Física Teórica 3 $-$ 1er cuatrimestre de 2018

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 un 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:

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

      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 $\Omega(n)e^{-\beta nW}$ 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. Una partícula cuántica de masa m está confinada en una caja cúbica de lado L. Su hamiltoniano es $H = p^2/2m$.

    (a) Muestre que los autoestados del hamiltoniano están etiquetados por un vector $\vec{n}$ de números enteros positivos, y que la energía del estado $\vec{n}$ es

    $$E(\vec{n}) = \frac{1}{2m}\left(\frac{h\vec{n}}{2L}\right)^2,$$

    donde h es la constante de Planck.

    (b) Escriba la función de partición canónica de la partícula como una suma sobre los autoestados del hamiltoniano. ¿Bajo qué condiciones se puede aproximar esa suma por una integral? Calcule esa integral y compárela con la función de partición clásica.

13. 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.

14. 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?

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

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

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 conjunto de N dados se encuentra sobre una superficie horizontal de área A que vibra fuertemente. Los dados, de masa M y lado l, pueden desplazarse libremente sobre la superficie y cambiar de cara. El sistema, pues, se puede interpretar como un gas ideal bidimensional cuyas partículas tienen un grado de libertad interno (la cara visible del dado) con seis estados posibles. Los dados están cargados para que salga el número 6 con una masa puntual m en el centro de la cara 1. El sistema se encuentra en equilibrio a temperatura T en presencia del campo gravitatorio terrestre.

(a) Calcule la función de partición canónica del sistema.

(b) Calcule la energía media del sistema. Estudie los límites de temperaturas altas y bajas y discuta sus resultados.

(c) Calcule el número medio de veces que aparece cada una de las caras. ¿Qué sucede a $T = 0$?

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

19. **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 20 en el límite $j \to \infty$, identificando $|\boldsymbol{\mu}| = \mu_B g\, j$.

20. **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).

21. **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 20?