Mecánica Estadística II - Curso 2019
Práctica 5: Transiciones de fase

1. **** Gas de Van de Waals**

   El gas de Van der Waals es uno de los modelos más sencillos en los que se puede ver una transición de fase. Su ecuación de estado es:

   $$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v^2}$$

   (a) Realice un esquema de las isotermas en un diagrama $P - v$. Observe la zona para temperaturas menores a una dada ($T < T_c$) donde el comportamiento de las curvas no es monótono. ¿Es esto físicamente posible? ¿Porqué?

   (b) Siguiendo la discusión anterior, ¿cómo se corrige este comportamiento? Indique y explique con esta corrección la curva de coexistencia de fases. Señale la isoterma de temperatura crítica T_c y mencione sus características.

   (c) Reescriba la ecuación de estado de Van der Waals en función de las variables reducidas $P_r = P/P_c, v_r, T_r$

   (d) Estudie el comportamiento de un gas de este tipo alrededor del punto crítico. Para ello, reescriba la ecuación de estado de las variables reducidas utilizando $P_r = 1 + \pi$, $v_r = 1 + \psi$, $T_r = 1 + t$. Primero, analice el caso largo de la isoterma crítica ($t = 0$) y el de la curva de coexistencia de fases cerca del tope $|t| \ll 1$. Luego, estudie el comportamiento de la compresibilidad isotérmica $\frac{\partial \psi}{\partial \pi}$ tomando los límites a la temperatura crítica desde temperaturas altas y bajas ($t \to 0-$ y $t \to 0+$)

2. **Equivalencia entre modelo de Ising, gas de red y aleaciones binarias**

   Considere el modelo de Ising a primeros vecinos

   $$H\{\sigma_i\} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \mu B \sum_i \sigma_i$$

   donde las variables σ_i toman el valor $\sigma_i = \pm 1$, representando espines para "arriba" o para "abajo".

   (a) Para una red de coordinación q, escriba de manera general la función de partición en función del número de espines "arriba", N_+, y del número de bonds de espines donde ambos espines están para "arriba", N_{++}.

   (b) Muestre la equivalencia entre este modelo y los de gas de red y de aleaciones binarias. En el modelo de gas de red, hay un número N_a de átomos que pueden ocupar lugares discretos de una red con número de coordinación q, y la energía de interacción entre sitios ocupados vecinos (sólo para primeros vecinos) es $-\epsilon_0$, y N_{aa} es el número de pares a primeros vecinos. Para aleaciones binarias, se cuenta con una estructura de red con dos tipos de átomos, digamos 1 y 2, y las interacciones también son a primeros vecinos.

3. **Modelo de Ising en una dimensión**

   Sea el modelo de Ising en una cadena unidimensional sin campo magnético externo, tomando condiciones periódicas de contorno.

(a) Obtenga la función de partición

(b) Calcule la función de correlación $G_{ij} = \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle$. Analice los límites $T \to 0$ y de distancia entre sitios $|i - j| \to \infty$. Muestre que se confirma la ausencia de magnetización espontánea y, por lo tanto, de transición de fase en este modelo

4. **** Teorema de fluctuación-disipación en el modelo de Ising**

   Sea la función de partición para un campo magnético no uniforme B_i, $Q[B_i]$.

   (a) Muestre que dicha función de partición es la función generatriz de las funciones de correlación

   (b) Recordando las definiciones de magnetización y susceptibilidad magnética χ, obtenga el teorema de fluctuación-disipación $\chi = \beta\mu^2 \sum_{i,j} G_{ij}$, donde μ es el valor del momento magnético.

5. **** Teorema de fluctuación-disipación: resultados generales**

   El teorema de fluctuación disipación (FDT por sus siglas en inglés) es un resultado general que afirma que la respuesta lineal a una perturbación externa puede expresarse en función de las propiedades de las fluctuaciones del sistema en equilibrio.

