Física Teórica 3 – 2do. cuatrimestre de 2014

Guía 4: *Ensambles*

1. Un oscilador armónico unidimensional tiene niveles de energía $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$, donde ω es la frecuencia del oscilador y $n = 0, 1, 2, \ldots$ El oscilador está en contacto con foco a temperatura T.

   (a) Hallar la energía media del oscilador en función de T.

   (b) Encontrar la razón entre la probabilidad del oscilador de estar en el primer estado excitado y la correspondiente al fundamental. Ídem para el segundo estado excitado.

   (c) Suponiendo que únicamente el fundamental y el primer excitado están permitidos, hallar la energía media del oscilador en función de T. Graficar y comparar con el resultado obtenido en (a). ¿Cuándo comienzan a diferir apreciablemente?

2. Hay N osciladores armónicos distinguibles de frecuencia ω, con niveles de energía $(n + 1/2)\hbar\omega$.

   (a) Hallar la función de partición en el ensamble canónico, calcular $U(\beta)$ y el calor específico. Graficar.

   (b) Escribir S, primero como función de β y luego como función de la energía.

   En el ensamble microcanónico, la energía del sistema siempre puede escribirse del siguiente modo

   $$E = \frac{1}{2}N\hbar\omega + M_0\hbar\omega.$$

   c) Demostrar que el número de configuraciones está dado por $\Omega(M_0) = \dfrac{(N + M_0 - 1)!}{M_0!(N-1)!}$.

   d) Calcular S, primero como función de la energía y luego como función de β. Comparar estas expresiones con las obtenidas en el ensamble canónico.

3. Hay dos espines, uno de momento magnético μ_1 y otro de momento magnético μ_2. Cada uno puede estar en los estados, $+$ o $-$. Hay un campo magnético H, de modo que las energías de los estados de cada espín son:

   $$E(1,+) = -\mu_1 H \qquad E(1,-) = \mu_1 H$$
   $$E(2,+) = -\mu_2 H \qquad E(2,-) = \mu_2 H.$$

   Se sabe que la energía total promedio del sistema de los dos espines es $-E_0$, siendo $E_0 \ll H\mu_i$.

   (a) Halle la distribución de probabilidades correspondiente al equilibrio.

   (b) Sabiendo que las contribuciones a la magnetización son $m_i(\pm) = \pm\mu_i$, halle el valor total promedio de la magnetización en función de la energía E_0. **Nota**: tenga en cuenta que la temperatura no es dato del problema; no obstante si necesita hallarla se sugiere suponer a priori que ésta es alta y finalmente verificar que dicha suposición era correcta de acuerdo con los datos del problema.

4. Sea un sistema de partículas distinguibles y no interactuantes cada una de las cuales puede tener **dos** valores de energía, $-\epsilon$ y $+\epsilon$.

   (a) Suponiendo que dicho sistema está aislado y consiste de N_0 partículas con una energía total E_0, calcule su entropía suponiendo $N_0 \pm E_0/\epsilon \gg 1$.

   (b) Suponga ahora que el sistema de N_0 partículas es cerrado y su energía *media* vale E_0.

      i. Calcule su temperatura y el rango de E_0 en la que es positiva.

      ii. Calcule la entropía y compare con la calculada en (a).

   (c) Finalmente suponga que el sistema es abierto con un número medio de partículas N_0 y una energía media E_0.

      i. Calcule U como función de la temperatura y del número medio de partículas. Compare con los resultados anteriores.

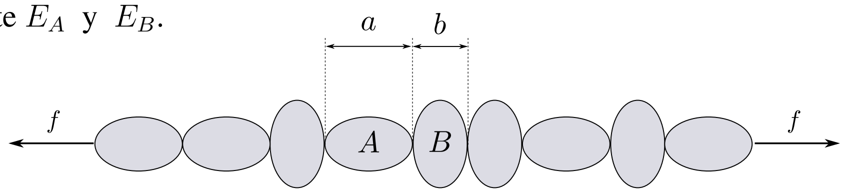
      ii. Generalice el resultado anterior demostrando que para un sistema formado por elementos independientes y distinguibles, existe la siguiente relación entre los ensambles canónico y gran canónico:

$$\frac{\langle U \rangle_{\mathrm{GC}}}{\langle N \rangle_{\mathrm{GC}}} = \langle U_1 \rangle_{\mathrm{C}}\,,$$

      donde U_1 es la energía por elemento.

5. Un sistema está compuesto por N elementos distinguibles e independientes, cada uno de los cuales puede tener **tres** valores de energía $-\epsilon$, 0 o ϵ. Encuentre $S(T)$ y $U(T)$ por dos caminos alternativos: i) usando el ensamble microcanónico, ii) usando el ensamble canónico.

