

## Física Teórica 3 – primer cuatrimestre de 2024

### Segundo recuperatorio resuelto

■ **1.** Considere un gas ideal de  $N$  fermiones de espín  $\frac{1}{2}$  en una **trampa armónica** tridimensional de frecuencia  $\omega$  en el límite termodinámico. Es válido aplicar la aproximación semiclásica.

- a) Calcule la energía de Fermi,  $\epsilon_F$ .
- b) Calcule la energía por partícula cuando  $T = 0$ , expresada sólo en términos de  $\epsilon_F$ .
- c) Calcule el potencial químico como función de  $T$  para  $kT \ll \epsilon_F$ . El resultado debe quedar expresado como una serie de potencias en  $kT/\epsilon_F$  hasta orden cuadrático, y debe quedar escrito únicamente en términos de  $\epsilon_F$  y  $T$ .
- d) Calcule la energía por partícula como función de la temperatura para  $kT \ll \epsilon_F$ . El resultado debe quedar expresado como en el ítem anterior.

■ **Solución.** La energía de Fermi se obtiene a través de la ecuación que da el número de partículas a  $T = 0$ . La aproximación semiclásica,

$$\sum_{\text{estados}} \rightarrow g_s \int \frac{d^3r d^3p}{h^3}, \quad (1)$$

permite escribir

$$N = \frac{2}{h^3} \int d^3r \int d^3p \Theta\left(\epsilon_F - \frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{2}r^2\right). \quad (2)$$

Mediante el cambio de variables  $\mathbf{P} = \mathbf{p}/\sqrt{2m}$  y  $\mathbf{R} = \sqrt{m\omega^2/2} \mathbf{r}$ , resulta

$$N = \frac{16}{(h\omega)^3} \int d^3R \int d^3P \Theta(\epsilon_F - P^2 - R^2). \quad (3)$$

Llamando  $\mathbf{Q}$  al vector que tiene por componentes cartesianas  $\{R_x, R_y, R_z, P_x, P_y, P_z\}$ , la integral puede escribirse como

$$N = \frac{16}{(h\omega)^3} \int d^6Q \Theta(\epsilon_F - Q^2). \quad (4)$$

Esto es el volumen de una esfera de radio  $\epsilon_F^{1/2}$  en un espacio de 6 dimensiones,

$$N = \frac{16\Omega_6}{(h\omega)^3} \int_0^{\epsilon_F^{1/2}} dQ Q^5 = \frac{1}{3} \left(\frac{\epsilon_F}{\hbar\omega}\right)^3. \quad (5)$$

Así,

$$\epsilon_F = \left[3N(\hbar\omega)^3\right]^{1/3}. \quad (6)$$

Por otro lado, la energía está dada por

$$E = 2 \int d^3r \int d^3p \Theta\left(\epsilon_F - \frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{2}r^2\right) \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}r^2\right). \quad (7)$$

Mediante los mismos cambios de variables,

$$E = \frac{16}{(\hbar\omega)^3} \int d^6Q \Theta(\epsilon_F - Q^2) Q^2 = \frac{\epsilon_F^4}{4(\hbar\omega)^3}. \quad (8)$$

Comparando con la ecuación para el número de partículas, Ec. (5), resulta

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{4}\epsilon_F. \quad (9)$$

En general

$$N = \frac{1}{(\hbar\omega)^3} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^2}{z^{-1}e^{\beta\epsilon} + 1} = \frac{2}{(\hbar\omega\beta)^3} g_3(z). \quad (10)$$

Cuando  $T \rightarrow 0$ ,  $z = e^{\beta\mu} \approx e^{\beta\epsilon_F} \rightarrow \infty$ . Entonces podemos usar el lema de Sommerfeld,

$$g_\nu(e^\alpha) \simeq \frac{\alpha^\nu}{\nu!} \left[ 1 + \frac{\pi^2}{6} \nu(\nu-1)\alpha^{-2} \right]. \quad (11)$$

