FÍSICA TEÓRICA 3 - 2do. Cuatrimestre de 2009

Segundo parcial: soluciones

Problema 1: Se trata de encontrar los volúmenes que hacen que la presión sea la misma a ambos lados del tabique. Esto puede calcularse directamente a partir de la función de partición del grán canónico

$$\frac{PV}{kT} = \log \mathcal{Z} = \pm \sum_{\text{estados 1 part.}} \log\left(1 \pm e^{-\beta\epsilon} z\right), \tag{1}$$

signo $'+'$ para los fermiones y $'-'$ para los bosones. Pasando de sumas a integrales y haciendo una integración por partes resulta, para fermiones

$$\begin{aligned}
\log \mathcal{Z} &= \sum_{s_i=\pm 1/2} \frac{V}{h^3} \int d^3p\ \log\left(1 + e^{-\beta p^2/2m_1}\ z\right) \\
&= \frac{4\pi V}{h^3}(2m_1)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon\ \sqrt{\epsilon}\ \log\left(1 + e^{-\beta\epsilon} z\right) \\
&= \frac{2}{3}\ \beta \frac{4\pi V}{h^3}(2m_1)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon\ \frac{\epsilon^{3/2}}{1 + e^{\beta\epsilon}\ z^{-1}} \\
\longrightarrow P &= \frac{2}{3}\ \frac{4\pi}{h^3}(2m_1)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon\ \frac{\epsilon^{3/2}}{1 + e^{\beta\epsilon}\ z^{-1}}.
\end{aligned} \tag{2}$$

Cuando el gas está degenerado,

$$P = \frac{2}{3}\ \frac{4\pi}{h^3}(2m_1)^{3/2} \int_0^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\ \epsilon^{3/2} = \frac{2}{5}\ \frac{2}{3}\ \frac{4\pi}{h^3}(2m_1)^{3/2}\epsilon_{\rm F}^{5/2}. \tag{3}$$

Conviene definir $\alpha = \dfrac{4\pi}{h^3}(2m_1)^{3/2}$, y así

$$P = \frac{4}{15}\alpha\, \epsilon_{\rm F}^{5/2}. \tag{4}$$

A su vez, la relación entre N y $\epsilon_{\rm F}$ es

$$\begin{aligned}
N &= V\alpha \int_0^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon\ \sqrt{\epsilon} \\
&= \frac{2}{3} V\alpha\epsilon_{\rm F}^{3/2} \\
\longrightarrow \epsilon_{\rm F}^{3/2} &= \frac{3N}{2V\alpha}.
\end{aligned} \tag{5}$$

Luego

$$P = \frac{4}{15}\left(\frac{3}{2}\frac{N}{V_1}\right)^{5/3}\ \alpha^{-2/3}. \tag{6}$$

En esta última fórmula ya hemos distinguido V_1 como el volumen que ocupa el gas de fermiones. En las fórmulas anteriores V debía entenderse en el mismo sentido.

Para los bosones no hace falta separar el término del estado fundamental al calcular la presión. Tanto la presión como la energía siempre están dados por la fracción no condensada. Repitiendo los pasos anteriores, resulta

$$P = \frac{1}{3}\,\frac{4\pi}{h^3}(2m_2)^{3/2}\int_0^\infty d\epsilon\;\frac{\epsilon^{3/2}}{-1+e^{\beta\epsilon}\;z^{-1}}. \tag{7}$$

La diferencia aparece en el signo dentro de la integral y en un factor 2, que para los fermiones venía de la degeneración por espín. Cambiando de variables para eliminar β dentro de la integral, resulta

$$\begin{aligned} P = \frac{1}{3}\,\frac{4\pi}{h^3}(2m_2kT)^{3/2}\;kT\int_0^\infty dx\;\frac{x^{3/2}}{-1+e^{x}\;z^{-1}} &= \frac{4}{3\sqrt{\pi}}\,\frac{kT}{\lambda^3}\;\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)\;g_{5/2}(z) \\ &= \frac{kT}{\lambda^3}\;g_{5/2}(z), \end{aligned} \tag{8}$$

donde $\lambda = h/\sqrt{2m_2\pi kT}$. No era fundamental saber cuál función g_ν aparecía, ni tampoco si era necesario separar un factor $\Gamma(5/2)$ o no. Lo importante era transformar la integral en algo que sólo dependiera de z. La hipótesis del problema era que había condensado, de manera que $z = 1$, y entonces

$$P = \frac{kT}{\lambda^3}\;g_{5/2}(1). \tag{9}$$

(Nótese que esta presión no depende del volumen. Si se mantiene constante la temperatura, el volumen de los bosones puede cambiarse sin modificar su presión. Cuando $z \neq 1$ esto no ocurre, pues z es función del volumen, y por lo tanto P hereda esa dependencia.)

