Física Teórica 3 — primer cuatrimestre de 2024

Segundo parcial – Resuelto

■ **1**. Considere un gas ideal de N electrones en una **trampa armónica** tridimensional de frecuencia ω en el límite termodinámico. La temperatura es cero. Los electrones interactúan con un campo magnético externo $\mathbf{B} = B\hat{z}$. La energía de interacción es $\epsilon_s = s\mu_e B$, donde s es el signo de la proyección del espín en la dirección $\hat{z}$ y μ_e es el valor absoluto del momento magnético de los electrones. Es válido aplicar la aproximación semiclásica.

a) Escriba la ecuación que determina la energía de Fermi como función de N, ω y B.

b) Calcule la magnetización por partícula, M, en función de la energía de Fermi, N, ω y B.

c) Calcule la susceptibilidad, es decir, la derivada de M respecto de B cuando B tiende a cero. El resultado debe quedar escrito únicamente en términos de la energía de Fermi.

Ayuda: $\displaystyle\int_0^\infty dx\, \Theta(b-x) f(x) = \Theta(b)\int_0^b dx\, f(x)$.

■ **Solución**. La energía de Fermi está determinada por la ecuación que da el número de partículas a temperatura cero,

$$N = \frac{1}{h^3}\sum_{s=\pm1}\int d^3r \int d^3p\, \Theta\left(\epsilon_F - \frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2 r^2}{2} - s\mu_e B\right) = N_+ + N_-, \tag{1}$$

donde

$$N_\pm = \frac{1}{h^3}\int d^3r \int d^3p\, \Theta\left(\epsilon_F - \frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2 r^2}{2} \mp \mu_e B\right). \tag{2}$$

La integral puede reducirse al volumen de una esfera en seis dimensiones. Introduzcamos las variables

$$\mathbf{x} = \frac{\mathbf{p}}{\sqrt{2m}}, \qquad \mathbf{y} = \sqrt{\frac{m\omega^2}{2}}\,\mathbf{r}. \tag{3}$$

Entonces,

$$N_\pm = \frac{8}{(h\omega)^3}\int d^3x \int d^3y\, \Theta\big(\epsilon_F - x^2 - y^2 \mp \mu_e B\big). \tag{4}$$

Ahora definamos un vector $\mathbf{z}$ en $\mathbb{R}^6$ cuyas componentes cartesianas sean las tres componentes de $\mathbf{x}$ y las tres componentes de $\mathbf{y}$. Entonces,

$$N_\pm = \frac{8}{(h\omega)^3}\int d^6z\, \Theta\big(\epsilon_F - z^2 \mp \mu_e B\big). \tag{5}$$

El resultado de esta integral es el volumen de una esfera en seis dimensiones,

$$N_\pm = \frac{8\Omega_6}{6(h\omega)^3}\,\Theta(\epsilon_F \mp \mu_e B)\,(\epsilon_F \mp \mu_e B)^3. \tag{6}$$

La función escalón es necesaria, porque si el radio de la esfera es negativo, el resultado debe ser cero. Recordando que

$$\Omega_d = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}, \tag{7}$$

tenemos $\Omega_6 = \pi^3$. Luego,

$$\begin{aligned} N_+ &= \frac{1}{6(\hbar\omega)^3}\,\Theta(\epsilon_F - \mu_e B)\,(\epsilon_F - \mu_e B)^3\,, \\ N_- &= \frac{1}{6(\hbar\omega)^3}\,\Theta(\epsilon_F + \mu_e B)\,(\epsilon_F + \mu_e B)^3\,. \end{aligned} \tag{8}$$

Finalmente, la ecuación que determina la energía de Fermi es

$$6N(\hbar\omega)^3 = \Theta(\epsilon_F - \mu_e B)\,(\epsilon_F - \mu_e B)^3 + \Theta(\epsilon_F + \mu_e B)\,(\epsilon_F + \mu_e B)^3\,. \tag{9}$$

Conviene escribir la ecuación en esta forma puesto que, en el límite termodinámico, el producto $N(\hbar\omega)^3$ se mantiene finito. Si $B = 0$,

$$\epsilon_F \equiv \epsilon_0 = \left[3N(\hbar\omega)^3\right]^{1/3}. \tag{10}$$

Esta es una escala de energía característica del sistema. En términos de ϵ_0,

$$2\epsilon_0^3 = \Theta(\epsilon_F - \mu_e B)\,(\epsilon_F - \mu_e B)^3 + \Theta(\epsilon_F + \mu_e B)\,(\epsilon_F + \mu_e B)^3\,. \tag{11}$$

Escrita de esta manera, la ecuación relaciona sólo cantidades intensivas.

