Física Teórica 3 — segundo cuatrimestre de 2024

Guía 5: *ensambles*

1. Un sistema está compuesto por N elementos distinguibles y no interactuantes. Cada elemento puede estar en dos estados, con energías 0 y $\epsilon > 0$.

   a) Encuentre el número $\Omega(E)$ de microestados con energía E.

   b) En en ensamble microcanónico, asumiendo que las poblaciones de cada estado son mucho mayores que uno, calcule $S(E)$, $\beta(E)$ y $S(\beta)$. Escriba y grafique la entropía por elemento en función de la fracción x de elementos en el estado con energía ϵ.

   c) Calcule la función de partición Z en el ensamble canónico mediante los siguientes dos métodos: i) a través de $\Omega(E)$, organizando la suma sobre los estados del sistema según los valores de la energía; ii) organizando la suma sobre los estados del sistema como una suma sobre los estados de cada elemento.

   d) En general, ¿bajo qué condiciones la función de partición de N elementos distinguibles, no necesariamente de la misma especie, puede escribirse como el producto de las funciones de partición de cada elemento?

   e) A partir de Z, calcule $\Omega(E)$. Aunque en este sistema no hay una diferencia notable, a veces es más fácil ir desde el ensamble canónico al microcanónico que a la inversa. En el lenguaje de los problemas de combinatoria, ¿qué es $Z(\beta)$ en relación a $\Omega(E)$?

   f) En el ensamble canónico, calcule la energía media y la entropía como funciones de β y escriba la entropía como función de la energía media. Compare con los resultados del ensamble microcanónico.

   g) En el ensamble canónico, considere un elemento determinado del sistema. ¿Cuál es, en función de la temperatura, la probabilidad de encontrar a este elemento en cada uno de los estados posibles?

   h) Misma pregunta pero en el ensamble microcanónico. ¿Cómo se comparan estas probabilidades con las calculadas en el ensamble canónico? ¿Cómo puede interpretar este resultado? ¿De qué condiciones depende?

   i) Demuestre que, en general, la variancia de la energía en el ensamble canónico es

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

   j) Calcule la fluctuación relativa $\sigma_E / \langle E \rangle$ para el sistema de los dos niveles. La equivalencia con el ensamble microcanónico requiere que $\sigma_E / \langle E \rangle \ll 1$. ¿Bajo qué condiciones esto es cierto?

2. Un sistema está compuesto por N elementos distinguibles no interactuantes. Los estados de cada elemento están numerados por un índice entero, $n_i = 0, 1, \dots$, con $i = 1, \dots, N$. Un elemento en el estado n tiene una energía $E_n = \hbar\omega n$.

   a) Muestre que la energía del sistema puede tomar los valores $E_m = \hbar\omega m$, donde $m = 0, 1, \dots$

   b) Calcule la multiplicidad $\Omega(m)$ del macroestado con energía E_m.

   c) Asumiendo que m y $N - m$ son mucho mayores que uno, calcule la entropía como función de la energía y como función de β.

   d) Calcule la función de partición en el ensamble canónico.

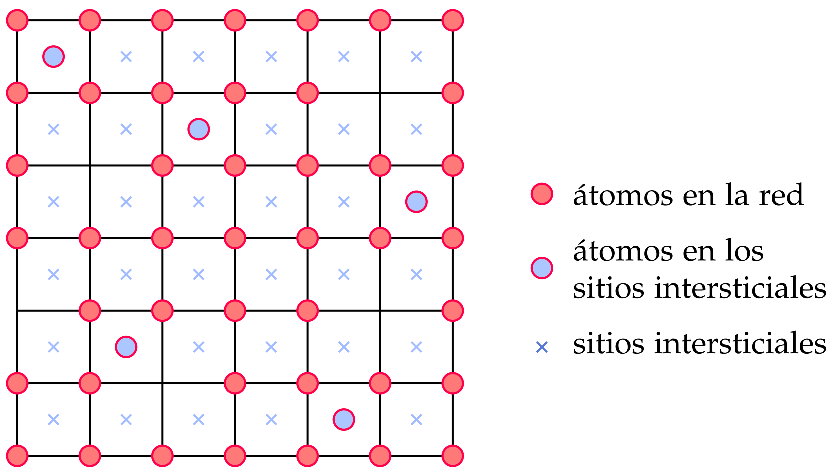
   e) Encuentre la energía media y el calor específico y grafíquelos como función de β.

   f) Calcule la entropía y compare el resultado con el del ensamble microcanónico.

