponde a $n=1$, el segundo a $n=3$ antiferromagnético y el último de interés en este trabajo $n=2$ ferromagnético.

La situación desde el punto de vista experimental, es la siguiente: a temperaturas muy altas, la ley de Curie-Weiss para la susceptibilidad es válida ($\chi \sim 1/T$). En el caso de CsNiF_3 esta región está dada para $T > 100^\circ\text{K}$. Para bajas temperaturas $2.8^\circ\text{K} < 100^\circ\text{K}$ el sistema se comporta con un alto grado de precisión como unidimensional ³³. Para temperaturas del orden de $T < 2.8^\circ\text{K}$ el sistema presenta una transición de fase de carácter tridimensional. Esto se debe a que alrededor de estas temperaturas, las interacciones dentro de las cadenas se vuelven del orden de las interacciones entre las cadenas, dando como resultado correlaciones de largo alcance de tipo tridimensional. La región en donde el ordenamiento de corto alcance (sin transición de fase) es esencialmente de naturaleza unidimensional es mayor para sistemas con simetrías continuas, que en el caso de sistemas anisotrópicos. Esto los hace idóneos desde el punto de vista experimental.

II.2 TEOREMA DE MERMIN-WAGNER:

Quizá la característica más sobresaliente de los sistemas unidimensionales, desde el punto de vista de fenómenos críticos, es su inhabilidad de presentar orden de largo alcance a temperaturas finitas. Esto ocurre para sistemas con interacciones de corto alcance. Este resultado fue probado rigurosamente por Mermin y Wagner ²². Antes de presentar los elementos de la demostración, presentaremos brevemente el argumento dado por Landau ¹¹ ya que es más intuitivo físicamente.

Imaginemos un sistema de espines unidimensional a temperatura $T \neq 0$ y con interacciones de corto alcance. Supongamos que el sistema se encuentra inicialmente ordenado, esto es, todos los espines orientados análogamente. La energía libre F del sistema está dado por:

$$F = U - TS \quad (2)$$

El sistema tiene N espines. Invirtamos n de los espines en dirección exactamente contraria a la anterior. El cambio en la energía libre tendrá dos partes ΔU y $T\Delta S$. Ya que las interacciones son de corto alcance, ΔU no depende de N . El cambio en la entropía S está representado por $\Delta S = -k \ln N$ dado que podemos escoger n de N maneras diferentes. Entonces, para $T \neq 0$ podemos escoger N tan grande como queramos, de tal manera que $\Delta F < 0$; bajo estas condiciones el sistema es inestable y por tanto el sistema ordenado no puede existir. Este argumento está basado en la suposición de que las interacciones son de corto alcance. Cuando se permiten interacciones de largo alcance, ΔU puede depender de N y por tanto invertir $\Delta F > 0$ para $T \neq 0$.

El teorema de M-W está basado en la llamada desigualdad de Bogoliubov (D-B) ³¹. La D-B fue usada primero por Hohenberg para probar la no existencia del condensado superfluido en ^4He para sistemas 1 y 2-dimensionales. La mayor parte de las demostraciones y conjeturas acerca de la no existencia de un parámetro de orden en 1 y 2-dimensiones para sistemas con simetrías continuas están basados en la D-B, por lo que la presen-

taremos aquí brevemente aplicada a los problemas de interés en este trabajo.

El promedio termodinámico de cualquier matriz A definida en el espacio de Hilbert finito, H , está dado por ($\beta > 0$)

$$\langle A \rangle = \text{tr} \left[A \exp - \beta \mathcal{H} \right] / \text{tr} e^{-\beta \mathcal{H}} \quad (3)$$

en donde la matriz Hamiltoniana está definida en H y satisface $\mathcal{H} = \mathcal{H}^+$. Para cualquier otra matriz $C \in H$ se satisface.

$$\frac{1}{2} \beta \langle AA^+ + A^+A \rangle \langle \left[[C, \mathcal{H}], C^+ \right] \rangle \geq | \langle [C, A] \rangle |^2 \quad (4)$$

en donde los paréntesis denotan los conmutadores en mecánica cuántica o los paréntesis de Poisson en mecánica clásica. La demostración de Bogoliuvov y sus modificaciones están basadas sólidamente en el formalismo de la M.C. El límite clásico de (4) se puede obtener tomando $\hbar \rightarrow 0$. Sin embargo, el procedimiento no es claro y es conveniente tener una derivación puramente clásica. El equivalente clásico de (4) es:

$$\beta \langle |A|^2 \rangle \langle \left[C, \left[C^*, \mathcal{H} \right]_{\text{p.p.}} \right]_{\text{p.p.}} \rangle \geq | \langle [C, A]_{\text{p.p.}} \rangle |^2 \quad (5)$$

en donde A y C son variables dinámicas funciones de los momentos y coordenadas generalizadas $x_i = (q_i, p_i)$ y los paréntesis de Poisson se escriben como ³⁹.

$$\left[A, C \right] = \frac{\partial A}{\partial x^k} \alpha^{kl} \frac{\partial C}{\partial x^l} \quad (6)$$

en donde α^{kl} es la matriz simpléctica. La validez de (5) presupone que las funciones A y C son periódicas y por tanto, las correcciones superficiales se anulan idénticamente ³²

Definiendo:

$$\vec{S}(\underline{r}) = \sum_{\underline{k}} e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}} \vec{S}(\underline{k}),$$

$$J(\underline{r}) = \sum_{\underline{k}} e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}} J(\underline{k}) \quad (7)$$

y la Hamiltoniana \mathcal{H} dada por

$$- \mathcal{H} = \sum_{\underline{r}, \underline{r}'} \vec{S}(\underline{r}) \vec{S}(\underline{r}') + \sum_{\underline{r}} \underline{h} \cdot \vec{S}(\underline{r}) \quad (8)$$

con

$$J(\underline{r}-\underline{r}') = \begin{cases} J & \text{si } |\underline{r}-\underline{r}'| < M \\ 0 & \text{si } |\underline{r}-\underline{r}'| > M \end{cases} \quad (9)$$

y tomando $A = S_+(\underline{k})$ y $C = S_-(\underline{k})$.

Haciendo uso de (5), (6), (7) y (8) para $n \geq 2$

se obtiene

$$1 > \alpha \beta^{-1} m^2 \int \frac{d\underline{k}}{(2\pi)^d} \left\{ k^2 \left(\sum_{\substack{|\underline{r}-\underline{r}'|^2 \\ |\underline{r}-\underline{r}'|}} J(\underline{r}-\underline{r}') + |\underline{h}| |m| \right) \right\}^{-1} \quad (10)$$

En donde la magnetización se definió como:

$$m = \sum_{\underline{r}} \langle S_z(\underline{r}) \rangle \quad (11)$$

La desigualdad (10) implica que $m(h) \rightarrow 0$ cuando $h \rightarrow 0$ para $d = 1, 2$ y $n \geq 2$. Este resultado es riguroso. Expresado en el lenguaje de TCC Coleman demostró que no existen Bosones de Goldston para sistemas con simetrías continuas en $1+1$ dimensiones. Este resultado anula la posibilidad de tener una transición de fase con orden de largo alcance. Sin embargo no niega la posibilidad de tener otro tipo de transiciones de fase en los que no se pueda definir un parámetro de orden, pero que alguna de las variables termodinámicas se vuelva "crítica" para un valor finito de la temperatura. Esto sucede en particular para el modelo $x-y$ en dos dimensiones ^o.

II.3 EL MODELO VECTORIAL CLASICO:

La aparición de la magnetización espontánea en materiales ferromagnéticos para temperaturas $T = T_c$ es de naturaleza colectiva de largo alcance. La interacción de intercambio es la responsable de alineamiento preferencial de los espines electrónicos. Para un sistema magnético con partículas con número cuántico de espín "S" y operadores de espín \hat{T} la Hamiltoniana más simple, no trivial, que se puede construir preservando la antisimetría de la función de onda es:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} f(i-j) \hat{t}_i \hat{t}_j + \sum_i \underline{h} \cdot \hat{t}_i \quad (12)$$

en donde los operadores de espín normalizados " \hat{t} " se han definido igual con:

$$\frac{\vec{H}_i}{S} \equiv \vec{t}_i \quad (13)$$

La Hamiltoniana (12) se le conoce como la de Heisenberg cuántica. La función de partición asociada con (12) es:

$$Z(\underline{h}, N, S) = \text{tr}_{\{\{\vec{t}_i\}\}} \exp - \hat{H} \quad (14)$$

En este caso el símbolo traza se evalúa con respecto al producto directo de los eigenvectores $|\vec{t}_i^z\rangle$ definidos en cada punto "i" de la red.

Cuando el valor del número cuántico de espín $S \rightarrow \infty$ (usualmente para $S > 1$) se puede demostrar que ⁴⁷

$$\lim_{S \rightarrow \infty} \frac{1}{S^N} \tilde{Z}(\underline{h}, S, N) = (2\pi)^{-N} Z(\underline{h}, N) \quad (15)$$

en donde $Z(\underline{h}, N)$ es la función de partición "clásica" definida por:

$$Z(\underline{h}, N) = \left(\prod_i d\vec{S}_i \right) \exp - \mathcal{H} \left\{ \vec{S}_i \right\} \quad (16)$$

con los vectores de "espín clásicos" $|\vec{S}_i| = 1$, y la Hamiltoniana del modelo vectorial clásico definida como:

$$- \mathcal{H} \left\{ \vec{S}_i \right\} = + \sum_{i,j} f(i-j) \vec{S}_i^{(n)} \cdot \vec{S}_j^{(n)} + \sum_i \underline{h} \cdot \vec{S}_i^{(n)} \quad (17)$$

El superíndice "n" representa el número de componentes del vector \vec{S} . Para $n = 1, 2, 3$ el modelo descrito por (17) se conoce como el modelo de Heisenberg Clásico. Para valores arbitrarios de $n \in (0, \infty)$ es conocido como el modelo de Stanley.

A pesar de la aparente irrealdad de (17), sobre la base de un gran número de cálculos, se ha encontrado que (12) y (17) poseen asintóticamente ($T \sim T_c$), las mismas propiedades críticas. Esto es, el carácter cuántico o clásico de la Hamiltoniana no afecta los valores de los exponentes críticos. Esto se puede explicar desde el punto de vista físico de la siguiente manera: El elemento esencial del comportamiento crítico de un sistema es su naturaleza de largo alcance. Las fluctuaciones en la magnetización son de longitudes de onda largas, tal que el número de espines contenidos en una región de orientación análoga es muy grande. Por esto las modificaciones de los resultados debidos a efectos cuánticos son esencialmente nulos. Desde luego que, (27) imita el comportamiento de (12) para longitudes de onda grandes pero el comportamiento a longitudes de onda pequeños debe ser cualitativamente diferente.