Finalmente, igualando las presiones (6) y (9) se encuentra V_1.

Un camino alternativo y quizá más simple para calcular la presión era usar la relación $P = \frac{2}{3}U/V$, y calcular U. La cuestión aquí era acordarse del factor correcto. Eso es sencillo si se recuerda la fórmula para el gas monoatómico ideal clásico, para el que también tiene que valer la relación anterior, puesto que es un caso límite tanto de FD como de BE. Ahí se tiene por un lado $PV = NkT$, y por otro $U = \frac{3}{2}NkT$ de donde $PV = \frac{2}{3}U$.

Problema 2: Para un gas ideal de Bose en dos dimensiones no hay condensado, de modo que FD y BE pueden tratarse de manera similar. Al calcular N o U puede usarse el siguiente cambio de variables

$$g\frac{A}{h^2}\int d^2p\;\frac{\epsilon(p)^{\nu-1}}{e^{\epsilon(p)\beta}\;z^{-1}\pm 1} = g\frac{2mkT\pi A}{h^2}\;\beta^{-(\nu-1)}\int_0^\infty dx\;\frac{x^{\nu-1}}{e^{x}\;z^{-1}\pm 1}$$

$$= g\frac{A}{\lambda^2}\,\beta^{-(\nu-1)}\,\Gamma(\nu)\,\left\{\begin{array}{l} f_\nu(z), \\ g_\nu(z). \end{array}\right. \tag{10}$$

Aquí $\epsilon(p) = p^2/2m$, y g es la degeneración por espín: $g = 1$ para los bosones de espín cero y $g = 2s+1$ para los fermiones de espín s. Como en el problema anterior, el signo $'+'$ vale para los fermiones y el $'-'$ para los bosones. Para calcular N será $\nu = 1$, y para calcular U, $\nu = 2$. Entonces, para el gas de fermiones,

$$\begin{aligned} \frac{N}{A} &= (2s+1)\frac{f_1(z_{\rm F})}{\lambda^2}, \\ \frac{U}{A} &= (2s+1)kT\,\frac{f_2(z_{\rm F})}{\lambda^2}, \\ \frac{U}{N} &= kT\,\frac{f_2(z_{\rm F})}{f_1(z_{\rm F})}. \end{aligned} \tag{11}$$

Para los bosones,

$$\begin{aligned} \frac{N}{A} &= \frac{g_1(z_{\rm B})}{\lambda^2}, \\ \frac{U}{A} &= kT\,\frac{g_2(z_{\rm B})}{\lambda^2}, \\ \frac{U}{N} &= kT\,\frac{g_2(z_{\rm B})}{g_1(z_{\rm B})}. \end{aligned} \tag{12}$$

En realidad f_1 y g_1 pueden obtenerse sin mucha dificultad,

$$\begin{aligned} f_1(z) &= \log(1+z), \\ g_1(z) &= -\log(1-z). \end{aligned} \tag{13}$$

Para iguales densidades y temperaturas, la relación entre las fugacidades de los dos gases, suponiendo que tengan la misma masa (es decir, aparece el mismo λ en todos lados), es

$$(2s+1)\log(1+z_{\rm F}) = -\log(1+z_{\rm B}) \longrightarrow (1+z_{\rm F})^{2s+1}\,(1+z_{\rm B}) = 1. \tag{14}$$

Problema 3:

a) La función de partición es una suma sobre los espines y una integral sobre B.

$$Z(\beta) = \frac{1}{h_B}\int_{-\infty}^{\infty} dB \sum_{\{s_i\}} \exp\left[\beta\left(J\sum_{i=1}^{N} s_i s_{i+1} + B\mu\sum_{i=1}^{N} s_i - \frac{NB^2}{2\alpha}\right)\right], \tag{15}$$

donde h_B es una constante con dimensiones de campo magnético.

b) Definiendo el espín total $S \equiv \sum_{i=1}^{N} s_i$, al completar cuadrados resulta

$$B\mu S - \frac{NB^2}{2\alpha} = -\left(\sqrt{\frac{N}{2\alpha}}B - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2\alpha}{N}}\mu S\right)^2 + \frac{\alpha\mu^2}{2N}S^2. \tag{16}$$

