Mecánica Estadística

03/06/2021

$\langle E \rangle$ ¿ $\sum P_l = 1$

Cuestiones

1. (*1 punto*) Considérese un sistema físico en contacto con un termostato. En el caso en el que el funcional entropía fuese de la forma:

$$S_q\{P_l\} = -k_B \frac{1 - \sum_{l=1}^{\Gamma} P_l^q}{1-q},$$

donde Γ es el número total de estados del sistema, y utilizando el principio de entropía máxima de Jaynes, demuéstrese que la distribución canónica asociada a la colectividad de sus microestados de equilibrio puede expresarse como

$$P_l = \frac{[1 - \beta(q-1)E_l]^{1/(q-1)}}{Z_q}$$

¿Cuál es la expresión de Z_q? ¿Cuál es el límite $q \to 1$ de esta distribución de probabilidad? (*Nota: téngase en cuenta que los parámetros de Lagrange pueden elegirse de manera arbitraria.*)

2. (*1 punto*) Un sistema termodinámico está formado por N subsistemas independientes espacialmente separados, cada uno de los cuales tiene un espectro de niveles de energía no degenerados 0, ϵ y 2ϵ. Calcúlese la función de partición si el sistema se encuentra en equilibrio térmico con un termostato a la temperatura T, así como su energía interna y su entropía.

3. (*1 punto*) Coméntese, brevemente, el concepto de número de ocupación y su principal utilidad mecanoestadística. Motívese la necesidad de su introducción y cómo se implementa la aproximación de límite diluido. ¿Es esta última equivalente a la aproximación clásica?

4. (*1 punto*) Coméntese brevemente el significado de la aproximación adiabática y sus consecuencias desde el punto de vista de la Mecánica Estadística. Analícese su aplicación en el caso de un gas ideal de moléculas diatómicas.

Problemas

independientes

1. (*1,5 puntos*) Calcúlese la evolución hacia el equilibrio del valor medio de la polarización eléctrica de una cadena ideal unidimensional de N eslabones de momento dipolar eléctrico p, en presencia de un campo eléctrico E, y en contacto con un termostato que le impone una temperatura T. Simplifíquese la expresión de equilibrio de la polarización media obtenida suponiendo que $pE \ll k_BT$ y coméntense los resultados obtenidos.

2. (*1,5 puntos*) Una partícula aislada de masa m puede moverse libremente con una energía cinética entre E y $E + \delta E$, en un espacio unidimensional en el intervalo entre 0 y L. En el marco de la Mecánica Clásica,

¿preciso algo?

i) ¿Cómo se definen los microestados en ese espacio de las fases?

ii) Represéntese el espacio físico clásico, identificando detalladamente las regiones que son accesibles a la partícula.

iii) Asúmase que la partícula tiene inicialmente energía E. ¿Qué sucede con el volumen fásico durante un desplazamiento adiabático de la pared en $x = L$?

sin cálculos

iv) Repítase el apartado ii) suponiendo que la partícula se mueve en una dimensión sometida a la acción de un "muelle ideal" (oscilador armónico unidimensional).

v) Sin necesidad de nuevos cálculos matemáticos, ¿cómo se modificarían estos resultados en el caso cuántico?

ulterior apartado

3. (*1,5 puntos*) Obténgase la relación entre la energía interna y la energía de Fermi de un gas de electrones no relativistas confinados en un nanohilo de InGaAs (1D) a $T = 0$ K. Calcúlese la capacidad calorífica del nanohilo en las proximidades de la temperatura anterior.

$g_s = 2$

Lo terminé!!

4. (*1,5 puntos*) Si un cristal se elonga en la dirección de uno de sus ejes la frecuencia de las oscilaciones de red en esa dirección se ve modificada, i.e., la frecuencia natural de los osciladores del sólido, ω_0, pasa a ω_s en la dirección de la elongación. Usando el modelo de Einstein, obténgase:

i) la capacidad calorífica del sistema.

ii) La ecuación de estado para la elongación

$$J = \left(\frac{\partial F}{\partial L}\right)_T$$

si consideramos que

$$\omega_s = \omega_0 + \frac{\alpha(L - L_0)^2}{2L_0^2}$$

donde L_0 es la longitud de equilibrio.

