

Resolución del primer parcial de Física Teórica 3 12/5/2021

Problema 1

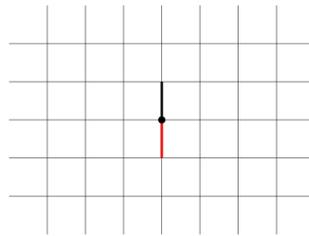
(a) Como la energía de un eslabón es 0 si se orienta paralelamente al anterior y ϵ si lo hace perpendicularmente, la energía del sistema es

$$E = n_{\perp} \epsilon, \quad (1)$$

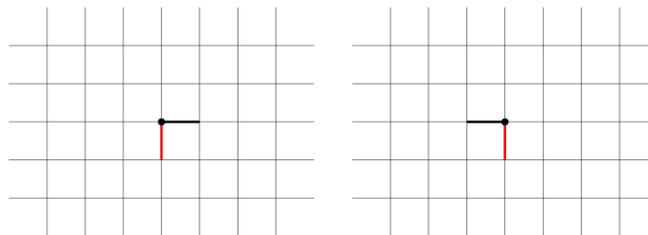
donde n_{\perp} es el número de eslabones que se orientan perpendicularmente al eslabón anterior. ¿Cuántos microestados hay con un dado valor de E ? Para dar un microestado del sistema hay que decir cómo se orienta cada eslabón respecto al eslabón anterior. El vínculo de la energía nos dice ya *cúantos* eslabones se orientan perpendicularmente; lo que queda para especificar un microestado es elegir *cuáles* son esos eslabones que se orientan perpendicularmente, y para cada uno de ellos cuál de las dos posibilidades elige (hacia la izquierda o hacia la derecha). El número de microestados es pues

$$\Omega = 2^{n_{\perp}} \binom{N}{n_{\perp}}. \quad (2)$$

El combinatorio es el número de formas de elegir cuáles son los n_{\perp} eslabones que se orientan perpendicularmente al eslabón anterior, y el factor $2^{n_{\perp}}$ es el número de formas de elegir, para cada uno de estos eslabones, si va hacia la izquierda o hacia la derecha. Verifiquemos este resultado en los casos $N = 1$ y $N = 2$. Para $N = 1$, $n_{\perp} = 0$, esta fórmula da $\Omega = 1$, que está bien: sólo tenemos una configuración, que es la que representamos en la siguiente figura.



Para $N = 2$, $n_{\perp} = 1$, la ecuación (2) da $\Omega = 2$, que también está bien: tenemos las dos configuraciones que representamos a continuación.



En el caso $N = 2$ tenemos tres posibilidades para el número de eslabones que se orientan perpendicularmente, $n_{\perp} = 0, 1, 2$. El análisis de estos casos es similar a lo anterior, así que lo dejo para ustedes.

(b) Para calcular la entropía aplicamos Stirling usando que $n_{\perp}, N - n_{\perp} \gg 1$,

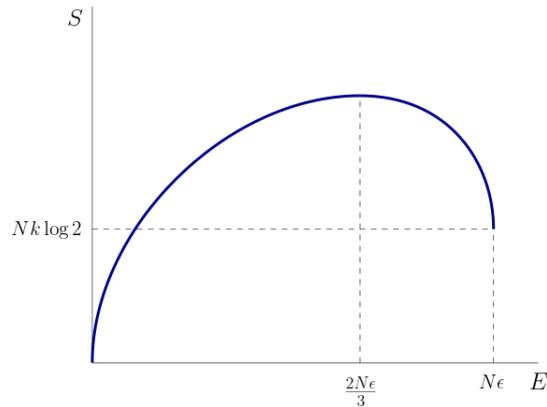
$$S = k \log \Omega$$

$$= k [n_{\perp} \log 2 + N \log N - n_{\perp} \log n_{\perp} - (N - n_{\perp}) \log(N - n_{\perp})]. \quad (3)$$

Junto con (1), esta ecuación nos da la entropía en función de E . Para graficar esto, notemos primero que S se anula en $n_{\perp} = 0$ y vale $Nk \log 2$ en $n_{\perp} = N$. Calculemos su derivada para ver si tiene algún extremo,

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial S}{\partial n_{\perp}} = \frac{k}{\epsilon} \log \frac{2(N - n_{\perp})}{n_{\perp}}. \quad (4)$$

Claramente, hay un extremo en $2(N - n_{\perp}) = n_{\perp}$, es decir, $n_{\perp} = 2N/3$. Para $n_{\perp} \rightarrow 0$ la derivada tiende a $+\infty$, y para $n_{\perp} \rightarrow N$ la derivada tiende a $-\infty$, con lo cual el extremo es un máximo. Con todo esto ya podemos hacer un buen gráfico cualitativo de la entropía en función de la energía.