Luego, en el entendimiento de que todas las igualdades que siguen son válidas hasta orden cuadrático en  $kT/\epsilon_F$ ,

$$N = \frac{1}{3} \left( \frac{\mu}{\hbar\omega} \right)^3 \left[ 1 + \pi^2 \left( \frac{kT}{\mu} \right)^2 \right]. \quad (12)$$

Escribiendo  $\mu$  de manera implícita en la forma de una ecuación de punto fijo,

$$\mu = (3N)^{1/3} \hbar\omega \left[ 1 + \pi^2 \left( \frac{kT}{\mu} \right)^2 \right]^{-1/3}. \quad (13)$$

El orden más bajo en la aproximación consiste en tomar  $T = 0$ ,

$$\mu^{(0)} = (3N)^{1/3} \hbar\omega = \epsilon_F. \quad (14)$$

La primera corrección se obtiene reemplazando este resultado en el segundo miembro de la Ec. (13),

$$\mu = \epsilon_F \left[ 1 + \pi^2 \left( \frac{kT}{\epsilon_F} \right)^2 \right]^{-1/3} = \epsilon_F \left[ 1 - \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{kT}{\epsilon_F} \right)^2 \right]. \quad (15)$$

Para calcular la energía se siguen más o menos los mismos pasos:

$$E = \frac{1}{(\hbar\omega)^3} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^3}{z^{-1}e^{\beta\epsilon} + 1} = \frac{6kT}{(\hbar\omega\beta)^3} g_4(z) \simeq \frac{\mu^4}{4(\hbar\omega)^3} \left[ 1 + 2\pi^2 \left( \frac{kT}{\mu} \right)^2 \right]. \quad (16)$$

Ahora hay que reemplazar aquí la expresión (15), notando que en el término que ya es proporcional a  $T^2$  en la Ec. (16) debe usarse la aproximación de orden cero para el potencial químico. Así obtenemos

$$\frac{E}{N} = \frac{\epsilon_F^4}{4N(\hbar\omega)^3} \left[ 1 - \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{kT}{\epsilon_F} \right)^2 \right]^4 \left[ 1 + 2\pi^2 \left( \frac{kT}{\epsilon_F} \right)^2 \right] = \frac{3}{4}\epsilon_F \left[ 1 + \frac{2\pi^2}{3} \left( \frac{kT}{\epsilon_F} \right)^2 \right]. \quad (17)$$

■ **2.** Un gas ideal de  $N$  bosones de masa  $m$  y espín cero está en una caja de **bidimensional** de área  $A$ . Si se define  $\epsilon_0 = mc^2$ , la relación de dispersión es

$$\epsilon(\mathbf{p}) = \sqrt{\epsilon_0^2 + (\mathbf{p}c)^2}. \quad (18)$$

- Calcule el logaritmo de la función de partición en el ensamble gran canónico.
- En el límite termodinámico, este sistema ¿tiene una transición de fase a temperatura finita? De ser así, ¿cuál es la condición crítica?
- Calcule la energía por partícula en el límite termodinámico como función de la temperatura, de la fugacidad y de la densidad  $A/N$ .

■ **Solución.** El logaritmo de la función de partición es

$$\log \mathcal{Z} = -\log(1 - ze^{-\beta\epsilon_0}) - \frac{2\pi A}{h^2} \int_0^\infty dp \, p \log \left\{ 1 - z \exp \left[ -\beta \sqrt{\epsilon_0^2 + (\mathbf{p}c)^2} \right] \right\}. \quad (19)$$

Definiendo

$$x = \beta \sqrt{\epsilon_0^2 + (\mathbf{p}c)^2}, \quad (20)$$

resulta

$$p^2 = \frac{1}{(\beta c)^2} [x^2 - (\beta \epsilon_0)^2], \quad dp^2 = \frac{2x}{(\beta c)^2} dx. \quad (21)$$

