Termodinámica y Mecánica Estadística II

http://www.famaf.unc.edu.ar/∼serra/termoII_2017.html

Guía 8 - Noviembre de 2017

Problema 1: *Paramagnetismo de Pauli.* Sea un electrón en una caja cúbica de lado L en presencia de un campo magnético $\vec{H} = H\hat{k}$, su Hamiltoniano, despreciando el acople con orbital es

$$h = \frac{p^2}{2m} - \mu_0 H \sigma_z$$

donde μ_0 es el magnetón de Bohr y σ_z la correspondiente matriz de Pauli. Asuma un ensamble de estas partículas (fermiones) no interactuantes.

a) Calcule la función gran partición.

b) Calcule la densidad de particulas con spin up y down $n_\pm = \langle N_\pm \rangle / \langle N \rangle$. Muestre que la densidad de magnetización puede escribirse como

$$m(T,H) = (n_+ - n_-)\mu_0 \,.$$

c) Verifique que $m(T,H)$ tiende a altas temperaturas al resultado clásico conocido como Paramagnetismo de Langevin, obtenido en el problema 13 de la guía 4.

d) Para bajas temperaturas, discuta en particular el caso $T = 0$. Muestre que en el límite de bajas temperaturas y campos chicos se obtiene

$$m(T,H) = \frac{3}{2}\left(1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{T}{T_F}\right)^2\right)\frac{\mu_0^2}{\varepsilon_F} H + O(H^2, (T/T_F)^3) \,.$$

Problema 2:

a) Muestre que si $f(x)$ una función analítica en $x = 0$ y $\sigma = \pm 1$ es una variable "tipo" Ising, entonces

$$f(\alpha\sigma) = f_p(\alpha) + f_i(\alpha)\,\sigma$$

donde α es un escalar y f_p y f_i son la proyección par e impar de f respectivamente.

b) Muestre que el Hamiltoniano de Ising mas general posible con interacción de pares y de sitios es

$$\mathcal{H} = \sum_{(i,j)}^{N} J_{ij}\,\sigma_i\sigma_j - \mu_0 \sum_{i=1}^{N} H_i\,\sigma_i$$

donde H_i se interpreta como el valor de un campo en el sitio i.

Problema 3: *El modelo de Ising con campo en $d = 1$: La matriz de transferencia.* Considere el modelo de Ising con interacción primeros vecinos en $d = 1$ con condiciones períodicas de contorno,

a) Muestre que la función partición puede escribirse como $Z_N = tr\left(T^N\right)$, donde T es la matriz de transferencia

$$T = \begin{pmatrix} e^{K-h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K+h} \end{pmatrix} \; ; \; K = \beta J \; ; \; h = \beta\mu_0 H \,.$$

b) Pruebe que la energía libre toma la forma

$$f(T,H) \;=\; -k_BT\ln\left(\lambda_+\right),$$

donde λ_+ es el mayor autovalor de T. Calcule explicitamente λ_+.

c) Muestre que la magnetización es

$$m(T,H) \;=\; \frac{\sinh\left(\beta\mu_0H\right)\,\mu_0}{\sqrt{\sinh^2\left(\beta\mu_0H\right)+e^{-4\beta J}}}\,.$$

d) Calcule la suceptibilidad magnética a campo nulo y muestre que a altas temperaturas obedece la ley de Curie.

Problema 4: *El modelo de Ising a campo nulo en $d=1$: solución iterativa.* Considere el modelo de Ising con interacción primeros vecinos en ausencia de campo ($H=0$) en $d=1$ con condiciones de contorno libres,

a) Muestre que la función partición cumple la relación de recurrencia

$$Z_N \;= 2\cosh\left(\beta J\right)Z_{N-1}\,.$$

b) Calcule explicitamente $Z_{N=2}$ y use este resultado como "condición inicial"para obtener explicitamente

$$Z_N \;= 2^N\cosh^{N-1}\left(\beta J\right).$$

c) Calcule la energía libre $f(T)$. Compruebe que esta coincide con $f(T,H=0)$ calculada en el punto (b) del problema anterior.

d) Definimos la función de correlación de spines separados a una distancia l como

$$\Gamma_l \;=\; \langle\left(\sigma_i-\langle\sigma_i\rangle\right)\left(\sigma_{i+l}-\langle\sigma_{i+l}\rangle\right)\rangle\,,$$

que en $d=1$, $H=0$ se reduce a (justifique)

$$\Gamma_l \;=\; \langle\sigma_i\,\sigma_{i+l}\rangle\,.$$

Muestre que en este caso, en el límite termodinámico obtenemos un decaimiento exponencial de la función correlación

$$\lim_{N\to\infty}\Gamma_l \;=\; e^{-l/\xi(T)}\,,$$

donde $\xi(T)$ se denomina longitud de correlación. Encuentre la expresión explícita de $\xi(T)$.

Ayuda: asuma que la interacción depende del sitio, $\mathcal{H}=-\sum_i J_i\sigma_i\sigma_{i+1}$, recalcule ahora $Z_N(\{J_i\})$, use que

$$\frac{\partial Z_N(\{J_i\})}{\partial J_k} \;=\; \beta\sum_\sigma\sigma_k\sigma_{k+1}e^{-\beta\mathcal{H}}\,,$$

y tome $J_i=J\;\forall i$ al final del calculo.

