Mecánica Estadística. Ayudantía 5

César Augusto Hidalgo Ramaciotti.
Licenciado en Física.
Facultad de Física.
Pontifícia Universidad Católica de Chile.

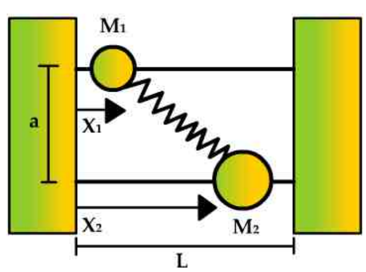
Ejercicio 1.- A lo largo de dos barras paralelas perfectamente lisas de largo L y separación a se mueven dos masas, m_1 y m_2 unidas por un resorte de constante elástica k y largo natural despreciable ($\ll a$). Las barras tienen topes en sus extremos, de manera que las masas rebotan y no pueden seguir de largo. El sistema puede adquirir o perder energía con un baño térmico a temperatura τ. No considere efectos cuánticos.

A.-) Escriba la función partición clásica del sistema (como integral sobre las posiciones y momentos de las masas). Haga las dos integrales simples y deje expresadas las dos integrales complicadas.

B.-) Las integrales complicadas se simplifican para temperaturas mucho mayores o menores que kL^2. Resuélvalas para estos casos y encuentre la energía interna en estos casos límites. Interprete los resultados en términos del principio de equipartición y señale donde se almacena la energía en promedio en estos casos límites.

Solución.

A.-)Buscamos la energía del sistema. Esta se encuentra dada por las energías cinéticas, más las energías potenciales.



$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}k(a^2 + (x_2 - x_1)^2)$$

La función partición del sistema estará dada por:

$$Z = \int dp_1 dp_2 dx_1 dx_2 e^{-\beta H}$$

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dp_1 e^{-\beta p_1^2/2m_1} \int_{-\infty}^{\infty} dp_1 e^{-\beta p_2^2/2m_2} \int_0^L dx_1 dx_2 e^{-(\beta/2)k(a^2+(x_2-x_1)^2)}$$

$$Z = \sqrt{\frac{2\pi m_1}{\beta}}\sqrt{\frac{2\pi m_2}{\beta}}\int_0^L dx_1 dx_2 e^{-(\beta/2)k(a^2+(x_2-x_1)^2)}$$

B.-) Ahora debemos evaluar los límites. Primero veamos cuando $\tau \gg kL^2$. Para esto expandimos en serie el argumento de la exponencial.

$$Z = \frac{2\pi}{\beta}\sqrt{m_1 m_2}\int_0^L dx_1 dx_2 e^{-(\beta/2)k(a^2+x_2^2+x_1^2-2x_1x_2)}$$

Como el valor máximo que pueden tomar los términos es $kL^2/2$ podemos despreciar a todos, excepto el primero, el cual es constante. Con esto llegamos a que:

$$Z = 2\pi\frac{\sqrt{m_1 m_2}}{\beta}e^{-\beta k a^2/2}L^2$$

Para encontrar la energía interna utilizamos el hecho que:

$$U = -\frac{\partial}{\partial\beta}(\ln Z)$$

$$U = -\frac{1}{Z}\bigg(-\frac{Z}{\beta}-\frac{ka^2}{2}Z\bigg)$$

$$U = \tau + \frac{ka^2}{2}$$

En este caso la energía se encuentra almacenada en la temperatura y en el estiramiento del resorte debida a la distancia entre las barras. Tenemos τ ya que hay 2 términos cuadráticos en el Hamiltoniano, los otros dos fueron despreciados.

Ahora si $\tau \ll kL^2$.

$$Z = \frac{2\pi}{\beta}\sqrt{m_1 m_2}e^{-\beta k a^2/2}\int_0^L dx_1 \int_{-x_1}^{L-x_1} e^{-\beta k\delta^2/2}d\delta$$

donde $\delta = x_2 - x_1$. Como la exponencial decae muy rápido en este régimen puedo decir que su valor es igual al de la integral sobre el intervalo $]-\infty,\infty[$. Por lo que la función partición resulta ser:

$$Z = \frac{2\pi}{\beta}\sqrt{m_1 m_2}e^{-\beta k a^2/2}L\sqrt{\frac{2\pi}{\beta k}}$$

Y la energía interna es:

$$U = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z = \frac{3}{2}\tau + \frac{ka^2}{2}$$

La cual es proporcional a $3\tau/2$. Cada uno de estos viene de un grado de libertad cuadrático en la energía. Los dos primeros son de los momentos, mientras que el último proviene de el estiramiento del resorte.

Ejercicio 2.- Un sistema consta de dos partículas idénticas de spin $3/2$ en presencia de un campo magnético. Ambas tienen la misma función de onda espacial por lo que difieren solo con respecto a la proyección del spin a lo largo del campo magnético.
A.-) Identifique las energías posibles del sistema, la multiplicidad y entropía para cada una de ellas.
B.-) Escriba la función partición del sistema y encuentre una expresión general para la energía interna $U(\delta, \tau)$ junto con sus valores extremos.
C.-) Escriba la expresión para la entropía en términos de la variable $\delta \equiv \beta\Delta$, donde delta es la diferencia de energía entre los niveles. Muestre que la entropía tiende a $\ln 6$ cuando $delta \to 0$.

