Guía 3, problema 16

Guillem Pérez Nadal

Enunciado

Un conjunto de N dados se encuentra sobre una superficie horizontal de área A que vibra fuertemente. Los dados, de masa M y lado l, pueden desplazarse libremente sobre la superficie y cambiar de cara. El sistema, pues, se puede interpretar como un gas ideal bidimensional cuyas partículas tienen un grado de libertad interno (la cara visible del dado) con seis estados posibles. Los dados están cargados para que salga el número 6 con una masa puntual m en el centro de la cara 1. El sistema se encuentra en equilibrio a temperatura T en presencia del campo gravitatorio terrestre.

(a) Calcule la función de partición canónica del sistema.

(b) Calcule la energía media del sistema. Estudie los límites de temperaturas altas y bajas y discuta sus resultados.

(c) Calcule el número medio de veces que aparece cada una de las caras. ¿Qué sucede a $T = 0$?

Resolución

(a) Como el enunciado nos dice que podemos interpretar el sistema como un gas ideal, vamos a pensar que las partículas son indistinguibles pero trataremos esa indistinguibilidad de forma aproximada: calculamos las sumas sobre estados del sistema como si las partículas fueran distinguibles y después dividimos por $N!$. Para partículas distinguibles no interactuantes la función de partición canónica factoriza, así que

$$Z_C = \frac{1}{N!} Z_1^N, \tag{1}$$

donde Z_1 es la función de partición canónica de una sola partícula, es decir, de un dado. ¿Cómo especificamos el estado de un dado? Tenemos que dar su posición $\mathbf{q}$, su momento $\mathbf{p}$ y su cara visible s, que toma valores enteros entre 1 y 6. Así pues,

$$Z_1 = \underbrace{\int \frac{d^2q d^2p}{h^2} \sum_{s=1}^{6}}_{\substack{\text{suma sobre estados} \\ \text{de un dado}}} e^{-\beta\epsilon(\mathbf{p},s)}, \tag{2}$$

donde h es la constante de Planck y $\epsilon(\mathbf{p}, s)$ es la energía de un dado con momento $\mathbf{p}$ que muestra la cara s (ya tenemos en cuenta que ésta no depende de $\mathbf{q}$). Nótese que, como el movimiento se produce sobre una superficie, la posición y el momento son vectores de dos dimensiones. ¿Cuánto vale la energía de un dado? Es la suma de la energía cinética más la potencial,

$$\epsilon(\mathbf{p}, s) = \frac{p^2}{2(M+m)} + V(s), \tag{3}$$

donde hemos tenido en cuenta que la masa total del dado es su masa intrínseca más la de la partícula puntual agregada a la cara 1, y que, como el dado se mueve sobre una superficie horizontal, su energía potencial sólo depende de la cara que muestra. La energía potencial es la del dado sin carga más la de la masa puntual. Si tomamos como $z = 0$ la altura del centro del dado, la primera de estas energías potenciales se anula y tenemos

$$V(1) = mgl/2 \qquad V(6) = -mgl/2 \qquad V(2) = \cdots = V(5) = 0. \tag{4}$$

Reemplazando la energía (3) en la función de partición (2) vemos que Z_1 es el producto de su parte traslacional y su parte interna,

$$Z_1 = \int \frac{d^2q d^2p}{h^2} \sum_{s=1}^{6} e^{-\beta\left[\frac{p^2}{2(M+m)} + V(s)\right]} = \int \frac{d^2q d^2p}{h^2} e^{-\beta\frac{p^2}{2(M+m)}} \sum_{s=1}^{6} e^{-\beta V(s)}. \tag{5}$$

El primer factor es la típica integral gaussiana del gas ideal común (en dos dimensiones), y el segundo factor es una suma de seis términos que se calcula usando (4), dando como resultado

$$Z_1 = \frac{A}{\lambda^2}\left[4 + 2\cosh(\beta mgl/2)\right] \qquad \lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi(M+m)kT}} \tag{6}$$

Reemplazando en (1) obtenemos

$$Z_C = \frac{1}{N!}\left\{\frac{A}{\lambda^2}\left[4 + 2\cosh(\beta mgl/2)\right]\right\}^N, \tag{7}$$

lo cual responde a la pregunta de este ítem.

