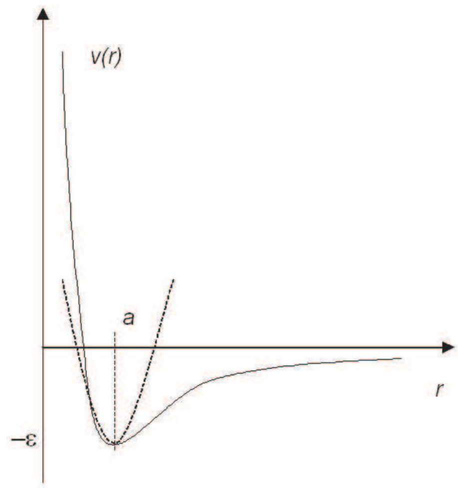
Termodinámica y Mecánica Estadística II

Guía 5 - Octubre de 2009

Problema 1: El potencial de interacción entre dos átomos de una molécula diatómica es similar a la función $v(r)$ mostrada en la figura. Si ignoramos la posible interacción entre moléculas diferentes, el Hamiltoniano de este gas (clásico) es

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_{1i}^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_{2i}^2}{2m} + v(|\mathbf{r}_{1i} - \mathbf{r}_{2i}|)$$



a) Para el modelo de la figura, derive una expresión de la energía en términos de integrales unidimensionales que involucran a la función $v(r)$.

b) Aproxime $v(r)$ por un oscilador armónico desplazado con un valor mínimo $-\epsilon$ en $r = a$ y una constante de fuerza k:

$$v(r) = -\epsilon + \frac{k}{2}(r-a)^2$$

Suponga que $kT \ll ka^2/2$ y muestre que esta simple modificación de desplazar el mínimo del potencial tiene efecto sobre la dependencia con la temperatura de la energía.

Problema 2: N partículas debilmente acopladas pueden existir cada una de ellas en uno de 3 estados de energía no degenerados: 0, ϵ_1 y ϵ_2. El sistema está en contacto con un reservorio a temperatura T.
a) Encuentre la función partición del sistema y la energía libre.
b) Encuentre la entropía máxima posible del sistema.
c) Encuentre la energía media y la energía mínima del sistema.
d) Relacione la función partición y la energía libre con las calculadas en el problema 2 de la guia 4.

Problema 3: Pruebe el teorema de *Van Leeuwen*: Clasicamente la magnetización macroscópica producida por un campo magnético externo sobre un sistema de cargas en movimiento es nula (esto es los fenómenos de diamagnetismo o paramagnetísmo no existen en física clásica).
Las siguientes ayudas pueden ser útiles:
a) Si $\mathcal{H}(\mathbf{p}_1, ..., \mathbf{p}_N, \mathbf{q}_1, ..., \mathbf{q}_N)$ es el hamiltoniano de un sistema de partículas cargadas en ausencia de un campo externo, entonces $\mathcal{H}(\mathbf{p}_1 - (e/c)\mathbf{A}_1, ..., \mathbf{p}_N - (e/c)\mathbf{A}_N, \mathbf{q}_1, ..., \mathbf{q}_N)$ es el hamiltoniano del mismo sistema en presencia de un campo magnético externo $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, donde $\mathbf{A}_i$ es el valor de $\mathbf{A}$ en la posición $\mathbf{q}_i$.
b) La magnetización inducida del sistema en la dirección de $\mathbf{B}$ es

$$M = \left\langle -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial B} \right\rangle = kT \; \frac{\partial (ln \; Z_N)}{\partial B},$$

donde $\mathcal{H}$ es el hamiltoniano en presencia de $\mathbf{B}$, $B = |\mathbf{B}|$, y Z_N es la función de partición del sistema en presencia de $\mathbf{B}$.