Entonces,

$$\begin{aligned} \log \mathcal{Z} &= -\log(1 - ze^{-\beta\epsilon_0}) - \frac{2\pi A}{(hc\beta)^2} \int_{\beta\epsilon_0}^\infty dx \, x \log(1 - ze^{-x}) \\ &= -\log(1 - \bar{z}) - \frac{2\pi A}{(hc\beta)^2} \int_0^\infty dx \, (x + \beta\epsilon_0) \log(1 - \bar{z}e^{-x}), \end{aligned} \quad (22)$$

donde  $\bar{z} = ze^{-\beta\epsilon_0}$ . La integral puede resolverse por partes,

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty dx \, (x + \beta\epsilon_0) \log(1 - \bar{z}e^{-x}) \\ &= \left( \frac{x^2}{2} + \beta\epsilon_0 x \right) \log(1 - \bar{z}e^{-x}) \Big|_0^\infty - \int_0^\infty dx \, \left( \frac{x^2}{2} + \beta\epsilon_0 x \right) \frac{1}{\bar{z}^{-1}e^x - 1} \\ &= -g_3(\bar{z}) - \beta\epsilon_0 g_2(\bar{z}). \end{aligned} \quad (23)$$

Finalmente,

$$\log \mathcal{Z} = -\log(1 - \bar{z}) + \frac{A}{(hc\beta)^2} \left[ g_3(\bar{z}) + \beta\epsilon_0 g_2(\bar{z}) \right]. \quad (24)$$

El número de partículas en los estados excitados es

$$N_{\text{exc}} = \frac{A}{(hc\beta)^2} \left[ g_2(\bar{z}) + \beta\epsilon_0 g_1(\bar{z}) \right]. \quad (25)$$

Cuando  $\bar{z} \rightarrow 1^-$ , este número no está acotado, puesto que  $g_1(\bar{z})$  diverge: en el límite termodinámico, este sistema no tiene una transición de fase a temperatura finita.

De ahora en más, en el límite termodinámico, podemos omitir la contribución del nivel fundamental. Así, la energía por partícula será

$$\frac{E}{N} = -\frac{1}{N} \frac{\partial \log \mathcal{Z}}{\partial \beta} = \frac{\alpha}{(\hbar c \beta)^2} \left\{ 2kT \left[ g_3(e^{-\beta \epsilon_0 z}) + \beta \epsilon_0 g_2(e^{-\beta \epsilon_0 z}) \right] + \beta \epsilon_0^2 g_1(e^{-\beta \epsilon_0 z}) \right\}, \quad (26)$$

donde  $\alpha = A/N$ . A modo de verificación, analicemos el límite clásico. Cuando  $z \ll 1$ ,

$$\frac{E}{N} \simeq z e^{-\beta \epsilon_0} \frac{\alpha}{(\hbar c \beta)^2} \left[ 2kT(1 + \beta \epsilon_0) + \epsilon_0 \right] = z e^{-\beta \epsilon_0} \frac{\alpha}{(\hbar c \beta)^2} (2kT + 2\epsilon_0 + \beta \epsilon_0^2). \quad (27)$$

En el mismo límite,

$$N \simeq z e^{-\beta \epsilon_0} \frac{A}{(\hbar c \beta)^2} (1 + \beta \epsilon_0), \quad (28)$$

lo que implica

$$z e^{-\beta \epsilon_0} \frac{\alpha}{(\hbar c \beta)^2} \simeq \frac{1}{1 + \beta \epsilon_0}. \quad (29)$$

Luego,

$$\frac{E}{N} \simeq \frac{kT}{1 + \beta \epsilon_0} \left[ 2 + 2\beta \epsilon_0 + (\beta \epsilon_0)^2 \right]. \quad (30)$$