Experimentalmente los modelos clásicos son representativos para valores del espín mayor que $5/2$. Sin embargo, en casos como el de CsNiF_3 (de espín igual con 1) el modelo x-y clásico representa satisfactoriamente los resultados experimentales - aún lejos del punto crítico.

II.4 MATRIZ DE TRANSFERENCIA:

Una de las técnicas más útiles para evaluar la función de partición Z es por medio de la "Matriz de Transferencia" - (M.T.). Propuesta por Kramers y Wannier, Montroull y Lasetree y Howe ²³ en 1941, ha sido extendida y aplicada a un gran número de problemas. Lars Onsager la utilizó para obtener su solución famosa al modelo 2-d de Ising.

La técnica de la M.T. se aplica a sistemas clásicos con interacciones de corto alcance en al menos una dirección. Imaginemos que nuestro sistema tridimensional lo dividimos en superficies bidimensionales con interacciones de corto alcance entre sí. Claramente, dado que la interacción entre superficies es de corto alcance si eliminamos una de las superficies, el sistema quedará dividido en dos partes no interactuantes entre sí. La Hamiltoniana se puede escribir como:

$$- \mathcal{H} = \sum_i \epsilon(i, i+1) + \sum_i \epsilon'(i) \quad (18)$$

En donde i denota la superficie i -ésima. ϵ da la energía de interacción entre superficies vecinas y ϵ' la energía por superficie. La función de partición queda dada por:

$$Z(N) = \text{tr} \prod_{i=1}^N e^{\epsilon(i, i+1) + \epsilon'(i)} \quad (19)$$

Definiendo la matriz de transferencia T por:

$$T(i, i+1) \equiv e^{\varepsilon(i, i+1) + \varepsilon'(i)} \quad (20)$$

T es en general una matriz simétrica nxn. Entonces el producto sobre i en (6) coincide con la multiplicación matricial de las diferentes T's quedando:

$$Z(N) = \text{tr} (T)^N \quad (21)$$

Desde luego para llegar a (21) de (19) hemos impuesto condiciones de frontera periódicas. Esto es, la primera y la última superficie coinciden. La traza en (21) es independiente de la representación de T y por tanto, podemos suponer que T tiene su representación diagonal, de donde

$$Z(N) = \sum_{i=1}^n (\lambda_i)^N \quad (22)$$

con $\{\lambda_i\}$ los eigenvalores de T. La energía libre correspondiente se calcula en el límite cuando $N \rightarrow \infty$ (el límite termodinámico)

$$-\beta F = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z(N) \quad (23)$$

En este límite de contribución máxima provendrá del eigenvalor máximo de T, entonces:

$$-\beta F = \ln \lambda_{\max} \quad (24)$$

Tomar el límite termodinámico es necesario, ya que como demostró Van Hove, esperamos encontrar comportamiento no analítico de F o sus derivadas sólo en el límite en que la suma sobre estados puede volverse no acotada por arriba.

El resultado (24) es muy poderoso y de gran utilidad ya que la difícil evaluación de F se reduce a la diagonalización de T para encontrar su eigenvalor máximo. En muchos casos esta diagonalización no es posible cuando T no es simétrica, como ocurre cuando los sistemas de espín tienen un campo magnético aplicado.

La matriz de transferencia que se utiliza en este trabajo se puede considerar como una versión continua de la presentada en esta sección. La ventaja es que al representar la función Z como una integral funcional, su evaluación (para una dimensión), se reduce a la solución de un problema de Sturm-Liouville tal que se diagonaliza un operador diferencial en lugar de una ecuación matricial o integral no simétrica.

Las funciones de correlación para funciones de espín $\eta^\alpha(\vec{S}_i^{(n)})^*$ se pueden calcular así mismo con la ayuda de la matriz de transferencia $T(i,j)$. En este caso se requiere conocer las eigenfunciones y eigenvalores de $T(i,j)$. Dado el conjunto completo de eigenfunciones ψ_n , que satisfacen

$$T(i,j) \psi_n(\vec{S}_i^{(n)}) = \lambda_n \psi_n(\vec{S}_j^{(n)}) \quad (25)$$

* $\alpha = x, y, z.$

Se puede expresar $T(i, j)$ en términos de sus eigen valores y eigenfunciones como:

$$T(i, j) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n \psi_n^* (\vec{S}_i^{(n)}) \psi_n (\vec{S}_j^{(n)}) \quad (26)$$

Sobre la base de (25) y (26) la función de correlación $\langle \eta^\alpha (\vec{S}_i^{(n)}) \eta^\beta (\vec{S}_j^{(n)}) \rangle$, en términos de los eigenvalores y eigenfunciones de T queda igual con ¹⁷

$$\sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{\lambda_m}{\lambda_0} \right)^{i-j} \left\{ \int \psi_m^* (\vec{S}_i^{(n)}) \eta^\alpha (\vec{S}_i^{(n)}) \psi_0 (\vec{S}_i^{(n)}) d\vec{S}_i^{(n)} \right\} \times$$

$$\times \left\{ \int \psi_0^* (\vec{S}_j^{(n)}) \eta^\beta (\vec{S}_j^{(n)}) \psi_m (\vec{S}_j^{(n)}) d\vec{S}_j^{(n)} \right\}$$

(27)

A diferencia en la determinación de la energía libre, para las funciones de correlación se requiere del conocimiento de eigenvalores y eigenfunciones superiores.

En la Sección II.9 utilizaremos una versión análoga a (26) en el lenguaje de la matriz de transferencia continua.

II.5 CADENA CLASICA EN AUSENCIA DE UN CAMPO MAGNETICO:

A pesar de que la evaluación de la función de partición asociada con la Hamiltoniana dada en la ecuación (12) es más complicada que la evaluación correspondiente con la ecuación (17), no existe, hasta hoy una solución general para $d > 2$. La situación es diferente para el caso unidimensional si tomamos $\hbar = 0$.

La solución exacta al modelo de Ising ($d = 1$ y $n = 1$) clásico fue obtenida por Thomson³⁴. Para el modelo clásico con dos componentes llamado modelo x - y , Joyce obtuvo la solución exacta de las propiedades termodinámicas y funciones de correlación, haciendo uso de la matriz de transferencia aunada con la teoría de coeficientes 3 - j .

El modelo isotrópico de Heisenberg ($d=1, n=3$) fue resuelto exactamente por Fisher³⁶, tanto para el caso ferromagnético como para el antiferromagnético. Sus resultados teóricos han sido corroborados experimentalmente. Una solución al problema de la evaluación de la función de partición fue dada previamente fuera del contexto del magnetismo por Nakamura³⁷ pero pasó inadvertido por mucho tiempo.

La solución general correspondiente a $d=1$ y n arbitraria fue dada por Stanley ³⁸. Aquí tomaremos una versión simplificada de su solución para discutir las propiedades termodinámicas del modelo clásico en ausencia de un campo aplicado.

La solución fue obtenida como en la mayoría de las soluciones exactas en existencia, por medio de la matriz de transferencia (M-T).

La M-T asociada con la Hamiltoniana dada en la ecuación (17) para $\hbar \equiv 0$ es:

$$T_{ij}^{(n)} = e^{j \vec{S}_i^{(n)} \cdot \vec{S}_j^{(n)}} \quad (28)$$

Dado que los espines están representados por vectores podemos expandir (28) en términos de los armónicos esféricos como:

$$T_{ij}^{(n)} = 4\pi \sum_{\ell m} (2\pi)^{1/2n} j^{1 - \frac{1}{2}n} I_{i/2n-1+\ell}(j) \times Y_{\ell m}(\vec{S}_i^{(n)}) Y_{\ell m}(\vec{S}_j^{(n)}) \quad (29)$$

En donde I_ν es la función de Bessel modificada de primera clase. Los valores de ℓ corren de $0, 1, 2, 3, \dots$. Es claro de (29) que los eigenvalores de T_{ij} están dados por los coeficientes de los $Y_{\nu} \cdot Y_{\nu, s}$. De donde la función de partición en términos de los eigenvalores

$$\lambda_{\ell}^{(n)} = (2\pi)^{\frac{1}{2}n} j^{1 - \frac{1}{2}n} I_{\frac{1}{2}n-1+\ell}^{(j)} \quad (30)$$

resulta:

$$Z = \prod_{\ell} \alpha_{\ell} (\lambda_{\ell}^{(n)})^N \quad (31)$$

con N el número de espines en el sistema y los coeficientes α_{ℓ} dependen de las condiciones de frontera. En el límite termodinámico ($N \rightarrow \infty$) la contribución máxima a la energía libre provienen de los eigenvalores con $\ell=0$. Por tanto, la energía libre queda:

$$-\beta F = -\log \left\{ (2\pi)^{\frac{1}{2}n} j^{1-\frac{1}{2}n} I_{\frac{1}{2}n-1}^{(j)} \right\} \quad (32)$$

La ecuación (32) da la solución exacta al problema unidimensional clásico para cualquier temperatura y con campo magnético aplicado cero. Lo primero que observamos es que al incluir un campo magnético externo, la simetría rotacional contenida en, (28) que nos ha permitido expandir T_{ij} en términos de la armónica esférica se rompe, y por tanto, el único recurso para obtener una solución aproximada del problema es tratar de hacer uso de la teoría de perturbaciones. En este trabajo presentamos una versión continua de la matriz de transferencia que nos permite resolver exactamente los problemas correspondientes a $n = 2, 3$ en la vecindad de la región crítica.

Para probar la validez de nuestra solución, necesitamos recuperar los resultados predichos por (32) en el límite cuando $h \rightarrow 0$ y $T \rightarrow 0$. Por lo tanto, discutiremos las predicciones de la ecuación (32) en el límite cuando $T \rightarrow 0$ con el fin de compararlas con los resultados posteriores cuando $h \rightarrow 0$.

Todas las propiedades termodinámicas se obtienen de (32) por medio de derivadas con respecto de j . Una observación de relevancia para la hipótesis de universalidad, es la variación continua explícita de las propiedades termodinámicas con n .