La magnetización por partícula es

$$M = \frac{\mu_e}{N}(N_- - N_+) = \frac{\mu_e}{6N(\hbar\omega)^3}\left[\Theta(\epsilon_F + \mu_e B)\,(\epsilon_F + \mu_e B)^3 - \Theta(\epsilon_F - \mu_e B)\,(\epsilon_F - \mu_e B)^3\right]. \tag{12}$$

Para calcular la susceptibilidad en el límite $B \to 0$, podemos asumir que $\epsilon_F > \mu_e|B|$,

$$M = \frac{\mu_e}{6N(\hbar\omega)^3}\left[(\epsilon_F + \mu_e B)^3 - (\epsilon_F - \mu_e B)^3\right]. \tag{13}$$

La susceptibilidad es

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B}\bigg|_{B=0} = \frac{\mu_e}{6N(\hbar\omega)^3}\left[3\epsilon_F^2\left(\frac{\partial \epsilon_F}{\partial B}\bigg|_{B=0} + \mu_e\right) - 3\epsilon_F^2\left(\frac{\partial \epsilon_F}{\partial B}\bigg|_{B=0} - \mu_e\right)\right] = \frac{\epsilon_F^2\mu_e^2}{N(\hbar\omega)^3}. \tag{14}$$

Por otro lado, cuando $B = 0$, la Ec. (9) da

$$N(\hbar\omega)^3 = \tfrac{1}{3}\epsilon_F^3. \tag{15}$$

Entonces, resulta

$$\chi = \frac{3\mu_e^2}{\epsilon_F}. \tag{16}$$

■ **2**. Un gas ideal de N bosones de masa m y espín cero está atrapado en una región bidimensional de largo a y altura ℓ. Hay un campo gravitatorio uniforme con aceleración g en la dirección vertical. Es válido aplicar la aproximación semiclásica. Se define $\alpha = \beta m g \ell$.

a) Calcule el logaritmo de la función de partición en el ensamble gran canónico.

b) Muestre que, en el límite termodinámico, este sistema tiene una transición de fase y escriba la ecuación que determina la temperatura crítica.

c) Calcule la energía como función de la temperatura y de la fugacidad.

Ayuda: resuelva primero la integral en el impulso.

■ **Solución**. La función de partición está dada por

$$\log \mathcal{Z} = -\log(1-z) - \frac{2\pi a}{h^2}\int_0^\infty dp\, p \int_0^\ell dy\, \log\left\{1 - z\exp\left[-\beta\left(\frac{p^2}{2m} + mgy\right)\right]\right\}. \tag{17}$$

Hay muchas formas de hacer estas integrales. El primer paso es cambiar de variables para extraer del integrando la mayor cantidad posible de parámetros. Definamos, entonces,

$$q = \beta\frac{p^2}{2m}, \qquad u = \beta m g y. \tag{18}$$

Así resulta

$$\log \mathcal{Z} = -\log(1-z) - \frac{a\ell}{\lambda^2\alpha}\int_0^\infty dq \int_0^\alpha du\, \log\left[1 - z e^{-(q+u)}\right], \tag{19}$$

donde

$$\alpha = \beta m g \ell. \tag{20}$$

Si integramos por partes en q,

$$\begin{aligned} \log \mathcal{Z} &= -\log(1-z) - \frac{a\ell}{\lambda^2\alpha}\int_0^\alpha du\, \left\{ q\log\left[1 - z e^{-(q+u)}\right]\Big|_0^\infty - \int_0^\infty dq\, \frac{q}{z^{-1}e^{q+u} - 1}\right\} \\ &= -\log(1-z) + \frac{a\ell}{\lambda^2\alpha}\int_0^\alpha du\, g_2(ze^{-u})\,. \end{aligned} \tag{21}$$

