Física Teórica 3 – 1er. cuatrimestre de 2012

Primer recuperatorio, resuelto

Problema 1. Considere un sistema de N partículas idénticas distinguibles, cada una de las cuales tiene dos niveles de energía, 0 y $\epsilon > 0$. El nivel de energía superior tiene una degeneración g, mientras que el nivel más bajo es no degenerado.

(a) Usando el ensamble microcanónico, encuentre el número de partículas en cada nivel de energía en función de la temperatura.

(b) Suponga que $g = 2$ y que el sistema está en equilibrio con $3/4$ de las partículas en el nivel ϵ. Se pone al sistema en contacto con un foco térmico a 500 K. ¿En qué dirección se produce el flujo de calor?

Solución. (a) Se trata de calcular el número de estados con una energía determinada. La energía depende del número de partículas en cada nivel. Podemos tomar n_+ como el número de partículas en el estado con energía ϵ. Luego

$$U = \epsilon n_+.$$

Hay $\binom{N}{n_+}$ formas de elegir esas n_+ partículas, y a su vez cada una de estas partículas puede estar en g distintos estados. Entonces

$$\Omega = \binom{N}{n_+} g^{n_+} \quad \Rightarrow S = k \log \left[\binom{N}{n_+} g^{n_+} \right].$$

Para calcular la temperatura derivamos respecto de la energía,

$$\frac{1}{kT} = \frac{1}{k}\frac{\partial S}{\partial U} = \frac{1}{k\epsilon}\frac{\partial S}{\partial n_+}.$$

Para calcular la derivada del número combinatorio usamos la fórmula de Stirling, con lo que resulta

$$\frac{\partial}{\partial n_+} \log \binom{N}{n_+} = \log \left(\frac{N - n_+}{n_+} \right).$$

Finalmente

$$\frac{\epsilon}{kT} = \log g + \log \left(\frac{N - n_+}{n_+} \right).$$

De aquí se obtiene

$$n_+ = N \frac{g e^{-\beta\epsilon}}{1 + g e^{-\beta\epsilon}}, \qquad n_0 = N - n_+ = \frac{N}{1 + g e^{-\beta\epsilon}}.$$

(b) Si $g = 2$ y $n_+ = 3N/4$, entonces la temperatura está dada por

$$\beta\epsilon = \log 2 - \log 3 = \log \frac{2}{3} < 0.$$

Esta es una temperatura negativa. En contacto con un foco término a temperatura positiva, el calor irá hacia el foco.

Problema 2. Un gas bidimensional está compuesto por N electrones, numerados de 1 a N, y N positrones, numerados de $N+1$ a $2N$, contenidos en una caja cuadrada de lado L y área $\mathcal{A} = L^2$. Se asume que las partículas se comportan clásicamente y que interactúan a través del potencial de Coulomb bidimensional; para cada par de partículas con $i \neq j$ la energía de interacción es

$$U_{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = -c_i c_j \log |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \, ,$$

donde c_i es igual a q para los electrones y $-q$ para los positrones.

(a) Escriba la función de partición canónica del sistema como un producto $Z = Z_\mathbf{p} Z_\mathbf{r}$, donde $Z_\mathbf{p}$ está asociada a la parte traslacional (cinética) de la energía y $Z_\mathbf{r}$ a la parte configuracional (potencial).

(b) Calcule $Z_\mathbf{p}$ explícitamente.

(c) Escriba $Z_\mathbf{r}$ como la integral de una productoria de factores exponenciales, cada uno asociado a la interacción de un sólo par de partículas.