La función de correlación de dos puntos se calcula directamente haciendo uso de (17) y (31) de donde resulta:

$$\langle \vec{S}^{(n)}(0) \cdot \vec{S}^{(n)}(x) \rangle = \frac{1}{n} \left(\frac{I_1^{(j)} \left(\frac{1}{2} \right)^n}{I_1^{(j)} \left(\frac{1}{2} \right)^{n-1}} \right)^x \quad (33)$$

La función de correlación es quizás la cantidad más fácil de medir experimentalmente por medio de dispersión de neutrones.

La susceptibilidad se obtiene haciendo uso del teorema de fluctuación-disipación. En el caso en que $n=2$ y $n=3$, a bajas temperaturas (33) resulta:

$$\langle \vec{S}^{(n)}(0) \cdot \vec{S}^{(n)}(x) \rangle \underset{\substack{T \rightarrow 0 \\ h=0}}{\approx} \exp \left(- \frac{1}{a} j^{-1} x \right) \quad (34)$$

para $n=2$, $a=8$ y para $n=3$, $a=4$. La comparación con los re

sultados experimentales predichos por (34) serán discutidos posteriormente.

Stanley obtuvo resultados gráficos de las funciones termodinámicas y de correlación, como función de β , β^{-1} , y n para los casos ferromagnético y antiferromagnético. Aquí discutiremos sólo el caso ferromagnético (ya que es el que presenta comportamiento crítico).

Haciendo uso de las expansiones de las funciones de Bessel para $j \gg 1$ se obtiene que la susceptibilidad magnética se comporta como:

$$\chi \sim c j^2 \quad T \rightarrow 0 \quad (35)$$

para $n \geq 2$, y como

$$\chi \sim j e^{-2j} \quad T \rightarrow 0 \quad (36)$$

para $n = 1$.

De (35-36) se ve inmediatamente que la susceptibilidad diverge cuando $T \rightarrow 0$, dando $\gamma = 2$, para $n \geq 2$. Para $n > 1$ la entropía diverge logarítmicamente como

$$S^{(n>1)} \sim -T \ln T \quad (37)$$

por tanto el calor específico resulta:

$$C \sim \text{cte}, \quad T = 0 \quad (38)$$

de donde $\alpha = 0$.

Los resultados (37) y (38) contradicen la tercera ley de la termodinámica. Esta es una característica de la mayoría de los modelos clásicos unidimensionales. La razón es de que se han dejado de lado las fluctuaciones cuánticas que son relevantes cuando $T \rightarrow 0$ y que cancelan la divergencia en la energía. A pesar de esto, el modelo está bien definido físicamente y la comparación con los resultados experimentales disponibles es excelente.

II.6. MODELO VECTORIAL CLASICO A BAJAS TEMPERATURAS:

Como se mencionó en la sección anterior, el modelo vectorial clásico está representado por vectores unitarios $\vec{S}^{(n)}$ de dimensión "n" asociados con cada punto de la red cristalina en "d" dimensiones. Al bajar la temperatura, el sistema magnético tiende a ordenarse. Las fluctuaciones en las orientaciones de los espines son muy pequeñas. Para vecinos cercanos, la diferencia angular en sus orientaciones es también muy pequeña. El primer término en la Hamiltoniana clásica (17) mide el coseno de la diferencia angular entre vecinos cercanos, " $\gamma_{\underline{r}, \underline{r}+1}$ ". En términos de $\gamma_{\underline{r}, \underline{r}+1}$ y tomando el campo magnético a lo largo de la dirección "z", (17) se puede representar como:

$$- \mathcal{H} = j \sum_{\langle \underline{r}, \underline{r}+1 \rangle} \cos \gamma_{\underline{r}, \underline{r}+1} + h \sum_{\underline{r}} \cos \gamma_{\underline{r}} \quad (39)$$

Al bajar la temperatura, la diferencia angular $\gamma_{\underline{r}, \underline{r}+1} \rightarrow 0$. Esto nos permite tomar la contribución principal de (39) en este límite, de donde queda:

$$- \mathcal{H} = -j/2 \sum_{\langle \underline{r}, \underline{r}+1 \rangle} \left(\gamma_{\underline{r}, \underline{r}+1} \right)^2 + h \sum_{\underline{r}} \cos \gamma_{\underline{r}} \quad (40)$$

El término constante se ha absorbido en \mathcal{H} ya que no modifica el valor de las propiedades termodinámicas del sistema.

El segundo término no se puede aproximar ya que el valor de $\gamma_{\underline{r}, \underline{r}+1}$ es pequeño pero $\gamma_{\underline{r}}$ puede adquirir cualquier valor. Esta representación de \mathcal{H} es conveniente para la discusión del modelo x-y. La ecuación (40) es válida para toda "n" y "d". En esta sección trataremos en particular el modelo x-y. En este caso, $\gamma_{\underline{r}}$ es el ángulo polar. La descripción del sistema está completamente determinada exclusivamente en términos de $\gamma_{\underline{r}}$ ya que los espines tienen magnitudes restringidas y constantes.

La función de partición correspondiente se lee:

$$Z = \left[\prod_{\underline{r}}^N d\gamma_{\underline{r}} \right] \left(\prod_{\underline{r}'} e^{-j/2 (\gamma_{\underline{r}'} - \gamma_{\underline{r}'+1})^2 + h \cos \gamma_{\underline{r}'}} \right) \quad (41)$$

Ya que la variación angular de los espines a bajas temperaturas es "suave" $\gamma_{\underline{r}}$ se convierte en una función continua de \underline{r} . De tal manera que el tomar el límite de bajas temperaturas en (39) es equivalente a tomar su límite continuo.

Midiendo las distancias renormalizadas por la constante de la red, el término cuadrático en (41) se puede aproximar por el gradiente cuadrado de $\gamma(\underline{r})$. Bajo estas condiciones el producto de diferenciales en (41) se vuelve infinito. Usualmente este límite se denota como:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{r=1}^N d\gamma_{\underline{r}} e^{-\sum_{\underline{r}} j(\gamma_{\underline{r}} - \gamma_{\underline{r}'+1})^2} \rightarrow (2j)^{\Lambda/2} \int \delta[\gamma(\underline{r})] \quad (42)$$

en donde la "medida" $\delta(\)$ es del tipo de Wiener-Feynman y se ha definido de tal manera, que es independiente de la temperatura. La "integral" en el miembro derecho está bien definida en el sentido de Lebesgue en cualquier número de dimensiones. Las integrales funcionales fueron introducidas en las matemáticas por Wiener en 1921 en sus estudios de movimiento Browniano. El logró mostrar que (41) define rigurosamente una integral en el espacio de funciones de clase L_2 . Posteriormente e independientemente Feynman introdujo las integrales funcionales en la física, en el contexto de la Mecánica Cuántica y con aplicaciones a la electrodinámica cuántica. Por medio de manipulaciones formales, encontró las "reglas de Feynman" para la teoría de perturbaciones que son de fundamental importancia en varias ramas de la física actualmente.

A pesar de que la formulación de Feynman fue motivada por razones puramente físicas, la "medida" de la integral funcional de Feynman difiere por un factor $i = \sqrt{-1}$ en la parte guassiana de la "medida". Esto hace que no se pueda definir las operaciones formales en ella sin recurrir a inconsistencias.

cias. Sin embargo, si se continúa el "tiempo" analíticamente de $t \rightarrow it$, se obtiene una representación Euclideana de la integral de Feynman, que entonces se encuentra, desde el punto de vista algebraico, perfectamente bien definida. De aquí se puede conectar formalmente la formulación Euclideana de la mecánica - - cuántica con la mecánica estadística clásica.

Haciendo uso de (41) y de (42), la función de partición para el modelo x - y en su representación continua - - ($T \rightarrow 0$) resulta:

$$Z = (2j)^{\Lambda/2} \int \delta\{\gamma(\underline{r})\} e^{\int h \cos \gamma(\underline{r}) d\underline{r}} \quad (43)$$

Incluyendo la parte cuadrática de la medida podemos definir la densidad "Lagrangiana Euclideana" "L" como:

$$L(\underline{r}) = -j/2 (\nabla_{\underline{r}} \gamma(\underline{r}))^2 + h \cos \gamma(\underline{r}) \quad (44)$$

Este resultado es interesante ya que L define así mismo la teoría de campo de "sine-Gordon" que ha sido de gran interés en los últimos dos años (en 1+1 dimensiones) ⁶.

Incluyendo el tiempo en (43) para una dimensión espacial, la ecuación de movimiento asociado es:

$$\partial_{\underline{x}}^2 \psi - \partial_t^2 \psi = 2 \frac{h}{j} \sin \psi \quad (45)$$

La ecuación no-lineal (45) puede resolverse exactamente y ha sido estudiada extensivamente en los dos últimos - -

años. Las soluciones de (45) son conocidas. Por ejemplo:

$$\psi_{\pm}(x,t) = 4 \tan^{-1} \exp \left[\pm \sqrt{2} \frac{\hbar}{j} (x-Vt)/(1-V^2)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (46)$$

en donde V es la velocidad de la solución ondulatoria de (45) ($|V| < 1$). La solución (46) tiene la propiedad llamada de "Soliton". Un soliton se define como una solución estable a una ecuación diferencial no lineal, tal que al hacer colisionar dos de esas soluciones no se destruyen.

En nuestro problema, los solitones forman las llamadas "paredes de Bloch". Sin embargo, al tomar el límite termodinámico dentro de la solución exacta, no aparecen explícitamente.

Sin embargo, por medio de un tratamiento semifenomenológico, se puede mostrar que si se toman las excitaciones representadas por las ondas de espín, más las paredes de Bloch independientemente la función de partición resultante coincide con la obtenida exactamente.

Volviendo al modelo x - y vemos que a bajas temperaturas, el modelo se reduce a la teoría del campo escalar libre sin masa cuando el campo magnético aplicado es nulo. En una dimensión el problema ($\hbar=0$) se resuelve trivialmente. En dos dimensiones el sistema presenta divergencias infrarrojas difíciles de controlar y se debe recurrir a los métodos de la teoría de renormalización para darles sentido. En este trabajo estamos interesados en el caso $\hbar \neq 0$. La evaluación de la integral funcional para dimensiones $d \geq 2$ en general involucra aproximaciones por medio del método de Laplace, que son difíciles de controlar.

La situación es diferente en una dimensión. Si la integral es del tipo de Wiener-Feynman, la evaluación de Z se reduce a resolver un problema del tipo de Sturm-Liouville asociado con $L(\underline{r})$. Este resultado se le conoce como el Teorema de Kac ²⁶ y lo discutiremos en la siguiente sección. Este método cuando se puede aplicar es muy poderoso. Sin embargo, su aplicación ha sido muy poco explotada. Una de las razones es de que la solución a la ecuación diferencial asociada es muy difícil y requiere, en la mayoría de los casos, de soluciones numéricas. En este trabajo las soluciones que se dan para el modelo x - y son exactas y asintóticas para el modelo de Heisenberg, haciendo uso del teorema de Kac.

