Física Teórica 3 − primer cuatrimestre de 2024

Guía 3: *ensambles*

1. Un sistema está formado por N elementos distinguibles y no interactuantes, cada uno de los cuales puede tener **dos** valores de energía, 0 y $\epsilon > 0$.

   a) El sistema está aislado y tiene una energía total E. Asumiendo que tanto N como las ocupaciones de cada nivel son mucho mayores que uno, calcule $S(E)$, $E(T)$ y $S(T)$.

   b) Si el sistema está en contacto con un foco a temperatura T:

      i) Calcule la función de partición canónica Z (al menos de dos maneras distintas) y la energía libre de Helmholtz. Es útil definir la cantidad $x = e^{-\beta\epsilon}$.

      ii) Calcule la energía media $\langle E\rangle$ como función de T. Interprete en términos de la energía media de cada elemento.

      iii) Demuestre que, en general, la fluctuación en la energía está dada por

      $$\sigma_E^2 = \left\langle E^2 \right\rangle - \left\langle E \right\rangle^2 = -\frac{\partial \langle E\rangle}{\partial \beta}.$$

      iv) Calcule la fluctuación relativa, $\sigma_E / \langle E\rangle$, para este sistema. La equivalencia con el ensamble microcanónico requiere que $\sigma_E / \langle E\rangle \ll 1$. ¿Se cumple o no?

      v) Calcule la entropía y compare con la calculada en el ítem (a).

2. Un sistema está compuesto por N elementos distinguibles y no interactuantes, cada uno de los cuales puede tener **tres** valores de energía, $-\epsilon$, 0 y $\epsilon > 0$. Encuentre $S(U)$ y $U(\beta)$ por dos caminos alternativos: i) usando el ensamble microcanónico, ii) usando el ensamble canónico. Compare las predicciones de cada uno.

3. Un oscilador armónico unidimensional tiene niveles de energía $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, donde ω es la frecuencia del oscilador y $n = 0, 1, 2, \ldots$ El oscilador está en contacto con foco a temperatura T.

   a) Hallar la energía media del oscilador en función de T.

   b) Encontrar la razón entre la probabilidad de estar en el primer estado excitado y la correspondiente al fundamental. Ídem para el segundo estado excitado.

   c) 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 el ítem (a). ¿Cuándo comienzan a diferir apreciablemente?

4. Hay N osciladores distinguibles de frecuencia ω, con niveles de energía $(n_i + 1/2)\hbar\omega$.

   a) Hallar la función de partición en el ensamble canónico, calcular $U(\beta)$ y el calor específico. Graficar.

   b) 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

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

c) Demostrar que el número de configuraciones está dado por

$$\Omega(m) = \frac{(N+m-1)!}{m!(N-1)!}.$$

d) Calcular S, primero como función de la energía y luego como función de β. Comparar estas expresiones con las obtenidas en el ensamble canónico.

5. Una red cristalina 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 $W > 0$ la energía necesaria para producir un defecto. Halle el valor de $\langle E \rangle = W\langle n \rangle$ y de allí muestre que

$$\langle n \rangle \simeq \sqrt{NN'}e^{-\beta W/2}.$$

Grafique cualitativamente $\Omega(n)e^{-\beta n W}$ en función de n. Resuelva este problema tanto en el ensamble microcanónico como en el canónico.

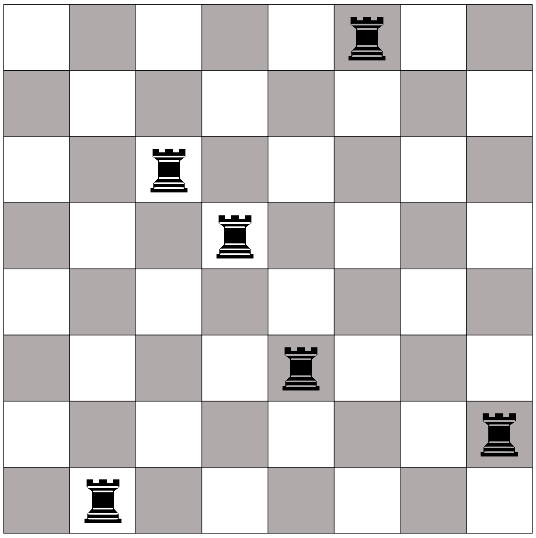
6. Un fluido de partículas que interactúan con un potencial repulsivo puede ser modelado como un “gas reticular”. Considere un recipiente de volumen V dividido en N celdas, cada una de volumen $v = V/N$, comparable al volumen de una partícula. Una celda desocupada o una ocupada por una sola partícula tienen energía cero. Una celda ocupada por dos partículas tiene energía $\epsilon > 0$, y ninguna celda puede estar ocupada por más de dos 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. En términos de T y c, encuentre expresiones aproximadas para la energía media por celda y para la presión en los límites en los que c es muy pequeña o muy cercana a su máximo valor.

