Parcial de Física Teórica 3, 1er cuatrimestre 2020
Problema 3

Enunciado

Considere una cadena unidimensional abierta de spines con hamiltoniano

$$H(s_1, \ldots, s_N) = -\sum_{i=1}^{N-1} J_i \delta_{s_i s_{i+1}},$$

donde $s_i = 1, \ldots, q$ (es decir, cada spin puede estar en q estados distintos), J_i son constantes positivas y δ_{ab} es la delta de Kronecker ($\delta_{ab} = 1$ si $a = b$, $\delta_{ab} = 0$ si $a \neq b$).

(a) Calcule la función de partición canónica de la cadena.

(b) Calcule la energía media, y discuta su resultado en el caso $T = 0$.

(c) ¿Cuál es la probabilidad de que $s_1 = s_2$? ¿Y la de que $s_1 = s_2 = \cdots = s_n$ para $n \leq N$? Discuta su resultado en los casos $T = 0$ y $T \to \infty$.
Ayuda*: Si una variable X vale 1 cuando ocurre el evento E y 0 cuando no ocurre, entonces $\langle X \rangle = P(E)$.*

(d) Calcule la entropía de la cadena a $T = 0$. ¿Cuánto valdría si las constantes J_i fueran negativas? ¿Y si sus signos se alternaran? En el último caso, asuma que $J_1 > 0$ y que N es par. Discuta sus resultados.

Resolución

(a) La función de partición canónica de N partículas es

$$Z_N(K_1, \ldots, K_{N-1}) = \sum_{s_1 \ldots, s_N} \prod_{i=1}^{N-1} e^{K_i \delta_{s_i s_{i+1}}}, \tag{1}$$

donde $K_i = \beta J_i$. Separando el último factor de la productoria obtenemos

$$\begin{aligned} Z_N(K_1,\ldots,K_{N-1}) &= \sum_{s_1\ldots,s_N} \left(\prod_{i=1}^{N-2} e^{K_i \delta_{s_i s_{i+1}}}\right) e^{K_{N-1}\delta_{s_{N-1}s_N}} \\ &= \sum_{s_1,\ldots,s_{N-1}} \left(\prod_{i=1}^{N-2} e^{K_i \delta_{s_i s_{i+1}}}\right) \sum_{s_N} e^{K_{N-1}\delta_{s_{N-1}s_N}}. \end{aligned} \tag{2}$$

La suma sobre s_N es fácil: el término $s_N = s_{N-1}$ vale $e^{K_{N-1}}$ y los demás $q-1$ términos valen 1, así que

$$\sum_{s_N} e^{K_{N-1}\delta_{s_{N-1}s_N}} = q - 1 + e^{K_{N-1}}. \tag{3}$$

Reemplazando en (2) obtenemos una relación de recurrencia,

$$Z_N(K_1,\ldots,K_{N-1}) = (q-1+e^{K_{N-1}}) Z_{N-1}(K_1,\ldots,K_{N-2}). \tag{4}$$

Aplicando sucesivas veces esta relación obtenemos

$$Z_N(K_1,\ldots,K_{N-1}) = Z_1 \prod_{i=1}^{N-1} (q-1+e^{K_i}). \tag{5}$$

Si la cadena tiene un solo spin su energía se anula en cualquiera de sus q estados posibles porque es una suma de 0 términos, así que $Z_1 = q$ y por lo tanto

$$Z = q \prod_{i=1}^{N-1} (q-1+e^{K_i}), \tag{6}$$

lo cual responde a la pregunta de este ítem.

(b) La energía media está dada por

$$E = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z = -\sum_{i=1}^{N-1} \frac{\partial}{\partial\beta} \ln(q-1+e^{\beta J_i}) = -\sum_{i=1}^{N-1} \frac{J_i e^{\beta J_i}}{q-1+e^{\beta J_i}}. \tag{7}$$

En el caso $T=0$ tenemos $\beta \to \infty$ y por lo tanto

$$E(T=0) = -\sum_{i=1}^{N-1} J_i. \tag{8}$$

Comparando con el hamiltoniano del sistema, vemos que ésta es la energía del estado fundamental, como debe ser.

