Mecánica Estadística

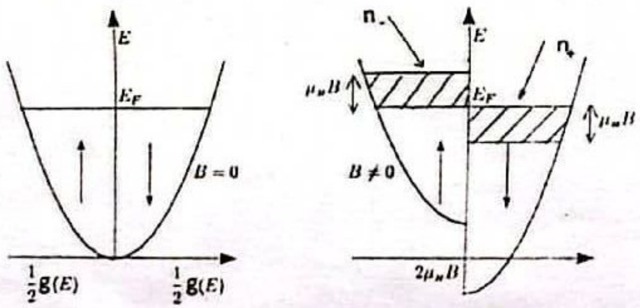
02/06/2022

Cuestiones

1. (*1 punto*) Usando el principio de entropía máxima, demuéstrese que la distribución exponencial corresponde a una situación en la que se impone el valor medio a una variable aleatoria x.

2. (*1 punto*) Un sistema termodinámico está formado por N partículas independientes y localizadas, cada una de las cuales tiene un espectro de niveles de energía $\epsilon_1=0$, $\epsilon_2=\epsilon$ y $\epsilon_3=2\epsilon$, con degeneraciones $g_1=1$, $g_2=2$ y $g_3=1$. Calcúlese la función de partición del sistema en equilibrio térmico con un termostato a la temperatura T, así como su energía interna y su entropía. Demuéstrese que este sistema es termodinámicamente equivalente a otro formado por $2N$ partículas independientes y localizadas con dos niveles no degenerados de energías $\epsilon_1=0$ y $\epsilon_2=\epsilon$.

3. (*1 punto*) Paramagnetismo de Pauli. *Considérese un gas ideal de electrones (factor de Landé $g=2, m_s=\pm 1/2$) con momentos magnéticos $-g\mu_B m_s \simeq \mp\mu_B$ en presencia de un campo magnético, de modo que las poblaciones de electrones con energía próxima a la energía de Fermi ($\mu_B B \ll \epsilon_F$) y con espines paralelos ($n_\uparrow$) y antiparalelos ($n_\downarrow$) al campo adquieren diferentes energías (Fig. 1). Debido a ello, las poblaciones de spines paralelos* y antiparalelos al campo difieren de su valor de equilibrio en ausencia de campo ($n_e/2$), aumentando la de spines antiparalelos al campo y disminuyendo la de paralelos en la misma medida.



Estímese la magnetización $\langle M\rangle = (n_\downarrow - n_\uparrow)\mu_B$ en términos de la densidad de estados del sistema y demuéstrese la ecuación de Sommerfeld para la susceptibilidad paramagnética del gas de electrones, $\chi = g(\epsilon_F)\mu_B^2$.

4. (*1 punto*) Considérese un sistema de N partículas indistinguibles, sin estructura interna y en interacción "débil", con M estados de energía de partícula cada una de ellas.

   i) Escríbase la función de partición canónica del sistema en función de los números de ocupación de los niveles de energía de las partículas individuales.

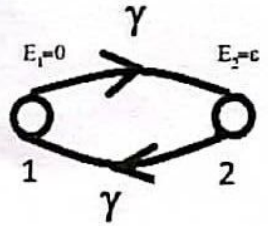
   ii) ¿Cuál es el factor de degeneración si las partículas están en sitios localizables (i.e. son discernibles)? Factorícese la función de partición en este caso.

   iii) ¿A qué se reduce dicho factor en el límite diluido?

   iv) Explíquese **brevemente** en qué consiste la denominada paradoja de Gibbs y cómo se resuelve en el formalismo estadístico clásico.

Problemas

1. (*1,5 puntos*) En el proceso *one-step* de la figura:



   i) Escríbase el sistema de ecuaciones diferenciales de evolución temporal de las probabilidades de los dos estados, $p_i(t), i=1,2$ en términos de la probabilidad de transición por unidad de tiempo, γ. Verifíquese que $\sum_i \dot{p}_i(t) = 0,\ \forall t$.

   ii) Escríbase la matriz de probabilidades de transición por unidad de tiempo, A. Obténganse el tiempo de relajación al equilibrio del sistema en términos de γ y la distribución de probabilidad de equilibrio. ¿Cuándo se alcanza esta distribución de probabilidad?

   iii) Escríbase la expresión explícita de la dependencia temporal de las componentes de la distribución de probabilidad, $\dot{p}_i(t), i=1,2$. ¿Cuál de las componentes evoluciona más rápidamente al equilibrio? Supóngase que el sistema se preparó inicialmente en el microestado 1, $p_1(0)=1$.

   iv) Escríbase la expresión para la evolución temporal de la energía interna y de la entropía y evalúense los comportamientos de estas magnitudes en los límites $t\to 0$ y $t\to\infty$.

2. (*1,5 puntos*) Considérese un gas ideal diatómico bidimensional con momento de inercia I y estados de rotación de energía $E_l = \hbar^2 l^2/2I$, $l=0,\pm1,\pm2\ldots$.

   i) Obténgase una expresión para la función de partición rotacional del sistema. (Nota: no tratar de sumar la serie en este paso).

   ii) Calcúlese la ratio de moléculas que se encuentran en estados de rotación $l=3$ y $l=2$.

   iii) Calcúlese ahora la contribución de la rotación molecular a la capacidad calorífica en el límite $\beta\hbar^2/2I \ll 1$.

3. (*1,5 puntos*) Considérese una cavidad de volumen V en la que coexisten un gas ideal de densidad $\rho = N/V$ y la correspondiente radiación electromagnética asociada a la temperatura T de la cavidad (cuerpo negro). Obténgase una expresión para la presión de la radiación y para la temperatura a la cual se igualan esta y la presión del gas. Calcúlese dicha temperatura para una densidad del gas igual a la correspondiente a las condiciones termodinámicas estándar.

4. (*1,5 puntos*) Un gas ideal monoatómico, que suponemos puede tratarse en el límite clásico a cualquier temperatura, está encerrado en una caja de volumen V y en contacto con un baño térmico a temperatura T. La caja tiene una parte (con volumen $V_0 = V/2$) en la que la energía potencial de los átomos es cero y la otra parte (con volumen $V_1 = V/2$) en la que los átomos tienen una energía potencial constante $E_P > 0$.

   i) Calcúlese la expresión de la función de partición canónica, así como la expresión de la energía media separando la contribución cinética de la potencial.

   i) Determínese la expresión de la capacidad calorífica a volumen constante (V_0 y V_1 constantes).

   iii) En los límites de altas y bajas temperaturas obténgase la energía cinética media y la energía potencial media. ¿Cuál es el número medio de partículas en V_0? ¿Y en V_1?

Relaciones matemáticas de posible utilidad:

Aproximaciones

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Varios

Volumen de una hiperesfera de radio r en D dimensiones:

$$V_D = \frac{r^D \pi^{D/2}}{\Gamma(D/2+1)}$$

Torema multinomial

$$\left(\sum_i x_i\right)^n = \sum_{k_1+k_2+\cdots+k_m=n} \binom{n}{k_1, k_2, \ldots, k_m} \prod_{1 \le t \le m} x_t^{k_t}$$

$$\binom{n}{k_1, k_2, \ldots, k_m} = \frac{n!}{k_1!\, k_2! \cdots k_m!}$$

Constantes físicas de interés

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