3. **Defectos de Frenkel**. Una red cristalina está formada por N átomos de la misma especie. Si se extraen n átomos de sus lugares en la red 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 mismo orden de magnitud que N. Si $W > 0$ es la energía necesaria para producir un defecto, encuentre el número de defectos como función de la temperatura. En particular, muestre que si $e^{-\beta W} \ll 1$, entonces $n \simeq \sqrt{NN'}e^{-\beta W/2}$. Resuelva este problema en los tres ensambles. En el ensamble microcanónico, asuma que todos los números involucrados son mucho mayores que uno. En el ensamble canónico, asuma, además, que el logaritmo de la función de partición,

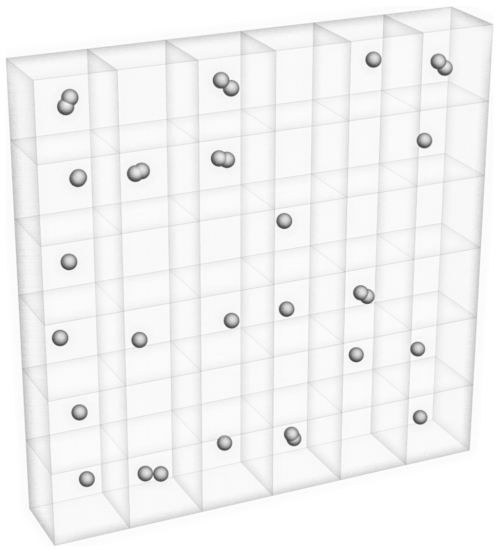
$$\log Z = \log\left[\sum_E \Omega(E)e^{-\beta E}\right],$$

puede aproximarse por el logaritmo del máximo término de la suma. En el ensamble gran canónico, note que el valor medio del número de átomos tiene que ser igual a N.

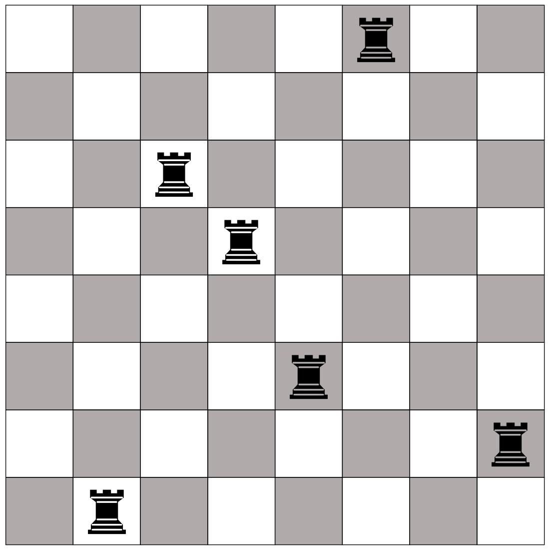


4. (Dalvit *et al.*, problema 3.24). Un fluido de partículas que interactúan con un potencial repulsivo puede ser modelado como un "gas reticular". Considere un recipiente de volumen V dividido en N celdas, cada una de volumen $v = V/N$, comparable al volumen de una partícula. Una celda desocupada o 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.



Gas reticular.

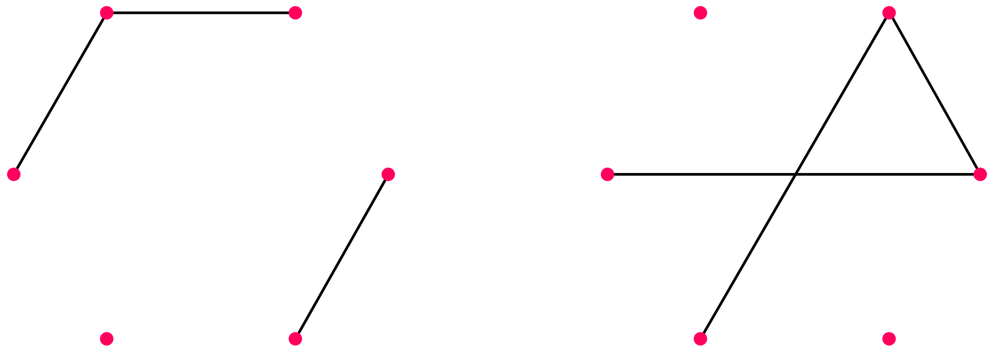


Una configuración de torres no atacantes en un tablero de 8×8.