II.7 EL TEOREMA DE KAC:

Motivado por los artículos de Feynman, Kac demostró que la evaluación de una integral funcional es equivalente a la solución de un problema de Sturm-Liouville, cuando la medida en la integral funcional es del tipo de Wiener-Feynman. En lugar de proceder a analizar la demostración dada por Kac (conectada directamente con la teoría matemática de procesos estocásticos), presentaremos una deducción heurística relacionada con la matriz de transferencia y adecuada para la evaluación de la energía libre en el límite termodinámico. El lector interesado puede dirigirse a (26) para una demostración más rigurosa.

La matriz de densidad está definida por:

$$g(\mu, \mu', \Lambda) = \int_{\mu'}^{\mu} \delta\{\gamma(\underline{r})\} e^{-\mathcal{H}[\gamma(\underline{r}), \Lambda]} \quad (47)$$

En donde las condiciones de frontera

$$\gamma(0) = \mu \quad \gamma(\Lambda) = \mu' \quad (48)$$

La definición (47) es análoga a la definición del propagador en mecánica cuántica dada por Feynman. En el caso de la "m.c" g mide la amplitud de probabilidad de que dada una partícula localizada inicialmente en el punto μ después de un "tiempo" Λ se encuentre en μ' . Aquí, desde luego, la m.c. no juega ningún papel, sin embargo, en ocasiones es útil visualizar (47) como un propagador.

La función de partición se obtiene al tomar la traza de g :

$$Z = \int_{\Lambda} d\mu g(\mu, \mu, \Lambda) \quad (49)$$

Haciendo uso de la teoría general de expansiones de funciones de dos variables en términos de eigenfunciones, tenemos que (47) se puede expandir como:

$$g(\mu, \mu', \Lambda) = \sum_n \psi_n(\mu) \psi_n(\mu') e^{-\lambda_n \Lambda} \quad (50)$$

En donde el conjunto $\{\psi_n\}$ es completo y satisface

$$\langle \psi_n(\mu) | \psi_{n'}(\mu') \rangle = \delta(\mu - \mu') \delta_{nn'} \quad (51)$$

Las funciones $\psi \{ \lambda_n \}$ se pueden obtener como soluciones al problema de S-L asociado con $L(\underline{r})$ caracterizado por

$$\hat{\omega} \psi_n = \lambda_n \psi_n \quad (52)$$

en donde λ_n son los eigenvalores asociados con $\hat{\omega}$. De la teoría general de ecuaciones diferenciales de segundo orden, sabemos que los eigenvalores crecen monotónicamente como:

$$\lambda_0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \lambda_4 \leq \dots \leq \quad (53)$$

sustituyendo (50) en (49) y usando (51) resulta:

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\lambda_n \Lambda} \quad (54)$$

En el límite termodinámico $\Lambda \rightarrow \infty$, ya que los λ_n crecen como (53) la contribución dominante en (54) provenirá básicamente de:

$$Z \underset{\Lambda \rightarrow \infty}{\sim} e^{-\lambda_0 \Lambda} \quad (55)$$

En nuestro caso necesitamos considerar el término multiplicativo en (42) de donde la energía libre queda dada por

$$\beta F(\gamma) = -\frac{n}{2} \ln 2j + \lambda_0(\gamma) \quad (56)$$

Esto es, la energía libre está dada esencialmente por el eigenvalor más bajo del operador $\hat{\omega}$. Haciendo uso de nuestra analogía m.c. podemos interpretar el resultado de la siguiente manera; ya que la energía libre está relacionada con los niveles de energía obtenidos por medio de la "Hamiltoniana" $\hat{\omega}$, al tomar el límite termodinámico la contribución de los estados excitados de las "partículas" tienden a contribuir menos. La mayoría de las "partículas" tienden a encontrarse en el estado base de energía caracterizado por λ_0 y por tanto $F \propto \lambda_0$ cuando $\Lambda \rightarrow \infty$. Desde luego las "partículas" descritas aquí no son físicas y sólo nos ayudan a visualizar el resultado.

Como vemos, el resultado (56) es de naturaleza similar al obtenido vía la matriz de transferencia discreta. Se puede emplear un argumento en términos de la M.T. discreta tal que al tomar el límite continuo da el mismo resultado ⁴⁷. Existen argumentos distintos para deducir (56) aquí hemos presentado el que nos parece más directo e intuitivo desde el punto de vista físico.

II.8 PROPIEDADES TERMODINAMICAS EXACTAS DEL MODELO x-y A BAJAS TEMPERATURAS

8, 29

Una vez que la función de partición para el modelo x-y ha sido expresada como una funcional integral del tipo W-F y - sobre la base del teorema de Kac, su evolución es directa. Dada la densidad Lagrangiana (44), la ecuación diferencial a resolver es:

$$\left(\frac{d^2}{d\theta^2} + 2\gamma \cos\theta + \lambda_n \right) \psi_n = 0 \quad (57)$$

La ecuación (57) es la bien conocida ecuación de Mathieu. Aparece cuando la ecuación de ondas se expresa en términos de coordenadas elípticas. A pesar de su apariencia inofensiva, sus soluciones no se pueden expresar en términos de ninguna de las funciones especiales de uso común en la física. Sin embargo, se ha estudiado exhaustivamente y sus soluciones periódicas así como $\lambda_n = \lambda_n(\gamma)$ se conocen para todo valor de γ . De tal manera que la solución de (57) es completa y exacta y por ende, la solución al modelo x-y en presencia de un campo magnético es así mismo exacta.

Tomando condiciones de frontera periódicas para las soluciones de (57) existen cuatro tipos diferentes de soluciones. Dos con período π y dos con 2π . Dos son pares y dos son impares.

$$\begin{array}{l} ce_{2n}(\gamma, \theta) \text{ período } 2\pi \\ ce_{2n+1}(\gamma, \theta) \text{ período } \pi \end{array} \quad \left. \vphantom{\begin{array}{l} ce_{2n}(\gamma, \theta) \\ ce_{2n+1}(\gamma, \theta) \end{array}} \right\} \text{ pares} \quad (58)$$

$$\begin{array}{l} se_{2n}(\gamma, \theta) \text{ período } 2\pi \\ se_{2n+1}(\gamma, \theta) \text{ período } \pi \end{array} \quad \left. \vphantom{\begin{array}{l} se_{2n}(\gamma, \theta) \\ se_{2n+1}(\gamma, \theta) \end{array}} \right\} \text{ impares} \quad (59)$$

Los eigenvalores λ_n son

$$\lambda_n = \begin{cases} a_n & \text{soluciones periódicas pares} \\ b_n & \text{soluciones periódicas impares} \end{cases} \quad (60)$$

Cuando γ es real, para valores de γ fijos, existen eigenvalores a_n o b_n que son reales y distintos. Si $\gamma \neq 0$ los eigenvalores satisfacen

$$a_0 < b_1 < a_1 < b_2 < a_2 < \dots < \quad (61)$$

Se puede demostrar ²⁸ que para valores dados de (γ, λ_n) sólo puede existir una y sólo una solución ψ_n periódica (con período π o 2π) ($\gamma \neq 0$). Hemos mencionado estas propiedades - por que son de relevancia en la física del problema. Si la condición (61) no se cumpliera o si existiera degeneración en las eigenfunciones de (57) para un valor dado de γ existiría correlación de largo alcance para las funciones de correlación correspondientes.

En este problema la energía libre está relacionada con el eigenvalor a_0 que corresponde a la solución periódica $ce_0(-\gamma, \theta)$. Los valores de a_0 como función de γ se pueden encontrar en tablas hasta el orden γ^{10} para $\gamma \in [0, 15]$ y para valores de $\gamma \gg 1$.

Aquí sólo tomaremos los primeros términos en las series el resultado es:

$$\beta F = -\ln 2j - 1/j (\gamma^2 - 1.75 \gamma^4 + \dots) \quad \text{para } \gamma \ll 1 \quad (62)$$

$$y \quad \beta F = -\ln 2j - 1/j (\gamma - \frac{1}{2} \gamma^{1/2} + \gamma^{-1/2} + \dots) \quad \text{para } \gamma \gg 1$$

La región de valores intermedios de γ ha sido calculada numéricamente y se puede encontrar en tablas ²⁸. Una vez obtenida la energía libre, todas las propiedades termodinámicas del sistema resultan de tomar las derivadas apropiadas con respecto a los campos termodinámicos β y h .