¿Qué ocurre en la región $2N\epsilon/3 < E < N\epsilon$? ¿Que la temperatura es negativa! Esto es algo que suele pasar en sistemas que tienen la energía acotada por arriba, como es el caso de este problema; en termodinámica no lo veíamos porque los sistemas que uno considera típicamente (gases, líquidos, etc) no tienen la energía acotada por arriba.

(c) Para encontrar la energía en función de T , simplemente despejamos n_{\perp} de la ecuación (4). Exponenciando esa ecuación obtenemos

$$e^{\beta\epsilon} = \frac{2(N - n_{\perp})}{n_{\perp}} = 2 \left(\frac{N}{n_{\perp}} - 1 \right), \quad (5)$$

de donde despejamos n_{\perp} ,

$$n_{\perp} = \frac{N}{e^{\beta\epsilon/2} + 1}. \quad (6)$$

La expresión de la energía en función de la temperatura es pues

$$E = \frac{N\epsilon}{e^{\beta\epsilon/2} + 1}. \quad (7)$$

En el límite $T \rightarrow 0$ tenemos $\beta \rightarrow \infty$ y por lo tanto $E = 0$: el sistema está en su estado fundamental. En el límite $T \rightarrow \infty$ tenemos $\beta \rightarrow 0$ y por lo tanto $E = 2N\epsilon/3$. ¿Cómo entender este último resultado? En este límite, en el ensamble canónico todos los estados son igualmente probables, sin importar su energía, así que cada estado de un eslabón tiene probabilidad $1/3$ y por lo tanto la energía media de un eslabón es $0/3 + \epsilon/3 + \epsilon/3 = 2\epsilon/3$.

(d) Si la grilla es tridimensional en lugar de bidimensional, hay cuatro formas de que un eslabón se coloque perpendicularmente al anterior, en lugar de dos, y por lo tanto

$$\Omega = 4^{n_{\perp}} \binom{N}{n_{\perp}}. \quad (8)$$

Problema 2

(a) Tenemos un gas ideal, así que las partículas son indistinguibles pero tratamos esa indistinguibilidad de forma aproximada, mediante el conteo de Boltzmann: hacemos la cuenta primero para partículas distinguibles y después dividimos por $N!$. Si las partículas son distinguibles, la función de partición factoriza como el producto de las de cada partícula, así que

$$Z = \frac{Z_1^N}{N!}. \quad (9)$$

Sólo queda calcular la función de partición de una partícula, que es fácil recordando la fórmula de la serie geométrica,

$$\begin{aligned} Z_1 &= \int \frac{d^3q d^3p}{h^3} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta[p^2/2m + \hbar\omega(n+1/2)]} \\ &= \int \frac{d^3q d^3p}{h^3} e^{-\beta p^2/2m} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)} \\ &= \frac{V}{\lambda^3} \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} = \frac{V}{\lambda^3} \frac{1}{2 \sinh(\beta\hbar\omega/2)}, \end{aligned} \quad (10)$$

donde, como siempre,

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}} \quad (11)$$

es la longitud de onda térmica de de Broglie. Las ecuaciones (9) y (10) son la respuesta a la pregunta de este ítem.

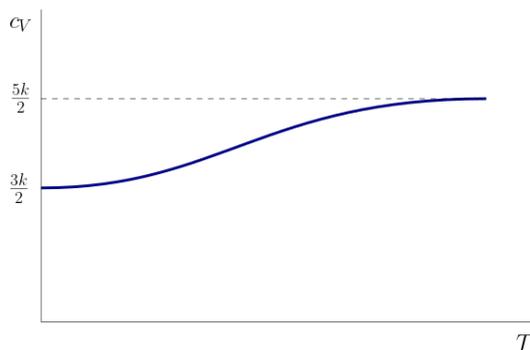
(b) Calculemos primero la energía por partícula,

$$E_1 = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z_1 = \frac{3}{2}kT + \frac{\hbar\omega}{2} \coth(\beta\hbar\omega/2). \quad (12)$$

El calor específico es $c_V = \partial E_1 / \partial T$. Teniendo en cuenta que $\partial / \partial T = -k\beta^2 \partial / \partial \beta$ y que $\coth'(x) = -1/\sinh^2(x)$ obtenemos

$$c_V = k \left\{ \frac{3}{2} + \left[\frac{\beta\hbar\omega/2}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)} \right]^2 \right\}. \quad (13)$$

Para graficar esto, fijémonos en los límites de temperaturas altas y bajas. Cuando $T \rightarrow 0$ tenemos $\beta \rightarrow \infty$, de manera que el seno hiperbólico se convierte en una exponencial y el segundo término tiende a cero, así que $c_V \rightarrow 3k/2$. Cuando $T \rightarrow \infty$ tenemos $\beta \rightarrow 0$, de manera que podemos aproximar el seno hiperbólico por lo que tiene adentro y en consecuencia el segundo término tiende a 1, así que $c_V \rightarrow 5k/2$. Con esto ya podemos graficar cualitativamente el calor específico en función de la temperatura.