Con el cambio de variable $w = ze^{-u}$,

$$\begin{aligned} \log \mathcal{Z} &= -\log(1-z) + \frac{a\ell}{\lambda^2\alpha}\int_{ze^{-\alpha}}^{z} dw\, \frac{g_2(w)}{w} \\ &= -\log(1-z) + \frac{a\ell}{\lambda^2\alpha}\left[g_3(z) - g_3(ze^{-\alpha})\right]. \end{aligned} \tag{22}$$

Derivando respecto de z, encontramos que el número de partículas es

$$N = z\frac{\partial \log \mathcal{Z}}{\partial z} = N_0 + N_{\text{exc}} = \frac{1}{z^{-1} - 1} + \frac{a\ell}{\lambda^2\alpha}\left[g_2(z) - g_2(ze^{-\alpha})\right]. \tag{23}$$

Cuando $z \to 1^-$, $N_{\rm exc}$ tiende a un valor finito. Esto significa que habrá una transición de fase. La condición crítica se encuentra igualando N al máximo número de partículas en los niveles excitados,

$$\frac{N\lambda^2}{a\ell} = \frac{1}{\alpha}\Big[\zeta(2) - g_2(e^{-\alpha})\Big]. \tag{24}$$

Para calcular la energía como función de la temperatura y de la fugacidad podemos derivar el logaritmo de la función de partición respecto de β,

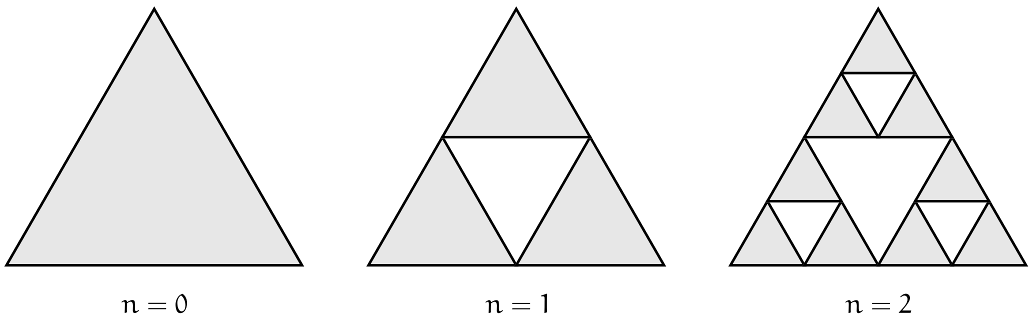
$$U = -\frac{\log \mathcal{Z}}{\partial\beta} = \frac{a\ell}{\lambda^2}\left\{\frac{2}{\alpha}\Big[g_3(z) - g_3(ze^{-\alpha})\Big] - g_2(ze^{-\alpha})\right\} kT. \tag{25}$$

Es instructivo verificar que, cuando $\alpha \to 0$,

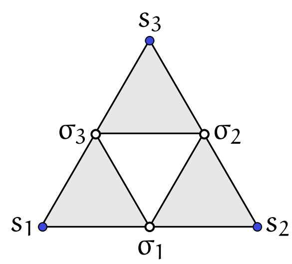
$$U \to \frac{\mathcal{A}}{\lambda^2} kT\, g_2(z), \tag{26}$$

donde $\mathcal{A}$ es el área del sistema. Este es el resultado usual sin campo gravitatorio.

■ **3**. Una red de Ising se construye iterativamente de acuerdo al siguiente algoritmo: la red de nivel $n = 0$ es un triángulo equilátero, como en la figura de la izquierda. En la primera iteración, para formar la red de nivel $n = 1$, se toma el punto medio de cada lado del triángulo original y se construyen tres nuevos triángulos, como en la figura central. En la segunda iteración, para formar la red de nivel $n = 2$, se toma cada uno de los tres triángulos sombreados y se les aplica el procedimiento del paso anterior, como en la figura de la derecha; y así sucesivamente.



