Física Teórica 3 — segundo cuatrimestre de 2024

SEGUNDO PARCIAL – RESUELTO*

■ **1**. Un gas ideal **ultrarrelativista** de N electrones está contenido en una caja de volumen V. Los electrones interactúan con un campo magnético $\mathbf{H} = H\hat{z}$. La energía de interacción es $\epsilon_s = s\mu_e H$, 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. El sistema está a temperatura cero.

a) Escriba la ecuación que determina la energía de Fermi en función de N, V y H.

b) ¿Cuál es el valor máximo de la densidad tal que todos los electrones tienen la misma proyección del espín sobre el eje z? La respuesta debe quedar sólo en términos de H.

c) Escriba la magnetización por partícula M en función de la densidad y de H.

d) Calcule la susceptibilidad. El resultado debe quedar escrito sólo en términos de ϵ_F.

■ **Solución**. El número de partículas está determinado por la siguiente ecuación:

$$N = \frac{V}{h^3} \sum_{s=\pm 1} \int d^3p \, \frac{1}{1 + z^{-1} e^{\beta\epsilon(\mathbf{p},s)}}, \tag{1}$$

donde

$$\epsilon(\mathbf{p}, s) = pc + s\mu_e H. \tag{2}$$

A temperatura cero,

$$N = \frac{V}{h^3} \sum_{s=\pm 1} \int d^3p \, \Theta\Big(\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{p}, s)\Big) = \frac{4\pi V}{h^3} \sum_{s=\pm 1} \int_0^\infty dp \, p^2 \, \Theta\Big(\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{p}, s)\Big). \tag{3}$$

De modo que, escribiendo los dos términos de la suma,

$$N = \frac{4\pi V}{h^3} \left[\int_0^\infty dp \, p^2 \, \Theta\big(\epsilon_F - pc - \mu_e H\big) + \int_0^\infty dp \, p^2 \, \Theta\big(\epsilon_F - pc + \mu_e H\big) \right]. \tag{4}$$

Al integrar, hay que tener cuidado con las funciones escalón:

$$\int_0^\infty dx \, \Theta(a - x) f(x) = \Theta(a) \int_0^a dx \, f(x). \tag{5}$$

En definitiva, la relación buscada entre la energía de Fermi, H, N y V es

$$N = N_+ + N_- = \frac{4\pi V}{3(hc)^3} \Big[\Theta\big(\epsilon_F - \mu_e H\big) \left(\epsilon_F - \mu_e H\right)^3 + \Theta\big(\epsilon_F + \mu_e H\big) \left(\epsilon_F + \mu_e H\right)^3 \Big], \tag{6}$$

donde $N_\pm$ son las poblaciones de electrones con cada proyección del espín,

$$N_\pm = \frac{4\pi V}{3(hc)^3} \, \Theta\big(\epsilon_F \mp \mu_e H\big) \left(\epsilon_F \mp \mu_e H\right)^3. \tag{7}$$

*zanellaj@df.uba.ar

Cuando el campo es nulo, la energía de Fermi ϵ_0 está determinada por

$$N = 2\,\frac{4\pi V}{3(hc)^3}\epsilon_0^3. \tag{8}$$

Usando esta definición en la Ec. (7), queda

$$\frac{N_\pm}{N} = \frac{1}{2}\,\Theta\big(\epsilon_F \mp \mu_e H\big)\left(\frac{\epsilon_F \mp \mu_e H}{\epsilon_0}\right)^3, \tag{9}$$

y la Ec. (6) se puede reescribir como

$$\epsilon_0^3 = \frac{1}{2}\Big[\Theta\big(\epsilon_F - \mu_e H\big)\,(\epsilon_F - \mu_e H)^3 + \Theta\big(\epsilon_F + \mu_e H\big)\,(\epsilon_F + \mu_e H)^3\Big]. \tag{10}$$

Existe un régimen en el que los únicos niveles ocupados son lo que corresponden a la proyección del espín antiparalela al campo. Los otros niveles sólo empiezan a poblarse cuando $\epsilon_F > \mu_e|H|$. La Ec. (10) implica, entonces,

$$\epsilon_0^3 > 4(\mu_e|H|)^3. \tag{11}$$

Esto determina un valor máximo de la densidad, por debajo del cual todos los electrones tienen su proyección del momento magnético antiparalela al campo,

$$\left(\frac{N}{V}\right)_{\text{máx}} = \frac{32\pi}{3}\left(\frac{\mu_e|H|}{hc}\right)^3. \tag{12}$$

