

Problema 1.— Se tiene un sistema que consiste en una red de N espines que sólo pueden tomar los valores $+1$ o -1 respecto a un eje (el eje z por ejemplo), es decir, que sólo pueden orientarse paralela o antiparalelamente al mencionado eje. Para este sistema, se supone que el hamiltoniano se puede escribir como

$$H(s_1, s_2, \dots, s_N) = J - \frac{J}{N} \left(\sum_{i=1}^N s_i \right)^2$$

donde J es una constante de interacción, las variables de espín s_i sólo pueden tomar los valores $+1$ o -1 , y hemos escrito explícitamente $H(s_1, s_2, \dots, s_N)$ para indicar que el hamiltoniano depende de las variables de espín.

(a) Demostrar que, utilizando la identidad

$$e^{a^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2} + \sqrt{2}ax} dx$$

la función de partición del sistema $Z_N = \sum_{s_i=\pm 1} e^{-\beta H}$ se puede escribir como (con $\beta^{-1} = kT$)

$$Z_N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\beta J} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2}} \left\{ 2 \cosh \left[\left(2\beta \frac{J}{N} \right)^{1/2} x \right] \right\}^N dx$$

(b) Haciendo en la ecuación anterior para la función de partición el cambio de variable $x = \sqrt{N}y$, y aplicando la fórmula aproximada (válida cuando $N \gg 1$)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left\{ e^{-\frac{y^2}{2}} \cosh \left[(2\beta J)^{1/2} y \right] \right\}^N dy = \max_{-\infty < y < \infty} \left\{ e^{-\frac{y^2}{2}} \cosh \left[(2\beta J)^{1/2} y \right] \right\}^N$$

donde $\max_{-\infty < y < \infty} [f(y)]$ indica el valor máximo de la función en el intervalo especificado, demostrar que, en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$, la energía libre de Helmholtz por espín puede expresarse formalmente como

$$\beta F(T) = -\ln \left[2 \max_{-\infty < y < \infty} \left\{ e^{-\frac{y^2}{2}} \cosh \left[(2\beta J)^{1/2} y \right] \right\} \right]$$

(c) Hallar la ecuación que debe cumplir la variable y en la expresión para la energía libre de Helmholtz del apartado anterior, y demostrar que existe una temperatura crítica $T_c = 2J/k$, tal que si $T < T_c$ se tiene $F(T) = -kT \ln 2 + g(T)$, donde $g(T) \neq 0$ es una función de la temperatura (que no es necesario especificar en este problema).

Solución:

(a) La función de partición del sistema se escribe

$$Z_N = \sum_{s_i=\pm 1} e^{-\beta H} = e^{-\beta J} \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \exp \left[\beta J \left(\sum_{i=1}^N \frac{s_i}{\sqrt{N}} \right)^2 \right] \quad (1)$$

Llamando $a^2 = \beta J \left(\sum_{i=1}^N \frac{s_i}{\sqrt{N}} \right)^2$ y utilizando la identidad del enunciado del problema, podemos escribir (1) como

$$\begin{aligned} Z_N &= \frac{e^{-\beta J}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2/2} \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \exp \left[x \sqrt{\frac{2\beta J}{N}} \sum_{i=1}^N s_i \right] \\ &= \frac{e^{-\beta J}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2/2} \sum_{s_1=\pm 1} e^{x \sqrt{\frac{2\beta J}{N}} s_1} \sum_{s_2=\pm 1} e^{x \sqrt{\frac{2\beta J}{N}} s_2} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} e^{x \sqrt{\frac{2\beta J}{N}} s_N} \end{aligned} \quad (2)$$

Pero, además, $\sum_{s_1=\pm 1} e^{x\sqrt{\frac{2\beta J}{N}}s_1} = 2 \cosh \left[x\sqrt{\frac{2\beta J}{N}} \right]$, por lo que, finalmente,

$$Z_N = \frac{e^{-\beta J}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} \left\{ 2 \cosh \left[x\sqrt{\frac{2\beta J}{N}} \right] \right\}^N dx \quad (3)$$