⇒ me faltaría el 1.

Relaciones matemáticas de posible utilidad:

Aproximaciones

$\ln(N!) \approx N\ln(N) - N$; para $N \to \infty$

$$\ln(1+\alpha x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n}(\alpha x)^n$$

$$\ln(1-\alpha x) = -\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\alpha x)^n}{n}; \text{ para } 0 < x < 1$$

$$\ln(1 \pm x) \approx \pm x; \text{ para } |x| \ll 1$$

Función Γ

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} x^{z-1} e^{-x}\, dx;$$

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x);$$

$$\Gamma(n+1) = n! \quad \forall n \in \mathbb{N}$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}+n\right) = \frac{(2n)!}{4^n(n!)}\sqrt{\pi}; \quad \forall n \in \mathbb{N}$$

Función ζ de Riemann

$$g_k(\lambda) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n^k}$$

$$g_k(1) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^k} \equiv \zeta(k)$$

$$\frac{dg_k(\lambda)}{d\lambda} = \frac{1}{\lambda} g_{k-1}(\lambda)$$

$$\zeta(-1) = -\frac{1}{12}$$

$$\zeta(0) = -\frac{1}{2}$$

$$\zeta\left(\frac{1}{2}\right) \approx -1{,}46$$

$$\zeta(1) \to \infty$$

$$\zeta\left(\frac{3}{2}\right) \approx 2{,}61$$

$$\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}$$

$$\zeta(3) \approx 1{,}20$$

$$\zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}$$

$$f_k(\lambda) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{\lambda^n}{n^k}$$

Integrales

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a(x+b)^2}\, dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx+c}\, dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\, e^{\frac{b^2}{4a}+c}$$

$$I_n = \int_0^{\infty} x^n e^{-ax^2}\ ; \ I_{n+2} = \frac{n+1}{2a} I_n$$

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-x}^{x} e^{-t^2} dt = \mathrm{erf}(x)$$

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n+1}}{n!(2n+1)}$$

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{\Gamma(n+1)}{a^{n+1}}$$

$$\int_0^{\infty} \frac{x^n}{e^x - 1} dx = \Gamma(n+1)\zeta(n+1)$$

$$\int_0^{\infty} \frac{x^n}{e^x + 1} dx = (1 - 2^{-n})\Gamma(n+1)\zeta(n+1)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(\pi x)}{\pi x} = 1$$

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax^2} dx = \frac{a^{-n/2-1/2}}{2}\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)$$

Varios

Volumen de una hiperesfera de radio r en D dimensiones:

$$V_D = \frac{r^D \pi^{D/2}}{\Gamma(D/2+1)} \Rightarrow \text{Para el caso}$$

$$D = 1 = \frac{r\sqrt{\pi}}{\Gamma\left(\frac{1}{2}+1\right)}$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}+1\right) = \frac{2}{4}\sqrt{\pi} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$D = \frac{r\sqrt{\pi}}{\sqrt{\pi}/2} = 2r$$

Constantes físicas de interés

k_B	=	$1,38\ 10^{-23}$ J/mol K	Cte. Boltzmann
h	=	$6,63\ 10^{-34}$ kg m^2 s^{-1}	Cte. Planck
m_e	=	$9,1\ 10^{-31}$ kg	masa del electrón
m_n	=	$1,6749\ 10^{-27}$ kg	masa del neutrón
m_p	=	$1,6726\ 10^{-27}$ kg	masa del protón
e	=	$1,6\ 10^{-19}$ C	carga del electrón
c	=	$3\ 10^8$ m s^{-1}	velocidad de la luz
μ_N	=	$5,05\ 10^{-27}$ J T^{-1}	magnetón nuclear
μ_B	=	$9,27\ 10^{-24}$ J T^{-1}	magnetón de Bohr