Física Estadística.
Soluciones relación 6

1. Un sólido contiene N partículas (distinguibles), cada una con momento magnético μ, que no interactúan entre sí. El sistema está inmerso en un campo magnético de intensidad H, de manera que cada partícula puede encontrarse en uno de dos niveles energéticos, $\epsilon_1 = 0$ o $\epsilon_2 = 2\mu H$.
a) Encuentre la entropía en función de n, el número de partículas en el estado más energético.
b) Obtenga el valor máximo de la entropía.
c) Supongamos que la capacidad calorífica se puede aproximar por una función de la temperatura del tipo

$$C(T) = c_1 \left(\frac{2T}{T_1} - 1 \right), \quad \textit{si } T_1/2 < T < T_1,$$
$$C(T) = 0, \quad \textit{en caso contrario.}$$

Obtenga el valor máximo de la capacidad calorífica, c_1, utilizando consideraciones entrópicas.
d) Discuta la posibilidad de temperaturas negativas.
e) Hay alguna transición de fase?

a) Como las partículas son distinguibles, tenemos

$$\Omega(n) = \frac{N!}{n!(N-n)!},$$

luego

$$S(n) = k \ln \Omega(n) \simeq k \left[N \ln \frac{N}{N-1} - n \ln \frac{n}{N-n} \right],$$

donde para la segunda igualdad se ha utilizado la aproximación de Stirling.
b) Por simetría, el máximo de $S(n)$ ocurre para $n = N/2$. En este valor,

$$S(N/2) = S_{max} = kN \ln 2.$$

c) De $C(T) = T\frac{dS}{dT}$ se tiene que

$$S_{max} - S_{min} = \int_0^\infty \frac{C(T)}{T} dT = c_1(1 - \ln 2).$$

Utilizando $S_{max} = kN \ln 2$ y $S_{min} = S(0) = 0$, tenemos

$$c_1 = kN \frac{\ln 2}{1 - \ln 2}.$$

d) La energía del sistema es $E = n\epsilon_2$. Por tanto, la temperatura cumple

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{\partial S}{\epsilon_2 \partial n},$$

y es negativa para $n \geq \frac{1}{2}N$. Estas configuraciones se pueden obtener en la práctica invirtiendo repentinamente el sentido del campo externo. Sin embargo, nótese que estamos hablando de la "temperatura" relacionada con la orientación de los espines, no de la energía cinética media. Cuando el caso es este último, los niveles energéticos no están acotados y por tanto la entropía es estrictamente creciente, y la temperatura siempre positiva.
e) A temperaturas bajas, todos los espines se alinean y podemos decir que el sólido se encuentra en una fase ferromagnética. Al aumentar la temperatura, este orden se va rompiendo hasta que, a temperaturas altas, los espines se orientan de manera (casi) aleatoria, aproximándose a una fase paramagnética. Sin embargo, no existe una transición de fase. Para que se observe este fenómeno es necesario que haya interacciones entre las partículas.

2. Considere N espines en una cadena, tratándola como un modelo de Ising de una dimensión, definido por:

$$H = -J \sum_{n=1}^{N-1} s_n s_{n+1},$$

donde cada espín puede tomar los valores $s_n = \pm 1$.
a) Obtenga la función de partición.
b) Encuentre la capacidad calorífica por espín.

a) La función de partición será

$$Z = \prod_{n=1}^{N} \sum_{s_n=\pm 1} e^{-\beta H}$$

Si $K \equiv \beta J$, para $n = 1$ la suma es

$$\sum_{s_1=\pm 1} e^{-K s_1 s_2} = e^K + e^{-K}$$

(independientemente de lo que valga s_2). Igualmente, para s_2, tenemos

$$\sum_{s_2=\pm 1} e^{-K s_2 s_3} = e^K + e^{-K},$$

y en general para la suma sobre cualquier s_n,

$$\sum_{s_n=\pm 1} e^{-K s_n s_{n+1}} = e^K + e^{-K},$$

luego tenemos

$$Z = (e^K + e^{-K})^N.$$

b) La energía libre es

$$F = -kT \ln Z = -kTN \ln(e^K + e^{-K}),$$

y por tanto la entropía

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = Nk \ln(e^K + e^{-K}) - \frac{NJ}{T} \tanh K.$$

La capacidad calorífica es, por tanto,

$$C = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right) = \frac{NJ^2}{kT^2}\frac{1}{\cosh^2 K} = \frac{NK^2}{\cosh^2 K},$$

o, por espín,

$$c = \frac{K^2}{\cosh^2 K}.$$

3. El modelo de Hopfield consiste en N neuronas binarias, con posibles actividades $s_i = \pm 1$, conectada cada una con todas las demás a través de unos pesos sinápticos ω_{ij} de manera que cada neurona percibe un campo

$$h_i = \sum_j \omega_{ij} s_j.$$

En cada paso temporal, cada neurona tiene una probabilidad

$$P(s_i \to +1) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\tanh(\beta h_i)$$

de adoptar el estado $s_i = +1$, donde β es una temperatura inversa, y

$$P(s_i \to -1) = 1 - P(s_i \to +1) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\tanh(\beta h_i)$$

de adoptar el estado $s_i = -1$. Se puede guardar una serie de M patrones de actividad $\xi_i^\mu = \pm 1$ en los pesos sinápticos de acuerdo con la regla de Hebb,