Debido a que el momento magnético del electrón es antiparalelo a su espín, la magnetización por partícula es

$$M = \frac{\mu_e}{N}(N_- - N_+) = \frac{\mu_e}{2}\left[\Theta\big(\epsilon_F + \mu_e H\big)\left(\frac{\epsilon_F + \mu_e H}{\epsilon_0}\right)^3 - \Theta\big(\epsilon_F - \mu_e H\big)\left(\frac{\epsilon_F - \mu_e H}{\epsilon_0}\right)^3\right]. \tag{13}$$

Para calcular la susceptibilidad, hay que estudiar la magnetización cuando $H \to 0$, en cuyo caso podemos asumir que $\epsilon_F > \mu_e|H|$,

$$M = \frac{\mu_e}{2}\left[\left(\frac{\epsilon_F + \mu_e H}{\epsilon_0}\right)^3 - \left(\frac{\epsilon_F - \mu_e H}{\epsilon_0}\right)^3\right]. \tag{14}$$

Teniendo en cuenta que ϵ_F es función de H y que, cuando $H = 0$, la energía de Fermi es ϵ_0,

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H}\Big|_{H=0} = \frac{3\mu_e}{2\epsilon_0}\left[\left(\frac{\partial \epsilon_F}{\partial H}\Big|_{H=0} + \mu_e\right) - \left(\frac{\partial \epsilon_F}{\partial H}\Big|_{H=0} - \mu_e\right)\right]. \tag{15}$$

No es necesario calcular la derivada de la energía de Fermi respecto de H, puesto que estos términos se cancelan. Entonces, la susceptibilidad es

$$\chi = \frac{3\mu_e^2}{\epsilon_0}. \tag{16}$$

■ **2**. Un gas ideal de bosones de espín cero y masa m está confinado en el interior de un cilindro de radio a y altura L, cuyo eje de simetría es el eje z. Además, existe un potencial armónico con simetría cilíndrica, $U(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m\omega^2\rho^2$. Se define $\alpha = \frac{1}{2}\beta m\omega^2 a^2$.

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, fijada la densidad, escriba la ecuación que determina la temperatura crítica.

c) Cuando $\omega = 0$, debe recuperarse la expresión de la temperatura crítica para el gas en una caja sin potencial, $T_c^{(0)}$. Cuando $\omega > 0$, $T_c = T_c^{(0)} + \Delta T_c$. Encuentre una expresión aproximada para ΔT_c asumiendo que $\alpha_c \ll 1$.

Fórmulas útiles:

$$
\begin{aligned}
g_\nu\left(e^{-\alpha}\right) &= \frac{\Gamma(1-\nu)}{\alpha^{1-\nu}} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!}\,\zeta(\nu-k)\alpha^k, \qquad \nu \notin \mathbb{Z};\\
g_\nu\left(e^{-\alpha}\right) &= \frac{(-1)^{\nu-1}}{(\nu-1)!}\left(\sum_{k=1}^{\nu-1}\frac{1}{k} - \log\alpha\right)\alpha^{\nu-1} + \sum_{\substack{k=0\\k\neq\nu-1}}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!}\,\zeta(\nu-k)\alpha^k, \qquad \nu \in \mathbb{Z}.
\end{aligned}
\tag{17}
$$

■ **Solución**. Llamemos y a la dirección según el eje del cilindro, para no interferir con la fugacidad. El logaritmo de la función de partición, separando la contribución del estado fundamental y escribiendo el resto de la suma mediante la aproximación semiclásica es

$$
\log\mathcal{Z} = -\log(1-z) - \frac{2\pi}{h^3}\int d^3p \int_0^L dy \int_0^a d\rho\,\rho\log\left\{1 - z\exp\left[-\beta\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\rho^2\right)\right]\right\}. \tag{18}
$$

Para eliminar parámetros dentro de la integral, definamos

$$
\mathbf{q} = \sqrt{\frac{\beta}{2m}}\,\mathbf{p}, \qquad x = \sqrt{\frac{\beta m\omega^2}{2}}\,\rho. \tag{19}
$$

Entonces, introduciendo el volumen $V = \pi a^2 L$,

$$
\log\mathcal{Z} = -\log(1-z) - \frac{8V}{\sqrt{\pi}\alpha\lambda^3}\int_0^\infty dq \int_0^{\sqrt{\alpha}} dx\; q^2 x\log\left\{1 - z\exp\left[-\left(q^2+x^2\right)\right]\right\}. \tag{20}
$$

