Mecánica Estadística, curso 2013-2014
Problemas Tema 3: Sistema de espines con interacción
Hoja 4

1. Considerar un sistema paramagnético ideal (sin interacción) de N iones magnéticos de momento angular total J situados en los puntos de una red cristalina. Colocamos esta substancia en un campo magnético uniforme $\bar{\mathsf{H}} = H\hat{\mathsf{z}}$.

   - Calcular la función de partición del sistema y expresarla como función de $x = \frac{\mu_B g J H}{k_B T}$.
   - Determinar la energía libre F, la magnetización M, la susceptibilidad magnética χ (ambas por unidad de volumen) y la entropia del sistema.
   - Discutir los límites de esas cantidades en $x \gg 1$ y $x \ll 1$. ¿En que condición estamos habitualmente?. Demostrar que $\chi \sim 1/T$ (Ley de Curie)
   - Dibujar el comportamiento de todas estas cantidades como función de x indicando claramente los límites. Dibujar (F, S) y (M, χ) en el mismo gráfico.

2. Considerar el modelo de Ising para spin 1/2 en un campo magnético

$$\mathcal{H} = -J \sum_{<ij>nn}^{i,j=1,\ldots,N} s_i s_j - \mu_B H \sum_{i=1}^{N} s_i; \qquad\qquad s_i = \pm 1;\ \text{J>0}$$

   Calcular sus exponentes críticos en la aproximación de campo medio. ¿Dependen estos exponentes de la dimension espacial?. Sugerencia:

   - β y δ: La magnetización a campo cero y la isoterma crítica se pueden calcular directamente de la ecuación que determina la magnetización espontanea en campo medio: $\langle s \rangle = \tanh\left(\frac{Jz\langle s\rangle + \mu_B H}{kT}\right)$, donde z es el número de coordinación de la red.
   - γ: Derivar la ecuación anterior y demostrar que la susceptibilidad por spin es:

   $$\chi = \frac{\partial \langle s \rangle}{\partial H} = \frac{1 - \langle s \rangle^2}{zJ(t + \langle s \rangle^2)}$$

     con $t = (T - T_c)/T_c$. Estudiar que ocurre alrededor de $t = 0$ y demostrar que $\chi \sim \frac{1}{T - T_c}$ (Ley de Curie-Weiss) y, por tanto, $\gamma_{MF} = 1$.
   - α: Desarrollar en potencias de $\langle s \rangle$ la energía libre en campo medio:

   $$F_{MF} = -NkT \ln\left(2\cosh \beta J z \langle s \rangle\right) + \frac{1}{2} N J z \langle s \rangle^2$$

     y re-escribir esta expresión en terminos de t. Usar el valor de la magnetización para hallar expresiones para $t < 0$ y $t > 0$. Derivar dos veces con respecto a T y demostrar que

   $$\begin{aligned} C_H &= 3Nk/2, \quad T < T_c \\ C_H &= 0, \quad T > T_c \end{aligned}$$

     y , por tanto, α_{MF} = 0

3. Dibujar el diagrama de fases de un ferromagneto y discutir cualitativamente la dependencia de F, M y χ con H para $T > T_c$, $T = T_c$, $T < T_c$. Representar la dependencia de M y χ con T para diferentes valores del campo aplicado. Usar como guia los resultados del problema anterior.

4. Determinar el estado fundamental (la configuración estable a $T = 0$) de los siguientes modelos de spin (con condiciones periódicas en todos los casos):

    a) Un modelo de Ising unidimensional (1D) con interacciones a primeros y segundos vecinos.

    $$H = -J_1 \sum_{i=1}^{N} s_i s_{i+1} - J_2 \sum_{i=1}^{N} s_i s_{i+2}; s_i = \pm 1$$

    Considerar valores positivos y negativos para J_1 y J_2

    b) Un modelo de Ising bidimensional (2D) en una red triangular con acoplamiento antiferromagnético ($J > 0$)

5. Deducir la ley de Curie-Weiss para un antiferromagneto $\chi = \frac{C}{T+\theta}$ y las correspondientes expresiones para C, θ y la temperatura de Neel (T_N, temperatura de transición).

    Sugerencia: considerar el antiferromagneto como dos subredes A,B con orden ferromagnético en cada una de ellas, suponer que el campo efectivo que actua en esos sitios es:

    $$\begin{aligned} H_a^{eff} &= H - \lambda_1 M_b - \lambda_2 M_a \\ H_b^{eff} &= H - \lambda_1 M_a - \lambda_2 M_b \end{aligned}$$

    y aplicar la teoria de campo medio vista para el ferromagneto. Discutir la relación entre T_N y θ en función de los signos de λ_1 y λ_2.

6. Demostrar, a partir de la desigualdad de Gibbs-Bogoliubov, que:

    - Que la aproximación de primer orden es una cota superior para la energía libre.
    - Que la identificación $Jz\langle s_1 \rangle_{\mathrm{MF}} = \mu \Delta H$ es la óptima para el campo medio en el modelo de Ising. Comprobar que con esta elección $\mathcal{Z} \approx \mathcal{Z}_{\mathrm{MF}}$ y $-k_B T \ln \mathcal{Z}_{\mathrm{MF}}$ es una cota superior a la energía libre exacta.

7. La aproximación de campo medio predice una transición de fase orden-desorden a temperatura finita para el modelo de Ising ferromagnetico en cualquier dimension. Demostrar que dicha transición no existe para el caso 1D y si para 2D y dimensiones superiores. Sugerencia: Estudiar el cambio de energía y de entropia cuando creamos un defecto en la configuración de energía mas baja.