Resolución del primer parcial de física teórica 3 10/5/2023

Problema 1

(a) El número de pares de nodos es el número de subconjuntos de dos elementos de un conjunto de K,

$$N = \binom{K}{2} = \frac{K(K-1)}{2}. \tag{1}$$

(b) La energía del grafo es $E = M\epsilon$. En el ensamble microcanónico, pues, el número M de aristas está fijo. ¿Qué me falta para especificar un microestado? Decir *cuáles* son los M pares de nodos unidos por una arista. El número de formas de hacer eso es

$$\Omega = \binom{N}{M}. \tag{2}$$

La entropía es entonces

$$S = k \log \Omega = k \left[N \log N - M \log M - (N-M) \log(N-M) \right], \tag{3}$$

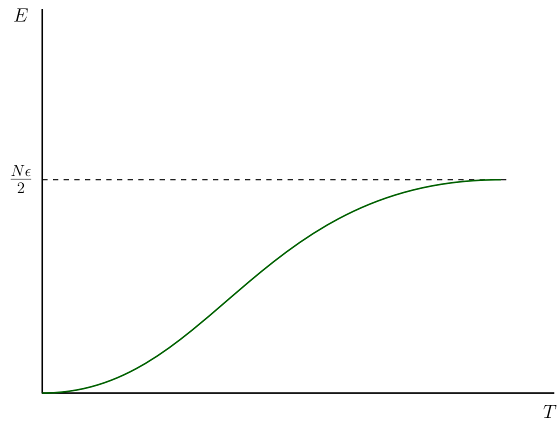
donde hemos aplicado Stirling usando que M y $N-M$ son muy grandes, y por lo tanto también lo es N. Para calcular la energía en función de la temperatura, primero calculamos la temperatura,

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial S}{\partial M} = \frac{k}{\epsilon} \log \left(\frac{N}{M} - 1 \right), \tag{4}$$

y luego despejamos,

$$E = M\epsilon = \frac{N\epsilon}{1 + e^{\beta\epsilon}}. \tag{5}$$

Esto es sencillo de graficar. A $T = 0$ tenemos $E = 0$, como debe ser (estado fundamental), y a $T \to \infty$ tenemos $E = N\epsilon/2$, también como debe ser (a temperatura infinita todos los estados son igualmente probables en el canónico, por lo tanto cada par tiene igual probabilidad de estar unido que de no estarlo, y por eso la mitad de los pares están unidos). A partir de estos límites sacamos el gráfico.



(c) La función de partición canónica factoriza como el producto de las de cada par de nodos, porque (i) los pares son distinguibles, (ii) la energía del sistema es la suma de las energías de cada par de nodos, y (iii) los estados de cada par son independientes en este ensamble. La función de partición de un par es una suma sobre dos estados (unido o no por una arista),

$$Z_1 = \sum_m e^{-\beta\epsilon_m} = 1 + e^{-\beta\epsilon}, \tag{6}$$

y por lo tanto la del sistema es

$$Z = (1 + e^{-\beta\epsilon})^N. \tag{7}$$

La energía es entonces

$$E = -\frac{\partial}{\partial\beta}\log Z = \frac{N\epsilon e^{-\beta\epsilon}}{1+e^{-\beta\epsilon}} = \frac{N\epsilon}{1+e^{\beta\epsilon}}, \tag{8}$$

es decir, lo mismo que habíamos obtenido en el ítem anterior.

(d) Elijamos un nodo. La probabilidad de que g aristas se conecten a él es la probabilidad de que, de los $K-1$ pares que incluyen este nodo, exactamente g estén unidos por una arista. Esto es una binomial con $K-1$ repeticiones del experimento y g éxitos, y con probabilidad de éxito $p = e^{-\beta\epsilon}/Z_1 = 1/(1+e^{\beta\epsilon})$. Por lo tanto,

$$P(g) = \binom{K-1}{g}\left(\frac{1}{1+e^{\beta\epsilon}}\right)^g \left(\frac{1}{1+e^{-\beta\epsilon}}\right)^{K-1-g}. \tag{9}$$

El valor medio de una binomial es el número de repeticiones multiplicado por la probabilidad de éxito, así que

$$\langle g \rangle = \frac{K-1}{1+e^{\beta\epsilon}}. \tag{10}$$

De vuelta, vemos que a temperatura cero no hay aristas, y a temperatura infinita la mitad de los pares están unidos, en consonancia con lo que habíamos visto anteriormente.

