Termodinámica y Mecánica Estadística II

Guía 8 - Noviembre de 2009

Problema 1: Un recipiente de volumen V contiene M bosones de masa m y sin spin; cada uno de ellos puede ser un bosón libre (con energía total igual a la cinética) o acceder a un estado con energía $-\gamma$ ($\gamma > 0$).

a) Para una dada temperatura T, encuentre el número medio de partículas en el estado con energía $-\gamma$.

b) ¿Qué condiciones debe cumplir el potencial químico μ en este caso?

c) Calcule la temperatura crítica de condensación. Compare con el caso $\gamma = 0$.

Problema 2: Un modelo simplificado para un semiconductor intrínseco consiste en considerar un sistema de dos niveles, correspondientes a las bandas de valencia y conducción respectivamente. Las energías respectivas son ϵ_1 y ϵ_2 ($> \epsilon_1$), con la misma degeneración g en ambos niveles. Cuando el sistema cuenta con N electrones, todos están en la banda de valencia a T=0 K. La característica de semiconductor se introduce imponiendo $N = g$.

a) Determine las poblaciones respectivas N_1 y N_2 en los niveles ϵ_1 y ϵ_2 a temperatura T.

b) Calcule el potencial químico en función de la temperatura. ¿Cuánto vale la energía de Fermi?

c) Exprese N_1 y N_2 en función de g, kT y $\Delta\epsilon \equiv \epsilon_1 - \epsilon_2$. Determine P_1 y P_2, el número de "huecos" o estados vacíos en cada banda. Analice los límites para altas y bajas temperaturas.

Problema 3: *El gas de red:* Si *cubificamos* el espacio en celdas del tamaño de las moléculas del gas, entonces la parte configuracional de la función partición puede aproximarse por un modelo discreto introduciendo una variable de ocupación de sitio

$$n_i = \begin{cases} 1 & \text{si la celda } i \text{ esta ocupada} \\ 0 & \text{si la celda } i \text{ esta desocupada} \end{cases}$$

Entonces el Hamiltoniano para un sistema de n partículas sera

$$\mathcal{H}_n = -\sum_{(i,j)} K_{i,j}\, n_i\, n_j \quad ; \quad \text{sujeto al vinculo} \quad \sum_{i=1}^{N} n_i = n$$

donde la suma es sobre todos los pares de celdas de una red de N sitios.

a) Escriba la función partición y la función gran-partición. Vea que esta ultima es mapeable a la función partición del modelo de Ising en presencia de un campo externo:

$$\mathcal{H}_N = -\sum_{(i,j)} J_{i,j}\,\sigma_i\,\sigma_j - h\sum_i \sigma_i \quad ; \ \sigma_i = \pm 1$$

encuentre la relacion entre $(J_{i,j}, h)$ y $(K_{i,j}, \mu)$, donde μ es el potencial químico del gas.

b) Muestre que para el gas de red la densidad del gas ρ_g y la compresibilidad isotermica K_T estan relacionadas con m y χ_T del modelo de Ising de la siguiente manera (use el problema 2-b de la guía 6):

$$\rho_g = \frac{1}{2}(1+m) \quad ; \quad \frac{4}{v^2}K_T = \chi_T \quad ;$$

Problema 4: *La cadena de Ising con condiciones libres de contorno* El modelo de Ising en una cadena lineal de N sitios abierta (FBC, del inglés: *free boundary conditions*) con campo nulo tiene el Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -\sum_{i=1}^{N-1} J_i\,\sigma_i\,\sigma_{i+1}\ .$$

Muestre que las funciones partición de cadenas de $N-1$ y N sitios cumplen la relación

$$\mathcal{Z}_N \,=\, 2\,\cosh\left(\beta J_{N-1}\right)\,\mathcal{Z}_{N-1}$$

Use esto como una relación de recurrencia, escriba la condición inicial y calcule la función partición. Particularice para el caso $J_i \,=\, J\,; i=1,\cdots,N-1$, calcule la energía libre y muestre que el sistema no presenta transición de fase.