Es fácil ver que este es el resultado correcto: la función de partición del gas clásico es

$$Z_N = \frac{Z_1^N}{N!}, \quad (31)$$

donde

$$Z_1 = \frac{2\pi A}{h^2} \int_0^\infty dp p e^{-\epsilon(p)} = \frac{2\pi A}{(\hbar c \beta)^2} \int_{\beta \epsilon_0}^\infty dx x e^{-x} = \frac{2\pi A}{(\hbar c \beta)^2} e^{-\beta \epsilon_0} (1 + \beta \epsilon_0). \quad (32)$$

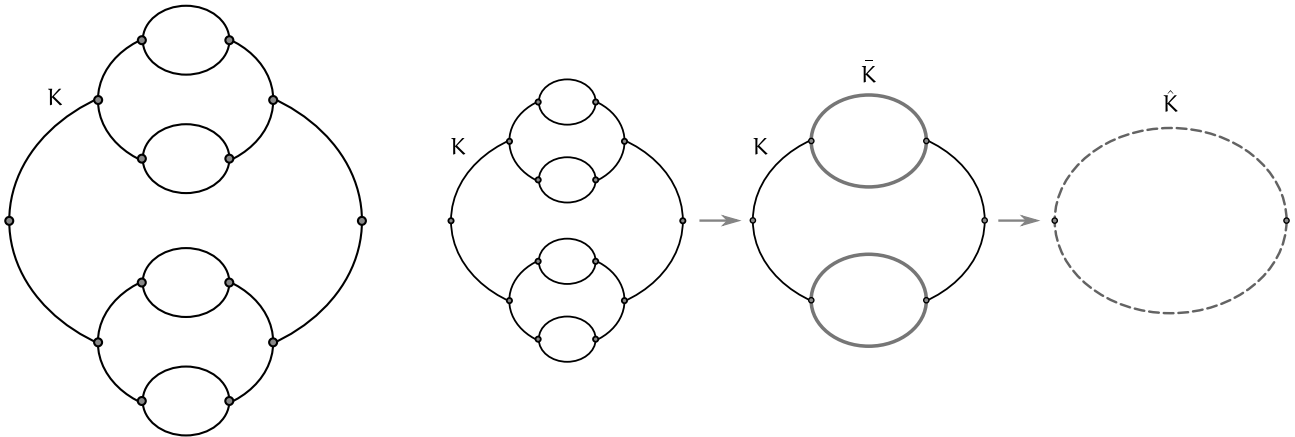
La energía por partícula es

$$\frac{E}{N} = -\frac{\partial \log Z_1}{\partial \beta} = 2kT + \epsilon_0 - \frac{\epsilon_0}{1 + \beta \epsilon_0} = \frac{1}{1 + \beta \epsilon_0} \left[ 2kT + 2\epsilon_0 + \beta \epsilon_0^2 \right]. \quad (33)$$

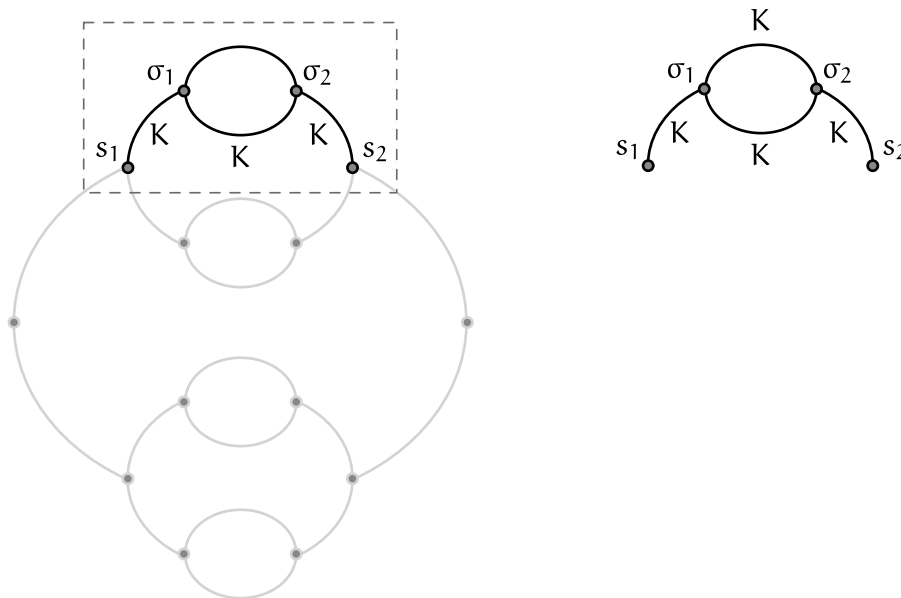
Esto coincide con la expresión (30).