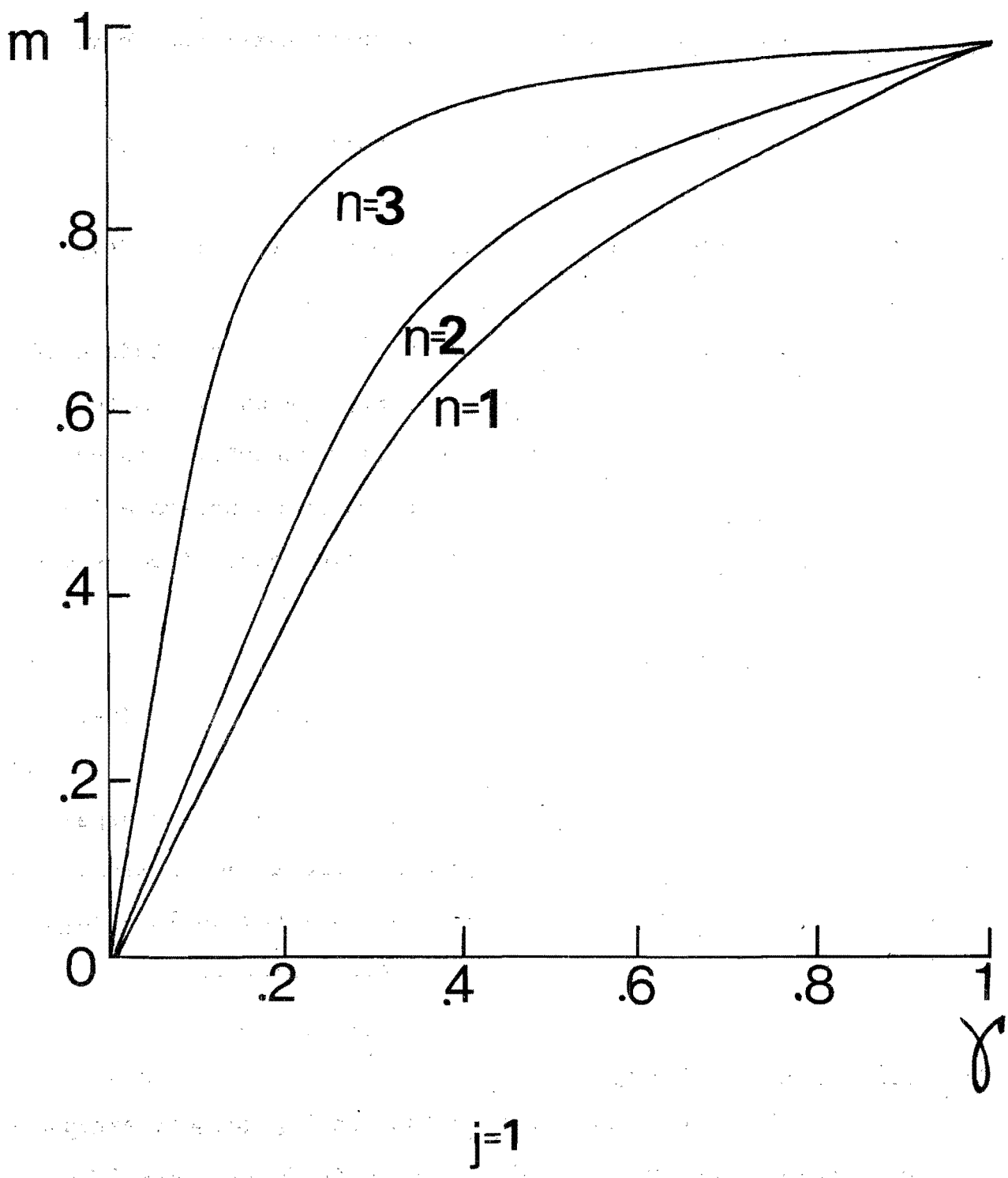
Comenzaremos con la magnetización m . Derivando (62) y (63) con respecto de h resulta:

$$m = 2\gamma - 7\gamma^3 + \dots \quad \gamma \ll 1 \quad (64)$$

$$m = 1 - 1/4 \gamma^{1/2} - \dots \quad \gamma \gg 1 \quad (65)$$

Lo primero que corroboramos es que cuando $h \rightarrow 0$ o $\gamma \rightarrow 0$ la magnetización $m \rightarrow 0$, de acuerdo con el teorema de Mervin y Wagner. Para valores pequeños de γ , m crece linealmente con h . Cuando $\gamma \rightarrow \infty$, $m \rightarrow 1$ como era de esperarse. La magnetización tiende a adquirir el valor de saturación 1 ya que físicamente al aplicar un campo magnético muy grande, cada uno de los espines del sistema responde individualmente y la interacción de intercambio es despreciable.

Como se ve en la gráfica (1), los valores de m vs h al variar n cambian continuamente de acuerdo con la hipótesis de universalidad.



La magnetización como función de γ para los modelos unidimensionales de Ising ($n=1$), X-y ($n=2$) y de Heisenberg ($n=3$).

fig-1

La susceptibilidad magnética resulta estar dada como

$$\chi = 2j\beta - 21 \gamma^3/h + \dots \quad \text{para } \gamma \ll 1 \quad (66)$$

y

$$\chi = 1/8 \left[1/h \gamma^{1/2} \right] + \dots \quad \text{para } \gamma \gg 1 \quad (67)$$

En el límite $h \rightarrow 0$ $\chi \rightarrow 2j\beta \sim \beta^2$. Este resultado está de acuerdo con los resultados de Joyce y Stanley en el límite $T \rightarrow 0$ y $h \rightarrow 0$. Para la entropía y el calor específico cuando $h = 0$ se reducen a (38) y (37). Para campo magnético aplicado no nulo (para $\gamma \ll 1$) tenemos que el calor específico se escribe como:

$$C = \text{constante} + \frac{1}{j} (6\gamma^2 - 73.5 \gamma + \dots) \quad (68)$$

de (68) vemos que para valores pequeños de γ el calor específico oscila como función de γ . Esto se debe al acoplamiento de las fluctuaciones de espín con las fluctuaciones en la densidad de energía inducidas por el campo externo aplicado.

II.9 FUNCIONES DE CORRELACION:

El método de la integración funcional puede ser extendido para evaluar las funciones de correlación de espín-espín en términos de las eigenfunciones y eigenvalores asociadas al operador $\hat{\omega}$. De manera general podemos escribir la densidad Lagrangiana asociada con $\hat{\omega}$ como:

$$L = \alpha \phi_i \Delta^{ij} \phi_j + V(\phi_i) \quad (69)$$

en donde Δ^{ij} es en general una matriz y ϕ_i representa las variables estadísticas definidas en el capítulo I.6. Desde luego, el requerimiento de tener la forma cuadrática como primer término en el miembro derecho de (69) es requisito, hasta la fecha, para definir algebraicamente las funciones de correlación asociadas con (65) de manera formal. Para generar las funciones de correlación usualmente se introduce una "fuente externa" en la Lagrangiana dada en (69). Este método fue propuesto por Schwinger en la teoría cuántica del campo y en la actualidad es de uso común. Entonces, la ecuación (69) se modifica por:

$$L_J = \alpha \phi_i \Delta^{ij} \phi_j + V(\phi_i) + J^i \phi_i \quad (70)$$

En donde J^i es la fuente externa acoplada a L .

La función de partición en este caso resulta estar dado como:

$$Z(J) \equiv \text{tr}_{\{\phi_i\}} e^{-\int_{\Lambda} L d^d x} \quad (71)$$

Para calcular las funciones de correlación asociadas con (69) es conveniente tomar el logaritmo de (71). Tal que las funciones de correlación de m puntos quedan definidos por

$$\frac{\delta^m \ln Z(J)}{\delta J_{i_1}(1) \delta J_{i_2}(2) \dots \delta J_{i_m}(m)} \Big|_{J=0} = \langle \phi_{i_1}(1) \dots \phi_{i_m}(m) \rangle_c \text{ n.c.} \quad (72)$$

en donde el subíndice c denota la parte conexas y la suma es sobre las contribuciones no conexas. Las ecuaciones anteriores son válidas en cualquier dimensión y sólo requieren que L se escriba como se expresa (69). La evaluación en general de (72) para $d \geq 2$ es intrincada y difícil. Sin embargo, en el caso $d = 1$ podemos utilizar la formulación continua de la matriz de transferencia y obtener resultados análogos a los dados en (27). En nuestro caso no tenemos que "apagar" la fuente externa, ya que coincide precisamente con el campo magnético aplicado.

La cantidad medible por medio de dispersión de neutrones es la función de correlación de dos puntos. En términos de las eigenfunciones y eigenvalores del operador $\hat{\omega}$, derivando la ecuación (43) funcionalmente con respecto de h resulta:

$$g_{zz}(x) = \sum_{m=0}^{\infty} |\langle \psi_m | S_z | \psi_0 \rangle|^2 e^{-(\lambda_m - \lambda_0)x} \quad (73)$$

en el límite termodinámico una aproximación muy buena da:

$$g_{zz}(x, \gamma) \approx |\langle \psi_1 | \cos \theta | \psi_0 \rangle|^2 e^{-(\lambda_1 - \lambda_0)x} \quad (74)$$

Comparando con la ecuación (I.8) la función de correlación queda definida por:

$$\xi^{-1} = \lambda_1 - \lambda_0 \quad (75)$$

En el caso del modelo x - y a bajas temperaturas nos

queda:

$$\xi \cong \frac{1}{8j} - \frac{1}{j} \left(\frac{1}{2} \gamma - \frac{3}{4} \gamma^2 + \frac{1}{8} \gamma^3 - 1.7708 \gamma^4 + \dots \right)$$

$$\text{para } \gamma \ll 1 \quad (76)$$

La función de correlación (70) está dada como:

$$g_{zz}(x) \cong (7 - 17.76\gamma - 4\gamma^2 + 2.24\gamma^3 + 1.28\gamma^4) e^{-x/\xi} \quad (77)$$

Los primero que corroboramos es que en el límite $\gamma \rightarrow 0$ ($h \rightarrow 0$) coincide con el resultado obtenido por Wegner ⁴¹ y con siderado en la sección II-8.

Nuevamente encontramos que para $\gamma \neq 0$ pero pequeña la longitud de coherencia y la función de correlación de espín espín oscilan suavemente como función de γ . Esta predicción teórica no ha sido explorada experimentalmente. Para el sistema antiferromagnético de Heisenberg (TMMC) se ha encontrado experimentalmente un comportamiento oscilatorio del calor específico como función de γ ³³. El material en el que se pueden llevar a cabo los experimentos para corroborar estos resultados es CsNiF_3 .

II.10 MODEL C x-y A BAJAS TEMPERATURAS CON CAMPO MAGNETICO Y ANISOTROPIA IONICA:

En muchos casos de interés en sistemas unidimensionales, en particular para CsNiF_3 , no se encuentran puros en la

naturaleza. El campo cristalino crea un potencial extra en la Hamiltoniana (II.44). El potencial más común encontrado es debido al acoplamiento relativista de espín-órbita. Este acoplamiento es débil y usualmente de interés ya que se observa su influencia experimentalmente.

En el caso del modelo x-y clásico, que es representativo de CsNiF_3 , la Hamiltoniana más general que incluye la anisotropía iónica y que es invariante ante inversiones temporales es ³³

$$- \mathcal{H} = j \sum_{\langle \underline{r}, \underline{r}+1 \rangle} \cos \gamma_{\underline{r}, \underline{r}+1} + h \sum_{\underline{r}} \cos \gamma_{\underline{r}} + D \sum_{\underline{r}} (\cos \gamma_{\underline{r}})^2 \quad (78)$$

En donde experimentalmente se encuentra que $D > 0$. Sin embargo, desde el punto de vista teórico, analizaremos el caso $D < 0$ ya que a bajas temperaturas presenta correlaciones "fantasma" de largo alcance.