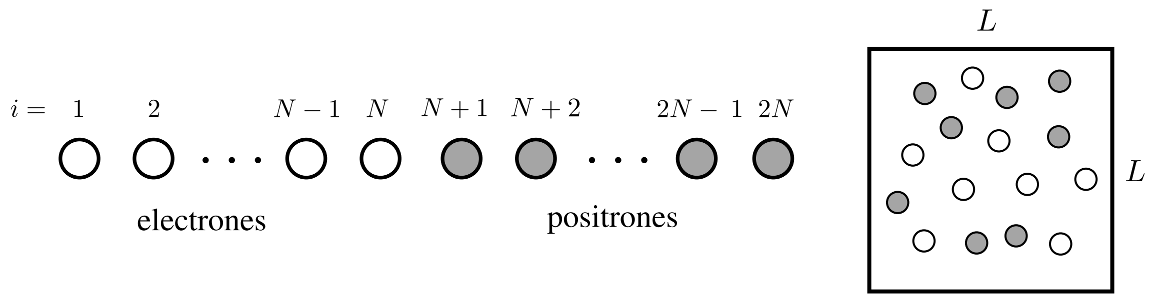
(d) ¿Cuántos pares hay con $c_i c_j = q^2$? ¿Cuántos con $c_i c_j = -q^2$?

(e) Mediante un cambio elemental de las variables de integración en $Z_\mathbf{r}$, muestre que toda la dependencia en el área puede factorizarse en la forma

$$Z_\mathbf{r} = \mathcal{A}^{2N - \beta q^2 N/2} \times f(N, \beta),$$

donde $f(N, \beta)$ es una integral adimensional que depende sólo de la temperatura y de N.

(f) Calcule la presión del gas y grafíquela en función de T. Explique el comportamiento de la presión a altas y bajas temperaturas. [*Ayuda*: todos los resultados necesarios para calcular la presión están dados en el enunciado del problema.]



Solución. La función de partición es

$$Z = \left[\frac{1}{h^{4N}} \left(\int d^2p \, e^{-\beta p^2/2m} \right)^{2N} \right] \left[\int_{L \times L} \left(\prod_{n=1}^{2N} d^2\mathbf{r}_n \right) \exp\left(-\beta \sum_{i<j} U_{ij} \right) \right] = Z_\mathbf{p} Z_\mathbf{r}.$$

El término cinético puede integrarse de la manera usual,

$$Z_\mathbf{p} = \left(\frac{1}{\lambda^2} \right)^{2N} ,$$

donde

$$\lambda^2 = \frac{h^2}{2\pi mkT}.$$

A su vez, el término asociado a la energía potencial puede desarrollarse un poco escribiendo la exponencial de la suma como producto de exponenciales,

$$Z_{\mathbf{r}} = \int_{L\times L} \left(\prod_{n=1}^{2N} d^2\mathbf{r}_n\right) \prod_{i<j} \exp\left(\beta c_i c_j \log|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|\right).$$

Pero la exponencial de un logaritmo puede escribirse como una potencia,

$$Z_{\mathbf{r}} = \int_{L\times L} \left(\prod_{n=1}^{2N} d^2\mathbf{r}_n\right) \prod_{i<j} |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^{\beta c_i c_j}.$$

La integral sobre el cuadrado $L \times L$ puede llevarse a una integral sobre el cuadrado 1×1 cambiando de variables $\mathbf{r}_i = L\mathbf{x}_i$, con lo que resulta

$$Z_{\mathbf{r}} = \mathcal{A}^{2N} \int_{1\times 1} \left(\prod_{n=1}^{2N} d^2\mathbf{x}_n\right) \prod_{i<j} \left(L^{\beta c_i c_j} |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^{\beta c_i c_j}\right).$$

La última productoria puede factorizarse:

$$Z_{\mathbf{r}} = \mathcal{A}^{2N} \left(\prod_{i<j} L^{\beta c_i c_j}\right) \int_{1\times 1} \left(\prod_{n=1}^{2N} d^2\mathbf{x}_n\right) \prod_{i<j} |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^{\beta c_i c_j} \equiv \mathcal{A}^{2N} \left(\prod_{i<j} L^{\beta c_i c_j}\right) \ f(N,\beta)$$

