Consultas

Facundo Rost

Física Teórica 3 - 1er cuatrimestre 2020

1. Ejer 1, 01-2018

1.1. Inciso a

Me pide calcular $n_a = n_a(E, N, L)$ y $n_\epsilon = n_\epsilon(E, N, L)$ y $n_b = n_b(E, N, L)$

$n_a = \#$ eslabones con longitud a

$n_\epsilon = \#$ eslabones con energía ϵ

$n_b = \#$ eslabones con longitud b

3 posibles eslabones:

TIPO 1- Longitud b y energía 0 $\longrightarrow n_b$

TIPO 2- Longitud a y energía $\epsilon \longrightarrow n_\epsilon$

TIPO 3- Longitud a y energía 0 $\longrightarrow n_a - n_\epsilon$

Objetivo: Escribir las variables termodinámicas N, E, L en términos de los números n_a, n_ϵ, n_b: Escribir $N = N(n_a, n_\epsilon, n_b)$, $E = E(n_a, n_\epsilon, n_b)$ y $L = L(n_a, n_\epsilon, n_b)$.

$$N = N(n_a, n_b, n_\epsilon) = n_a + n_b = n_\epsilon + (n_a - n_\epsilon) + n_b \implies n_b = N - n_a \tag{1}$$

Ahora, también puedo escribir $L = L(n_a, n_\epsilon, n_b)$:

$$L = L(n_a, n_\epsilon, n_b) = n_a a + n_b b \tag{2}$$

Ahora, también puedo escribir $E = E(n_a, n_\epsilon, n_b)$:

$$E = E(n_a, n_\epsilon, n_b) = n_\epsilon \epsilon \tag{3}$$

En definitiva, obtenemos:

$$\begin{cases} N = N(n_a, n_b, n_\epsilon) = n_a + n_b \\ L = L(n_a, n_\epsilon, n_b) = n_a a + n_b b \\ E = E(n_a, n_\epsilon, n_b) = n_\epsilon \epsilon \end{cases} \tag{4}$$

Ahora lo único que tengo que hacer es despejar $n_a = n_a(E, N, L)$ y $n_\epsilon = n_\epsilon(E, N, L)$ y $n_b = n_b(E, N, L)$.

$$\begin{cases} N = N(n_a, n_b, n_\epsilon) = n_a + n_b \iff n_b = N - n_a \\ L = L(n_a, n_\epsilon, n_b) = n_a a + n_b b \\ E = E(n_a, n_\epsilon, n_b) = n_\epsilon \epsilon \iff n_\epsilon = E/\epsilon \end{cases} \tag{5}$$

Meto la primera ecuación en la segunda:

$$\begin{cases} n_b = N - n_a \\ L = n_a a + (N - n_a)b = Nb + n_a(a-b) \iff n_a = \dfrac{L - Nb}{a - b} \\ n_\epsilon = E/\epsilon \end{cases} \tag{6}$$

Finalmente:

$$\begin{cases} n_b = N - n_a = N - \dfrac{L - Nb}{a - b} = \dfrac{Na - L}{a - b} \\ n_a = \dfrac{L - Nb}{a - b} \\ n_\epsilon = E/\epsilon \end{cases} \tag{7}$$

1.2. Inciso b

Va a ser más fácil calcular $\Omega = \Omega(n_a, n_\epsilon, n_b)$. Y si quieren expresar $\Omega = \Omega(E, L, N)$ sólo reemplacen en la anterior expresión la ecuación 7.

$$\Omega = \Omega(n_a, n_\epsilon, n_b) = \underbrace{\binom{N}{n_a}}_{\substack{=\#\text{formas de elegir } n_a \\ \text{eslabones de un total de } N}} \cdot \underbrace{\binom{n_a}{n_\epsilon}}_{\substack{=\#\text{formas de elegir } n_\epsilon \\ \text{eslabones de un total de } n_a}} \tag{8}$$

Luego:

$$
\begin{aligned}
\Omega &= \frac{N!}{(N-n_a)!\,\cancel{n_a!}} \cdot \frac{\cancel{n_a!}}{n_\epsilon!(n_a-n_\epsilon)!} = \frac{N!}{\underbrace{(N-n_a)!}_{=n_b!}\, n_\epsilon!(n_a-n_\epsilon)!} \\
&= \frac{\#\text{ de formas de ordenar a todos los } N \text{ eslabones}}{\#\text{ de formas de ordenar a todos los } n_b \text{ eslabones de tipo I}} \cdot \\
&\cdot \frac{1}{\#\text{ de formas de ordenar a todos los } n_\epsilon \text{ eslabones de tipo II}} \cdot \\
&\cdot \frac{1}{\#\text{ de formas de ordenar a todos los } n_a - n_\epsilon \text{ eslabones de tipo III}}
\end{aligned} \tag{9}
$$

