

## Física Teórica 3 – 1er. cuatrimestre de 2015

### Guía 5: Ensamblés

- Un oscilador armónico unidimensional tiene niveles de energía  $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ , donde  $\omega$  es la frecuencia del oscilador y  $n = 0, 1, 2, \dots$ . El oscilador está en contacto con un baño a temperatura  $T$ .
  - Hallar la energía media del oscilador en función de  $T$ .
  - 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.
  - 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?
- Hay  $N$  osciladores armónicos distinguibles de frecuencia  $\omega$ , con niveles de energía  $(n + 1/2)\hbar\omega$ .
  - Hallar la función de partición en el ensamble canónico, calcular  $U(\beta)$  y el calor específico. Graficar.
  - Escribir  $S$ , primero como función de  $\beta$  y luego como función de la energía.

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

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

- Demostrar que el número de configuraciones está dado por  $\Omega(M_0) = \frac{(N + M_0 - 1)!}{M_0!(N - 1)!}$ .
  - Calcular  $S$ , primero como función de la energía y luego como función de  $\beta$ . Comparar estas expresiones con las obtenidas en el ensamble canónico.
- Hay dos espines, uno de momento magnético  $\mu_1$  y otro de momento magnético  $\mu_2$ . 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:

$$\begin{aligned} E(1, +) &= -\mu_1 H & E(1, -) &= \mu_1 H \\ E(2, +) &= -\mu_2 H & E(2, -) &= \mu_2 H. \end{aligned}$$

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

- Halle la distribución de probabilidades correspondiente al equilibrio.
- 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.

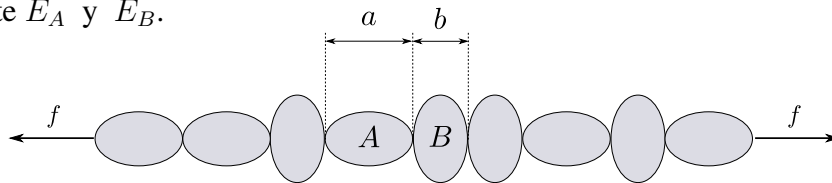
ii. Generalice el resultado anterior demostrando que para un sistema formado por elementos independientes y distinguibles, existe la siguiente relación entre los ensambles canónico y gran canónico:

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

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  $\epsilon$ . 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.

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 un gas ideal monoatómico en el microcanónico. La energía de cada partícula es  $\epsilon = p^2/2m$ .
  - (a) Calcule el volumen del espacio de fases encerrado por la superficie de energía  $E$ .
  - (b) Calcule la entropía, primero como función  $E$  y luego como función de  $T$ .
  - (c) Encuentre la energía, la capacidad calorífica a volumen constante y la ecuación de estado.
  - (d) En particular, demuestre que la ecuación de estado para un gas ideal clásico es  $PV = NkT$  independientemente de cuál es la relación entre la energía y el impulso de las partículas. [Por ejemplo, para un gas ordinario  $\epsilon(p) = p^2/2m$ ; para uno ultrarrelativista,  $\epsilon(p) = cp$ .]
9. Encuentre la función de partición del gas ideal en el ensamble canónico. La energía de cada partícula es  $\epsilon = p^2/2m$ . Calcule  $S(T, V, N)$  y compare con el resultado del ensamble microcanónico.
10. Encuentre la función de partición del gas ideal en el ensamble gran canónico. La energía de cada partícula es  $\epsilon = p^2/2m$ . Calcule  $S(T, V, \mu)$  y compare con los resultados de los otros ensambles.
11. Resuelva el gas ideal en los tres ensambles si ahora las partículas son ultrarrelativistas,  $\epsilon(p) = cp$ .
12. Resuelva el gas ideal en los tres ensambles para el caso bidimensional. Considere por separado los casos  $\epsilon = p^2/2m$  y  $\epsilon = cp$ .
13. Un gas ideal está en una caja cúbica de volumen  $2V$ . Una mitad de la caja está a potencial cero y la otra a potencial  $W = \epsilon$ . Se pide encontrar, en función de la temperatura, del volumen y del número total de partículas: i) el potencial químico, ii) la densidad de partículas en cada mitad de la caja, iii) la energía total. Generalice para una caja dividida en  $n$  compartimientos, cada uno con energía potencial  $\epsilon_i, i = 1, 2, \dots, n$ . ¿Cuál es la relación entre las densidades de cada par de compartimientos?
14. 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 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

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

15. 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  $\epsilon$ , 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.
16. Un gas ideal diatómico consiste de  $N$  moléculas de momento dipolar eléctrico  $\mu$ . Muestre que la polarización eléctrica  $\mathbf{P}$  está dada por:

$$\mathbf{P} = \frac{N}{V} \mu \left[ \coth \left( \frac{\mu \mathcal{E}}{kT} \right) - \frac{kT}{\mu \mathcal{E}} \right] \hat{n}, \quad (1)$$

siendo  $V$  el volumen del gas y  $\mathbf{E} = \mathcal{E} \hat{n}$  el campo eléctrico externo. Pruebe que si  $|\mu \mathcal{E}| \ll kT$ , entonces la constante dieléctrica del gas vale

$$\epsilon = 1 + 4\pi \frac{N}{V} \frac{\mu^2}{3kT}.$$

Despreciar la polarización inducida de las moléculas, y asumir que el campo eléctrico actuante sobre cada molécula es simplemente  $\mathbf{E}$ . Recordar que  $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P} = \epsilon \mathbf{E}$ .

17. **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 18 en el límite  $j \rightarrow \infty$ , identificando  $|\boldsymbol{\mu}| = \mu_B g j$ .
18. **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  $j, j-1, \dots, -j+1, -j$ ;  $g$  el factor de Landé, y  $\mu_B$  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 ( $g\mu_B j H \ll kT$ ) y compare este resultado con la ley de Curie. Suponga que la interacción entre momentos magnéticos es despreciable (Pathria §3.9).
19. **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

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

siendo  $\mathbf{A}$  el potencial vectorial del cual se deriva el campo magnético. ¿Existe alguna contradicción entre este problema y el resultado del problema 18?