Solución:

A.-) Las energías posibles del sistema son las siguientes:

ε	$g(\varepsilon)$	$\sigma(\varepsilon)$
2Δ	1	0
Δ	1	0
0	2	$\ln 2$
-Δ	1	0
-2Δ	1	0

B.-) La función partición del sistema esta dada por:

$$Z = e^{-2\beta\Delta} + e^{-\beta\Delta} + 2 + e^{\beta\Delta} + e^{2\beta\Delta}$$

Con esto podemos sacar la energía promedio.

$$U = \frac{1}{Z}\Big(- 2\Delta e^{-2\beta\Delta} - \Delta e^{-\beta\Delta} + \Delta e^{\beta\Delta} + 2\Delta e^{2\beta\Delta}\Big)$$

Si $\beta \to 0$, tenemos que la energía promedio es cero. Todos los estados son igualmente probables. Si $\beta \to \infty$ la energía tiende a -2Δ, y el sistema está en el estado de menor energía. En cambio si $\beta \to -\infty$ el sistema tiende a su estado de mayor energía, 2Δ, lo cual ocurre en temperaturas negativas.[1]

C.-) Para encontrar la entropía podemos usar la relación:

$$\sigma = \frac{-\partial F}{\partial \tau}.$$

[1] La temperatura de un sistema puede entenderse como la importancia que este mismo le da a la energía. Si la temperatura es baja, el sistema le dará mucha importancia a la energía y tratará de repartirla entre todas sus componentes de manera justa, esto llevará a valores esperados de la energía dominados por energías bajas. Si la temperatura es muy alta, al sistema no le importará la energía de sus componentes, por lo que estas podrán estar en cualquier estado, sin preocuparse de quitarle energía al sistema, por lo que tenderemos al estado promedio, eso si, un promedio en el cual el factor de Boltzmann no importa, un promedio regido por las multiplicidades y los valores. La temperatura negativa ocurre luego de la temperatura infinita, en este caso el sistema se ordena en torno a los estados de mayor energía, es igual a la temperatura positiva, pero con la jerarquía cambiada.

Donde F es la energía libre de Helmholtz. Usamos el hecho que:

$$F = -\tau \ln Z$$

con lo que:

$$\sigma = \ln Z + \frac{\tau}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \tau}$$

y como $\beta = 1/\tau$ tenemos que $d\beta/d\tau = -1/\tau^2$ con lo que $d/d\tau = -(1/\tau^2)(d/d\beta)$. Este calculo nos permite concluir que:

$$\sigma = \ln Z - \frac{1}{\tau}\langle \varepsilon \rangle$$

Como ya conocemos la función partición y el valor esperado de la energía solo necesitamos evaluarlos en el caso que δ tienda a cero. Con esto podemos concluir que:

$$\sigma = \ln 6$$

La interpretación de esto proviene de la degeneración de los estados. El campo magnético desdobla los nivéles rompiendo la degeneración. Al quitarlo, los niveles se juntan y la degeneración aumenta.

Ejercicio 3.- Considere un sistema de 3 partículas interactuantes con spin 1/2. Diagonalize el Hamiltoniano para encontrar los niveles de energía y sus degeneraciones. Con esto encuentre la energía promedio y el calor específico. Considere $\hbar = 1$

Solución: El Hamiltoniano del sistema está dado por:

$$H = \left(\vec{S_1}\vec{S_2} + \vec{S_2}\vec{S_3} + \vec{S_1}\vec{S_3}\right)a$$

Donde a es una constante con unidades de energía. Ahora diagonalizamos el Hamiltoniano cambiándonos a la variable $\vec{S}^2$, la cual representa el spin total del sistema. Nuestro Hamiltoniano ahora es:

$$H = \left(\vec{S}^2 - \frac{9}{4}\right)\frac{a}{2}$$

Donde hemos usado el hecho que los autovalores de $\vec{S_i}^2$ son iguales $S(S+1)$. La función partición del sistema estará dada por la suma sobre los estados, o en su defecto por la suma sobre los niveles ponderados por las multiplicidades. Los niveles de energía son solo dos, en los cuales $\vec{S}$ toma el valor 1/2 o 3/2, con degeneración iguales a 4 en ambos casos. Esto nos lleva a concluir que la función partición del sistema está dada ‘por:

$$Z = 4e^{-3a\beta/4} + 4e^{3a\beta/4}$$

y la energía promedio es entonces:

$$\langle\varepsilon\rangle = \frac{3a}{4Z}\left(4e^{-3\beta a/4} - 4e^{3a\beta/4}\right)$$

Notamos que cuando $\beta \to 0$ el sistema tiende a una energía 0, en cambio cuando $\beta \to \infty$ el sistema converge a $-3a/4$.
El calor específico está dado por:

$$C_v(\tau) = \frac{\partial}{\partial\tau}\langle\varepsilon\rangle$$

Si llamamos ε a $3a/4$, podemos escribir el calor específico como:

$$C_v(\tau) = \frac{\partial}{\partial\tau}\varepsilon\tanh\varepsilon\beta$$

Lo que resulta ser:

$$C_v(\tau) = \frac{\varepsilon^2}{\tau^2}\mathrm{sech}^2(\varepsilon\beta)$$