Problema 5: *El modelo de Ising a campo nulo en $d=1$: independencia de las condiciones de contorno.* Considere el modelo de Ising con interacción primeros vecinos en ausencia de campo ($H=0$) en $d=1$ con condiciones de contorno fijas, esto es los valores de los spines extremos de la cadena, σ_1 y σ_N, toman un valor fijo. Podemos asi definir 4 funciones de particion distintas: $Z_N(+,+)$, $Z_N(+,-)$, $Z_N(-,+)$, $Z_N(-,-)$:

$$Z_N(\sigma_1,\sigma_N) \;=\; \sum_{\sigma_2,\ldots,\sigma_{N-1}} e^{-\beta\mathcal{H}(\{\sigma_i\})}\,.$$

Definiendo los vectores

$$u(+) \;=\; \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \quad;\quad u(-) \;=\; \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

a) Muestre que $Z_N(\sigma_1, \sigma_N)$ se puede escribir como:

$$Z_N(\sigma_1, \sigma_N) \,=\, (u(\sigma_1))^\dagger \, T^{N-1} u(\sigma_N)\,,$$

donde T es la matriz de transferencia definida en el problema 3 con $h = 0$.

b) Calcule los autovalores y autovectores de T y use la expresión anterior para mostrar que:

$$Z_N(+,+) \,=\, Z_N(-,-) \,=\, 2^{N-2}\left(\cosh^{N-1}(K) + \sinh^{N-1}(K)\right)$$

$$Z_N(+,-) \,=\, Z_N(-,+) \,=\, 2^{N-2}\left(\cosh^{N-1}(K) - \sinh^{N-1}(K)\right)\,.$$

c) Calcule las correspondientes energías libres y muestre que ambas dan el mismo resultado que las obtenidas en los problemas 3 y 4. Completamos asi la prueba de que la termodinámica del modelo de Ising en $d = 1$ **no** depende de las condiciones de contorno (la extensión a $H \neq 0$ es engorrosa, pero directa).

Problema 6: *Modelo de Ising en dimensión 2:* A partir de las expresiones dadas en el teórico para la energía interna y la magnetización espontanea del modelo de Ising en la red cuadrada, calcule los exponentes críticos α y β.

Problema 7: *Una solución de campo medio del modelo de Ising.* Sea el Hamiltoniano de Ising ferromagnético con interacción primeros vecinos en una red arbitraria:

$$\mathcal{H} \,=\, -J \sum_{<i,j>} \sigma_i\,\sigma_j \,-\, \mu_0 H \sum_i \sigma_i$$

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, asumiendo invarianza traslacional $\langle\sigma_i\rangle \,=\, m$; $i \,=\, 1,\cdots N$. Muestre que podemos escribir entonces un Hamiltoniano campo medio como

$$\mathcal{H}_{cm} \,=\, -Jqm \sum_i \sigma_i \,+\, \frac{q}{2} N J m^2 \,-\, \mu_0 H \sum_i \sigma_i$$

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:

$$m \,=\, \tanh\left[\beta(\lambda m \,+\, \mu_0 H)\right]$$

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. Calcule el exponente crítico β.

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 $\Delta C(T_c)$.

Problema 8: *El modelo de Potts a campo nulo en $d = 1$: solución por Matriz de Transferencia.* Considere el modelo de Potts de p estados con interacción primeros vecinos en ausencia de campo ($H = 0$) en $d = 1$ con condiciones de contorno periódicas,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{N} \delta_{s_i, s_{i+1}} \quad ; \quad s_{N+1} = s_1 \; ; \; s_i = 1, \ldots, p \, .$$

a) Utilice el método de la matriz de transferencia para escribir $Z_N = tr(T^N)$, donde T es una matriz simétrica de $p \times p$. De la expresión explícita de T.

b) Muestre que T puede escribirse como $T = a\,I + b\,M$ donde I es la matriz identidad y los elementos de M son $M_{i,j} = 1$, ambas matrices $p \times p$. Determine las constantes a y b.

c) Muestre que el vector con componentes $u_i = 1, \; i = 1, \cdots, p$ es un autovector de M con autovalor no nulo y que todo vector normal a $\vec{u}$ es autovector de M con autovalor nulo. A partir de estos resultados, calcule el espectro de T.

d) Calcule $F_N(T)$ y $S_N(T)$. Estudie el límite $T \to 0$ y explique los resultados obtenidos.

e) Calcule ahora en el límite termodinámico $f(T)$ y $s(T)$, analice los resultados y comparelos con los obtenidos el punto anterior.

Problema 9: *Modelos equivalentes al modelo de Ising*

a) *El gas de red.* Muestre que para un gas de red la densidad del fluido ρ, el calor específico C_v, la compresibilidad isotermica K_T estan relacionadas con m, χ_T y C_m del modelo de Ising de la siguiente manera:

$$\rho = \frac{1}{2}(1 + m) \quad ; \quad \frac{4}{v^2} K_T = \chi_T \quad ; \quad \frac{1}{v} C_v = C_m \, .$$

Calcule la presión y el volumen específico en función de la temperatura y el "campo externo" del modelo de Ising equivalente, muestre que cualitativamente el modelo reproduce correctamente la transición de fase gas-líquido para dimensiónes mayores que uno.

b) *La aleación binaria.* Encuentre la relación entre los parámetros Φ_{ij}^{AA}, Φ_{ij}^{BB}, Φ_{ij}^{AB} de una aleación binaria y los parámetros J_{ij} y H del modelo de Ising antiferromagnético. Interprete el modelo de Ising a campo nulo en términos de la aleación binaria. Muestre que la aleación con igual número de átomos de tipo A y de tipo B corresponde al modelo de Ising con magnetización nula. Discuta el caso ferromagnético en términos de la aleación binaria. Muestre que la aleación con igual número de átomos de tipo A y de tipo B corresponde siempre al modelo de Ising con magnetización nula. Interprete el diagrama de fases a temperatura nula de Ising $d = 1$ para el caso de la aleación binaria.