Termodinámica y Mecánica Estadística II

Guía 4 - Septiembre de 2009

Problema 1: Considere un sistema distribuido entre todos sus estados accesibles r de acuerdo con una distribución de probabilidad P_r *arbitraria* (adecuadamente normalizada), y definamos su entropía mediante la relación

$$S = -k \sum_r P_r \ln P_r .$$

Con el objeto de comparar esta distribución con la canónica $P_r^o = e^{-\beta E_r}/Z$ (Z es la función partición) correspondiente a la misma energía media $<E>$:
a) demostrar que

$$S - S_o = k \sum_r P_r \ln \frac{P_r^o}{P_r} .$$

b) teniendo en cuenta que $\ln x \leq x - 1$, demostrar que la entropía para la distribución canónica cumple $S_o \geq S$, siendo válido el signo igual únicamente si $P_r = P_r^o$ para todos los estados r.

Problema 2: *Sistema de spines 1 no interactuantes*

Los átomos de cierto sólido cristalino pueden ser de dos tipos: magnéticos (de spin 1/2) o no-magnéticos, asi el Hamiltoniano del sistema puede escribirse como

$$\mathcal{H} \,=\, D \sum_{i=1}^{N} s_i^2 \,-\, \mu_0 \, H \sum_{i=1}^{N} s_i \quad ; \qquad s_i = 0, \pm 1$$

donde D se interpreta como la diferencia de potenciales químicos entre ambas especies atómicas.

a) Use el ensamble canónico para obtener la densidad de magnetización y la densidad de átomos magnéticos

$$q \,=\, \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^{N} s_i^2 \right\rangle$$

en función de T y H.

b) Cuando el campo es nulo, reobtenga las magnitudes en función de la temperatura obtenidas utilizando el ensamble microcanónico en el problema 1 de la guia 3.

c) Estudie el límite no diluído y recupere la energía libre y magnetización para el caso de N átomos magnéticos descriptos en el problema 2 del primer parcial..

Problema 3: Considere un sistema magnético unidimensional de N spines 1/2 localizados definido por el Hamiltoniano

$$\mathcal{H} \,=\, -J \sum_{i=1,3,5,\cdots,N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} \,-\, \mu_0 H \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \quad ; \quad \sigma = \pm 1 \quad ; \quad J, \mu_0 > 0$$

Considere N par.

a) Obtenga la función partición, la energía interna $u(T, H)$ y la entropía como función de T y H.

b) Calcule la magnetizacion por spin y la suceptibilidad magnética

$$m \,=\, \frac{\mu_0}{N} \left\langle \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \right\rangle \quad ; \quad \chi(T, H) \,=\, \left(\frac{\partial m}{\partial H} \right)_T$$

c) Grafique $u(T, H = 0), s(T, H = 0)$ y $\chi(T, H = 0)$.

Problema 4: Calcule la energía interna de un sólido tridimensional clásico. Derive una expresión para el calor específico y estudie los casos límites $T \to 0$ y $T \to \infty$.

Problema 5: Obtenga la presión de un gas ideal clásico como función de N, V y T mediante el cálculo de la función partición. Obtenga también una expresión para $\mu(T, p, N)$.

Problema 6: Considere un sistema clásico de N moléculas diatómicas no interactuantes encerradas en un volumen V a una temperatura T. El hamiltoniano para cada molécula es

$$\mathcal{H}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{2m}(\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2) + \frac{K}{2}|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2$$

Encuentre
a) la energía libre de Helmholtz del sistema;
b) el calor específico a volumen constante;
c) el valor medio del cuadrado del radio molecular $\langle\, |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2 \rangle$.

Problema 7: Considere un gas diluido de partículas que interactúan a través de un potencial de pares tipo "pozo cuadarado" de la forma

$$u(r) = \begin{cases} \infty & \text{si} \quad 0 \le r \le \sigma \\ -\epsilon & \text{si} \quad \sigma \le r \le R\sigma \\ 0 & \text{si} \quad r > R\sigma \end{cases} \tag{1}$$

a) Calcule el segundo coeficiente del virial $B(T)$.

b) Calcule en este orden de aproximación la ecuación de estado para la energía interna por partícula.

c) Analice las ecuaciones de estado en el límite de esferas rígidas $R \to 1$.