Resulta interesante observar que, si  $\epsilon_0 = 0$ , la expresión (25) no diverge cuando  $z \rightarrow 1^-$ , lo que indica que para partículas de masa cero sí hay transición de fase. A este resultado se llega de manera directa asumiendo que las partículas son ultrarrelativistas. Ahora bien, que las partículas sean ultrarrelativistas no significa que su masa sea cero. Este problema muestra que, aún en el caso ultrarrelativista, cuando la masa de las partículas no es nula, estrictamente hablando no hay condensado en dos dimensiones en el límite termodinámico. De todas formas, la velocidad con la que la fracción de partículas en el estado fundamental tiende a cero cuando  $N \rightarrow \infty$  es tan lenta que, a todos los fines prácticos, esa fracción es finita para cualquier valor realizable de  $N$ .

■ **3.** Calcule la función de partición del sistema de la figura de la izquierda. Es un modelo de Ising con un espín en cada nodo. La energía de interacción entre espines vecinos es  $\epsilon(s, s') = -Jss'$  [por cada enlace]. Se define  $K = \beta J$ . El campo externo es nulo. La expresión de  $Z$  tiene que conducir manifiestamente a una expansión en potencias de  $\kappa = e^K$  y tiene que poder evaluarse en una calculadora usando sólo las operaciones de suma, resta, producto, división y exponenciación. *Ayuda:* elimine espines paso a paso, como en la figura de la derecha.



■ **Solución.** La idea del problema es ir eliminando espines sistemáticamente. Consideremos el siguiente conjunto de espines.



En la función de partición, los espines  $\sigma$  de este gráfico aparecen en un factor de la forma

$$e^{K(s_1\sigma_1 + s_2\sigma_2 + 2\sigma_1\sigma_2)}. \tag{34}$$

Este es el único lugar en donde aparecen estos dos espines  $\sigma$ . La suma sobre los espines  $\sigma$  genera un acoplamiento efectivo entre los espines  $s$ ,

$$\sum_{\sigma_1, \sigma_2} e^{K(s_1\sigma_1 + s_2\sigma_2 + 2\sigma_1\sigma_2)} = 2 \left[ e^{2K} \cosh K(s_1 + s_2) + e^{-2K} \cosh K(s_1 - s_2) \right] = ce^{\bar{K}s_1s_2}. \tag{35}$$

Las ecuaciones que determinan a  $c$  y  $\bar{K}$  son

$$\begin{aligned} 2(e^{2K} \cosh 2K + e^{-2K}) &= ce^{\bar{K}}, \\ 2(e^{2K} + 2e^{-2K} \cosh 2K) &= ce^{-\bar{K}}. \end{aligned} \quad (36)$$

De aquí obtenemos

$$\begin{aligned} 2\bar{K} &= \log \frac{A}{B}, \\ c^2 &= AB, \end{aligned} \quad (37)$$