Problema 5: *La cadena de Ising con condiciones períodicas de contorno : La matriz de Transferencia* Resuelva ahora el Hamiltoniano de Ising en una cadena lineal con PBC (del inglés: *periodic boundary conditions*) y campo externo no nulo:

$$\mathcal{H} \,=\, -J\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\,\sigma_{i+1} \,-\, \mu\,H\sum_{i=1}^{N}\sigma_i$$

imponiendo PBC: $\sigma_{N+1} \,\equiv\, \sigma_1$.

a) Haga un diagrama de fase a temperatura nula (esto es, estudio del estado fundamental) para $-\infty \,<\, J,H \,<\infty$.

b) Escriba la función de partición como la traza de un producto de N matrices identicas simétricas de 2×2: $\mathcal{Z}_N \,=\, tr\{\mathcal{T}^N\}$. Calcule los autovalores $\lambda_\pm$ de $\mathcal{T}$ y muestre que $\lambda_+ \,>\, \lambda_- \;\forall\, T>0$.

c) Calcule la energía libre. Compare la expresión obtenida a campo $H=0$ con la que obtuvo en el caso de FBC antes y despues de tomar el límite termodinámico. Compruebe que no existe transición de fase para $T>0$.

d) Cálcule la magnetización $m(T,H)$ y compruebe, en concordancia con lo demostrado en el punto anterior, que el sistema no presenta magnetización espontanea. Calcule la suceptibilidad magnética $\chi(T,H)$. Analice su comportamiento para $T\to 0$ y verifique que a altas temperaturas obedece la ley de Curie.

Problema 6: *Una solución de campo medio del modelo de Ising* Sea el Hamiltoniano de Ising ferromagnético en una red arbitraria:

$$\mathcal{H} \,=\, -J\sum_{<i,j>}\sigma_i\,\sigma_j \,-\, \mu H\sum_{i}\sigma_i$$

donde la primera suma es sobre todos los pares primeros vecinos, mientras la segunda es sobre todos los sitios de red.

a) Vea que el termino de interacción entre espines se puede escribir como

$$\sigma_i\,\sigma_j \,=\, (\sigma_i \,-\, \langle\sigma_i\rangle)\;(\sigma_j \,-\, \langle\sigma_j\rangle) \,+\, \sigma_i\,\langle\sigma_j\rangle \,+\, \langle\sigma_i\rangle\,\sigma_j \,-\, \langle\sigma_i\rangle\,\langle\sigma_j\rangle$$

b) Genericamente llamamos campo medio a aproximaciones que desprecian fluctuaciones. En este caso, las fluctuaciones de los espines estan descritas en el primer término de la expresión anterior. Ademas, por invarianza traslacional $\langle\sigma_i\rangle \,=\, m\;;\; i=1,\cdots N$. Muestre que podemos escribir entonces un Hamiltoniano campo medio como

$$\mathcal{H}_{cm} \,=\, -Jqm\sum_{i}\sigma_i \,+\, \frac{q}{2}NJm^2 \,-\, \mu H\sum_{i}\sigma_i$$

donde q es la coordinación de la red = número de primeros vecinos de un sitio arbitrario ($q=2d$ para una red hipercúbica en d dimensiones).

c) Muestre que la magnetización por spin m obedece la ecuación fenomenológica de Curie-Weiss de ferromagnetísmo que vimos en Termo I:

$$m \,=\, \tanh\left[\beta(\lambda m \,+\, \mu H)\right]$$

con $\lambda \,=\, qJ$. Muestre que la temperatura crítica viene dada por $k_B T_c \,=\, q\,J$. Note que este modelo predice ferromagnetismo en $d=1$ mientras que la solución exacta muestra que esto no es asi, de argumentos que expliquen este resultado.

d) Calcule la energía interna y el calor específico a campo nulo. Muestre que este ultimo es discontinuo en $T=T_c$, de el valor de la discontinuidad $\Delta C(T_c)$.