(b) Haciendo la sustitución $x = y\sqrt{N}$, y usando la fórmula aproximada del enunciado, la función de partición (3) se puede escribir como

$$\begin{aligned} Z_N &= \sqrt{\frac{N}{2\pi}} e^{-\beta J} 2^N \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ e^{-y^2/2} \cosh \left[\sqrt{2\beta J} y \right] \right\}^N dy \\ &= \sqrt{\frac{N}{2\pi}} e^{-\beta J} 2^N \max_{-\infty < y < \infty} \left\{ e^{-\frac{y^2}{2}} \cosh \left[(2\beta J)^{1/2} y \right] \right\}^N \end{aligned} \quad (4)$$

La energía libre de Helmholtz por espín se calcula ahora, en el límite termodinámico, a partir de la función de partición

$$\begin{aligned} F(T) &= -kT \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N} \ln Z_N \right) = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \left(\frac{1}{2} \ln N - \frac{1}{2} \ln 2\pi - \beta J + N \ln 2 \right. \\ &\quad \left. + N \ln \left[\max_{-\infty < y < \infty} \left\{ e^{-\frac{y^2}{2}} \cosh \left[(2\beta J)^{1/2} y \right] \right\} \right] \right) \end{aligned} \quad (5)$$

de donde nos queda, finalmente,

$$\beta F(T) = -\ln \left[2 \max_{-\infty < y < \infty} \left\{ e^{-\frac{y^2}{2}} \cosh \left[(2\beta J)^{1/2} y \right] \right\} \right] \quad (6)$$

(c) En primer lugar, calculamos la ecuación que debe verificar la variable y para hacer máxima la expresión entre corchetes en (6)

$$\frac{d}{dy} \left(e^{-\frac{y^2}{2}} \cosh \left[(2\beta J)^{1/2} y \right] \right) = 0 \quad \Rightarrow \quad y = \sqrt{2\beta J} \tanh \left[(2\beta J)^{1/2} y \right] \quad (7)$$

La ecuación (7) es una ecuación trascendente que no puede resolverse analíticamente para y . Para encontrar los valores de y que satisfacen la ecuación, lo mejor es usar un método gráfico, dibujando cada uno de los miembros de la ecuación y viendo para que valores de los parámetros las dos curvas se cortan. Es fácil ver que $y = 0$ es siempre una solución de la ecuación y que, además, esta solución es la única si $2\beta J < 1$. Por el contrario, si $2\beta J > 1 \Rightarrow T < 2J/k$, además de la solución $y = 0$ existe otra con $y \neq 0$ (el valor preciso de y dependerá, obviamente, de los valores numéricos de T , J y k). De esta forma, definiendo una temperatura crítica $T_c = \frac{2J}{k}$, se tiene:

— si $T > T_c$, la única solución de (7) es $y = 0$, por lo que

$$\max_{-\infty < y < \infty} \left\{ e^{-\frac{y^2}{2}} \cosh \left[(2\beta J)^{1/2} y \right] \right\} = 1 \quad \Rightarrow \quad F(T) = -kT \ln 2 \quad (8)$$

— si $T < T_c$ existe, también, una solución de (7) con $y \neq 0$, por lo que

$$\max_{-\infty < y < \infty} \left\{ e^{-\frac{y^2}{2}} \cosh \left[(2\beta J)^{1/2} y \right] \right\} \neq 1$$

y

$$F(T) = -kT \ln 2 + g(T) \quad (9)$$

donde $g(T) = -kT \ln \left[\max_{-\infty < y < \infty} \left\{ e^{-\frac{y^2}{2}} \cosh \left[(2\beta J)^{1/2} y \right] \right\} \right] \neq 0$ es una función de la temperatura.

Problema 2.— Se considera un gas ideal relativista formado por bosones, de forma que la relación entre la energía y el momento es $\varepsilon = cp$. Además, para este tipo de gas se cumple que el potencial químico es cero, es decir, $\mu = 0$. Se pide:

(a) Demostrar que la densidad de estados $D(\varepsilon)$ viene dada por la expresión

$$D(\varepsilon) = \frac{4\pi gV}{h^3 c^3} \varepsilon^2$$

(b) Demostrar que, para este tipo de gas, se verifica $PV = U/3$.