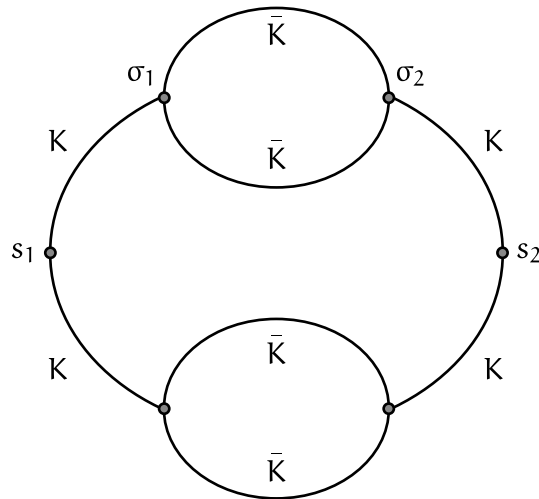
donde

$$\begin{aligned} A &= 2(e^{2K} \cosh 2K + e^{-2K}), \\ B &= 2(e^{2K} + e^{-2K} \cosh 2K). \end{aligned} \quad (38)$$

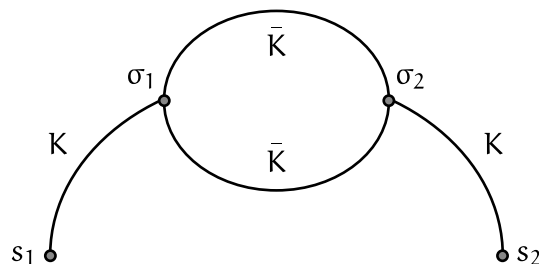
Por cada loop eliminado, se genera un factor  $c$ . De esta forma, la función de partición original puede escribirse como

$$Z = c^4 \bar{Z}, \quad (39)$$

donde  $\bar{Z}$  es la función de partición del sistema de la figura.



(Hemos renombrado los espines). Para calcular  $\bar{Z}$ , podemos repetir el proceso de eliminación, considerando ahora el subconjunto de espines de la siguiente figura.



Los espines  $\sigma$  aparecen en la función de partición  $\bar{Z}$  a través de un factor de la forma

$$e^{K(s_1\sigma_1+s_2\sigma_2)+2\bar{K}\sigma_1\sigma_2}. \quad (40)$$

La suma sobre los espines  $\sigma$  genera un acoplamiento efectivo entre los espines s:

$$\sum_{\sigma_1, \sigma_2} e^{K(s_1\sigma_1+s_2\sigma_2)+2\bar{K}\sigma_1\sigma_2} = 2 \left[ e^{2\bar{K}} \cosh K(s_1 + s_2) + e^{-2\bar{K}} \cosh K(s_1 - s_2) \right] = \hat{c} e^{\hat{K}s_1s_2}. \quad (41)$$

De aquí se obtiene

$$2\hat{K} = \log \frac{C}{D}, \quad (42)$$

$$\hat{c}^2 = CD,$$

donde

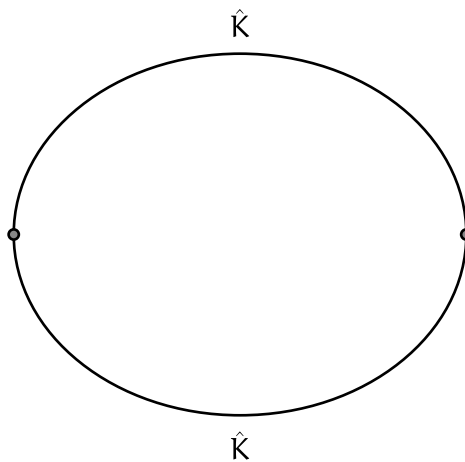
$$C = 2 \left( e^{2\bar{K}} \cosh 2K + e^{-2\bar{K}} \right), \quad (43)$$

$$D = 2 \left( e^{2\bar{K}} + e^{-2\bar{K}} \cosh 2K \right).$$

Luego, debido a que se eliminan dos de estos loops,

$$\bar{Z} = \hat{c}^2 \hat{Z}, \quad (44)$$

donde  $\hat{Z}$  es la función de partición del sistema de la figura.



