Ensemble Canónico

Mecánica Estadística (2022)

Práctico 3

1. La función de partición está definida por la suma sin restricciones:

$$\mathcal{Z} = \sum_r e^{-\beta E_r},$$

donde E_r es la energía de un sistema de volumen V en su estado cuántico r, medida respecto a un determinado nivel de referencia. A partir de esta cantidad se obtienen en el ensemble canónico los valores de energía interna U, entropía S y presión p por las relaciones:

$$U = -\left(\frac{\partial Ln(\mathcal{Z})}{\partial \beta}\right)_V, \qquad S = Ln(\mathcal{Z}) + \beta U, \qquad p = \frac{1}{\beta}\left(\frac{\partial Ln(\mathcal{Z})}{\partial V}\right)_\beta.$$

a) Considere que se cambia el nivel de referencia de la energía en un valor ϵ_0 de forma que $E_r^* = E_r + \epsilon_0$, y la nueva función de partición será:

$$\mathcal{Z}^* = \sum_r e^{-\beta E_r^*}.$$

Calcule los nuevos valores de energía total del sistema $U^* = \langle E_r^* \rangle$, entropía S^* y presión p^* comparando los resultados con U, S y p.

b) Un sistema determinado A está compuesto por dos partes A' y A'', que interaccionan solo débilmente entre sí. El estado cuántico r del sistema A' tiene energía E'_r, mientras que el estado cuántico s del sistema A'' tiene energía E''_s. De esta forma el estado del sistema total A estará especificado por los números cuánticos r y s cuya energía es: $E_{rs} = E'_r + E''_s$. Si las funciones de partición correspondientes a A, A' y A'' son $\mathcal{Z}$, $\mathcal{Z}'$ y $\mathcal{Z}''$ respectivamente, demuestre que $\mathcal{Z} = \mathcal{Z}'\mathcal{Z}''$. Discuta qué consecuencias tiene esto para el valor que tomarán las energías internas, entropías y presiones del sistema total A en función de la de sus partes A' y A''.

c) Demuestre que la dispersión en energía de un sistema que se encuentra a temperatura $T = \frac{1}{k_B \beta}$ viene dada por:

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle = k_B T^2 \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$$

2. El teorema de equipartición se puede enunciar en una forma más general de la siguiente forma:

$$\left\langle \eta_i \frac{\partial H}{\partial \eta_j} \right\rangle = \delta_{ij} k_B T$$

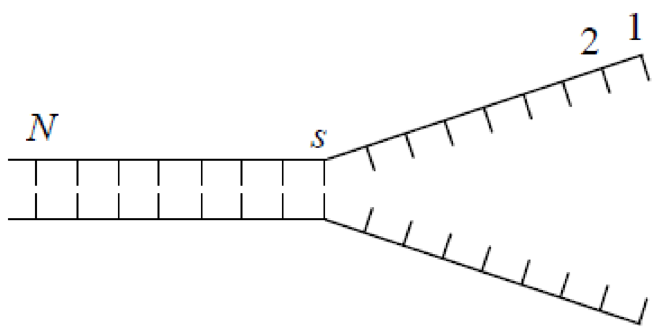
, siendo η_i una variable que representa tanto una coordenada q o un momento p.

   a) Demuéstrelo para un sistema canónico tal que el potencial es $+\infty$ en los límites del rango de las coordenadas (por ejemplo: partículas en una caja), escribiendo la definición del valor medio anterior e integrando por partes.

   b) Calcule los siguientes valores medios:

      1) $H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + A_i x_i^n$, con $n > 0$.
      2) $H = \sum_{i=1}^{N} |\vec{p}_i| c$.
      3) En el caso $H = \frac{p^2}{2m} + ax^2 + bx^4$, ¿qué valores medios puede calcular?

3. Un cierre tiene N enlaces. Cada enlace tiene un estado de energía en que está cerrado (con energía nula) o está abierto (con energía ϵ). El cierre solo se puede abrir desde un lado por lo que el enlace s-ésimo puede estar abierto si todos los enlaces 1, 2, ..., $s-1$ están abiertos. De esta forma el cierre tiene $N+1$ estados posibles: que todos los enlaces desde 1 a s estén abiertos y todos los enlaces de $s+1$ a N están cerrados (con s desde 1 a N), además del estado en que todos los enlaces están cerrados. Cada uno de estos estados tiene energía $E_s = s\epsilon$.



   a) Muestre que la función de partición puede ser sumada para dar:

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

   b) Demuestre que el valor esperado de enlaces abiertos puede calcularse como:

$$\langle s \rangle = -\frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial \epsilon} \right)$$

   c) Encuentre el valor esperado de enlaces abiertos en el límite $\beta\epsilon \ll 1$, de forma que $(N + 1)\beta\epsilon \gg 1$.

   d) Calcule la entropía del sistema en el mismo límite de la parte anterior.

   e) Interprete físicamente (comentando) los resultados de las partes $3b$, $3c$ y $3d$ anteriores.

4. Se coloca un sólido a la temperatura absoluta T en un campo magnético $H = 3000 gauss$. El sólido contiene átomos paramagnéticos de espín $\frac{1}{2}$ que interaccionan débilmente entre ellos.

   a) Si el momento magnético es igual al magnetón de Bohr. ¿Por debajo de qué temperatura se debe enfriar el sólido para que el 75 % de los átomos tengan sus espines paralelos al campo magnético externo?

   b) Suponga que el sólido no tiene átomos paramagnéticos, sino muchos protones (por ejemplo es el caso de la parafina). Cada protón tiene espín $\frac{1}{2}$ y un momento magnético característico. ¿Cuál sería la temperatura de $4a$ en este caso?

