Termodinámica y Mecánica Estadística II

Guía 3 - Septiembre de 2009

Problema 1: Considere un sistema de N iones localizados definido por el Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = D \sum_{i=1}^{N} s_i^2$$

donde las variables s_i pueden asumir los valores 0, ± 1 para todo valor de i.

a) Encuentre el número de estados microscópicos accesibles cuando el sistema tiene energía total E y calcule la entropía $s(u)$, con $u = E/N$.

b) De una expresión para el calor específico en función de T, escriba también la entropía en función de T y analice los casos límite $T \to 0$ y $T \to \infty$.

Problema 2: Considere un sistema compuesto por N osciladores no interactuantes clásicos y *distinguibles* de masa m y frecuencia ω. Calcule la entropía cuando el sistema tiene energía total E. Calcule también el calor específico. Compare los resultados con los obtenidos en el ejercicio 7 de la guia 2.

Problema 3: Muestre que, para una distribución de probabilidades $\{P_i\}$ correspondiente a M eventos, si

$$\sum_{i=1}^{M} P_i = 1,$$

entonces la función

$$S(\{P_i\}) = -\sum_i P_i \ln P_i$$

toma su máximo valor cuando $P_i = 1/M$ para todo i. Calcule el valor de $S(\{P_i\})$.

Problema 4: Usando la definición de entropía (S) como valor de expectación, encontrar S para:

a) $f(x) = C\, e^{-Cx}\ \ \Theta(x)$

b) $f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x-\eta)^2}{2\sigma^2}\right]$

Problema 5: Suponga que una urna contiene pelotas con números, y que estos números pueden ser 0, 1 ó 2. Se sabe además que el valor medio del número inscripto en las pelotas de la urna es $\langle n \rangle = 2/7$.

a) Usando el principio de máxima incertidumbre, estime las probabilidades P_0, P_1 y P_2.

b) Calcule el valor de $\langle n^3 \rangle - 2\langle n \rangle$.

c) Suponga que además de conocer el valor medio $\langle n \rangle$, se sabe también que $\langle n^3 \rangle = 3/7$. Estime las probabilidades P_0, P_1 y P_2. Muestre que el valor de S con esta restricción es menor que sin ella.

Problema 6: Determine la densidad de probabilidad $f_X(x)$ que maximiza la entropía para una variable X, imponiendo $\langle x^2 \rangle = m_2$.

Problema 7: Considere un conjunto de partículas sujetas a la restricción que el valor medio para la energía cinética es $\langle K \rangle = K_0$. Encuentre las distribuciones

a) $f_V(v_x)$ para una de las componentes de la velocidad.

b) $f(v)$ para el módulo del vector velocidad de las partículas.

Problema 8: Muestre que en el ensamble canónico se tienen las relaciones:

a) $U(T,N) \;=\; -\frac{\partial}{\partial\beta}\,\ln\mathcal{Z}$

b) $S(T,N) \;=\; k_B\left(1 - \;\beta\,\frac{\partial}{\partial\beta}\right)\,\ln\mathcal{Z}$

c) $C_v \;=\; k_B\,\beta^2\,\left(\langle\mathcal{H}^2\rangle \;-\; \langle\mathcal{H}\rangle^2\right)$

Infiera de este resultado la positividad del calor específico.

Problema 9: Considere el sistema de 2 niveles del problema 5-a de la guía 2.

a) Use el ensamble canónico para calcular la energía libre $F_N(T)$.

b) Calcule la energía interna $U_N(T)$ y la entropía $S_N(T)$.

c) Calcule $\frac{S_N(U/N)}{k_B N}$ y compare con la expresión obtenida en el ensamble microcanónico **antes** de tomar el límite termodinámico, compruebe que no coinciden y calcule el término dominante de la diferencia para N grande. Grafique ambas expresiones versus $1/N$ para $E_N/N\epsilon = 0{,}1$.