¿Cómo cambia el resultado si tratamos el grado de libertad de vibración clásicamente en lugar de cuánticamente? Podríamos hacer la cuenta explícitamente, pero es más rápido aplicar equipartición. La parte de traslación no cambia, y en cuanto a la vibración tenemos dos coordenadas de espacio de fases (posición y momento) que entran cuadráticamente en el hamiltoniano, así que la contribución del grado de libertad de vibración al calor específico es $k/2 + k/2 = k$, y por lo tanto el calor específico es $c_V = 5k/2$. Es decir, el resultado cuántico coincide con el clásico en el límite de temperaturas altas. El gráfico que hemos obtenido para el calor específico es cualitativamente igual al que se observa experimentalmente para gases diatómicos, aunque en estos últimos hay un grado de libertad interno más, el de rotación, y eso se traduce en que el calor específico tiene dos “escalones” en lugar de uno solo, como obtuvimos acá.

(c) La probabilidad de que una dada partícula tenga su grado de libertad de vibración en el estado fundamental es la suma de las probabilidades de todos los estados de esa partícula en los que el grado de libertad de vibración está en el fundamental,

$$p = \int \frac{d^3q d^3p}{h^3} \frac{e^{-\beta(p^2/2m + \hbar\omega/2)}}{Z_1} = \frac{V}{\lambda^3} \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{Z_1} = 2 \sinh(\beta\hbar\omega/2) e^{-\beta\hbar\omega/2}, \quad (14)$$

donde en el último paso hemos usado nuestro resultado del ítem (a) para Z_1 , ecuación (10). Nótese que este resultado tiene sentido, porque en el límite $T \rightarrow 0$ se tiene $p \rightarrow 1$, es decir, a temperatura cero la partícula tiene seguro su grado de libertad de vibración en el fundamental. La probabilidad de que exactamente k partículas tengan su grado de libertad de vibración en el fundamental es simplemente una binomial,

$$P(k) = \binom{N}{k} p^k (1-p)^{N-k}. \quad (15)$$

Problema 3

(a) Calculemos primero el flujo de partículas, es decir, el número de partículas que escapan por unidad de tiempo y de superficie. Si elegimos los ejes de manera que el vector normal a la apertura sea $\hat{\mathbf{x}}$, tenemos

$$\begin{aligned} \Phi &= \mathbf{j} \cdot \hat{\mathbf{x}} = j_x = n \langle p_x/m \rangle = \int d^3p \frac{p_x}{m} f(z, \mathbf{p}) \\ &= \frac{n}{(2\pi mkT)^{3/2}} \int d^3p \frac{p_x}{m} \exp\left(-\frac{p^2}{2mkT}\right) \\ &= \frac{n}{(2\pi mkT)^{3/2}} \int_0^\infty dp_x \frac{p_x}{m} \exp\left(-\frac{p_x^2}{2mkT}\right) \int_{-\infty}^\infty dp_y \exp\left(-\frac{p_y^2}{2mkT}\right) \\ &\quad \times \int_{-\infty}^\infty dp_z \exp\left(-\frac{p_z^2}{2mkT}\right), \end{aligned} \quad (16)$$

donde hemos tenido en cuenta que, sobre la apertura, f se anula para $p_x < 0$ (no hay partículas entrantes), por eso la primera integral es entre cero e infinito. Las dos últimas integrales son gaussianas de toda la vida, que dan $\sqrt{2\pi mkT}$ cada una, así que

$$\Phi = \frac{n}{\sqrt{2\pi mkT}} \int_0^\infty dp_x \frac{p_x}{m} \exp\left(-\frac{p_x^2}{2mkT}\right). \quad (17)$$

Haciendo el cambio de variables $x = p_x/\sqrt{2mkT}$ y usando la ayuda del enunciado (con $k = 0$) obtenemos

$$\Phi = 2n \sqrt{\frac{kT}{2\pi m}} \int_0^\infty dx x e^{-x^2} = n \sqrt{\frac{kT}{2\pi m}}. \quad (18)$$