(b) La energía media se deriva de la función de partición canónica,

$$\begin{aligned} E = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_C &= N\left\{-\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\frac{A}{\lambda^2} - \frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left[4 + 2\cosh(\beta mgl/2)\right]\right\} \\ &= N\left[kT - \frac{mgl\sinh(\beta mgl/2)}{4 + 2\cosh(\beta mgl/2)}\right]. \end{aligned} \tag{8}$$

En el límite $T \to 0$ tenemos $\beta \to \infty$ y por lo tanto el seno hiperbólico y el coseno hiperbólico que aparecen en esta ecuación se aproximan ambos por $e^{\beta mgl/2}/2$. Teniendo en cuenta que esta exponencial es muy grande frente al 4 que aparece en el denominador, obtenemos

$$E = -Nmgl/2 \quad \text{para } T \to 0. \tag{9}$$

Este resultado era de esperar: a temperatura 0 todos los dados se encuentran en su estado fundamental, cuya energía es $-mgl/2$. Por otra parte, en el límite $T \to \infty$ tenemos $\beta \to 0$ y por lo tanto el seno hiperbólico se anula, así que

$$E = NkT \quad \text{para } T \to \infty. \tag{10}$$

Este resultado también era de esperar: a temperatura infinita todos los estados son igualmente probables (sin importar su energía), así que las energías potenciales positivas se cancelan con las negativas al tomar el valor medio y sólo contribuyen las energías cinéticas, por lo que recuperamos la energía media de un gas ideal común en dos dimensiones.

(c) Antes que nada, hagamos una observación general acerca del cálculo de valores medios en un sistema de partículas indistinguibles, cuando la indistinguibilidad se trata de forma aproximada tal como hacemos en este contexto. Consideremos un sistema genérico de N partículas indistinguibles, y una función f del estado del sistema. De acuerdo con nuestra aproximación (conteo de Boltzmann), el valor medio de f es

$$\langle f \rangle = \frac{1}{N!} \sum_{m_1,\ldots,m_N} f(m_1,\ldots,m_N) P(m_1,\ldots,m_N), \tag{11}$$

donde m_i denota el estado de la partícula i y $P(m)$ es la probabilidad del estado m del sistema. Es decir, la suma sobre estados se hace asumiendo primero que las partículas son distinguibles y después dividiendo por $N!$. Ahora, en el ensamble canónico la probabilidad del estado m es

$$P(m) = \frac{e^{-\beta E_m}}{Z_C} = N! \frac{e^{-\beta E_m}}{Z_{C,\text{dist}}} = N! P_{\text{dist}}(m), \tag{12}$$

donde el subíndice "dist" agregado a una cantidad indica esa cantidad calculada para partículas distinguibles. Reemplazando este resultado en (11) obtenemos $\langle f \rangle = \langle f \rangle_{\text{dist}}$, es decir, el valor medio de cualquier cantidad es insensible a la distinguibilidad o indistinguibilidad de las partículas dentro de nuestra aproximación.

Supongamos, pues, que los dados son distinguibles. En ese caso, la probabilidad $P(n_s)$ de que n_s de los N dados muestren la cara s no es más que una binomial (en la que el éxito corresponde a que el dado muestre la cara s y el fracaso corresponde a que no lo haga). Por lo tanto, el valor medio de n_s es el valor medio de una binomial,

$$\langle n_s \rangle = N p_s, \tag{13}$$

donde p_s es la probabilidad de que un dado muestre la cara s. ¿Cuánto vale esa probabilidad? Es la suma de las probabilidades de todos los estados en los que el dado muestra la cara s,

$$p_s = \frac{1}{Z_1} \int \frac{d^2q d^2p}{h^2} e^{-\beta\epsilon(\mathbf{p},s)} = \frac{e^{-\beta V(s)}}{4 + 2\cosh(\beta mgl/2)}. \tag{14}$$

Reemplazando en (13) obtenemos finalmente

$$\langle n_s \rangle = \frac{N e^{-\beta V(s)}}{4 + 2\cosh(\beta mgl/2)}, \tag{15}$$

así que

$$\begin{aligned}
\langle n_1 \rangle &= \frac{N e^{-\beta mgl/2}}{4 + 2\cosh(\beta mgl/2)} \\
\langle n_6 \rangle &= \frac{N e^{\beta mgl/2}}{4 + 2\cosh(\beta mgl/2)} \\
\langle n_2 \rangle = \cdots = \langle n_5 \rangle &= \frac{N}{4 + 2\cosh(\beta mgl/2)}
\end{aligned} \tag{16}$$

A temperatura 0 tenemos $\beta \to \infty$, y por lo tanto $\langle n_1 \rangle = \cdots = \langle n_5 \rangle = 0$ y $\langle n_6 \rangle = N$, es decir, todos los dados muestran la cara 6. Eso era de esperar, porque a temperatura 0 el sistema se encuentra en su estado fundamental.