   Ahora resuelva el problema en el ensamble canónico y compare los resultados.

7. Un sistema está formado por las N^2 casillas fijas y distinguibles de un tablero cuadrado de ajedrez, con $N \gg 1$. Cada casilla puede estar en dos estados: en uno de los estados está ocupada por una torre y la energía de la casilla es $\epsilon > 0$; en el otro estado, está vacía y la energía de la casilla es 0. Hay, además, una energía de interacción entre las casillas. Si las torres ocupan posiciones no atacantes, la energía de interacción entre las casillas es 0. Si hay dos torres en posición de atacarse entre sí, la energía de interacción es infinita. (Dos torres se atacan si ocupan la misma línea de casillas, horizontal o verticalmente). El sistema está a temperatura T.

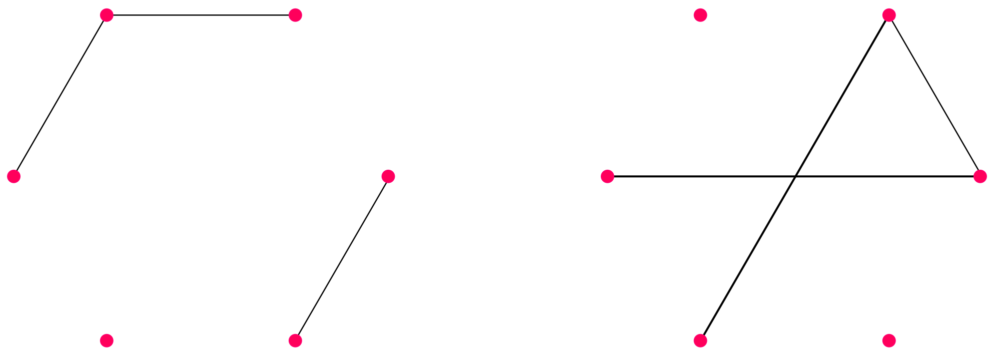
a) Encuentre el número medio de torres sobre el tablero en función de N, T y ϵ.

b) Calcule la entropía del tablero.



Una configuración de torres no atacantes en un tablero de 8×8.

8. Un grafo es un conjunto de vértices o nodos distinguibles, donde distintos pares de nodos pueden estar unidos por aristas. Los estados del grafo se especifican diciendo qué pares de nodos están unidos por una arista. En la figura se muestran dos estados posibles de un grafo con seis nodos y tres aristas.



Considere un grafo con k nodos, y suponga que cada arista tiene una energía $\epsilon > 0$.

a) ¿Cuál es el máximo número de aristas, N?

b) Calcule la entropía de un grafo en función del número de aristas m, asumiendo que $1 \ll m$ y $1 \ll N - m$. Obtenga la energía del grafo en función de la temperatura.

c) Calcule $U(\beta)$ en el ensamble canónico y compare con el resultado anterior. ¿Existe una manera natural de factorizar el sistema?

d) El grado g de un nodo es igual al número de aristas que se conectan con él. Elegido un cierto nodo, escriba la distribución de probabilidad para g y calcule su valor medio como función de la temperatura.

9. **Gas ideal para todos y todas**

   a) Resolver el gas ideal en el ensamble microcanónico calculando el volumen de la región acotada por la superficie de energía $\mathcal{E}$,

   $$S(\mathcal{E}, V, N) = k \log \Omega(\mathcal{E}, V, N), \qquad \text{donde} \qquad \Omega(\mathcal{E}, V, N) = \int_{\sum p_i^2 \leqslant 2m\mathcal{E}} \frac{d^{3N}r\, d^{3N}p}{h^{3N}\, N!}.$$

   b) Encuentre la función de partición $Z(\beta, V, N)$ del gas ideal en el ensamble canónico. Calcule F, U, S, p y μ como funciones de T, V y N. Compare con los resultados del ensamble microcanónico.

   c) Encuentren la función de partición $\mathcal{Z}(\beta, V, z)$ del gas ideal en el ensamble gran canónico. Calculen $S(T, V, N)$ y comparen con los resultados de los otros ensambles. Obtengan la ecuación de estado.

   d) Resuelve el gas ideal en los tres ensambles (μC, C y GC) para el caso bidimensional: funciones de partición, c_V, $S(T, V, N)$, $U(T, V, N)$, $p(T, V, N)$ y $\mu(T, V, N)$.

   e) Resolvamos el gas ideal en dos y tres dimensiones, en los ensambles canónico y gran canónico si ahora las partículas son ultrarrelativistas, $\epsilon(p) = cp$.