El límite de bajas temperaturas da:

$$- \mathcal{H} = j \sum_{\langle \underline{r}, \underline{r}+1 \rangle} \left[\gamma_{\underline{r}, \underline{r}+1} \right]^2 + h \sum_{\underline{r}} \cos \gamma_{\underline{r}} + D \sum_{\underline{r}} (\cos \gamma_{\underline{r}})^2 \quad (79)$$

Nuevamente la función de partición se puede escribir como una integral funcional de tipo (II.43). En una dimensión, sobre la base del teorema de Kac, el problema de Sturm-Liouville asociado resulta:

$$\left\{ \frac{d^2}{d\theta^2} + 2\gamma \cos \theta + d \cos 2\theta + \lambda_n \right\} \psi_n = 0 \quad (80)$$

en donde la variable reducida d ha sido definida como:

$$d = Dj \quad (81)$$

Las ecuaciones (57) y (80) son casos particulares de la ecuación de Hill que aparece en mecánica celeste, al resolver el problema de la órbita lunar; ésta es del tipo ⁴²

$$\left\{ \frac{d^2}{d\theta^2} + \lambda_n + \sum_{i=1}^t \beta_i \cos i\theta \right\} \psi_n = 0 \quad (82)$$

La ecuación de Mathieu corresponde a $t = 1$ y (80) a $t = 2$. La ecuación (80) se le conoce como la ecuación de Hill con tres términos, o como la ecuación de Whittaker.

De la teoría general de ecuaciones diferenciales con potenciales periódicos, se pueden obtener un gran número de propiedades cualitativas de soluciones periódicas y no periódicas de (82), distribución de eigenvalores, soluciones estables e inestables y degeneración en las curvas características, por ejemplo. Sin embargo, cuantitativamente (analíticamente) soluciones para $t \geq 3$ son desconocidas, tanto como sabemos, y en el caso $t = 2$ las soluciones son parcialmente conocidas. La razón esencial de este problema es de que las ecuaciones de recurrencia que se obtienen para los coeficientes, al expander las soluciones en series trigonométricas, es mayor que 5.

En el caso de la ecuación de Hill con tres términos, los eigenvalores más bajos fueron calculados numéricamente por Klotter y G. Kotowski ⁴³. El análisis de la carta caracterís-

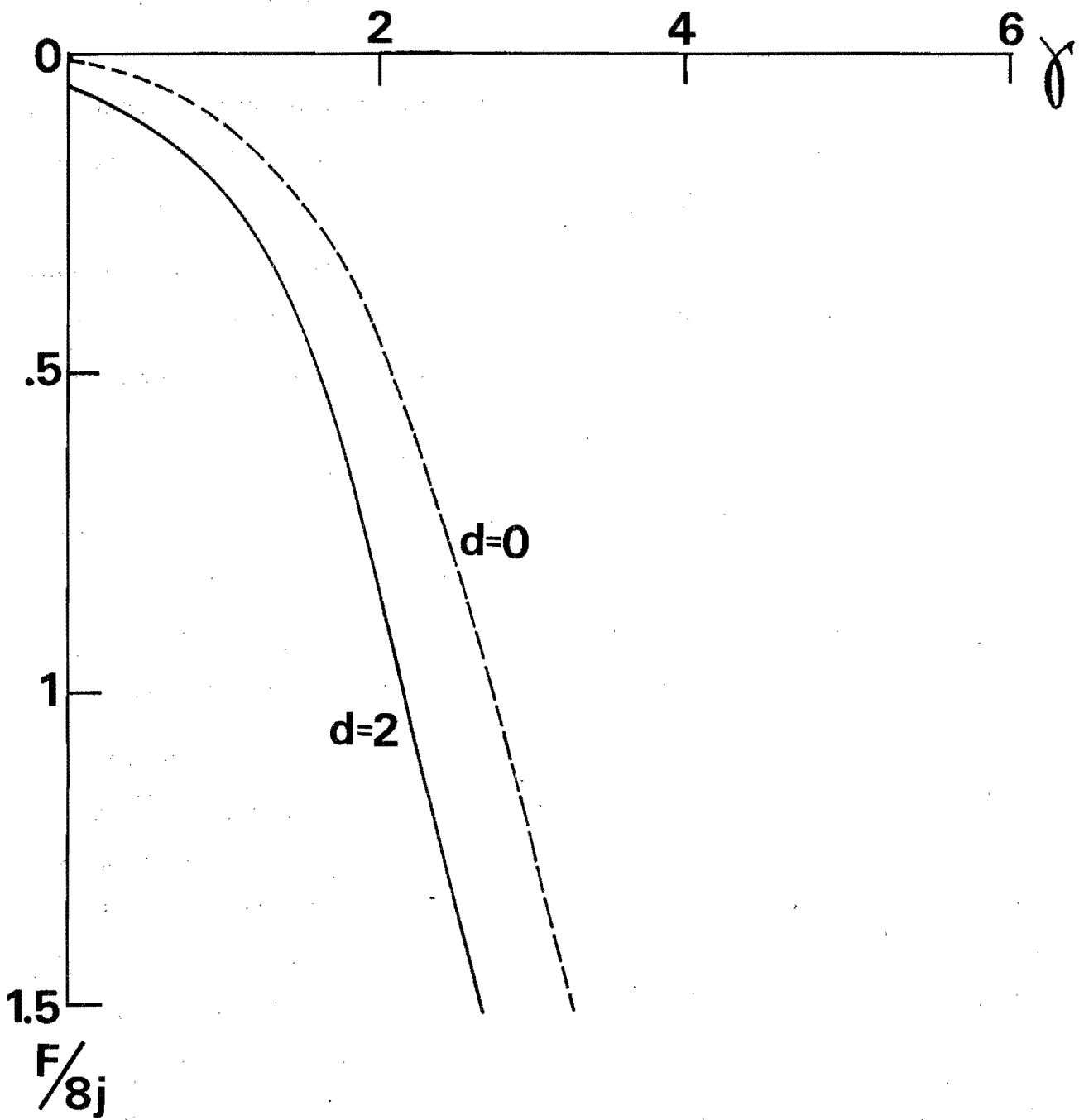


fig-2

Energía libre como función de γ . La línea punteada es sin anisotropía iónica y la continua con ella ($d=2$).

tica para $d > 0$ y $d < 0$ fue llevado a cabo por Magnus y Orbidger⁴⁴.

Sobre la base de esta información, podemos obtener la solución a la función de partición asociada con (79) para valores de γ y d moderados.

Lo primero que observamos es que para $\gamma = 0$ la solución resulta estar dada análogamente a (62) y (63) con los coeficientes numéricos diferentes. La energía libre resulta ser:

$$\beta F_{=0} = -\ln 2j - 1/j (0.06d^2 - 0.01d^4 + 0.0002d^6 - \dots) \quad (83)$$

$$\beta F_{=0} = 0 \ln 2j - 1/j \left(\frac{1}{2}d - \sqrt{2} d^{1/2} + 0.02 d^{-1/2} + \dots \right) \quad (84)$$

La energía libre es la misma para $d > 0$ que para $d < 0$ cuando $d \ll 1$. Cuando $d \gg 1$ la solución está definida desde el punto de vista físico, sólo cuando $d > 0$, que corresponde al caso encontrado experimentalmente. El resultado es similar al encontrado en las secciones II.8-9 y por tanto, el análisis es análogo intercambiando $\gamma \leftrightarrow d$.

El caso $\gamma \neq 0$, $d \neq 0$ es más interesante desde el punto de vista tanto teórico como experimental. Para $d > 0$ una solución perturbativa fue presentada por Ince⁴⁵. Sin embargo, existen dudas sobre el método que empleó⁴⁴. Aquí tomaremos la solución numérica de Klotter et al (Fig. 2). La magnetización, susceptibilidad y calor específico se obtienen de derivar numéricamente la Fig. 2.

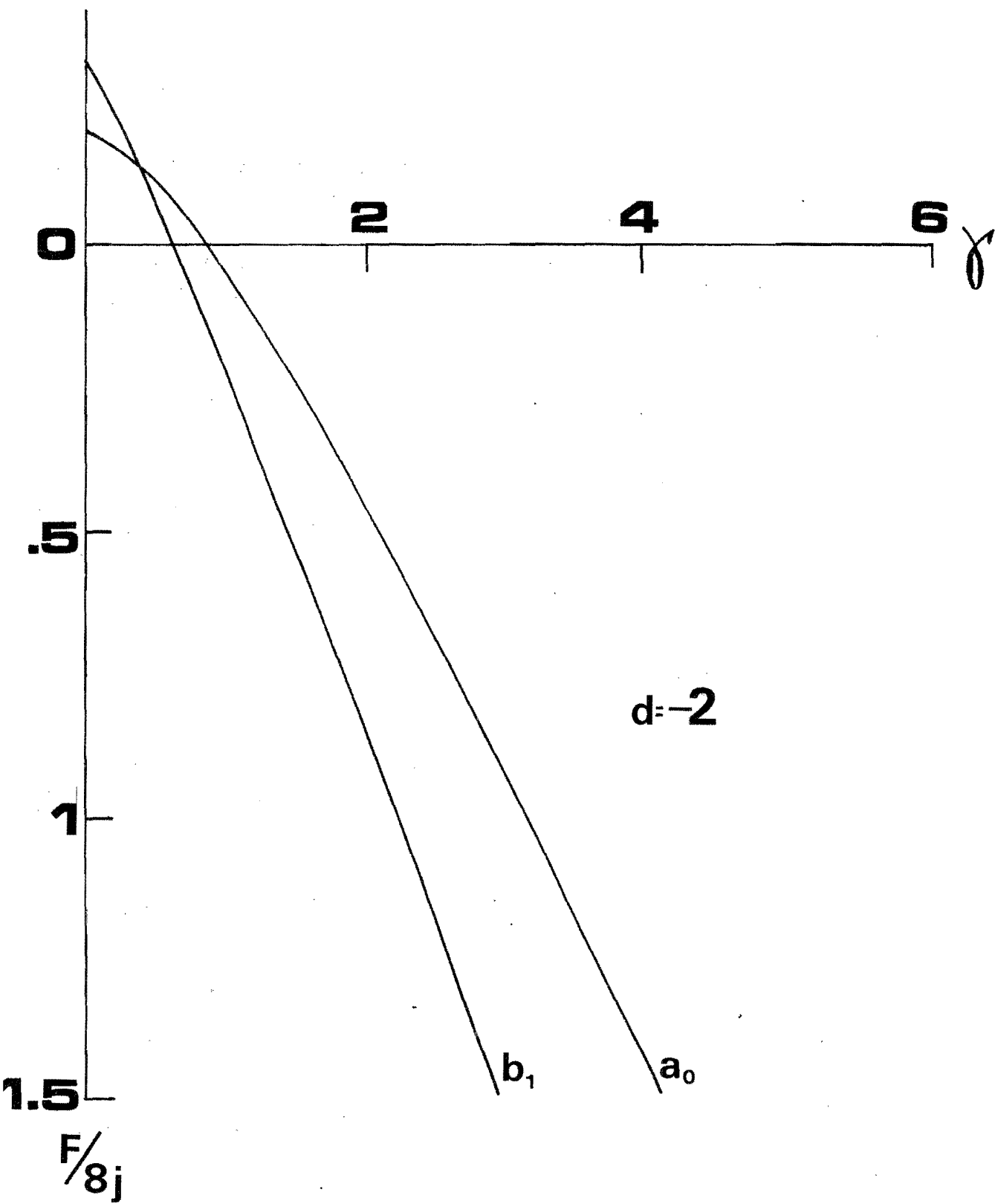


fig-3

Los dos exigen valores mas bajos de la ecuación 80 como función de δ para anisotropía iónica negativa ($d = 2$).