6. Una cadena lineal está compuesta por N unidades, formando una molécula elástica. Cada unidad puede estar en dos estados, A o B. La longitud del estado A es a y la del B es b, y las energías son respectivamente E_A y E_B.



   Encontrar los valores medios de la energía y de la longitud en función de la temperatura y de la tensión sobre la cadena: i) en el ensamble microcanónico, ii) en el ensamble canónico, iii) en el ensamble isobárico. Además, calcular la constante elástica; es decir, la constante de proporcionalidad entre la tensión y la deformación para pequeñas deformaciones. ¿Qué forma toma el primer principio para este problema?

7. Una red cristalina perfecta está formada por N átomos de la misma especie. Si se extraen n átomos de sus lugares en la red (con $1 \ll n \ll N$) y se los coloca en posiciones intersticiales, se obtienen n

defectos de tipo Frenkel. El número N' de posiciones intersticiales en la red es del orden de magnitud de N. Sea W la energía necesaria para producir un defecto. Halle el valor de $\langle E \rangle = W\langle n \rangle$ y de allí muestre que

$$\langle n \rangle \approx \sqrt{NN'}e^{-\beta W/2}.$$

Grafique cualitativamente $\Omega(n)e^{-\beta nW}$ en función de n. Resuelva este problema tanto en el ensamble microcanónico como en el canónico.

8. Considere una superficie adsorbente que tiene N lugares, cada uno de los cuales puede adsorber una molécula del gas. La superficie se halla en contacto con un gas ideal monoatómico. La energía de una molécula adsorbida vale $-E_0$, respecto al mismo origen que se toma para para las energías del gas.

   (a) Halle el número medio de moléculas adsorbidas, $\langle n \rangle$, conocidos T y el potencial químico del gas.

   (b) Recordando que para el gas $\mu = kT\log(\beta p) + \frac{3}{2}kT\log(h^2\beta/2\pi m)$, muestre que

   $$\frac{\langle n \rangle}{N} = \frac{p}{p + p_0(T)},$$

   donde p es la presión del gas y

   $$p_0(T) = \left(\frac{2\pi m}{\beta h^2}\right)^{3/2} kTe^{-\beta E_0}.$$

9. Un fluido de partículas que interactúan con un potencial repulsivo puede ser modelado como un “gas reticular”. Considere un recipiente dividido en N celdas, cada una de volumen v, comparable al volumen de una partícula. Una celda desocupada o una ocupada por una sola partícula tienen energía cero. Una celda ocupada por 2 partículas tiene energía ϵ, y ninguna celda puede estar ocupada por más de 2 partículas. En el ensamble gran canónico encuentre la energía media por celda, la concentración de partículas c (número de partículas dividido por N) y la presión p en términos de la temperatura y del potencial químico. Encuentre expresiones aproximadas para la energía media por celda y la presión en términos de T y c en los límites en que c es muy pequeña y muy cercana a su máximo valor.

10. **Modelo clásico de Langevin para una sustancia paramagnética**. Antes del surgimiento de la mecánica cuántica, Langevin explicó el paramagnetismo suponiendo que cada ión paramagnético posee un momento magnético permanente $\boldsymbol{\mu}$, libre de orientarse en todas direcciones (de módulo fijo) y que, sometido a un campo $\mathbf{H}$, posee una energía $E = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{H}$. Calcule la magnetización y la susceptibilidad en este modelo y verifique que se obtienen los resultados del problema 11 en el límite $j \to \infty$, identificando $|\boldsymbol{\mu}| = \mu_B g\, j$.

11. **Modelo cuántico para una sustancia paramagnética**. Suponga que un momento magnético puede tomar cualquiera de los valores discretos $g\mu_B m$ para su proyección sobre la dirección del campo magnético H, siendo m el número cuántico magnético, que puede tomar los valores $j, j-1, ..., -j+1, -j$; g el factor de Landé, y μ_B el magnetón de Bohr. Calcule la magnetización M de un cuerpo que contiene n de tales momentos magnéticos por unidad de volumen. Evalúe la susceptibilidad magnética para un campo débil a alta temperatura ($g\mu_B jH \ll kT$) y compare este resultado con la ley de Curie. Suponga que la interacción entre momentos magnéticos es despreciable (Pathria §3.9).

12. **Ausencia de magnetismo en mecánica clásica**. Muestre que la susceptibilidad magnética de un sistema que obedece a la mecánica y a la estadística clásica es estrictamente nula (*Teorema de Bohr−van Leeuwen*). **Ayuda:** el Hamiltoniano para un sistema de partículas cargadas en un campo magnético es

$$H = \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{2m_j} \left[\mathbf{p}_j - \frac{e_j}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_j)\right]^2 + U(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N).$$

siendo $\mathbf{A}$ el potencial vectorial del cual se deriva el campo magnético. ¿Existe alguna contradicción entre este problema y el resultado del problema 11?