En cada vértice hay un espín. La red de nivel $n > 0$ es un agregado de 3^{n-1} elementos de la forma



donde los espines σ_i son los últimos en haber sido incorporados a la red. La energía de interacción entre espines vecinos es

$$\epsilon(s, s') = -Jss'. \tag{27}$$

Se define $K = \beta J$.

a) Muestre que, si en la red de nivel n se eliminan de la descripción los espines σ, los pares de vecinos resultantes interactúan de manera efectiva a través de un término que tiene la misma forma que la interacción original, pero con un acoplamiento renormalizado $\bar{K}$. Escriba $\bar{K}(K)$.

b) Encuentre una relación de recurrencia para la función de partición, de la forma:

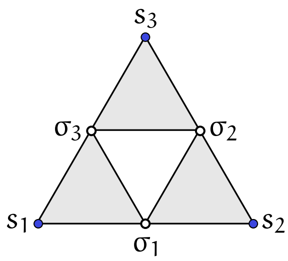
$$Z^{(n)}(K) = \alpha_n(K)\, Z^{(n-1)}(\bar{K}). \tag{28}$$

c) Calcule la función de partición de la red de nivel $n = 2$. La expresión que obtenga se tiene que poder evaluar con una calculadora.

Ayuda: escriba $\bar{K}$ y α_n de manera compacta en términos de dos funciones de K, de forma que

$$\bar{K} = \log \frac{A(K)}{B(K)}. \tag{29}$$

■ **Solución**. Consideremos una de las piezas elementales que forman la red de nivel n.



Este elemento está formado por tres espines s y tres espines σ. Los espines σ sólo tienen enlaces con esos tres espines s y entre sí. De manera que la función de partición es de la forma

$$Z^{(n)}(K) = \sum_{\{s\}} \left[\sum_{\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3} \exp\Big\{ K\big[(s_1+s_2)\sigma_1 + (s_2+s_3)\sigma_2 + (s_3+s_1)\sigma_3\big] \Big\}\, e^{K(\sigma_1\sigma_2+\sigma_2\sigma_3+\sigma_3\sigma_1)} \right] \ldots \tag{30}$$

Los puntos suspensivos indican otros términos análogos, correspondientes a las otras piezas elementales de la red. Lo que es seguro es que, en la suma sobre estados, los espines σ_1, σ_2 y σ_3 sólo aparecen dentro del término mostrado en la ecuación anterior. De modo que es fácil sumarlos explícitamente:

$$\begin{aligned} f(s_1,s_2,s_3) &= \sum_{\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3} \exp\Big\{ K\big[(s_1+s_2)\sigma_1 + (s_2+s_3)\sigma_2 + (s_3+s_1)\sigma_3\big] \Big\}\, e^{K(\sigma_1\sigma_2+\sigma_2\sigma_3+\sigma_3\sigma_1)} \\ &= 2e^{3K}\cosh\big[2K(s_1+s_2+s_3)\big] + 2e^{-K}\big[\cosh(2Ks_1) + \cosh(2Ks_2) + \cosh(2Ks_3)\big]. \end{aligned} \tag{31}$$

Ahora bien, cuando x sólo toma los valores ± 1,

$$\cosh(\alpha x) = \cosh \alpha. \tag{32}$$

Luego,

$$f(s_1,s_2,s_3) = 2e^{3K}\cosh\big[2K(s_1+s_2+s_3)\big] + 6e^{-K}\cosh 2K. \tag{33}$$

El objetivo es escribir

$$f(s_1, s_2, s_3) = c e^{\bar{K}(s_1 s_2 + s_2 s_3 + s_3 s_1)}. \tag{34}$$

Como los tres espines son equivalentes y estas expresiones son pares respecto al cambio simultáneo del signo de los tres espines, habrá sólo dos ecuaciones independientes. Por ejemplo, podemos tomar $s_1 = s_2 = s_3 = 1$ y $s_1 = s_2 = -s_3 = 1$. Las dos ecuaciones son

$$\begin{aligned} &2e^{3K} \cosh 6K + 6e^{-K} \cosh 2K = c e^{3\bar{K}}, \\ &2\left(e^{3K} + 3e^{-K}\right) \cosh 2K = c e^{-\bar{K}}. \end{aligned} \tag{35}$$