10. En realidad, la energía de las partículas de un gas ideal monoatómico es

    $$\epsilon(p) = \sqrt{(mc^2)^2 + (pc)^2}.$$

    a) Encuentre la primera corrección en potencias de $1/c$ para el calor específico a volumen constante del gas ideal no relativista.

    b) Encuentre la primera corrección en potencias de m para el calor específico a volumen constante del gas ideal ultrarrelativista.

11. Un gas ideal clásico, no relativista, compuesto por partículas de masa m 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 V y del número total de partículas N: 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 de volumen V, cada uno con energía potencial ϵ_i, con $i = 1, 2, \ldots, n$. ¿Cuál es la relación entre las densidades de cada par de compartimientos?

12. Considere una superficie adsorbente que tiene N lugares, cada uno de los cuales puede adsorber una molécula. La superficie se halla en contacto con un gas ideal monoatómico. La energía de una molécula adsorbida vale $-E_0 < 0$.

    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

$$p_0(T) = \left(\frac{2\pi m}{\beta h^2}\right)^{3/2} kTe^{-\beta E_0}.$$

13. Un gas ideal consiste en N moléculas con momento dipolar eléctrico μ. Muestre que la polarización eléctrica $\mathbf{P}$ está dada por:

$$\mathbf{P} = \frac{N}{V}\mu\left[\coth\left(\frac{\mu\mathcal{E}}{kT}\right) - \frac{kT}{\mu\mathcal{E}}\right]\hat{n},$$

donde V es el volumen del gas y $\mathbf{E} = \mathcal{E}\hat{n}$ es 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 $\mathbf{E}$. La constante dieléctrica está definida a través de la relación $4\pi\mathbf{P} = (\epsilon - 1)\mathbf{E}$.

14. **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 $\mathbf{H}$, donde m es el número cuántico magnético, que puede tomar los valores $j, j-1, ..., -j+1, -j$; 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 ($g\mu_B jH \ll kT$) y compare este resultado con la ley de Curie. Suponga que la interacción entre momentos magnéticos es despreciable. (Pathria §3.9).

15. **Modelo clásico de Langevin para una sustancia paramagnética**. Antes del surgimiento de la mecánica cuántica, Langevin explicó el paramagnetismo suponiendo que cada ion paramagnético posee un momento magnético permanente $\boldsymbol{\mu}$, libre de orientarse en todas las direcciones 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 14 en el límite $j \to \infty$, identificando $|\boldsymbol{\mu}| = \mu_B g\, j$.

16. Una cadena lineal está formada por N elementos, donde N es par. Cada elemento puede estar en dos estados, con energías cero y $\epsilon > 0$, respectivamente. No hay una dirección privilegiada desde la cual leer la secuencia de los estados de los elementos. Por ejemplo, si $N = 4$, los estados 1000 y 0001 son indistinguibles. La temperatura es $T = 1/(k\beta)$ y se define $x = e^{-\beta\epsilon}$.

a) Encuentre la función de partición en el ensamble canónico.

b) ¿Es extensivo el sistema respecto a N? ¿Qué sucede en el límite $N \to \infty$?

c) ¿Cuál es la probabilidad de que el sistema esté en una configuración simétrica? ¿Qué sucede en el límite $N \to \infty$? Por ejemplo, si $N = 4$, la configuración 1001 es simétrica.

17. Un recipiente cilíndrico de volumen $2V$ contiene N partículas indistinguibles de un gas ideal, como muestra la figura. Mediante un procedimiento que no nos está dado revelar, cuando una partícula está en la mitad izquierda del recipiente, su energía es cp, mientras que si está en la mitad derecha, su energía es $p^2/2m$. Las partículas pueden pasar libremente de una mitad del recipiente a la otra. La temperatura del sistema es $T = 1/(k\beta)$.

a) Encontrar la fracción de partículas en cada mitad del recipiente en el equilibrio.

b) La fracción de partículas en cada mitad del recipiente es la encontrada en el ítem anterior, pero ahora los dos compartimientos en los que está dividido el recipiente están separados por una pared móvil. A la izquierda de la pared, la energía de cada partícula es cp; a la derecha, $p^2/2m$. Encontrar la fracción del volumen total que ocupa cada compartimiento en el equilibrio.