(c) Demostrar, sin necesidad de calcular explícitamente ninguna integral, que la función de Helmholtz F es proporcional a T^4 , mientras que la capacidad calorífica a volumen constante C_V es proporcional a T^3 .

Solución:

(a) El número de estados corpusculares en un elemento de volumen del espacio fásico viene dado por

$$\frac{g}{h^3} d^3q d^3p = \frac{g}{h^3} d^3q \sin \alpha d\alpha d\beta p^2 dp \quad (1)$$

donde $g = 2s + 1$ es el factor de multiplicidad de espín.

Suponiendo que los niveles de energía están muy juntos, las sumas sobre los estados de energía individuales pueden sustituirse por integrales sobre el volumen del espacio fásico, de forma que, para el número medio de partículas, se puede poner

$$\bar{N} = \sum_j \bar{n}_j(\varepsilon) \approx \int_0^\infty D(\varepsilon) n(\varepsilon) d\varepsilon \quad (2)$$

donde $D(\varepsilon)$ es la densidad de estados. Usando (1) se tiene

$$\begin{aligned} \bar{N} &= \sum_j \bar{n}_j(\varepsilon) \approx \frac{g}{h^3} \int \cdots \int n(\varepsilon) d^3q d^3p = \frac{gV}{h^3} \int_0^{2\pi} d\beta \int_0^\pi \sin \alpha d\alpha \int_0^\infty n(\varepsilon) p^2 dp \\ &= \frac{4\pi gV}{h^3} \int_0^\infty n(\varepsilon) p^2 dp = \frac{4\pi gV}{h^3 c^3} \int_0^\infty \varepsilon^2 n(\varepsilon) d\varepsilon \end{aligned} \quad (3)$$

donde, para llegar a la última igualdad, hemos usado que $\varepsilon = cp$. Comparando ahora (2) con (3), nos queda

$$D(\varepsilon) = \frac{4\pi gV}{h^3 c^3} \varepsilon^2 \quad (4)$$

(b) El gran potencial viene dado por la expresión

$$\Omega = -PV = -kT \ln \mathcal{Z} \quad (5)$$

donde, teniendo en cuenta que $\mu = 0$, e integrando por partes para eliminar el logaritmo,

$$\begin{aligned} \ln \mathcal{Z} &= - \int_0^\infty D(\varepsilon) \ln(1 - e^{-\beta\varepsilon}) d\varepsilon = - \frac{4\pi gV}{(hc)^3} \int_0^\infty \varepsilon^2 \ln(1 - e^{-\beta\varepsilon}) d\varepsilon \\ &= \frac{4\pi gV}{(hc)^3} \frac{\beta}{3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon \end{aligned} \quad (6)$$

Por otra parte

$$U = \int_0^\infty \frac{\varepsilon D(\varepsilon)}{e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon = \frac{4\pi gV}{(hc)^3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon \quad (7)$$

por lo que, comparando (5), (6) y (7), nos queda

$$PV = \frac{U}{3} \quad (8)$$

(c) Haciendo en (7) el cambio $\beta\varepsilon = x$, podemos escribir

$$U = \frac{4\pi gV}{(hc)^3} \frac{1}{\beta^4} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{4\pi gVI}{(hc)^3} (kT)^4 \Rightarrow U \sim T^4 \quad (9)$$

ya que $I = \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$ es un número (de hecho $I = \pi^4/15$).

La función de Helmholtz se escribe, teniendo en cuenta que, en nuestro caso, $\mu = 0$, como

$$F = U - TS = \Omega + \mu N \underset{(\mu=0)}{=} \Omega = -PV = -\frac{U}{3} \Rightarrow F \sim T^4 \quad (10)$$

y como, por otra parte, $C_V = (\partial U / \partial T)_V$, tenemos

$$C_V \sim T^3 \quad (11)$$