Llamando $n_a - n_\epsilon = n_3$

$$
\begin{aligned}
S = S(n_b, n_\epsilon, n_3) &= k_B \ln \Omega = k_B \ln\left(\frac{N!}{n_b! n_\epsilon! n_3!}\right) \\
&= k_B \left(N(\ln N - 1) - n_b(\ln n_b - 1) - n_\epsilon(\ln n_\epsilon - 1) - n_3(\ln n_3 - 1)\right) \\
&= k_B \left(N(\ln N) - n_b(\ln n_b) - n_\epsilon(\ln n_\epsilon) - n_3(\ln n_3)\right)
\end{aligned} \tag{10}
$$

$S(E,N,V) = k_B \left(N(\ln N) - n_b(E,N,V)(\ln n_b(E,N,V)) - n_\epsilon(E,N,V)(\ln n_\epsilon(E,N,V))\right.$
$\left. - n_3(E,N,V)(\ln n_3(E,N,V))\right)$

OJO: CUANDO PUSE V, DEBERÍA HABER PUESTO L

1.3. Inciso c

Tengo a $S = S(n_b, n_\epsilon, n_3) = S(n_b(E,V,N), n_\epsilon(E,V,N), n_3(E,V,N))$

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{T} = \left.\frac{\partial S(E,V,N)}{\partial E}\right|_{N,V} &= \left.\frac{\partial n_b}{\partial E}\right|_{N,V} \cdot \left.\frac{\partial S(n_b,n_\epsilon,n_3)}{\partial n_b}\right|_{n_\epsilon,n_3} + \left.\frac{\partial n_\epsilon}{\partial E}\right|_{N,V} \cdot \left.\frac{\partial S(n_b,n_\epsilon,n_3)}{\partial n_\epsilon}\right|_{n_b,n_3} + \\
&+ \left.\frac{\partial n_3}{\partial E}\right|_{N,V} \cdot \left.\frac{\partial S(n_b,n_\epsilon,n_3)}{\partial n_3}\right|_{n_b,n_\epsilon}
\end{aligned} \tag{11}
$$

Para la tensión f:

$$
\frac{-f}{T} = \left.\frac{\partial S(E,L,N)}{\partial L}\right|_{N,E} \tag{12}
$$

Si hubiera sido presión p, con volumen V, se escribe:

$$
\frac{p}{T} = \left.\frac{\partial S(E,V,N)}{\partial V}\right|_{N,E} \tag{13}
$$

La analogía es $L \leftrightarrow V$ y $-f \leftrightarrow p$

2. Ejer 2, 01-2018

$$
\begin{aligned}
Q = Z_C = \sum_{r\ \in M} e^{-\beta E_m} &= \frac{1}{N!} \sum_{r_1, r_2, (\cdots), r_N} e^{-\beta E_{r_1, r_2, \cdots, r_N}} = \frac{1}{N!} \sum_{r_1, r_2, (\cdots), r_N} e^{-\beta \sum_{i=1}^{N} \epsilon_{r_i}} \\
&= \frac{1}{N!} \sum_{r_1} \sum_{r_2} (\cdots) \sum_{r_N} e^{-\beta \sum_{i=1}^{N} \epsilon_{r_i}} = \frac{1}{N!} \sum_{r_1} \sum_{r_2} (\cdots) \sum_{r_N} \prod_{i=1}^{N} e^{-\beta \epsilon_{r_i}} \\
&= \frac{1}{N!} \left(\sum_{r_1} e^{-\beta \epsilon_{r_1}} \right) \left(\sum_{r_2} e^{-\beta \epsilon_{r_2}} \right) (\cdots) \left(\sum_{r_N} e^{-\beta \epsilon_{r_N}} \right) \\
&= \frac{1}{N!} Q_1 \cdot Q_2 \cdot (\cdots) Q_N = \frac{1}{N!} \prod_{i=1}^{N} Q_i \\
&= \frac{1}{N!} Q_1^N
\end{aligned}
\tag{14}
$$

Paso 0: Incluir factor $1/N!$ del conteo correcto de Boltzmann pues las part. son indistinguibles; si las partículas fueran distinguibles, no habría que poner dicho factor.

