Física Teórica 3 – 1er cuatrimestre de 2017

Guía 3: *Ensambles*

1. Un oscilador armónico unidimensional tiene niveles de energía $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$, donde ω es la frecuencia del oscilador y $n = 0, 1, 2, \ldots$ 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 del oscilador 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 (a). ¿Cuándo comienzan a diferir apreciablemente?

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

   (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

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

   (c) Demostrar que el número de configuraciones está dado por $\Omega(M_0) = \dfrac{(N + M_0 - 1)!}{M_0!(N-1)!}$.

   (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.

3. 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:

   $$E(1,+) = -\mu_1 H \qquad E(1,-) = \mu_1 H$$
   $$E(2,+) = -\mu_2 H \qquad E(2,-) = \mu_2 H.$$

   Se sabe que la energía total promedio del sistema de los dos espines es $-E_0$, siendo $E_0 \ll H\mu_i$.

   (a) Halle la distribución de probabilidades correspondiente al equilibrio.

   (b) 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:

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

      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. Considere una cadena lineal formada por N eslabones distinguibles, que vamos a interpretar como un modelo microscópico de un resorte. Cada eslabón puede tener dos energías, 0 y ϵ, y para cada una de estas energías hay dos estados posibles, que corresponden a que el eslabón tenga longitud a o b. El resorte se encuentra en equilibrio a temperatura T y tensión f.

   (a) Calcule la energía interna, E, y la longitud, L, del resorte como funciones de T, f y N (i) en el ensamble microcanónico, (ii) en el ensamble canónico, y (iii) en el ensamble isobárico.

   (b) Pruebe que, para tensiones pequeñas, se satisface la ley de Hooke,

$$f(T, L, N) = \kappa(T, N)[L - L_0(N)],$$

   y obtenga el valor de la constante recuperadora $\kappa(T, N)$ y la longitud natural $L_0(N)$ del resorte.

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 $\Omega(n)e^{-\beta n W}$ 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 ϵ_i, $i = 1, 2, \ldots, n$. ¿Cuál es la relación entre las densidades de cada par de compartimientos?

14. Considere un sistema unidimensional formado por N partículas clásicas y distinguibles de masa m. Las partículas están sometidas a un potencial armónico de frecuencia angular ω, y también al campo gravitatorio terrestre (el sistema está orientado verticalmente). El hamiltoniano del sistema es pues

$$H(q,p) = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q_i^2 + mgq_i \right)$$

   donde g es la aceleración de la gravedad.

   (a) Calcule el número de microestados, $\bar{\Omega}(E)$, con energía menor o igual que E.

   (b) Calcule el número de microestados, $\Omega(E)$, con energía entre $E - \Delta E$ y E, donde ΔE es la precisión con la que medimos la energía. Evalúe el resultado al orden más bajo en el límite en que N es muy grande, y de ahí obtenga la entropía $S(E)$.

(c) Obtenga $E(T)$ y $F(T)$, donde T es la temperatura y F la energía libre de Helmholtz.

15. 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

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

16. 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.

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

    $$\mathbf{P} = \frac{N}{V}\mu\left[\coth\left(\frac{\mu\mathcal{E}}{kT}\right) - \frac{kT}{\mu\mathcal{E}}\right]\hat{n}, \tag{1}$$

    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 $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = \epsilon\mathbf{E}$.

18. **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 19 en el límite $j \to \infty$, identificando $|\boldsymbol{\mu}| = \mu_B g\, j$.

19. **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 $j, j-1, ..., -j+1, -j$; 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).

20. **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

$$H = \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{2m_j} \left[\mathbf{p}_j - \frac{e_j}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_j)\right]^2 + U(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N).$$

siendo $\mathbf{A}$ el potencial vectorial del cual se deriva el campo magnético. ¿Existe alguna contradicción entre este problema y el resultado del problema 19?