## Grado en Física, Curso 2023-2024

## Mecánica Estadística

# Problemas

## Tema 5: Sistemas de partículas interactuantes

1. La función de partición para un gas clásico con $N$ partículas de la misma masa $m$ con interacción entre sus partículas dependiente únicamente de distancias entre dos pares de átomos se puede aproximar a:

$$Z = \frac{1}{N!}\left(\frac{2\pi m}{h_0^2\beta}\right)^{3N/2} V^N \left(1 + \frac{N^2}{2}\frac{I(\beta)}{V}\right)$$

donde

$$I(\beta) = 4\pi \int_0^\infty dr\, r^2 (e^{-\beta u(r)} - 1)$$

siendo $u(r)$ la dependencia de la energía de interacción con la distancia entre dos partículas. Calcula la energía media del sistema y la presión media para el siguiente potencial de interacción (Sutherland):

$$u(r) = \begin{cases} \infty & \text{si } r < r_0 \\ -u_0 \left(\frac{r_0}{r}\right)^s & \text{si } r \geq r_0 \end{cases} \tag{1}$$

donde $r$ es la distancia entre partículas, $r_0$ indica la separación mínima entre partículas y $u_0$ el valor de la energía mínima del potencial. ¿Cómo se relacionan los resultados de la presión que has obtenido con la ecuación de van der Waals que se discutió en Termodinámica? Repite el cálculo para el potencial de esferas rígidas:

$$u(r) = \begin{cases} \infty & \text{si } r < r_0 \\ 0 & \text{si } r \geq r_0 \end{cases} \tag{2}$$

2. En la aproximación de campo medio la función de partición para un gas no-ideal de $N$ partículas a temperatura constante $T$ puede escribirse como:

$$Z = \frac{1}{N!}\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3N/2} \left[(V - V_x)e^{-\beta\langle U_e\rangle}\right]^N$$

   (a) Explica el significado de $V_x$ y de $\langle U_e\rangle$.

(b) Teniendo en cuenta que $\langle U_e \rangle = \frac{N}{2}\langle u \rangle$, donde $\langle u \rangle$ es la energía media entre moléculas, calcula $\langle U_e \rangle$ considerando el potencial de interacción de Sutherland.

(c) Calcula $V_x$ en términos del radio de la molécula $r_0$ del potencial de Sutherland. Ten en cuenta que el número de parejas de interacción se puede aproximar a $N^2/2$.

3. Muestra que si $J > 0$ y el campo magnético externo $H$ es nulo, la menor energía para el modelo de Ising a primeros vecinos con una red cúbica es: $E = -DNJ$ donde $D$ es la dimensionalidad y $N$ el número de átomos de la red. (Pista: calcula el número de primeros vecinos en una red cúbica con 1, 2 y 3 dimensiones). Calcula la energía del estado fundamental para el caso de una red triangular en dos dimensiones con el modelo de Ising.

4. Muestra que la energía media para $N$ partículas a temperatura constante $T$ con spín $\pm 1/2$ interactuantes según el modelo de Ising y en la aproximación de campo medio viene dada por: $\langle E \rangle = -N\mu H m - (1/2)JNzm^2$ donde $m = \langle s_i \rangle = \frac{\langle M \rangle}{\mu N}$ (magnetización por partícula) y $z$ es el número de primeros vecinos. Muestra que para $H = 0$ y $T = 0$ el resultado es igual al valor exacto $\langle E \rangle = -DNJ$.

   (a) Escribe la función de partición y calcula la energía libre $F$.

   (b) Usando que $M = -\frac{\partial F}{\partial H}$ muestra que cuando $H = 0$ existe una temperatura crítica $T_c = zJ/k$ por debajo de la cual hay tres soluciones $M = 0$, $M = \pm M_0$. Muestra también que si $T > T_c$ la única solución es $M = 0$.

   (c) Muestra que si $T < T_c$ la solución $M = 0$ corresponde a un máximo de $F$. Dibuja $F$ en función de $m$ para $T > T_c$ y para $T < T_c$.

   (d) Calcula $M(T)$ cuando $T < T_c$ y $T - T_c \sim 0$.

   (e) Calcula la suceptibilidad $\chi = \frac{\partial M}{\partial H}(H = 0)$ cuando $T - T_c \sim 0$.

   (f) Compara $T_c$ que da campo medio con el resultado que obtuviste al resolver el modelo de Ising usando el método de montecarlo.

   (g) Analiza si existe esta transición de fase en una dimensión cuando $N \to \infty$. Ayuda: calcula la energía libre de los estados con una pared de dominio y compárala con la energía libre del estado ordenado.

5. **PROBLEMA EXTRA: Ver el video propuesto.**
Partiendo del modelo de Ising en una dimensión para $N$ partículas con espín $\pm 1/2$ en un campo magnético externo $H$:

   (a) Expresa la función de partición canónica para este sistema en términos de una matriz de la forma:

$$q = \begin{bmatrix} e^{\beta(J+H)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-H)} \end{bmatrix} \tag{3}$$

(b) Muestra que la función de partición se puede expresar como: $Z = \lambda_+^N + \lambda_-^N$ donde $\lambda_+$ y $\lambda_-$ son el mayor y el menor de los dos autovalores de la matriz q.

(c) Muestra que en el límite en que $N \to \infty$ se cumple: $\frac{\ln Z}{N} = \ln \lambda_+$ y calcula los autovalores.

(d) Calcula el valor medio de la magnetización considerando que este se puede obtener como: $\langle M \rangle = -\frac{\partial F}{\partial H}$ donde $F$ es la energía libre de Helmholtz que podemos calcular a partir de la función de partición ($F = -kT \ln Z$).

(e) Analiza el resultado anterior. ¿Cuánto vale $m(T)$ si $H = 0$? ¿Hay transición de fase? ¿Qué ocurre si primero haces $T \to 0$ y luego haces $H = 0$?

# Tema 5: Soluciones

.

1. Sutherland: $\langle E\rangle = \frac{3}{2}NkT + \frac{1}{2}\frac{N^2}{V}\frac{4\pi u_0 r_0^3}{3-s}$; $\quad \langle p\rangle = kT\left[\left(\frac{N}{V}\right) + \frac{2\pi r_0^3}{3}\left(1 + \frac{3}{(3-s)kT}\right)\left(\frac{N}{V}\right)^2\right]$
   Esfera rígida: $\langle E\rangle = \frac{3}{2}NkT$; $\quad \langle p\rangle = kT\left[\left(\frac{N}{V}\right) + \frac{2\pi r_0^3}{3}\left(\frac{N}{V}\right)^2\right]$
2. (a) $\langle U_e\rangle = -a\frac{N}{V}$
   (b) $V_x = bN \quad$ con $a = \frac{2\pi r_0^3 u_0}{s-3}$ y $b = \frac{2\pi r_0^3}{3}$.
3. $E = -3NJ$ para una red triangular en 2D.