Paso 1: Especificar un microestado del sistema $r \in M$ es equivalente a especificar el microestado $r_1, r_2, \cdots, r_N$ de cada una de las N partículas.

Paso 2: Como $H = E = \sum_{i=1}^{N} \epsilon_i$ con $\epsilon_i = \frac{p_{z,i}^2}{2m} + \hbar\omega(n_{x,i} + n_{y,i} + 1)$ la energía de la partícula i, entonces las partículas son no interactuantes gracias a que en la fórmula de la energía total (hamiltoniano) no hay términos de interacción V_{ij} entre dos o más partículas (no hay términos como por ejemplo $V_{ij} = cte. |\vec{r}_i - \vec{r}_j|^{-1}$ que no lo podés separar como $V_{ij} \neq V_i + V_j$). Si son no interactuantes: $E_r = E_{r_1, r_2, \cdots, r_N} = \sum_{i=1}^{N} \epsilon_{r_i}$ con la partícula i en el microestado r_i con energía ϵ_{r_i}.

Paso 3: Si podemos especificar libremente el microestado r_i de cada una de las N partículas, es decir que todos los N microestados $r_1, r_2, \cdots, r_N$ son independientes. O sea que no hay ningún tipo de vínculos entre dichos microestados. Si podemos hacer eso, podemos factorizar la sumatoria $\sum_{r_1, r_2, (\cdots), r_N} = \sum_{r_1} \sum_{r_2} (\cdots) \sum_{r_N}$. (Ejemplo de lo contrario: Ver la solución del 6 y 15 de la guia 3 con ensamble canónico.).

Paso 4: Identificar los factores con la función de partición de sólo la partícula i: $Q_i \equiv \sum_{r_i} e^{-\beta \epsilon_{r_i}}$. En caso de que las N partículas sean idénticas (o sea que los posibles microestados de cada una de éstas N partículas son todos los mismos): $Q_i = Q_1$ no dependen de i (no dependen de cual partícula es).

Lo que debemos hacer ahora es calcular Q_1, sumando sobre todos los microestados r_1 de una partícula:

$$
\begin{aligned}
Q_1 &= \sum_{r_1} e^{-\beta \epsilon_{r_1}} = \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \int \frac{dzdp_z}{h} \; e^{-\beta\left(\frac{p_z^2}{2m} + \hbar\omega(n_x+n_y+1)\right)} \\
&= \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \int \frac{dzdp_z}{h} \; e^{-\beta\frac{p_z^2}{2m}} e^{-\beta\hbar\omega n_x} e^{-\beta\hbar\omega n_y} e^{-\beta\hbar\omega} \\
&= \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{h} \left(\sum_{n_x=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n_x} \right) \cdot \left(\sum_{n_y=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n_y} \right) \cdot \underbrace{\left(\int dz \right)}_{=L} \underbrace{\left(\int_{-\infty}^{\infty} dp_z \;\; e^{-\beta\frac{p_z^2}{2m}} \right)}_{=\sqrt{\frac{\pi}{\beta/2m}}} \\
&= \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{h} \; L \; \sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} \; \left(\sum_{n=0}^{\infty} \left(e^{-\beta\hbar\omega}\right)^n \right)^2 = \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{h} \; L \; \sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} \; \left(\frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} \right)^2 \\
&= \frac{L}{h} \sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} \; \left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} \right)^2 = \frac{L}{h} \sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} \; \left(\frac{1}{e^{+\beta\hbar\omega/2} - e^{-\beta\hbar\omega/2}} \right)^2 \\
&= \frac{L}{h} \sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} \; \left(\frac{2}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)} \right)^2
\end{aligned}
\tag{15}
$$

En nuestro caso, el microestado de una partícula r_1 se describe con las variables z, p_z para describir el mov libre en z, y los números cuánticos n_x, n_y para describir el osc arm cuántico en plano xy. $r_1 \leftrightarrow z, p_z, n_x, n_y$

Considerando que $0 < e^{-\beta\hbar\omega} < 1 \iff \beta\hbar\omega > 0$, podemos considerar que esa sumatoria es la de una serie geométrica.

$\ln Q = N \ln Q_1 - \ln(N!)$

$U = -\partial(\ln Q)/\partial\beta$