El caso $d < 0$ es particularmente interesante, ya que los eigenvalores correspondientes a (80) son degenerados^{43, 44}. Esto implicaría inmediatamente correlación de largo alcance.

El mecanismo matemático para generar una transición de fase por medio de la degeneración de los eigenvalores de la matriz de transferencia ha sido empleado extensivamente¹³. Sin embargo, si se aplica la teoría de perturbaciones en la temperatura y el método variacional para las eigenfunciones de la matriz de transferencia discreta, se puede ver que no existe degeneración y por tanto, no hay correlación de largo alcance⁴⁹ de acuerdo con el teorema de Mermin y Wagner.

II.11 PROPIEDADES TERMODINAMICAS ASINTOTICAS DEL MODELO DE HEISENBERG ($d=1$) A BAJAS TEMPERATURAS CON CAMPO MAGNETICO APLICADO^{8, 29}:

El modelo clásico de Heisenberg está descrito por vectores de espín unitarios tridimensionales. En esta sección en lugar de utilizar la descripción angular de (39) utilizaremos la descripción cartesiana. La función de partición en este caso es

$$Z = \left(\prod_{\underline{r}}^N \int d\vec{S}(\underline{r}) \right) \prod_{\underline{r}'} T_{\Lambda}(\vec{S}(\underline{r}'-1/2), \vec{S}(\underline{r}' + 1/2)) \quad (85)$$

en donde la matriz de transferencia T_{Λ} está dada por:

$$T_{\Lambda} = e^{2j\vec{S}(\underline{r}'-1/2) \cdot \vec{S}(\underline{r}'+1/2) + \vec{h} \cdot \vec{S}(\underline{r})} \quad (86)$$

Cerca del estado base ($T \rightarrow 0$) el sistema tiende a ordenarse magnéticamente. Por tanto podemos aproximar:

$$1 - \vec{S}(\underline{r}-1/2) \cdot \vec{S}(\underline{r} + 1/2) \rightarrow \left[d\vec{S}(\underline{r}/d\underline{r}) \right]^2 \quad (87)$$

Con \vec{S} función continua de \underline{r} . Bajo estas circunstancias el producto:

$$\prod_{\underline{r}}^N d\vec{S}(\underline{r}) \quad (88)$$

se convierte en:

$$(2j)^{\frac{3}{2} \Lambda} \int \delta \left[\underline{S}(\underline{r}) \right] \quad (89)$$

entonces (85) resulta:

$$Z(\gamma, \Lambda) = (2j)^{\frac{3}{2} \Lambda} \int \delta \left[\vec{S}(\underline{r}) \right] e^{-\int \mathcal{H} \left[\vec{S}(\underline{r}) \right]} \quad (90)$$

La funcional Hamiltoniana se obtiene de integrar la densidad Lagrangiana:

$$L(\underline{r}) = - \frac{1}{2} j \left[\frac{d \vec{S}(\underline{r})}{d\underline{r}} \right]^2 + \underline{h} \cdot \vec{S}(\underline{r}) \quad (91)$$

En una dimensión el operador $\hat{\omega}$ correspondiente a (91) depende de dos variables, el ángulo azimutal ϕ y el ángulo polar θ . Las eigenfunciones asociadas con $\hat{\omega}$ son $\psi_{nm}(\theta, \phi)$. Tomando la dirección del campo magnético aplicado a lo largo del -

eje polar podemos separar la ecuación diferencial asociada con $\hat{\omega}$ por medio de la sustitución $\psi_{nm}(\theta, \phi) = \Theta_n(\theta)\phi_m(\phi)$.

La ecuación para ϕ_m es:

$$\phi_m''(\phi) + m^2 \phi_m(\phi) = 0 \quad (92)$$

Imponiendo condiciones de frontera periódicas:

$$m^2 = 1, 2, 3, \dots$$

Para Θ la ecuación correspondiente es:

$$\left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \sin\theta \frac{d}{d\theta} + 2\gamma \cos\theta - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right] \Theta_{nm} = \lambda_{nm} \Theta_{nm} \quad (93)$$

La ecuación (93) no tiene una solución exacta conocida. La teoría de perturbaciones se puede aplicar para $\gamma \ll 1$. Por medio de las propiedades de los polinomios de Legendre, el primer orden da cero y el segundo orden es proporcional a γ^2 . El siguiente orden sería de cuarto orden en la teoría de perturbaciones para obtener el orden γ^4 . Claramente la complicación de calcular el segundo y el cuarto orden es grande y es preferible tratar otro método. Independientemente ²⁹ McGurn y Scalapino calcularon numéricamente los elementos de matriz de (93) por medio de una representación matricial de $\hat{\omega}$ tomando como base los armónicos esféricos y diagonalizando la matriz numéricamente. Los autores dicen encontrar convergencia razonable usando matrices de 25×25 ³⁰. Ellos calcularon las funciones de correlación con y sin anisotropía iónica, así como la función

de coherencia, todos estos cálculos se llevan a cabo numéricamente.

Nuestra intención aquí es la de obtener un resultado analítico. Sobre la base de la hipótesis de universalidad y la solución general dada por Stanley ($h=0$) esperamos que la energía libre como función de n sea continua. Esto nos lleva a buscar una conexión entre la ecuación de Mathieu y la ecuación (93). De tal manera, que la estrategia será la de construir la solución para $n=3$ basado en la solución para $n=2$.

Desde el punto de vista físico, esperamos que cuando el campo magnético $h \rightarrow \infty$ a simetría del parámetro de orden será irrelevante y la energía libre tenderá asintóticamente al mismo valor para toda n . Para todo valor de h esperamos, así mismo, que las propiedades geométricas (concavidad, continuidad, comportamiento oscilatorio, etc.) de $F_{n=2}$ sean cualitativamente análogas para $F_{n=3}$. Para demostrar que éste es el caso requerimos de expresar (57) y (93) en formas algebraicas análogas. Esto se logra por medio del cambio de variables $x = \cos\theta$ en ambas ecuaciones y la sustitución

$$\theta_{n,m} = (1-x^2)^{1/2} U_{n,m}$$

en la ecuación (93). Entonces las dos ecuaciones se pueden escribir como:

$$\left\{ (1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} - \alpha x \frac{d}{dx} + (\lambda'_n + 2\gamma x) \right\} y_n = 0 \quad (94)$$

en donde $\alpha = 1$ y $y_n = \psi_n$ para el modelo x-y y $\alpha = 4$ y $y_n = u_{n,1}$ para el modelo de Heisenberg. En (94) hemos tomado el eigenvalor más bajo de (93) ($m' = 1$). Los eigenvalores están dados por:

$$\lambda'_n = \lambda_n \quad \text{para } n = 2 \quad (95)$$

$$y \quad \lambda'_n = \lambda_n - 2 \quad \text{para } n = 3 \quad (96)$$

Ambas ecuaciones tienen en general soluciones diferentes, básicamente debido a los valores distintos de α . Sin embargo, al tomar los límites $\gamma \gg 1$ y $\gamma \ll 1$ ambas ecuaciones en ambos límites se reducen asintóticamente a:

$$\frac{d^2 y_n}{dx^2} + (\lambda'_n + 2\gamma x) y_n = 0 \quad (97)$$

La ecuación (97) es bien conocida tanto en física como en matemáticas. Aparece en m.c. cuando se estudia el método W.K.B. en la vecindad de los puntos de retorno. La ecuación (97) es conocida como la ecuación de Airy. Soluciones analíticas y numéricas están disponibles para algunas de sus soluciones y eigenvalores en el intervalo $-\alpha < x < \infty$. Suponiendo continuación analítica de las soluciones cuando $\gamma \rightarrow 0$, $\gamma \rightarrow \infty$ podemos construir las soluciones en el intervalo $-1 < x < 1$, que es la región de interés de este problema. En lugar de eso, es más conveniente para nuestro propósito, usar la conexión explícita con la ecuación de Mathieu. Esta conexión es nueva y ha resultado como consecuencia del argumen

to de universalidad.

Sería interesante encontrar todas las limitaciones y extensiones de la conexión entre la ecuación de Airy en el intervalo $-1 < x < 1$ y la ecuación de Mathieu, en particular las eigenfunciones correspondientes con el fin de calcular analíticamente las funciones de correlación para modelo de Heisenberg. Aquí nos interesaremos sólo en evaluar la energía libre y por tanto en el eigenvalor mínimo de (93) para $n = 3$.

En el límite $\gamma \rightarrow \infty$ el eigenvalor $\lambda_n(\gamma)$ es también grande. Entonces el factor de -2 que aparece en (96) es irrelevante. En este caso el valor de $F_{n=3}$ como función de γ es asintóticamente el mismo que $F_{n=2}$, como esperábamos. Para diferenciar los valores de la energía libre cuando $\gamma \rightarrow \infty$ para diferentes valores de n necesitaríamos hacer un desarrollo perturbativo alrededor del punto de convergencia de todas las soluciones para encontrar las correcciones de primer orden a este resultado.

En el límite $\gamma \ll 1$, $\lambda_n(\gamma) \ll 1$ también y el factor -2 en (96) es relevante. La ecuación de Mathieu correspondiente resulta tener "eigenvalor" localizado en la primera zona de inestabilidad de la carta de estabilidad para la ecuación de Mathieu¹⁸. La solución correspondiente resulta la ser parte pseudoperiódica acotada de la función $me_{i2\sqrt{2}}(\theta, -\gamma)$. El valor correspondiente para la energía libre es:

$$\beta F_{n=3} = -\frac{3}{2} \ln 2j - 1/f(1/9\gamma^2 + 0.037\gamma^4 + \dots)$$

Para $\gamma \ll 1$ (98)

De donde la magnetización resulta:

$$m = 0.22\gamma + 0.148\gamma^3 + \dots \quad \text{para } \gamma \ll 1 \quad (99)$$

En este caso vemos que la magnetización no oscila como función de γ . Cuando $\gamma \rightarrow 0$ nuevamente $m \rightarrow 0$ y por tanto no existe orden de largo alcance para $T > 0$ en el sistema.