$$\omega_{ij} = \frac{1}{N}\sum_{\mu=1}^{M} \xi_i^\mu \xi_j^\mu.$$

Cada patrón se convierte así en un atractor de la dinámica, de manera que temperatura cero el sistema evoluciona de manera que, para algún patrón ν, las actividades evolucionan hasta que $s_i = \xi_i^\nu$, y la red recupera el patrón ν. La medida en que el sistema recupera de esta manera algún patrón viene dada por el solapamiento

$$m \equiv \frac{1}{1 + M/N}\sum_{\mu=1}^{M}\frac{1}{N}\sum_j \xi_i^\mu s_i.$$

Para el caso de un sólo patrón, $M = 1$, haga la aproximación de campo medio,

$s_i = \langle s \rangle = P(s \to +1) - P(s \to -1) = 2P(s \to +1) - 1$, y obtenga:
a) Una ecuación para el valor estacionario del solapamiento, m^*.
b) La temperatura crítica por encima de la cual no hay memoria. (A temperauras altas, puede usar la aproximación $\tanh(x) = x - \frac{1}{3}x^3 + O(x^5)$.)

4. a) Para un sistema de electrones (en ausencia de interacciones), demuestre que la probabilidad de encontrar un electrón en un estado con energía Δ sobre el potencial químico μ es igual a la probabilidad de encontrar la ausencia de un electrón a una energía Δ por debajo de μ a cualquier temperatura T dada.
b) Suponga que la densidad de estados es

$$\begin{aligned} D(\epsilon) &= a(\epsilon - \epsilon_g)^{1/2}, \qquad \textit{si } \epsilon > \epsilon_g, \\ D(\epsilon) &= 0, \qquad \textit{si } 0 < \epsilon < \epsilon_g, \\ D(\epsilon) &= b(-\epsilon)^{1/2}, \qquad \textit{si } \epsilon < 0, \end{aligned}$$

Para $T = 0$ todos los estados con $\epsilon < 0$ están ocupados y los demás vacíos; mientras que para $T > 0$, algunos estados con $\epsilon > 0$ estarán ocupados y asimismo algunos con $\epsilon < 0$ estarán vacíos. Si $a = b$, cuánto vale μ? Discuta cómo cambia μ cuando $a > b$ y cuando $b > a$..
c) Si, a $T = 0$, existe un exceso de n_d electrones que no pueden ser acomodados a $\epsilon < 0$, cuánto valdrá ahora μ?

a) Los electrones son fermiones (tienen espín 1/2) de manera que siguen la distribución de Fermi, según la cual la probabilidad de ocupar un nivel de energía ϵ es

$$F(\epsilon) = \frac{1}{1 + e^{\beta(\epsilon - \mu)}}.$$

Por lo tanto, la probabilidad de encontrar un electrón con energía $\mu + \Delta$ es

$$F(\mu + \Delta) = \frac{1}{1 + e^{\beta\Delta}}.$$

La probabilidad de no encontrar ningún electrón a energía $\epsilon = \mu - \Delta$ es

$$1 - F(\mu - \Delta) = \frac{e^{-\beta\Delta}}{1 + e^{-\beta\Delta}} = \frac{1}{1 + e^{\beta\Delta}} = F(\mu + \Delta).$$

b) Cuando $T > 0$, el número de electrones en estados $\epsilon > \epsilon_g$ es

$$n_e = \int_{\epsilon_g}^{\infty} D(\epsilon) \frac{1}{1 + e^{\beta(\epsilon - \mu)}} d\epsilon = \int_{\epsilon_g}^{\infty} a(\epsilon - \epsilon_g)^{1/2} \frac{1}{1 + e^{\beta(\epsilon - \mu)}} d\epsilon = \int_0^{\infty} a(\epsilon')^{1/2} \frac{1}{1 + e^{\beta(\epsilon' + \epsilon_g - \mu)}} d\epsilon'.$$

El número de ausencias de electrones (huecos) a $\epsilon < 0$ es

$$n_p = \int_{-\infty}^{0} D(\epsilon)[1 - F(\epsilon)] d\epsilon = \int_{-\infty}^{0} b(-\epsilon)^{1/2} \frac{1}{1 + e^{-\beta(\epsilon - \mu)}} d\epsilon = \int_0^{\infty} b(\epsilon')^{1/2} \frac{1}{1 + e^{\beta(\epsilon' + \mu)}} d\epsilon'.$$

Ya que $n_e = n_p$, tenemos,

$$\frac{a}{b} = \frac{1 + e^{\beta(\epsilon + \epsilon_g - \mu)}}{1 + e^{\beta(\epsilon + \mu)}}.$$

Si $a = b$, entonces $\mu = \frac{1}{2}\epsilon_g$. Si $a > b$, se tiene que $\mu < \frac{1}{2}\epsilon_2$, mientras que si $b > a$, entonces $\mu > \frac{1}{2}\epsilon_2$.

c) Se tiene que

$$n_d = \int_{\epsilon_g}^{\mu} a(\epsilon - \epsilon_g)^{1/2} d\epsilon,$$

de donde

$$\mu = \epsilon_g + \left(\frac{3n_d}{2a}\right)^{2/3}.$$