(c) Usando la ayuda, vemos que la probabilidad de que $s_1 = s_2$ es

$$P(s_1 = s_2) = \langle \delta_{s_1 s_2} \rangle = \frac{\partial}{\partial K_1} \ln Z = \frac{\partial}{\partial K_1} \ln(q-1+e^{K_1}) = \frac{e^{K_1}}{q-1+e^{K_1}}. \tag{9}$$

Para generalizar a n spines notamos que $\delta_{s_1 s_2}\delta_{s_2 s_3}\dots\delta_{s_{n-1}s_n}$ es 1 cuando $s_1 = s_2 = \cdots = s_n$ y 0 en otro caso, así que, usando la ayuda de vuelta,

$$\begin{aligned} P(s_1 = s_2 = \cdots = s_n) &= \langle \delta_{s_1 s_2}\delta_{s_2 s_3}\dots\delta_{s_{n-1}sn}\rangle \\ &= \frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial K_1}\frac{\partial}{\partial K_2}\cdots\frac{\partial}{\partial K_{n-1}}Z = \prod_{i=1}^{n-1}\frac{e^{K_i}}{q-1+e^{K_i}}. \end{aligned} \tag{10}$$

En el caso $T = 0$ tenemos $K_i \to \infty$ y por lo tanto

$$P(s_1 = s_2 = \cdots = s_n) = 1 \qquad (T = 0). \tag{11}$$

Claro, a temperatura cero el sistema está en el estado fundamental, que corresponde a que todos los spines estén en el mismo estado. En el caso $T \to \infty$ tenemos $K_i \to 0$ y por lo tanto

$$P(s_1 = s_2 = \cdots = s_n) = \frac{1}{q^{n-1}} \qquad (T \to \infty). \tag{12}$$

Claro, a temperatura infinita todos los estados son igualmente probables, sin importar su energía, y por lo tanto la probabilidad es el número de casos favorables (q) sobre el número de casos posibles (q^n).

(d) La entropía a temperatura cero es

$$S = k \ln \Omega, \tag{13}$$

donde Ω es la degeneración del estado fundamental. Si $J_i > 0$, el estado fundamental corresponde a que todos los spines estén en el mismo estado. Hay q posibilidades, así que

$$\Omega = q \qquad (J_i > 0). \tag{14}$$

Si $J_i < 0$, el estado fundamental corresponde a que el primer spin se encuentre en un estado distinto que el segundo, y éste se encuentre en un estado distinto que el tercero, y así sucesivamente. Para el primer spin podemos elegir cualquier estado, así que hay q posibilidades. Una vez elegimos una, tenemos $q-1$ posibilidades para el segundo, porque su estado tiene que ser distinto que el del primero. Una vez elegimos una de ésas, tenemos $q-1$ posibilidades para el tercero, y así sucesivamente, así que

$$\Omega = q(q-1)^{N-1} \qquad (J_i < 0). \tag{15}$$

Si los signos se alternan (con $J_1 > 0$), el estado fundamental corresponde a que los dos primeros spines estén en el mismo estado, los siguientes dos spines estén también en el mismo estado pero uno distinto del anterior, y así sucesivamente. Tenemos q posibilidades para el primer par; para cada una de éstas, hay $q-1$ posibilidades para el segundo; para cada una de éstas, hay $q-1$ posibilidades para el tercero, y así sucesivamente, así que

$$\Omega = q(q-1)^{N/2-1} \qquad (J_1 > 0,\ \text{signos alternados}). \tag{16}$$

En todos los casos vemos que la entropía es distinta de cero a temperatura cero, lo cual está en desacuerdo con la tercera ley de la termodinámica. En el primer caso la discrepancia es irrelevante porque la entropía por partícula sí tiende a cero en el límite termodinámico. En los otros dos casos, en cambio,

$$\frac{S}{N} = \begin{cases} k \ln(q-1) & (J_i < 0) \\ \frac{k}{2} \ln(q-1) & (J_1 > 0,\ \text{signos alternados}), \end{cases} \tag{17}$$

donde hemos tomado el límite termodinámico, así que la violación de la tercera ley sí es apreciable en estos casos.