Lo más sencillo ahora es integrar por partes en q,

$$
\begin{aligned}
\log\mathcal{Z} = -\log(1-z) - \frac{8V}{3\sqrt{\pi}\alpha\lambda^3}\int_0^{\sqrt{\alpha}} dx\; x\Bigg(& q^3\log\left\{1 - z\exp\left[-\left(q^2+x^2\right)\right]\right\}\Bigg|_0^\infty \\
& - 2\int_0^\infty dq\,\frac{q^4}{z^{-1}\exp(q^2+x^2) - 1}\Bigg).
\end{aligned}
\tag{21}
$$

El término integrado es cero en los dos límites y la integral restante, con el cambio de variable $Q = q^2$, es una de las funciones de Bose—Einstein. Así, es fácil demostrar que

$$\log \mathcal{Z} = -\log(1-z) + \frac{2V}{\alpha\lambda^3}\int_0^{\sqrt{\alpha}} dx\, x\, g_{5/2}\left(ze^{-x^2}\right). \tag{22}$$

A su vez, con el cambio de variable $u = ze^{-x^2}$, queda

$$\log \mathcal{Z} = -\log(1-z) + \frac{V}{\alpha\lambda^3}\int_{ze^{-\alpha}}^{z} du\, \frac{g_{5/2}(u)}{u} = -\log(1-z) + \frac{V}{\alpha\lambda^3}\left[g_{7/2}(z) - g_{7/2}\left(ze^{-\alpha}\right)\right]. \tag{23}$$

La relación entre el número de partículas y la fugacidad está dada por

$$N = z\frac{\partial \log \mathcal{Z}}{\partial z} = \frac{z}{1-z} + \frac{V}{\alpha\lambda^3}\left[g_{5/2}(z) - g_{5/2}(ze^{-\alpha})\right]. \tag{24}$$

Cuando $z = 1$, el número de partículas en los estados excitados es

$$N_{\text{exc}} = \frac{V}{\alpha\lambda^3}\left[\zeta\left(\tfrac{5}{2}\right) - g_{5/2}\left(e^{-\alpha}\right)\right]. \tag{25}$$

Este número es finito, de modo que habrá condensado a temperatura no nula y densidad finita. Fijada la densidad, la temperatura crítica está determinada por la condición

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{\alpha_c\lambda_c^3}\left[\zeta\left(\tfrac{5}{2}\right) - g_{5/2}\left(e^{-\alpha_c}\right)\right], \tag{26}$$

donde $\alpha_c = \frac{1}{2}\beta_c m\omega^2 a^2$.

Si $\alpha_c \ll 1$, debemos estudiar el comportamiento de $g_{5/2}(e^{-\alpha_c})$ cuando α_c tiende a cero. Usando las fórmulas del enunciado,

$$g_{5/2}(e^{-\alpha_c}) \simeq \zeta\left(\tfrac{5}{2}\right) - \alpha_c\zeta\left(\tfrac{3}{2}\right) + \frac{4\sqrt{\pi}}{3}\alpha_c^{3/2}.$$

Bajo esta aproximación, la condición (26) se escribe como

$$\frac{N}{V} \simeq \frac{1}{\lambda_c^3}\left[\zeta\left(\tfrac{3}{2}\right) - \frac{4\sqrt{\pi}}{3}\alpha_c^{1/2}\right]. \tag{27}$$

La solución de orden cero corresponde al problema usual del gas en la caja,

$$kT_c^{(0)} = \frac{h^2}{2\pi m}\left[\frac{1}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}\frac{N}{V}\right]^{2/3}. \tag{28}$$

La primera corrección está dada por

$$kT_c \simeq kT_c^{(0)}\left[1 - \frac{4\sqrt{\pi}}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}\alpha_c^{1/2}\right]^{-2/3} \simeq kT_c^{(0)}\left[1 + \frac{8\sqrt{\pi}}{9\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}\alpha_c^{(0)\,1/2}\right], \tag{29}$$

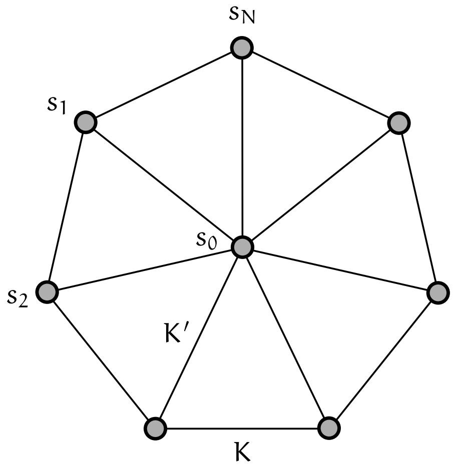
donde $\alpha_c^{(0)} = \dfrac{1}{2}\beta_c^{(0)} m\omega^2 a^2$.