Ahora bien, el producto $\left(\prod_{i<j} L^{\beta c_i c_j}\right)$ puede calcularse como

$$\left(\prod_{i<j} L^{\beta c_i c_j}\right) = L^{\beta q^2 N_{++}} \ L^{\beta q^2 N_{--}} \ L^{-\beta q^2 N_{+-}},$$

donde N_{++} es el número de pares de electrones, N_{--} el número de pares de positrones y N_{+-} el número de pares electrón$-$positrón. Es fácil ver que

$$N_{++} = N_{--} = \frac{1}{2}N(N-1), \qquad N_{+-} = N^2.$$

Luego,

$$\left(\prod_{i<j} L^{\beta c_i c_j}\right) = L^{-\beta q^2 N} = \mathcal{A}^{-\beta q^2 N/2}.$$

Finalmente

$$Z_{\mathbf{r}} = \mathcal{A}^{2N - \beta q^2 N/2} \ f(N,\beta).$$

Para calcular la presión no es necesario conocer f explícitamente. Uno tiene

$$P = -\left(\frac{\partial F}{\partial \mathcal{A}}\right)_{T,N} = kT\frac{\partial \log Z}{\partial \mathcal{A}} = kT\frac{\partial \log Z_{\mathbf{r}}}{\partial \mathcal{A}} = \frac{2NkT}{\mathcal{A}} - q^2\frac{N}{2\mathcal{A}}.$$

La primera contribución es la presión de un gas ideal de $2N$ partículas en dos dimensiones. El segundo término viene de las interacciones entre las partículas. Como el número de pares de partículas que se atraen es mayor que el número de las que se repelen, este término es negativo. A muy altas temperaturas predomina la presión del gas ideal, pero si se baja la temperatura llega un momento en que el otro término se vuelve dominante, la presión se hace negativa y el sistema tiende a colapsar.

Problema 3. En una caja pueden aparecer partículas espontáneamente. Cuantas más partículas hay, más alta es la probabilidad de que aparezca una nueva partícula. Si hay n partículas, la probabilidad por unidad de tiempo de que aparezca una nueva partículas es $\alpha(n+1)$, donde α es una constante positiva.

(a) Escriba la ecuación maestra para $P_n(t)$, la probabilidad de que haya n partículas a tiempo t.

(b) Escriba la ecuación diferencial que satisface la función generatriz.

(c) Demuestre que la solución de la ecuación anterior puede escribirse como

$$F(z,t) = \frac{1}{z}\, f\left(e^{\beta t}\,\frac{z-1}{z}\right),$$

y dé el valor de β.

(d) Encuentre F para la condición inicial en la que a tiempo $t=0$ la caja está vacía.

(e) Para la misma condición inicial, encuentre el número medio de partículas como función del tiempo.

Solución. (a) La ecuación maestra es

$$\dot{P}_n = \alpha n P_{n-1} - \alpha(n+1)P_n.$$

Notar que para $n<0$ si $P_n=0$ en cierto instante t, entonces $\dot{P}_n = 0$ y $P_n = 0$ para todo t. Esto evita preocuparse por los estados con número negativo de partículas. (b) Multiplicando por z^n y sumando para todo n se obtiene la ecuación para la función generatriz,

$$\dot{F} = \alpha \sum_n z^n \left[n P_{n-1} - (n+1) P_n \right].$$

Por otro lado

$$\sum_n z^n n P_{n-1} = \sum_n z^{n+1}(n+1)P_n = z\frac{\partial}{\partial z} zF,$$

$$\sum_n z^n (n+1) P_n = \frac{\partial}{\partial z} zF.$$

Así,

$$\dot{F} = \alpha(z-1)\frac{\partial}{\partial z} zF.$$

(c) Es inmediato verificar que la solución propuesta vale si $\beta = \alpha$. (d) Si en $t = 0$ la caja está vacía, la condición inicial para F se escribe como

$$F(z,0) = \sum_n z^n P_n(0) = 1 = \frac{1}{z} f\left(\frac{z-1}{z}\right).$$

Invirtiendo se obtiene

$$f(z) = \frac{1}{1-z}.$$

Finalmente,

$$F(z,t) = \frac{1}{z(1-e^{\alpha t}) + e^{\alpha t}}.$$

(e) El valor medio de n se obtiene a partir de la derivada de F respecto de z,

$$\bar{n} = \left.\frac{\partial F}{\partial z}\right|_{z=1} = e^{\alpha t} - 1.$$