Entonces,

$$\begin{aligned} e^{4\bar{K}} &= \frac{e^{4K} \cosh 6K + 3 \cosh 2K}{(e^{4K} + 3) \cosh 2K}, \\ c(K) &= 2e^{-K} \left\{ \left(e^{4K} \cosh 6K + 3 \cosh 2K\right) \left[\left(e^{4K} + 3\right) \cosh 2K\right]^3 \right\}^{1/4}. \end{aligned} \tag{36}$$

Explícitamente, la transformación para K es

$$\bar{K}(K) = \frac{1}{4} \log \left[\frac{e^{4K} \cosh 6K + 3 \cosh 2K}{(e^{4K} + 3) \cosh 2K} \right]. \tag{37}$$

Es práctico definir las funciones

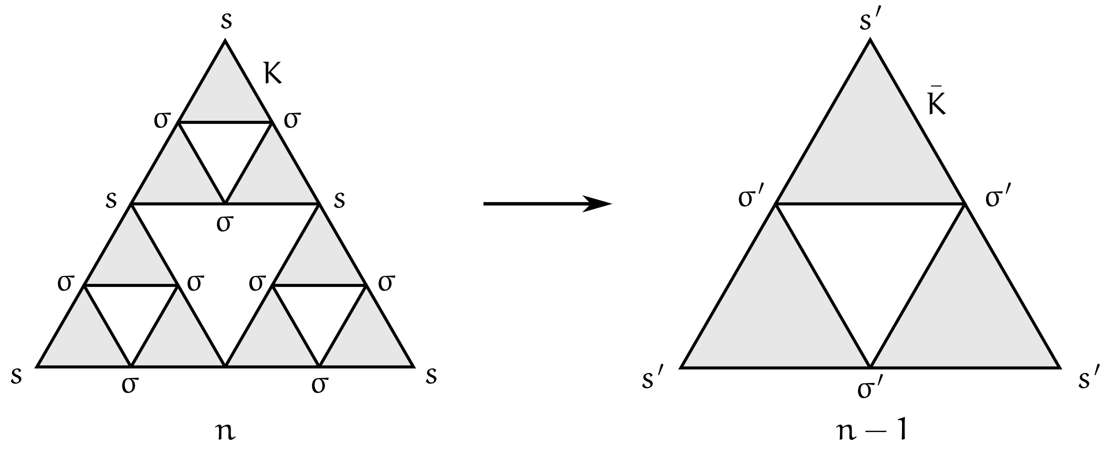
$$\begin{aligned} A(K) &= \left(e^{4K} \cosh 6K + 3 \cosh 2K\right)^{1/4}, \\ B(K) &= \left[\left(e^{4K} + 3\right) \cosh 2K\right]^{1/4}, \end{aligned} \tag{38}$$

y escribir

$$\begin{aligned} \bar{K}(K) &= \log \frac{A(K)}{B(K)}, \\ c(K) &= 2e^{-K} A(K) B(K)^3. \end{aligned} \tag{39}$$

Es importante entender que al sumar sobre todos los espines σ, la suma sobre los espines sobrevivientes tiene la misma forma que la función de partición de la red de nivel $n - 1$, pero con acoplamientos renormalizados y multiplicada por un factor numérico:

$$Z^{(n)}(K) = \sum_{\{s\},\{\sigma\}}^{(n)} e^{\mathcal{H}(\{s\},\{\sigma\},K)} = \alpha_n(K) \sum_{\{s'\},\{\sigma'\}}^{(n-1)} e^{\mathcal{H}(\{s'\},\{\sigma'\},\bar{K})}. \tag{40}$$



Como muestra la figura, los espines s' y σ' son los espines restantes luego de haber sumado sobre los espines σ. Resulta fundamental que todos los enlaces se hayan renormalizado del mismo modo.