■ **3**. En cada vértice de un polígono regular de N lados hay un espín. Los espines interactúan a primeros vecinos con una constante de acoplamiento J. En el centro del polígono hay otro espín, que está acoplado a cada uno de los espines de los vértices con una constante de acoplamiento J'. Además, hay un campo magnético externo B. Se definen $K = \beta J$, $K' = \beta J'$ y $b = \beta\mu B$, donde μ es el momento magnético de los espines.

a) Calcule la función de partición canónica del sistema.

b) Calcule el valor medio de los espines de los vértices y el valor medio del espín central.

Ayuda: escriba la función de partición como una suma de dos términos, uno correspondiente a $s_0 = 1$ y el otro a $s_0 = -1$. Para el ítem b, puede ser útil acoplar a cada tipo de espín con un campo distinto. Trate de dejar todo escrito de manera compacta en términos de los autovalores de la matriz de transferencia y de la magnetización por espín de la cadena infinita.



■ **Solución**. Siguiendo la notación de la figura, el hamiltoniano del sistema está dado por

$$-\beta H(\{s\}) = K(s_1 s_2 + \ldots + s_N s_1) + K' s_0 (s_1 + \ldots + s_N) + b(s_0 + \ldots + s_N). \qquad (30)$$

Agrupando los términos que son lineales en los espines de los vértices,

$$-\beta H(\{s\}) = K(s_1 s_2 + \ldots + s_N s_1) + (b + K' s_0)(s_1 + \ldots + s_N) + b s_0. \qquad (31)$$

Para los espines periféricos, fijar el valor de s_0 es equivalente a tener un campo efectivo

$$b_{s_0} = b + K' s_0. \qquad (32)$$

La función de partición puede escribirse, entonces, como la suma de las funciones de partición de dos cadenas cerradas, cada una con un campo efectivo y a menos de un factor multiplicativo dado por el término $e^{b s_0}$,

$$\mathcal{Z} = e^{b} Z(K, b_+) + e^{-b} Z(K, b_-)\,, \qquad (33)$$

donde

$$b_\pm = b \pm K'. \qquad (34)$$

Recordemos que

$$Z(K,b) = \lambda_+^N(K,b) + \lambda_-^N(K,b), \tag{35}$$

donde

$$\lambda_\pm = e^K\left(\cosh b \pm \sqrt{e^{-4K} + \sinh^2 b}\right). \tag{36}$$

Notar que el signo $\pm$ de λ no tiene nada que ver con el signo $\pm$ de b.

Para calcular los valores medios, conviene introducir temporalmente dos campos magnéticos distintos, b_0 y b, de modo que b_0 se acople al espín s_0 y b a los espines de los vértices. Entonces,

$$\mathcal{Z}(b,b_0) = e^{b_0} Z(K,b_+) + e^{-b_0} Z(K,b_-)\,. \tag{37}$$

El valor medio del espín central es

$$\langle s_0\rangle = \frac{\partial \log \mathcal{Z}(b,b_0)}{\partial b_0}\Big|_{b=b_0} = \frac{1}{\mathcal{Z}}\Big[e^b Z(K,b_+) - e^{-b} Z(K,b_-)\Big]. \tag{38}$$

El valor medio de cualquiera de los espines de los vértices es

$$\langle s\rangle = \frac{1}{N}\frac{\partial \log \mathcal{Z}(b,b_0)}{\partial b}\Big|_{b=b_0} = \frac{1}{N\mathcal{Z}}\left[e^b \frac{\partial Z(K,b_+)}{\partial b} + e^{-b}\frac{\partial Z(K,b_-)}{\partial b}\right]. \tag{39}$$

Aquí podemos usar el resultado de la cadena cerrada usual,

$$\frac{1}{N}\frac{\partial Z(K,b)}{\partial b} = \Big[\lambda_+(K,b)^N - \lambda_-(K,b)^N\Big] m(K,b), \tag{40}$$

donde

$$m(K,b) = \frac{\sinh b}{\sqrt{e^{-4K} + \sinh^2 b}} \tag{41}$$

es la magnetización por espín en una cadena infinita. Luego,

$$\begin{aligned}\langle s\rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}}\Big\{ & e^b\Big[\lambda_+(K,b_+)^N - \lambda_-(K,b_+)^N\Big] m(K,b_+) \\ & + e^{-b}\Big[\lambda_+(K,b_-)^N - \lambda_-(K,b_-)^N\Big] m(K,b_-)\Big\}.\end{aligned} \tag{42}$$