5. Estudie el paramagnetismo, en equilibrio térmico, de una sal en la cual iones paramagnéticos de espín j que tienen un momento magnético μ. En presencia de un campo magnético los niveles de energía son $-\mu jH$, $\mu(-j+1)H$, $\ldots$, $\mu(j-1)H$, μjH.

   a) Calcule la función de partición, la energía y la magnetización media para cada ion. Grafique para diferentes valores de j (curvas de Brillouin).

   b) Calcule la susceptibilidad magnética, muestre que la ley de Curie se satisface y calcule el coeficiente de Curie.

6. Antes del nacimiento de la mecánica cuántica, Langevin explicaba el paramagnetismo suponiendo que cada ion paramagnético poseía un momento magnético permanente dado por un vector $\vec{\mu}$ clásico libre de orientarse en todas las direcciones. La energía depende de la dirección relativa del momento magnético respecto del campo magnético como $E(\vec{\mu}) = -\vec{\mu} \cdot \vec{H}$. La ley de probabilidad es, en equilibrio térmico, la distribución de Boltzmann:

$$p(\vec{\mu})d^2\vec{\mu} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\beta E(\vec{\mu})} d^2\vec{\mu}$$

   .

   a) Calcule la función de partición $\mathcal{Z}$, deduzca el valor medio de la energía, la magnetización y la susceptibilidad magnética longitudinal.

   b) Compare estas magnitudes para la teoría cuántica de un paramagneto constituido por iones con espín j. Muestre que los resultados se reducen al paramagnetismo clásico de Langevin para $\mu = \mu_B g(j + \frac{1}{2})$ y $j \to \infty$, pero que la curva de saturación de Langevin no es correcta cuantitativamente.

7. Dos dipolos clásicos con momento dipolar $\vec{\mu}_1$ y $\vec{\mu}_2$ están separados una distancia R dada y la orientación de los respectivos vectores de momento magnético es libre. Están en equilibrio térmico a temperatura T. Calcule en el límite de altas temperaturas $\left(\frac{\vec{\mu}_1 \cdot \vec{\mu}_2}{k_B T R^3} \ll 1\right)$:

   a) La función de partición clásica.

   b) La energía media.

   c) La fuerza media entre los dipolos

   El potencial entre dos dipolos es:

$$U(r) = \frac{\vec{\mu}_1 \cdot \vec{\mu}_2}{r^3} - 3\frac{(\vec{\mu}_1 \cdot \vec{r})(\vec{\mu}_2 \cdot \vec{r})}{r^5}.$$

8. Considere un sistema magnético unidimensional de N espines localizados, a temperatura T, descritos por el hamiltoniano:

$$H = -J \sum_{i=1,3,\ldots N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} - \mu_0 H \sum_{i=1}^{N} \sigma_i,$$

donde los parámetros J, μ_0 y H son positivos, y $\sigma_i = \pm 1$ para todos los sitios i. Asuma que N es un número par, y note que la primera suma es sobre los enteros impares.

a) Obtenga una expresión para la función de partición canónica y calcule la energía interna por espín $u(T, H)$. Bosqueje la gráfica de $u(T, H = 0)$. Obtenga una expresión para la entropía por espín $s(T, H)$ y bosqueje la gráfica $s(T, H = 0)$.

b) Obtenga una expresión para la magnetización por partícula:

$$m(T, H) = \frac{1}{N} \left\langle \mu_0 \sum_{i=1} N \sigma_i \right\rangle.$$

Y para la susceptibilidad:

$$\xi(T, H) = \left(\frac{\partial m}{\partial H} \right)_T.$$

Bosqueje la gráfica $\xi(T, H = 0)$.

9. Considere nuevamente el problema de la banda de goma. Sujeta por un extremo a un clavo y soporta por el otro extremo un peso W. Suponiendo nuevamente que la banda de goma está compuesta de una cadena de polímeros ligados de N segmentos unidimensionales unidos extremo a extremo. Cada segmento tiene una longitud a y puede orientarse paralela o perpendicularmente a la dirección vertical descendente. Suponga que si se orienta paralela a la dirección vertical su energía es $\epsilon > 0$ y sino 0. Calcule la longitud media de la banda $\langle L \rangle$ en función de W. Halle la constante elástica.

10. Considere un sistema de N partículas clásicas no interactuantes. Los estados de las partículas individuales tienen energía $\epsilon_n = n\epsilon$, y son veces n degenerados ($\epsilon > 0$; $n = 1, 2, 3, \ldots$). Calcular la función de partición y la entropía del sistema. Obtenga una expresión para la energía interna y la entropía como función de la temperatura. ¿Cuáles son las expresiones para la entropía y el calor específico en el límite de altas temperaturas?.

11. Considere un sistema de N partículas clásicas no interactuantes en contacto con un reservorio térmico a temperatura T. Cada partícula puede tener energía 0, $\epsilon > 0$ ó 3ϵ. Obtenga una expresión para la función de partición canónica y calcule y bosqueje la energía interna por partícula $u(T)$ (indicando los valores de en los límites $T \to 0$ y $T \to \infty$). Calcular y bosquejar la entropía por partícula $s(T)$ y el calor específico a volumen constante $c_v(T)$.