5. 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) Primero póngase de acuerdo en cuál es el sistema: ¿las casillas o las torres?
   b) Encuentre el número medio de torres sobre el tablero en función de N, T y ϵ.
   c) Calcule la entropía del tablero.

6. 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 el número medio de aristas en función de β.

c) 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.

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

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

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

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. Obtengan la ecuación de estado y la fugacidad $z(T, V, N)$. Calculen $S(T, V, N)$ y comparen con los resultados de los otros ensambles.

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 $z(T, V, N)$.

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

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

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

   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.

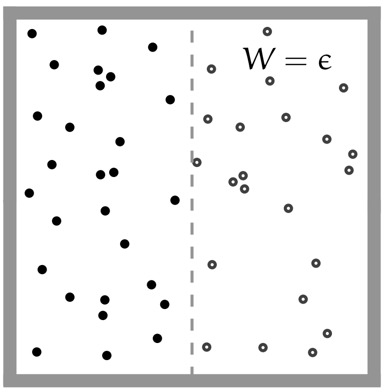
9. En dos dimensiones, el problema del gas ideal relativista de partículas con energía

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

puede resolverse en términos de funciones elementales.

   a) Calcule la función de partición canónica para N partículas.
   b) Encuentre la ecuación de estado, $P(T, A, N)$, donde A es el área ocupada por el gas.
   c) Encuentre la entropía por partícula, $s(T, A, N)$.
   d) Encuentre la energía por partícula, $u(T, A, N)$, y grafíquela como función de T.
   e) Encuentre el calor específico por partícula a área constante, $c_A(T, A, N)$. Grafíquelo.
   f) A partir de las funciones u y c_A, analice los límites no relativista y ultrarrelativista.
   g) Calcule la fugacidad, $z(\beta, P)$.

10. Un gas ideal, compuesto por partículas de masa m está contenido en una caja cúbica de volumen $2V$. Una mitad de la caja está a potencial cero y la otra a potencial $W = \epsilon$. El sistema está a temperatura T.

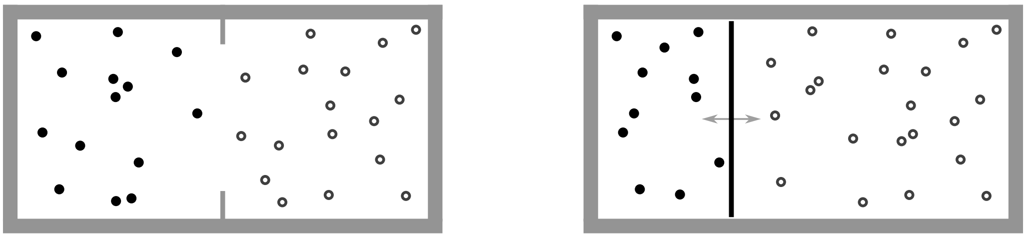


   a) Encuentre la densidad de partículas, la presión y la fracción de partículas en cada mitad de la caja en función de V, N y T. ¿Cuánto vale la energía total?
   b) Generalice sus resultados para una caja dividida en n compartimientos interconectados de volumen V, cada uno a un potencial ϵ_i.
   c) ¿Cuál es la relación entre las densidades de cada par de compartimientos?

11. 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.

