

Física Teórica 3 – 2do. cuatrimestre de 2020

Guía 5: Ensamblés

- Un oscilador armónico unidimensional tiene niveles de energía $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$, donde ω es la frecuencia del oscilador y $n = 0, 1, 2, \dots$. 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 ω , 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 β y luego como función de la energía.

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

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

- 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 β . Comparar estas expresiones con las obtenidas en el ensamble canónico.
- 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:

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

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.

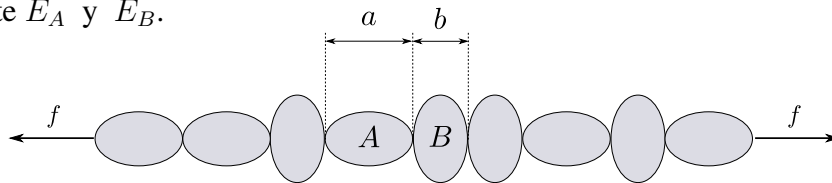
ii. Generalice el resultado anterior demostrando que para un sistema formado por elementos independientes y distinguibles, existe la siguiente relación entre los ensambles canónico y gran canónico:

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

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 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.

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 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 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.
16. Un gas ideal diatómico consiste de N moléculas de momento dipolar eléctrico μ . 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 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 ($g\mu_B j H \ll kT$) 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?