Este último cálculo es trivial,

$$\hat{Z} = 4 \cosh 2\hat{K}. \quad (45)$$

Finalmente,

$$Z = 4c^4 \hat{c}^2 \cosh 2\hat{K}. \quad (46)$$

Esto se puede escribir de manera más explícita:

$$2 \cosh 2\hat{K} = 2 \cosh \log \frac{C}{D} = \frac{C}{D} + \frac{D}{C}, \quad (47)$$

$$2\hat{c}^2 \cosh 2\hat{K} = C^2 + D^2, \quad (48)$$

$$\begin{aligned} C^2 + D^2 &= 4 \left[ 4 \cosh 2K + (1 + \cosh^2 2K) \left( e^{4\bar{K}} + e^{-4\bar{K}} \right) \right] \\ &= 4 \left\{ 4 \cosh 2K + (1 + \cosh^2 2K) \left[ \left( \frac{A}{B} \right)^2 + \left( \frac{B}{A} \right)^2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (49)$$

Entonces,

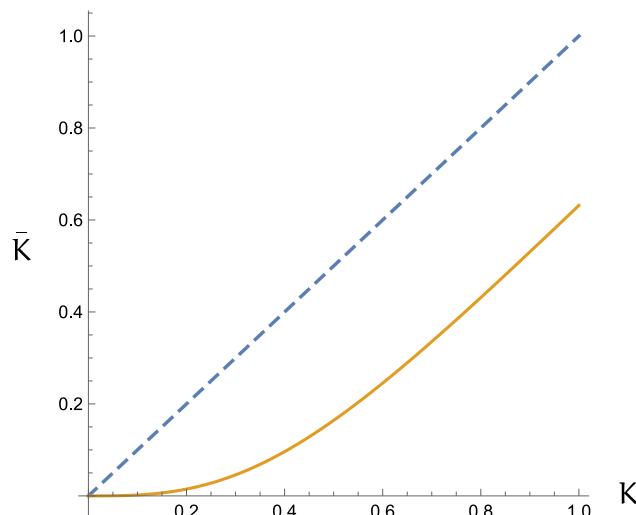
$$Z = 8 \left\{ 4A^2B^2 \cosh 2K + (1 + \cosh^2 2K) [A^4 + B^4] \right\}. \quad (50)$$

No se necesitó un esfuerzo sobrehumano para llegar hasta aquí. Ahora bien, evaluar esta expresión sí es bastante tedioso. El producto  $A^2B^2$  involucra nueve términos, y la suma  $A^4 + B^4$ , otros diez. Y esto sin expandir las funciones coseno hiperbólico. El resultado final, obtenido mediante un programa de cálculo simbólico, es

$$\begin{aligned} Z &= 2x^{20} + \frac{2}{x^{20}} + 20x^{16} + \frac{20}{x^{16}} + 80x^{14} + \frac{80}{x^{14}} + 158x^{12} + \frac{158}{x^{12}} + 416x^{10} \\ &\quad + \frac{416}{x^{10}} + 888x^8 + \frac{888}{x^8} + 1344x^6 + \frac{1344}{x^6} + 1824x^4 + \frac{1824}{x^4} + 2256x^2 + \frac{2256}{x^2} + 2408, \end{aligned} \quad (51)$$

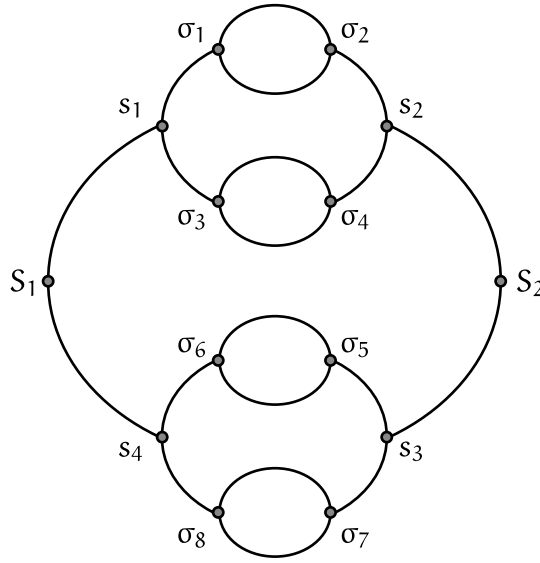
donde  $x = e^K$ .