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

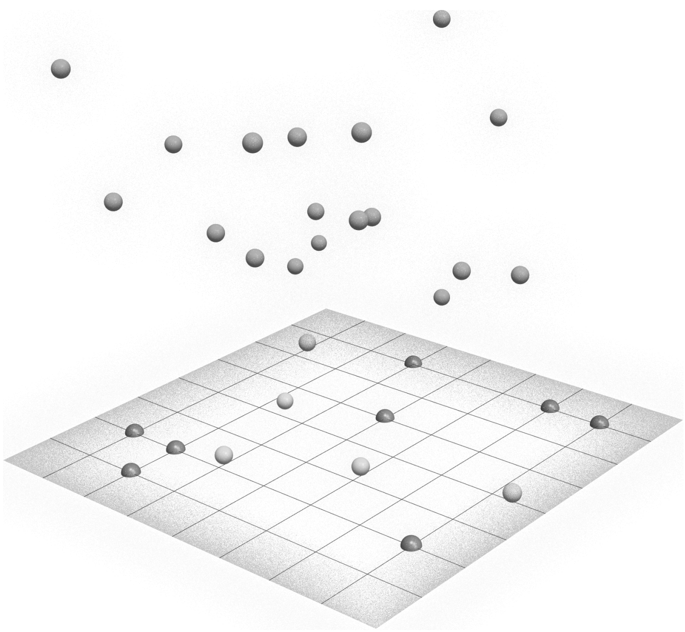
    b) La fracción de partículas en cada mitad del recipiente es la encontrada en el ítem anterior, pero ahora los dos compartimientos en los que está dividido el recipiente están separados por una pared móvil. A la izquierda de la pared, la energía de cada partícula es cp; a la derecha, $p^2/2m$. Encontrar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



12. Una superficie con sitios adsorbentes está en equilibrio con un gas ideal de partículas de masa m, a temperatura T y presión P. Cada sitio puede adsorber una partícula. Un sitio vacío tiene energía nula. Un sitio ocupado tiene una energía $-\epsilon_0$. Muestre que la fracción media de sitios ocupados es

$$\theta(T, P) = \frac{P}{P + P_0(T)},$$

y escriba la función $P_0(T)$.



13. Una superficie con sitios adsorbentes está en equilibrio con un gas ideal de partículas de masa m, a temperatura T y presión P. Cada sitio puede adsorber una partícula. Un sitio vacío tiene energía nula. Los estados de una partícula en un sitio ocupado se caracterizan por un número entero $n = 0, 1, \ldots$ y tienen una energía $\epsilon(n) = -\epsilon_0 + \hbar\omega n$, con $\omega \geqslant 0$. Muestre que la fracción de sitios ocupados puede escribirse igual que en el problema anterior y encuentre la función $P_0(T)$.

14. Generalice los dos problemas anteriores suponiendo que la función de partición de cada partícula adsorbida es Z_1.

15. Calcule la función de partición canónica de un cuerpo rígido de masa m y momentos de inercia principales I_1, I_2 e I_3 respecto de su centro de masa.

16. **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).

17. **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 16 en el límite $j \to \infty$, identificando $|\boldsymbol{\mu}|$ con $\mu_B g\, j$.

18. 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. 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.

    La motivación para este problema surge de imaginar proteínas inmersas en un líquido. No hay un sentido privilegiado en el cual deba leerse la secuencia de aminoácidos.

19. N espines ocupan los N sitios de una cadena lineal. Cada espín puede estar en dos estados, $\downarrow$ y $\uparrow$. Un espín en el estado $\downarrow$ tiene energía cero. Un espín en el estado $\uparrow$ tiene energía ϵ. Además, no puede haber dos espines consecutivos en el estado $\uparrow$.

   a) ¿Cuál es el número $\Omega(j)$ de estados de la cadena con j espines en el estado $\uparrow$?
   b) Escriba la función de partición exacta $Z(\beta, N)$ en el ensamble canónico.
   c) Asumiendo que $N \gg 1$, encuentre la fracción media $\overline{x}(\beta)$ de espines en el estado $\uparrow$. Cuando $\beta\epsilon \to 0$, ¿a qué valor tiende $\overline{x}(\beta)$?
   d) Encuentre la dispersión cuadrática media de x, es decir, $\left\langle (x-\overline{x})^2 \right\rangle$.

   Ayuda: Para $N = 4$ y $j = 2$, hay tres estados. Si se agrega un espín $\downarrow$ al final de la cadena, el número de estados sigue siendo $\Omega(j)$, pero ahora es más fácil contarlos: las cadenas de $N+1$ espines, terminadas en un espín $\downarrow$ y que no tienen dos espines $\uparrow$ consecutivos se pueden descomponer en bloques de dos tipos: bloques de pares de espines $\uparrow\downarrow$ y bloques de un espín $\downarrow$. Todo lo que resta es permutar esos bloques.