La susceptibilidad magnética queda dada por:

$$\chi = 0.22j\beta + 0.44 \gamma^3/h + \dots \quad \text{para } \gamma \ll 1 \quad (100)$$

Nuevamente vemos que $\chi \sim 0.22j\beta$ cuando $\gamma \rightarrow 0$ de acuerdo con los resultados obtenidos por Fisher ³⁶ y Stanley ³⁸. Nuevamente la entropía y el calor específico se reducen a los dados en (36) y (37) cuando $h = 0$. El calor específico se escribe como:

$$C = \text{constante}' + \frac{1}{j} (.66 \gamma^2 + 1.55 \gamma^4 + \dots)$$

$$\text{para } \gamma \ll 1 \quad (101)$$

En este caso el calor específico es una función creciente de γ . La situación es diferente para un sistema antiferromagnético en donde el calor específico oscila como función de h .

C O N C L U S I O N E S

En este trabajo hemos tratado sistemas de espín unidimensionales en presencia de campos magnéticos externos. Nos hemos restringido a la región crítica para sistemas ferromagnéticos. Es en esta región en donde la matriz de transferencia continua via su representación funcional puede evaluarse al diagonalizar un operador diferencial de segundo orden. Dos modelos clásicos han sido tratados, el modelo x-y y el de Heisenberg. El primero ha sido resuelto exactamente tanto en sus propiedades macroscópicas como microscópicas. De donde la solución, desde el punto de vista de la Mecánica Estadística, es completa. Así mismo el modelo x-y en presencia de anisotropía iónica (de interés en CsNiF_3) y campo magnético aplicado ha sido tratado. En este caso la solución ha sido numérica y aún no es conclusiva.

Para el modelo de Heisenberg se obtiene una solución asintótica ($\gamma \ll 1$, $\gamma \gg 1$). Esta se construye a partir de la solución para el modelo x-y y sobre la base de razonamientos físicos. La evaluación de las funciones de correlación no fue llevado a cabo por la falta de conocimiento de las eigenfunciones y eigenvalores superiores de la matriz de transferencia.

Desde el punto de vista teórico, las soluciones fueron corroboradas con las soluciones exactas conocidas en ausencia de un campo magnético. Este límite ($T \rightarrow 0$, $h = 0$) ha sido comprobado en sus predicciones experimentalmente ³³.

A partir de 1974 se ha incrementado el interés tanto teórico como experimental en sistemas de espín unidimensionales en presencia de campos magnéticos externos sobre todo la parte dinámica ⁴⁵. De este último artículo se puede ver el poder del método funcional sobre métodos más tradicionales.

Se pueden considerar dos objetivos de este trabajo: Desde el punto de vista teórico, para el modelo $x-y$ representa, junto con la solución de Ising (1925) y la de Berlin-Kac (1952), los únicos modelos resueltos exactamente en presencia de un campo magnético. La potencialidad para evaluar funciones de partición y funciones de correlación para sistemas altamente no lineales por medio de la representación continua de la matriz de transferencia es evidente.

Desde el punto de vista experimental en el límite $\gamma = 0$ las soluciones coinciden con los resultados experimentales. En el caso $\gamma \neq 0$ se requiere llevar a cabo experimentos con CsNiF_3 y un sistema ferromagnético de Heisenberg () Los experimentos serán tanto calorimétricos como de dispersión de neutrones, en la región en donde la unidimensionalidad de los sistemas está bien definida (para CsNiF_3 la región es de 2.38°K a 70°K).

El sistema vectorial clásico no solo ha sido estudiado en la T.M.F. Recientemente ^{46, 47} se ha convertido de gran utilidad en teorías cuánticas del campo con invariancias de norma locales y globales. El sistema $x-y$ se vió en la Sección II. que corresponde formalmente en su representación euclídeana a la teoría cuántica del campo no-lineal llamada de sine-Gordon (S_G). Sin embargo, el autor ha encontrado

que la TCC de S-G es isomórfica al nivel de sus propagadores al modelo bidimensional clásico $x-y$ en ausencia de un campo magnético ⁶. Esta conexión sugiere que la transición superfluida en ^4He es debida al desligamiento de estados ligados de vórtices a bajas temperaturas.

Otra utilidad teórica de las soluciones exactas es para corroborar aproximaciones y algoritmos desarrollados para calcular propiedades termodinámicas y estadísticas.

Referencias:

- 1) L. Onsager Phys. Rev. 65, 117 (1944).
- 2) T. H. Berlin y M.Kac, Phys. Rev. 86, 821 (1952).
- 3) J. Baxter, Phys. Rev. Lett. 26, 832 (1971).
- 4) A. Luther y Peschel, Phys. Rev. B (1975).
- 5) A. Luther y D. Scalapino (comunicación privada, por publicarse).
- 6) J. José V. (Por aparecer en Phys. Rev. D 15)).
- 7) E. Ising, Z. Physik 31, 253 (1925).
- 8) J. José V. (Phys. Rev. B. (Sept. 1976)).
- 9) J. José V. Bulletin A.P.S. Washington meeting (1976).
- 10) En este trabajo tomaremos como ejemplo en el capítulo I a sistemas magnéticos. Extensiones a sistemas de aleaciones binarias, transiciones líquido-gas y transiciones superfluidas, por mencionar algunas, están sobreentendidas.
- 11) L. Landau y E. Lifshitz "Fisique Statistique", ed. MIR (1971).
- 12) L. P. Kadanoff, W. Gotze, D. Hanblen, R. Hecht, E. A. Lewis, V. V. Palciauskas, M. Ray, J. Swift y J. Kane. Rev. Mod. Phys. 39, 395 (1967).
- 13) S. K. Ma "Modern theory of critical phenomena." ed. W. A. Benjamin (1976).
- 14) B. Widon. J. Chem. Phys. 43, 3989 (1965).

- 15) L. P. Kadanoff, *Physics* (N.Y.) 2, 263 (1966).
- 16) A. Z. Patashinskii y V. L. Padrouskii. *Sov. Phys. JETP* 23, 292 (1966).
- 17) M. E. Fisher, *Journ. of Appl. Phys.* 38, 981 (1967).
- 18) H. E. Stanley. Introduction to phase transitions and critical phenomena (Oxford University Press, New York and Oxford).
- 19) L. P. Kadanoff en Proc. Intern. School of Physics "Enrico Fermi". Corso LI. ed. Green (Academic Press 1971).
- 20) R. B. Griffiths. *Phys. Rev. Lett.*
- 21) K. Wilson y J. Kogut, *Phys. Rep.* C12, 75 (1974).
- 22) N. D. Mermin y H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* 17, 1133 (1966).
- 23) H. A. Kramers y G. H. Wannier. *Phys. Rev.* 60, 252 (1941).
E. W. Montroll, *J. Chem. Phys.* 9, 747 (1941). E. N. Lassetre y S. P. Howe. *J. Chem. Phys.* 9, 747 (1941).
- 24) R. P. Feynman. *Rev. Mod. Phys.* 20, 367 (1948), *Phys. Rev.* 80, 440 (1951), 84, 108 (1951).
- 25) Para una revisión ver A. C. Scott, F. Y. F. Chu y D. W. Mc Laughlin, *Proc. IEEE* 61, 1443 (1973).
- 26) M. Kac en "Second Berkeley Symposium on Mathematics and Probability". U. of Berkeley (1951).
- 27) D. Scalapino, M. Sears, y R. A. Ferrell, *Phys. Rev.* B6, 3409 (1972).

- 28) Los resultados y notación corresponden a los dados en J. Meixner y F. W. Shaefke "Matiusche Funktionen Und Spheroid Funktionen, (Springer, Berlin, 1954).
- 29) Las secciones II (6, 8, 9, 10) están basadas en pláticas dadas por el autor en la Universidad de Brown, el Instituto Tecnológico de Masachusstts y en el "A.P.S. meeting" de Washington (1976).
- 29') A. R. McGurn y D. J. Scalapino, Phys. Rev. B11, 2552 (1975).
- 30) El autor agradece al Profesor M. Blume por llamar a su atención la referencia (29'), posteriormente a la aceptación de (8).
- 31) L. De Jongh y A. R. Midema. Adv. Phys. 23, 1 (1974).
- 32) N. D. Mermin. J. Math. Phys. 8, 1061 (1967).
- 33) M. Steiner, J. Villain y C. G. Windsor, Adv. Phys. 25, 87 (1976).
- 34) C. J. Thomson, J. Math. Phys. 9, 241 (1968).
- 35) G. S. Joyce, Phys. Rev. 155, 478 (1967).
- 36) M. E. Fisher, Am. J. Phys. 32, 343 (1964).
- 37) T. Nakamura, J. Phys. Soc. Japan, 7, 264 (1952).
- 38) H. E. Stanley, Phys. Rev. 179, 570 (1969).
- 39) Ver por ejemplo, J. José V. Mecánica Analítica (ed. Centro de Investigación de Materiales y Facultad de Ciencias, UNAM (1974) pp. 44.

- 40) No todas las soluciones ondulatorias o ecuaciones diferenciales no lineales son solitones. Ver 25).
- 41) F. Wegner, Z. Phys., 206 465 (1967).
- 42) A. Bishop ha comenzado a estudiar la ecuación de Hill general para explorar la existencia de solitones asociados con sus soluciones (comunicación privada).
- 43) K. Klotter y G. Kotowsky, A. Angen. Math. Mech. Bd 23, Nr 3 149 (1943).
- 44) W. Magnus (comunicación privada).
- 45) M. Blume, P. Heller y N. A. Lurie, Phys. Rev. B11, 4483 (1975).
- 46) R. Balian, J. M. Drouffe y C. Itz y Kson, Phys. Rev. D10, 3376 (1974).
- 47) E. Brézin y Zinn-Justin, Phys. Rev. Lett. 36, 691 (1976) y las referencias que se mencionen allí.
- 48) L. Ince, Monthly Notices T. 75, 76, 77, (1923).
- 49) J. José V. (inérito). El autor agradece la conversación con L. P. Kadanoff en que se aclaró este punto.
- 50) B. Mc Coy. T. T. Wu, Phys. Rev. B (1976).