Termodinámica y Mecánica Estadística II

http://www.famaf.unc.edu.ar/∼serra/termoII_2017.html

Guía 5 - Octubre de 2017

Problema 1: Calcule la función partición para un sistema de $N = 3$ partículas indistinguibles no interactuantes

a) Cuando estas son fermiones.

b) cuando estas son bosones.

En ambos casos escriba explicitamente los autovectores del Hamiltoniano con la simetría correspondiente y luego calcule $Z_3 = Tr(\rho)$.

c) Estudie el límite de altas temperaturas y comparelo con la función partición clásica.

Problema 2: Deduzca la expresión para la densidad de probabilidad que maximiza la entropía en el ensamble gran canónico para sistemas *clásicos*.

Problema 3: Obtenga la presión de un gas ideal clásico como función de N, T y V usando el ensamble gran canónico.

Problema 4: Use las relaciones

$$\begin{aligned} F &= NkT \ln z - kT \ln \mathcal{Z}(z, T, V) \\ N &= z \frac{\partial}{\partial z} \ln \mathcal{Z}(z, T, V) \end{aligned}$$

para mostrar que

$$\left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V} = kT \ln z \equiv \mu \, .$$

Problema 5: Muestre que en el ensamble gran canónico la fluctuación cuadrática media del número de partículas puede expresarse como

$$\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = z \frac{\partial}{\partial z} \left(z \frac{\partial}{\partial z} \ln \mathcal{Z}(z, T, V) \right) \, .$$

Particularice para un gas ideal, en el que se cumple

$$\left(\frac{\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2}{\langle N \rangle^2} \right)^{1/2} = \langle N \rangle^{-1/2} \, .$$

Problema 6: Generalice el problema anterior para el caso de un sistema abierto multicomponente. Muestre que

$$\langle \delta N_i \, \delta N_j \rangle = \left(\frac{\partial \langle N_i \rangle}{\partial \beta \mu_j} \right)_{\beta, V, \beta\mu_i} \, ,$$

donde $\delta N = N_i - \langle N_i \rangle$.

Problema 7: Encuentre la varianza para las fluctuaciones de la energía en el ensamble gran canónico; relacione esta cantidad con funciones respuesta como el calor específico y la compresibilidad.

Problema 8: Muestre que la ecuación de estado $U = \frac{3}{2} pV$ vale tanto para el gas ideal clásico, como para el de bosones y fermiones.

Problema 9: Calcule la función gran partición para un sistema de osciladores armónicos cuánticos no interactuantes, todos de igual frecuencia. Considere los dos casos siguientes:

a) estadística de Boltzmann;

b) estadística de Bose.

Problema 10: *El ensamble a presión constante.* Suponga que se tiene un sistema clásico con un número N constante de partículas en contacto con un reservorio a temperatura T mantenido a presión constante p (esto es, su volumen puede fluctuar).

a) Use el principio de máxima entropía para calcular la densidad de probabilidad ρ y la función partición $Y_N(T, p)$ en este ensamble. ¿Con qué función termodinámica debe relacionar el logaritmo de la función partición?

b) Calcule la varianza del volumen y relacionelo con la compresibilidad isotérmica κ_T, use este resultado para demostrar que $\kappa_T \geq 0$.

c) Use este ensamble para calcular la ecuación de estado del gas ideal monoatómico clásico.

Problema 11: *Gas de esferas rígidas.* Calcule la función partición en el ensamble de las presiones para un gas de esferas rígidas unidimensional. Obtenga la ecuación de estado y compárela con la del gas ideal.

Problema 12: Considere una superfice adsorbente con N trampas. Cada una de las trampas puede adsorber una sola molécula. La superficie está en contacto con un gas ideal a presión P, temperatura T y potencial químico μ. Suponiendo que cada molécula adsorbida tiene una energía $-\epsilon_0$ comparada con la de la molécula libre, encuentre la función gran partición del sistema y determine el cociente de ocupación de trampas $\langle m \rangle / N$, donde m es el número de trampas adsorbidas.

Problema 13: A temperaturas muy elevadas, un gas contenido en un volumen V está compuesto de átomos de masa m y potencial químico μ_a. Al disminuir la temperatura algunos átomos comienzan a combinarse formando moléculas diatómicas de masa $2m$, potencial químico μ_m y energía de ligadura $-\phi$ ($\phi > 0$). Suponemos que las moléculas no tienen estados vibracionales ni rotacionales, de manera que cada molécula tiene energía $-\phi$ más su energía cinética traslacional. Utilizando la estadística de Maxwell-Boltzmann:

a) Calcule la función de gran partición para la mezcla de átomos y moléculas.

b) Obtenga las expresiones para los números medios de átomos y moléculas, $\bar{N}_a$ y $\bar{N}_m$ respectivamente.

c) ¿Cuál debe ser la relación entre μ_a y μ_m en el equilibrio termodinámico a P y T dados?

d) ¿Para qué rango de temperaturas $\bar{N}_m \gg \bar{N}_a$? En ese rango de temperaturas escriba la ecuación de estado del sistema en términos del número medio total de átomos, $\bar{N} = \bar{N}_a + 2\bar{N}_m$.

e) ¿Cuál es la ecuación de estado en términos de $\bar{N}$ en el rango de temperatura en que se cumple $\bar{N}_m \ll \bar{N}_a$?