Ahora la integral que hay que hacer es

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} dB\, \exp\left[-\beta\left(\sqrt{\frac{N}{2\alpha}}B - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2\alpha}{N}}\mu s\right)^2 + \beta\frac{\alpha\mu^2}{2N}S^2\right] \\ = \sqrt{\frac{2\alpha\,\pi}{N\beta}}\, \exp\left[\beta\frac{\alpha\mu^2}{2N}S^2\right].\end{aligned} \tag{17}$$

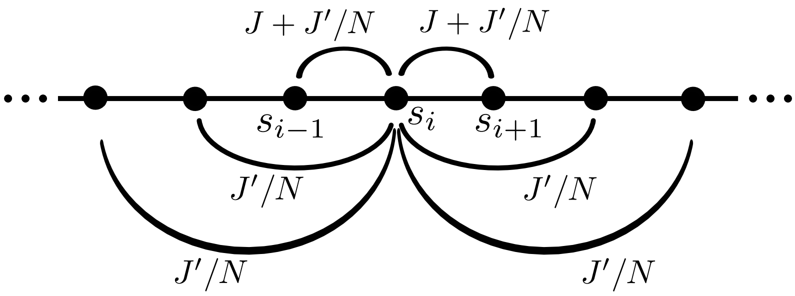
La función de partición es entonces

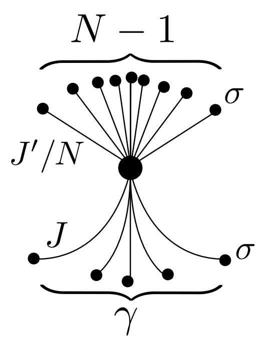
$$\begin{aligned}Z(\beta) &= \sqrt{\frac{2\alpha\,\pi}{h_B^2 N\beta}}\sum_{\{s_i\}} \exp\left[\beta\left(J\sum_{i=1}^{N} s_i s_{i+1} + \frac{\alpha\mu^2}{2N}S^2\right)\right] \\ &= \sqrt{\frac{2\alpha\,\pi}{h_B^2 N\beta}}\sum_{\{s_i\}} \exp\left\{\beta\left[J\sum_{i=1}^{N} s_i s_{i+1} + \frac{\alpha\mu^2}{2N}\left(\sum_{i=1}^{N} s_i\right)^2\right]\right\}.\end{aligned} \tag{18}$$

El último término es equivalente a una interacción entre todos los pares de espines, más un término constante

$$\frac{\alpha\mu^2}{2N}\left(\sum_{i=1}^{N} s_i\right)^2 = \frac{\alpha\mu^2}{2N}\left(\sum_{i=1}^{N} s_i^2 + 2\sum_{i<j} s_i s_j\right) = \frac{\alpha\mu^2}{2} + \frac{\alpha\mu^2}{N}\sum_{i<j} s_i s_j. \tag{19}$$

Como la constante de acoplamiento, $J'/N \equiv \alpha\mu^2/N$ es mayor que cero, se trata de una interacción de tipo ferromagnética.





c) Para aplicar campo medio construimos la función de partición de un sistema auxiliar que consta de un único espín acoplado a espines medios $\sigma \equiv \langle s\rangle$,

$$Z_1(\beta) = \sum_{s=\pm 1} \exp\left[\beta\left(\gamma\sigma J\, s + (N-1)\sigma\frac{J'}{N}s\right)\right]. \tag{20}$$

El primer término es el usual: la interacción con los γ primeros vecinos; para la red lineal $\gamma = 2$. El segundo término es la interacción que se genera a través del término S^2 con los $N-1$ espines de la red. Para $N \gg 1$, $(N-1)/N \longrightarrow 1$, y resulta

$$Z_1(\beta) \longrightarrow \sum_{s=\pm 1} \exp\left[\beta\left(\gamma J + J'\right)\sigma s\right]$$

$$= 2\cosh\left[\beta\left(2J + J'\right)\sigma\right]. \tag{21}$$

La condición de autoconsistencia es

$$\sigma = \tanh\left[\beta\left(2J + J'\right)\sigma\right]. \tag{22}$$

Para $\beta\left(2J + J'\right) \leq 1$ la única solución es $\sigma = 0$, pero si $\beta\left(2J + J'\right) > 1$ es posible tener dos valores distintos de cero $\pm\sigma$. La temperatura crítica está dada por

$$\beta_c\left(J + \frac{J'}{2}\right) = \frac{1}{2}. \tag{23}$$

En esta forma se ve que cuando $J' = 0$ se recupera el resultado usual de campo medio para una red unidimensional, es decir $\beta_c J = 1/\gamma$.