Problema 2

(a) La función de partición grancanónica del subsistema A factoriza como el producto de las de cada celda de tipo A, porque (i) las celdas son distinguibles (las etiquetamos por su posición), (ii) las celdas son no interactuantes, y (iii) los estados de cada celda son independientes en este ensamble. Una celda de tipo A puede tener tres estados: vacía (energía 0), ocupada con spin up y ocupada con spin down (ambos con energía ϵ_A), y por lo tanto su función de partición grancanónica es

$$Z_{1A} = \sum_m z^{n_m} e^{-\beta\epsilon_m} = 1 + 2ze^{-\beta\epsilon_A}. \tag{11}$$

La función de partición del subsistema A es pues

$$Z_A = \left(1 + 2ze^{-\beta\epsilon_A}\right)^N, \tag{12}$$

donde hemos tenido en cuenta que hay N celdas de tipo A. Análogamente, para el subsistema B tenemos

$$Z_B = \left(1 + 2ze^{-\beta\epsilon_B}\right)^N. \tag{13}$$

(b) El número de partículas en celdas de tipo A es

$$N_A = z\frac{\partial}{\partial z}\log Z_A = \frac{N}{(2z)^{-1}e^{\beta\epsilon_A} + 1}. \tag{14}$$

Análogamente, para las celdas de tipo B tenemos

$$N_B = z\frac{\partial}{\partial z}\log Z_A = \frac{N}{(2z)^{-1}e^{\beta\epsilon_B} + 1}. \tag{15}$$

Ahora, z no es dato pero sí lo es el número total de partículas, que es N. Imponiendo $N = N_A + N_B$ podemos despejar z. Tenemos

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{1}{(2z)^{-1}e^{\beta\epsilon_A} + 1} + \frac{1}{(2z)^{-1}e^{\beta\epsilon_B} + 1} \\ &= \frac{(2z)^{-1}\left(e^{\beta\epsilon_A} + e^{\beta\epsilon_B}\right) + 2}{\left((2z)^{-1}e^{\beta\epsilon_A} + 1\right)\left((2z)^{-1}e^{\beta\epsilon_B} + 1\right)}. \end{aligned} \tag{16}$$

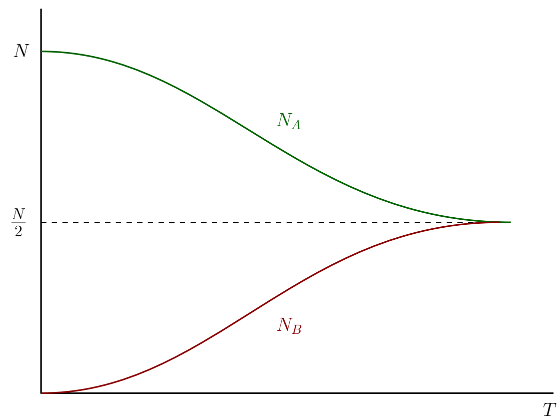
Pasando el denominador al lado izquierdo vemos que los términos lineales en z^{-1} se cancelan y obtenemos

$$(2z)^{-1} = e^{-\beta(\epsilon_A+\epsilon_B)/2}. \tag{17}$$

Reemplazando en las expresiones que obtuvimos inicialmente para N_A y N_B llegamos a lo que se nos pide,

$$N_A = \frac{N}{e^{-\beta(\epsilon_B-\epsilon_A)/2}+1} \qquad N_B = \frac{N}{e^{\beta(\epsilon_B-\epsilon_A)/2}+1} \tag{18}$$

El gráfico cualitativo de ambas funciones es como sigue.



A temperatura 0 todas las partículas están en celdas de tipo A (estado fundamental), y a temperatura infinita el número de celdas ocupadas de tipo A es igual que el de tipo B, como como debe ser a esa temperatura (todos los estados son igualmente probables en el canónico, y por lo tanto la probabilidad de que una celda de tipo A esté ocupada es igual a la de que una celda de tipo B esté ocupada).

(c) La entropía la podríamos calcular a partir de la función de partición grancanónica que calculamos en el ítem (a): de ahí sacamos el potencial grancanónico, lo derivamos respecto a la temperatura y obtenemos la entropía, que nos queda expresada en función de z. Reemplazamos el valor de z que obtuvimos en el ítem anterior y ahí obtenemos la entropía en términos de los datos del problema. Finalmente, la evaluamos a temperatura 0.

Pero se puede hacer mucho más fácil: a temperatura 0, el sistema tiene energía 0. Usamos eso para calcular la entropía en el microcanónico. Cuantos microestados hay con energía 0? Energía 0 significa que todas las celdas de tipo A están ocupadas, y las de tipo B vacías. Qué falta para dar un microestado? Falta decir hacia dónde apunta el spin de la partícula que tenemos en cada celda de tipo A. Hay 2^N formas de hacer eso, así que la entropía que buscamos es

$$S(T=0) = N \log 2. \tag{19}$$

Nótese que esto va en contra de la tercera ley de la termodinámica: la entropía a temperatura 0 no es 0. Eso es un ejemplo más de que algunos postulados de la termodinámica se cumplen en la grandísima mayoría de los casos, pero no siempre (en clase discutimos, por ejemplo, la posibilidad de que haya temperaturas negativas). En el caso de la tercera ley, se cumple cuando el estado fundamental es único (no degenerado), o tiene una degeneración pequeña comparada con la exponencial del número de partículas (cosa de que la entropía quede pequeña frente a N, y por lo tanto despreciable). Esa exponencial es un número escalofriante, inconmensurable, frente al cual el mismísimo número de Avogadro es de una pequeñez ridícula. Por eso la tercera ley se cumple en la grandísima mayoría de los casos... Aunque no siempre.