Problema 4: *Paramagnetismo de Langevin.* Considere un sistema de N átomos, cada uno de los cuales tiene un momento magnético intrínseco μ. En presencia de un campo magnético externo $\mathbf{H}$, el hamiltoniano del sistema es

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) - h \sum_i \cos \alpha_i$$

donde $h \equiv \mu H$, $\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ es el hamiltoniano en ausencia del campo magnético externo, α_i es el ángulo que forman $\mathbf{H}$ y el momento magnético del i–ésimo átomo. Muestre que
a) El momento magnético inducido es $M = N\mu(\coth\theta - 1/\theta)$, donde $\theta \equiv \beta h$.
b) Muestre que la susceptibilidad magnética por átomo es $\chi = \beta\mu^2(1/\theta^2 - \mathrm{csch}^2\theta)$.
c) Verifique que a altas temperaturas χ satisface la ley de Curie. Encuentre la constante de Curie.

Problema 5: Encuentre la presión, entropía y calor específico a volumen constante de un gas ideal de partículas indistinguibles cuando la energía de cada partícula es: $E = c\;(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{1/2}$.

Problema 6: *Sólido de Debye.*

a) Calcule la energía interna de un sólido tridimensional de Debye. Muestre que ésta tiene la forma

$$U = 3\;k\;N\;T\;D\left(\frac{\theta_D}{T}\right)$$

donde D es la función de Debye.

b) Derive la expresión para el calor específico y estudie los casos límites $T \gg \theta_D$ y $T \ll \theta_D$.

Problema 7: Considere un gas ideal compuesto por moléculas diatómicas. Cada molécula está formada por dos átomos distintos separados por una distancia fija, de modo que las moléculas pueden rotar y los niveles de rotación deben tratarse cuánticamente. Si el momento de inercia es I, la energía cinética de rotación es $L^2/2I$, y el momento angular puede tomar los valores $L = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$, con $\ell = 0, 1, \cdots, \infty$. La degeneración en la energía para cada valor de ℓ es $2\ell+1$, ya que L_z puede tomar los valores $-\ell, -\ell+1, \cdots, \ell$. Suponiendo que la energía de rotación y de traslación son independientes, escriba la función de partición del sistema en términos de la temperatura de rotación $\Theta_{rot} = \hbar^2/2kI$. Calcule la energía interna y el calor específico en el límite de bajas y de altas temperaturas.

Problema 8: El *teorema del virial* es consecuencia de la invariancia del espacio de fases de un sistema de N partículas bajo transformaciones canónicas, como ser un cambio de escala. Considere N partículas clásicas con coordenadas $\{\vec{q}_i\}$, momentos conjugados $\{\vec{p}_i\}$ y Hamiltoniano $\mathcal{H}(\{\vec{q}_i\}, \{\vec{p}_i\})$.

a) Escriba la expresión formal para la función partición $Z[\mathcal{H}]$ y muestre que es invariante bajo el cambio de variables

$$\begin{aligned} \vec{q}_i &= \lambda \vec{q}\,'_i \\ \vec{p}_i &= \frac{1}{\lambda}\vec{p}\,'_i \\ \mathcal{H}(\{\vec{q}_i\}, \{\vec{p}_i\}) &= \mathcal{H}_\lambda(\{\vec{q}\,'_i\}, \{\vec{p}\,'_i\}) \end{aligned}$$

de un par cualquiera de variables conjugadas; es decir, muestre que $Z[\mathcal{H}_\lambda]$ es independiente de λ

b) Suponga que

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} + V(\{\vec{q}_i\})$$

y use la independencia de $Z[\mathcal{H}_\lambda]$ con λ para demostrar la relación virial

$$\left\langle \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{m} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial V}{\partial \vec{q}_i} \cdot \vec{q}_i \right\rangle$$

c) Muestre que para el caso particular $V(\{\vec{q}_i\}) = \sum_i v(\vec{q}_i) = \sum_i c\, q_i^\alpha$ se tiene

$$\left\langle \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{m} \right\rangle = \alpha \left\langle v(\vec{q}_i) \right\rangle$$

Note que esta relación implica que para Hamiltonianos que solo poseen términos cuadráticos las energías cinética y potencial medias son iguales.