El camino que muchos siguieron fue aproximar la energía en la propia función de partición Z. Eso suele llevar a resultados incorrectos, por dos motivos: cuentan dos veces cada par de espines, o se olvidan de contar las configuraciones que tienen el mismo valor de la energía aproximada. Hecho bien, este camino es el que usa Huang en la sección 14.4 de su libro. La idea es la siguiente: una vez eliminado el campo magnético, la energía de interacción en la función de partición efectiva de los espines, Ec. (18), es

$$E = -J\sum_{\langle i,j\rangle} s_i s_j - \frac{J'}{2N}\left(\sum_i s_i\right)^2$$

$$= -\left[J\left(N_{++} + N_{--} - N_{+-}\right) + \frac{J'}{2N}\left(N_+ - N_-\right)^2\right]. \tag{24}$$

Usando las relaciones

$$\begin{aligned} \gamma N_+ &= 2N_{++} + N_{+-}, \\ \gamma N_- &= 2N_{--} + N_{+-}, \\ N &= N_+ + N_- \end{aligned} \tag{25}$$

para eliminar N_{--}, N_{+-} y N_-, se obtiene

$$E = -J\left(4N_{++} - 2\gamma N_+ + \frac{N\gamma}{2}\right) + \frac{J'}{2N}(2N_+ - N)^2. \tag{26}$$

La aproximación de campo medio consiste en tomar

$$\frac{N_{++}}{N\gamma/2} = \left(\frac{N_+}{N}\right)^2, \tag{27}$$

es decir, la probabilidad de que un dado par de vecinos sea del tipo N_{++} se asume igual a la que se obtendría si los N_+ espines $'+'$ estuvieran distribuidos al azar, ignorando cualquier tipo de correlación. Usando esta aproximación en la energía se obtiene

$$\begin{aligned} E &= -J\frac{\gamma}{2N}(2N_+ - N)^2 - \frac{J'}{2N}(2N_+ - N)^2 \\ &= -\frac{N}{2}\left(\gamma J + J'\right)(2x-1)^2, \end{aligned} \tag{28}$$

donde $x \equiv N_+/N$. Aquí ya se ve, sin necesidad de seguir avanzando en la resolución, que este problema es equivalente a uno usual con un $J_{\text{ef}} \equiv \gamma J + J' = 2J + J'$. De todas formas vale la pena continuar con el planteo, porque es ilustrativo del método. La función de partición para el sistema de los N espines resulta, en esta aproximación,

$$Z(\beta) = \sqrt{\frac{2\alpha\,\pi}{h_B^2 N\beta}} \sum_{\{s_i\}} \exp\left[\frac{\beta N}{2} J_{\text{ef}}\,(2x-1)^2\right]. \tag{29}$$

Sería un error suponer aquí que los espines son independientes y que la función de partición puede factorizarse. El término cuadrático $(2x-1)^2$ lo impide. La energía ahora depende únicamente de $x = N_+/N$. Para cada valor de x hay $\binom{N}{N_+}$ configuraciones que tienen la misma energía,

$$Z(\beta) = \sqrt{\frac{2\alpha\,\pi}{h_B^2 N\beta}} \sum_{N_+=0}^{N} \binom{N}{N_+} \exp\left[\frac{\beta N}{2} J_{\text{ef}}\,(2x-1)^2\right]. \tag{30}$$

Ahora se usa el método del máximo término y se aproxima Z por el sumando que toma el mayor valor. Maximizando respecto de x se encuentra, Stirling mediante,

$$2\beta J_{\text{ef}}(2\overline{x} - 1) + \log\left(\frac{1-\overline{x}}{\overline{x}}\right) = 0. \tag{31}$$

El valor medio σ está relacionado con el x que maximiza el sumando de Z a través de $\sigma = 2\overline{x} - 1$. De manera que $1 - \overline{x} = (1-\sigma)/2$ y $\overline{x} = (1+\sigma)/2$. Usando que $\operatorname{arctanh} y = \frac{1}{2}\log[(1+y)/(1-y)]$, resulta la condición usual

$$\sigma = \tanh(\beta J_{\text{ef}}\,\sigma), \tag{32}$$

que es el mismo resultado de antes.