La red de nivel $n > 0$ es un agregado de 3^{n-1} piezas elementales. La suma sobre los espines σ de cada una de estas piezas contribuye con un factor $c(K)$. Por lo tanto, la relación de recurrencia para la función de partición es

$$Z^{(n)}(K) = c(K)^{3^{n-1}}\, Z^{(n-1)}(\bar{K}). \tag{41}$$

Para escribirla de manera más general, definamos $K^{(n)} = K$. Entonces

$$K^{(j-1)} = \bar{K}\big[K^{(j)}\big]\,, \tag{42}$$

y

$$Z^{(j)}\big[K^{(j)}\big] = c\big[K^{(j)}\big]^{3^{j-1}}\, Z^{(j-1)}\big[K^{(j-1)}\big]\,. \tag{43}$$

Con las definiciones (39), la relación de recurrencia se lee como

$$Z^{(j)}(K) = \big[2e^{-K}A(K)B^3(K)\big]^{3^{j-1}}\, Z^{(j-1)}\left[\log\frac{A(K)}{B(K)}\right]. \tag{44}$$

Sólo resta calcular $Z^{(0)}$ o $Z^{(1)}$, para tener un punto de partida. Por ejemplo,

$$Z^{(0)}(K) = \sum_{s_1,s_2,s_3} e^{K(s_1s_2+s_2s_3+s_3s_1)} = 2\left(e^{3K}+3e^{-K}\right). \tag{45}$$

Para calcular $Z^{(1)}$, es más práctico hacerlo de manera directa que mediante la relación de recurrencia. Podemos usar el resultado (33), puesto que no hay más enlaces que entre los espines s_1, s_2 y s_3,

$$\begin{aligned} Z^{(1)}(K) &= \sum_{s_1,s_2,s_3} f(s_1,s_2,s_3) = \sum_{s_1,s_2,s_3}\Big\{2e^{3K}\cosh\big[2K(s_1+s_2+s_3)\big] + 6e^{-K}\cosh 2K\Big\} \\ &= 48e^{-K}\cosh 2K + 4e^{3K}\cosh 6K + 12e^{3K}\cosh 2K \\ &= 2e^{9K} + 6e^{5K} + 30e^{K} + 26e^{-3K}. \end{aligned} \tag{46}$$

El cálculo de la función de partición de la red de nivel 2 normalmente involucraría la suma sobre 2^{15} estados. Mediante la relación de recurrencia, resulta

$$Z^{(2)}(K) = 8e^{-3K}\left(AB^3\right)^3 Z^{(1)}\left(\log\frac{A}{B}\right), \tag{47}$$

donde la dependencia de A y B con K se da por sobreentendida. Entonces, usando la expresión (46) para $Z^{(1)}$,

$$Z^{(2)}(K) = 8e^{-3K}\left(2A^{12} + 6A^8B^4 + 30A^4B^8 + 26B^{12}\right). \tag{48}$$

No se gana mucho al sustituir las expresiones explícitas de A y B, a menos que uno tenga la intención de avanzar en el desarrollo:

$$\begin{aligned} Z^{(2)}(K) = 8e^{-3K}\Big[&2\left(e^{4K}\cosh 6K + 3\cosh 2K\right)^3 + 6\left(e^{4K}\cosh 6K + 3\cosh 2K\right)^2\left(e^{4K}+3\right)\cosh 2K \\ &+ 30\left(e^{4K}\cosh 6K + 3\cosh 2K\right)\left(e^{4K}+3\right)^2\cosh^2 2K + 26\left(e^{4K}+3\right)^3\cosh^3 2K\Big]. \end{aligned} \tag{49}$$

En última instancia, el objetivo es escribir la función de partición como un polinomio de Laurent en la variable e^K. El resultado final, obtenido a partir de la expresión anterior mediante un programa de cálculo simbólico, es

$$\begin{aligned} Z^{(2)}(K) = {}&2198e^{-9K} + 7602e^{-5K} + 10296e^{-K} + 7400e^{3K} + 3540e^{7K} \\ &+ 1308e^{11K} + 344e^{15K} + 72e^{19K} + 6e^{23K} + 2e^{27K}. \end{aligned} \tag{50}$$