d) La relación anterior se usa frecuentemente para estimar la masa de galaxias distantes. La velocidad medida de las estrellas exteriores de la galaxia G-8.333 es aproximadamente 200 km/s. Estime el cociente entre la masa de dicha galaxia y su tamaño. (Recuerde que la constante de gravitación es $G = 6,670 \times 10^{-11} \mathrm{m}^3 \mathrm{kg}^{-1} \mathrm{s}^{-2}$)

Problema 9: Un sistema está formado por K osciladores clásicos unidimensionales de masa m. Suponga que el potencial para los osciladores contiene un término anarmónico que va como x^4, es decir

$$V(x) = \frac{k_0}{2} x^2 + \alpha x^4$$

con $\alpha x^4 \ll kT$.
a) Escriba la función de partición de las K osciladores a primer orden en el parámetro α.
b) Encuentre la corrección por anarmonicidad a la energía media por oscilador.
c) Encuentre el calor específico de este sistema.

Problema 10: Un modelo alternativo de sólido clásico puede construirse suponiendo un reticulado de N nodos, asociando a cada uno de ellos tres osciladores anarmónicos clásicos, de forma tal que el hamiltoniano del i-ésimo oscilador es

$$H_i = p_i^2 + b\, x_i^{2n}$$

donde n es un entero positivo mayor que 1 y b es una constante común para todos los osciladores.

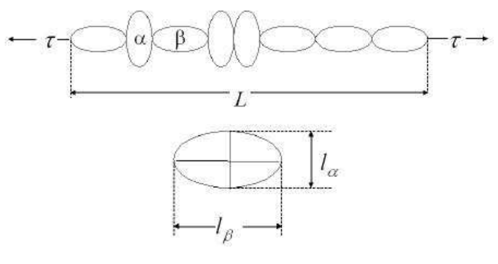
a) calcular la función partición del sistema;
b) calcular la energía cinética media;
c) calcular la energía potencial media;
d) calcular el calor específico del sólido.

Discutá en todos los puntos la dependencia de los resultados con n. Em particular los casos límite $n = 1$ (oscilador armónico) y $n \to \infty$.

Ayuda:

$$\int_0^\infty dx\; x^{\nu-1}\, e^{-x} = \Gamma(\nu) \quad ; \; \nu > 0$$

Problema 11: Considere una cadena unidimensional de n moléculas que pueden adoptar dos configuraciones, α y β, con energías ε_α y ε_β y longitudes a y b respectivamente. La cadena está sometida a una tensión f.



a) Calcule la función partición del sistema.

b) Calcule la longitud promedio $\langle L \rangle$ como función de f y la temperatura T.

c) Suponiendo $\varepsilon_\alpha > \varepsilon_\beta$ y $a > b$, estime la longitud promedio en ausencia de tensiones externas ($f = 0$) como función de T. ¿Cuáles son los valores límites de alta y baja T?. Estime el valor de T que determina el cambio de régimen?

d) Calcule la función respuesta del sistema $\chi = \left(\frac{\partial \langle L \rangle}{\partial f}\right)_{f=0}$ y verifique que $\chi > 0$.

Problema 12: Dos osciladores armónicos simples, cada uno de frecuencia natural ω, están acoplados de modo tal que no interactúan si se hallan en diferentes estados cuánticos, mientras que su energía *combinada* cuando poseen el mismo número cuántico n es $(2n + 1)\,\hbar\omega + \Delta \quad (\Delta < \hbar\omega)$. El sistema está en equilibrio térmico a temperatura T.

a) Calcule la función partición para el sistema.

b) Calcule la probabilidad de que ambos osciladores posean el mismo número cuántico. Analice para $T \to 0$ y $T \to \infty$.

c) Repita el punto b) para el caso $\Delta > \hbar\omega$.

c') ¿Qué ocurre cuando $\Delta = \hbar\omega$?

d) Calcule la energía media del sistema a temperatura T. Evalúe el límite $T \to 0$ para todos los valores Δ posibles.