Problema 3

(a) La función de distribución es la de equilibrio en presencia de un potencial,

$$f(r,p) = \frac{n(r)}{(2\pi mkT)^{3/2}} e^{-\beta p^2/2m} \qquad n(r) = n_0 e^{-\beta\phi(r)}, \tag{20}$$

donde n_0 es una constante que ahora determinaremos en función de los datos del problema. Pero primero veamos que f cumple la ecuación de Boltzmann,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{col}}. \tag{21}$$

Lo hace porque todos los términos de esta ecuación se anulan: el primero porque f no depende del tiempo; el segundo porque f es función del hamiltoniano, $f(r,p) = f(H(r,p))$, y por lo tanto es una cantidad conservada de H; y el tercero porque f cumple balance detallado. Así que sí, f cumple Boltzmann. Ahora veamos cuánto vale n_0. Usando la forma expícita del potencial que nos da el enunciado, tenemos

$$n(r) = n_0 \left(\frac{r}{R}\right)^{\beta\kappa}. \tag{22}$$

El enunciado nos dice que el número total de partículas es N. Calculando ese número a partir de n,

$$N = \int d^3r\, n(r) = 2\pi h \int_0^R dr\, rn(r) = \frac{2\pi h n_0}{R^{\beta\kappa}} \int_0^R dr\, r^{\beta\kappa+1} = \frac{\pi R^2 h n_0}{1+\beta\kappa/2}, \tag{23}$$

podemos despejar n_0,

$$n_0 = \frac{N(1+\beta\kappa/2)}{\pi R^2 h}. \tag{24}$$

Y ahora si, con este resultado y (20) respondemos a la pregunta de este ítem.

(b) Primero calculemos el flujo de partículas,

$$\begin{aligned}
\Phi = \boldsymbol{j} \cdot \hat{\boldsymbol{z}} = j_z = n\langle p_z/m\rangle &= \int d^3p\, \frac{p_z}{m} f \\
&= \frac{n}{(2\pi mkT)^{3/2}} \int d^3p\, \frac{p_z}{m} e^{-\beta p^2/2m} \\
&= \frac{n}{\sqrt{2\pi mkT}} \int_0^\infty dp_z\, \frac{p_z}{m} e^{-\beta p_z^2/2m} \\
&= \frac{n}{\sqrt{2\pi mkT}} (-kT) \int_0^\infty dp_z\, \frac{d}{dp_z} e^{-\beta p_z^2/2m} = n\sqrt{\frac{kT}{2\pi m}}. \qquad (25)
\end{aligned}$$

Y ahora, el número de partículas que escapan por unidad de tiempo, llamémosle $\mathcal{R}$, es la integral del flujo sobre el área del agujero,

$$\mathcal{R} = \int \Phi\, dA = \sqrt{\frac{kT}{2\pi m}} \int n\, dA. \qquad (26)$$

La última integral es

$$\begin{aligned}
\int n\, dA = 2\pi \int_0^{R_0} dr\, rn(r) &= \frac{2\pi n_0}{R^{\beta\kappa}} \int_0^{R_0} dr\, r^{\beta\kappa+1} \\
&= \frac{\pi n_0}{R^{\beta\kappa}} \frac{R_0^{\beta\kappa+2}}{1+\beta\kappa/2} = \frac{N}{h}\left(\frac{R_0}{R}\right)^{\beta\kappa+2}, \qquad (27)
\end{aligned}$$

donde en el último paso hemos usado la expresión que obtuvimos para n_0 en el ítem anterior, Ec. (24). Por lo tanto, el número de partículas que escapan por unidad de tiempo es finalmente

$$\mathcal{R} = \frac{N}{h}\sqrt{\frac{kT}{2\pi m}} \left(\frac{R_0}{R}\right)^{\beta\kappa+2}. \qquad (28)$$

En el límite $\kappa \to 0$ (no hay potencial), el número de partículas que escapan por unidad de tiempo se vuelve proporcional a R_0^2, es decir al área del agujero, como corresponde a tener una densidad de partículas uniforme. En el límite opuesto, $\kappa \to \infty$, $\mathcal{R}$ tiende a cero (porque $R_0 < R$). ¿Por qué ocurre eso? Porque en ese límite el potencial tiende a $+\infty$ en todas partes excepto en la superficie lateral del cilindro, y en consecuencia todas las partículas se amontonan en esa superficie. Por eso no escapa nada al hacer un agujero de radio menor a R.