■ Uno puede preguntarse si el sistema que resulta de iterar infinitamente la red tiene alguna transición de fase. Para eso, alcanza con ver si existe algún punto fijo no trivial de la transformación de grupo de renormalización para  $K$ . La respuesta es que no: sólo existen los puntos fijos  $K = 0$  y  $K \rightarrow \infty$ . La siguiente figura muestra la curva  $\bar{K}(K)$  comparada con la función identidad.





■ **Solución vía la matriz de transferencia.** Este camino es formalmente más sencillo, pero requiere familiaridad con las operaciones con índices. Nombremos a los espines como se muestra en la figura.



Debido a que hay un doble enlace entre los espines  $\sigma$ , estos espines interactúan mediante la matriz de transferencia

$$\bar{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} x^2 & x^{-2} \\ x^{-2} & x^2 \end{pmatrix}. \quad (52)$$

Todos los otros pares de vecinos interactúan vía la matriz

$$\mathbf{q} = \begin{pmatrix} x & x^{-1} \\ x^{-1} & x \end{pmatrix}. \quad (53)$$

Es fácil ver que la función de partición es

$$\begin{aligned} Z = & q_{s_1 s_1} q_{s_1 \sigma_1} \bar{q}_{\sigma_1 \sigma_2} q_{\sigma_2 s_2} q_{s_1 \sigma_3} \bar{q}_{\sigma_3 \sigma_4} q_{\sigma_4 s_2} q_{s_2 s_2} \\ & \times q_{s_2 s_3} q_{s_3 \sigma_5} \bar{q}_{\sigma_5 \sigma_6} q_{\sigma_6 s_4} q_{s_3 \sigma_7} \bar{q}_{\sigma_7 \sigma_8} q_{\sigma_8 s_4} q_{s_4 s_1}. \end{aligned} \quad (54)$$

Se sobreentiende que hay una suma sobre todos los espines. La suma sobre los espines  $\sigma$  forma algunos productos matriciales:

$$Z = q_{s_1 s_1} [(q \bar{q} q)_{s_1 s_2}]^2 q_{s_2 s_2} q_{s_2 s_3} [(q \bar{q} q)_{s_3 s_4}]^2 q_{s_4 s_1}. \quad (55)$$

Notar que lo que está elevado al cuadrado son los elementos de una matriz, no la matriz. Definiendo la matriz  $\hat{q}$  con elementos

$$(\hat{q})_{ss'} = [(q \bar{q} q)_{ss'}]^2, \quad (56)$$

queda

$$Z = \text{Tr}(q \hat{q} q^2 \hat{q} q) = \text{Tr}(q^2 \hat{q} q^2 \hat{q}) = \text{Tr}[(q^2 \hat{q})^2]. \quad (57)$$

Aquí usamos la propiedad cíclica de la traza:  $\text{Tr}(\mathbf{ABC}) = \text{Tr}(\mathbf{CAB})$ . No vale la pena calcular esta traza a través de los autovalores. Es más sencillo calcular explícitamente la matriz que aparece ahí y tomar la traza.

La expresión (57) es muy compacta, pero desarrollarla por extenso es trabajoso. Este método tiene la ventaja de que el resultado vale también cuando hay un campo externo, aunque requiere cierto cuidado. Si siguiéramos el primer método, sería necesario escribir las ecuaciones de renormalización del campo externo. También es fácil generalizar este método para sistemas con un mayor número de iteraciones en la construcción de la red.