   Considere un sistema cuántico con Hamiltoniano H que es sujeto a una perturbación dependiente del tiempo, de manera que el Hamiltoniano completo del sistema viene dado por

$$H(t) = H - K(t)A, \tag{1}$$

   en donde A es un operador y $K(t)$ es una función que parametriza la perturbación externa.

   (a) **Teoría de respuesta lineal** Muestre que a primer orden en la perturbación

$$\langle \Delta B(t) \rangle = \int_{\infty}^{t} K(t')\phi_{BA}(t - t'), \tag{2}$$

   en donde $\Delta B(t) = B(t) - \langle B \rangle$, $\phi_{BA}(t) = \frac{1}{i\hbar}\langle [A(0), B(t)] \rangle$ es la función respuesta, y todos los promedios se toman con respecto a la distribución de equilibrio $\rho_{\text{eq}} = e^{-\beta H}/Z$.

   (b) Suponga que la perturbación externa es periódica con frecuencia ω,

$$K(t) = \Re[K_0 e^{-i\omega t}], \tag{3}$$

   con K_0 una amplitud real. Muestre que en tal caso

$$\langle \Delta B(t) \rangle = \Re[\chi_{BA}(\omega) K_0 e^{i\omega t}], \tag{4}$$

   con la susceptibilidad $\chi_{BA}(\omega)$ dada por,

$$\int_0^{\infty} dt\, e^{-i\omega t}\phi_{BA}(t). \tag{5}$$

   (c) Por otro lado, sean dos operadores X e Y, muestre que

$$\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{-i\omega t}\langle [X(0), Y(t)] \rangle = \frac{\omega}{iE_\beta(\omega)}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{-i\omega t}\langle \{X(0), Y(t)\}_{\text{sym}} \rangle, \tag{6}$$

   en donde $\langle \{X(0), Y(t)\}_{\text{sym}} \rangle$ es la función de correlación simetrizada $\langle X(0)Y(t) + Y(t)X(0) \rangle/2$, y $E_\beta(\omega) = \frac{1}{2}\hbar\omega \coth\left[\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right]$.

   (d) Muestre que sin $\phi_{BA}(t)$ es par en el tiempo entonces

$$\Re[\chi_{BA}(\omega)] = \frac{\omega}{2iE_\beta(\omega)}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{-i\omega t}\langle \{A(0), B(t)\}_{\text{sym}} \rangle, \tag{7}$$

   y la relación análoga en el caso de que $\phi_{BA}(t)$ sea impar en t. Estas relaciones son el FDT en el caso cuántico.

(e) Encuentre el FDT clásico tomando el límite $\hbar\omega/kT \to 0$.

Para resolver este ejercicio puede seguir el review de Kubo sobre el FDT, (Rep. Prog. Phys. **29** 255, 1966), secciones 5-7.

6. **** Modelo de Ising en la red cuadrada - Campo medio**

En la aproximación de campo medio, se descartan las interacciones entre las variables y los parámetros de orden. Esto implica que la aproximación es válida cuando las fluctuaciones no son importantes, es decir, cuando la longitud de correlación es pequeña en comparación con la escala considerada.

Tomemos el caso del modelo de Ising ferromagnético en la red cuadrada, en presencia de campo magnético externo

(a) Calcule la función de partición y el valor medio de la magnetización para el caso sin interacciones entre espines ($J = 0$)

(b) Considerando invariancia traslacional en la red, calcule la función de partición en la aproximación de campo medio para el caso de espines interactuantes. A partir de ésta, obtenga la energía libre en función del parámetro de orden (la magnetización).

(c) Analice si este modelo predice o no magnetización espontánea para el caso de campo externo nulo. En el caso de que sí lo haga, obtenga un valor para la temperatura crítica.

(d) Obtenga una expresión para la magnetización en presencia de un campo externo. Discuta cómo resolverla gráficamente y qué soluciones son físicas o no. Justifique.

(e) Calcule los exponentes críticos obtenidos a partir de la aproximación de campo medio para la magnetización espontánea, la susceptibilidad magnética, la magnetización y el calor específico.