Nótese que este flujo depende de z , porque n depende de z . El número de partículas que escapan por unidad de tiempo, llamémosle R , será la integral del flujo sobre la apertura,

$$\begin{aligned} R &= l \int_0^h dz \Phi(z) = l \sqrt{\frac{kT}{2\pi m}} \int_0^h dz n(z) \\ &= ln_0 \sqrt{\frac{kT}{2\pi m}} \int_0^h \exp\left(-\frac{mgz}{kT}\right) dz = ln_0 \sqrt{\frac{kT}{2\pi m}} \frac{kT}{mg} \left[1 - \exp\left(-\frac{mgh}{kT}\right)\right]. \end{aligned} \quad (19)$$

Nótese que kT/mg tiene unidades de longitud, así que R tiene unidades de flujo por área, como debe ser.

(b) En este ítem procedemos igual que en el anterior, es decir, empezamos calculando el flujo de energía cinética,

$$\begin{aligned} \Phi_c &= \mathbf{j}_c \cdot \hat{\mathbf{x}} = j_{cx} = n \langle (p^2/2m)(p_x/m) \rangle = \int d^3p \frac{p^2}{2m} \frac{p_x}{m} f(z, \mathbf{p}) \\ &= \frac{n}{(2\pi mkT)^{3/2}} \int d^3p \frac{p^2}{2m} \frac{p_x}{m} \exp\left(-\frac{p^2}{2mkT}\right). \end{aligned} \quad (20)$$

Esta integral la podríamos calcular en cartesianas, igual que hicimos en el ítem anterior, pero es más rápido si pasamos a esféricas, tomando el ángulo polar θ como el ángulo con el eje p_x , es decir, dándole a este eje el rol que usualmente se asigna al eje z en las coordenadas esféricas. Como sólo hay que integrar para $p_x > 0$, se tiene $\theta \in (0, \pi/2)$ y por lo tanto

$$\begin{aligned} \Phi_c &= \frac{n}{(2\pi mkT)^{3/2}} 2\pi \int_0^\infty dp p^2 \int_0^{\pi/2} d\theta \sin\theta \frac{p^2}{2m} \frac{p \cos\theta}{m} \exp\left(-\frac{p^2}{2mkT}\right) \\ &= \frac{n}{(2\pi mkT)^{3/2}} \frac{\pi}{m^2} \int_0^\infty dp p^5 \exp\left(-\frac{p^2}{2mkT}\right) \int_0^{\pi/2} d\theta \sin\theta \cos\theta. \end{aligned} \quad (21)$$

La integral en θ se hace fácilmente con el cambio de variables $x = \cos\theta$,

$$\int_0^{\pi/2} d\theta \sin\theta \cos\theta = \int_0^1 dx x = \frac{1}{2}. \quad (22)$$

Para la integral en p , hacemos el cambio de variables $x = p/\sqrt{2mkT}$ y usamos la ayuda del enunciado (con $k = 2$),

$$\int_0^\infty dp p^5 \exp\left(-\frac{p^2}{2mkT}\right) = (2mkT)^3 \int_0^\infty dx x^5 e^{-x^2} = (2mkT)^3. \quad (23)$$

Reemplazando (22) y (23) en (21) obtenemos

$$\Phi_c = \frac{n}{(2\pi mkT)^{3/2}} \frac{\pi}{m^2} \frac{(2mkT)^3}{2} = 2kTn \sqrt{\frac{kT}{2\pi m}} = 2kT\Phi, \quad (24)$$

donde en el último paso hemos usado el resultado del ítem anterior para el flujo de partículas. La cantidad de energía cinética que escapa por unidad de tiempo, llamémosle R_c , se obtiene integrando Φ_c sobre la apertura, pero, como lo único que depende de z en el resultado que acabamos de obtener es Φ , esta integral ya la hemos hecho en el ítem anterior,

$$R_c = 2kTR, \quad (25)$$

donde R está dado por la ecuación (19).

(c) Como la temperatura del gas se mantiene constante, la derivada temporal de su energía cinética es

$$\dot{E}_c = \frac{3}{2}\dot{N}kT = -\frac{3}{2}RkT. \quad (26)$$

Por otra parte, también podemos escribir esta derivada temporal en términos de la energía cinética que escapa por la apertura y la energía cinética que el gas absorbe del reservorio. Si llamamos \dot{Q}_c a esta última (porque es una energía transferida en forma de calor), tenemos

$$\dot{E}_c = -R_c + \dot{Q}_c = -2RkT + \dot{Q}_c. \quad (27)$$

Igualando ambas ecuaciones obtenemos lo que se nos pide,

$$\dot{Q}_c = \frac{1}{2}RkT, \quad (28)$$

donde, una vez más, R está dado por la ecuación (19).