Física Teórica 3 — primer cuatrimestre de 2025

Guía 3: *Ensambles*

1. Un sistema está compuesto por N elementos distinguibles y no interactuantes. Cada elemento puede estar en dos estados, con energías 0 y $\epsilon > 0$, respectivamente.

a) Encuentre el número $\Omega(E)$ de microestados con energía E.

b) En el ensamble microcanónico, asumiendo que las poblaciones de cada estado son mucho mayores que uno, calcule $S(E)$, $\beta(E)$ y $S(\beta)$. Escriba y grafique la entropía por elemento en función de la fracción x de elementos en el estado con energía ϵ.

c) Calcule la función de partición en el ensamble canónico mediante los siguientes métodos: i) a través de $\Omega(E)$, organizando la suma sobre los estados del sistema según los valores de la energía; ii) organizando la suma sobre los estados del sistema como una suma sobre los estados de cada elemento.

d) En general, ¿bajo qué condiciones la función de partición de N elementos distinguibles, no necesariamente de la misma especie, puede escribirse como el producto de las funciones de partición de cada elemento?

e) A partir de Z, calcule $\Omega(E)$. Aunque en este sistema no hay una diferencia notable, a veces es más fácil ir desde el ensamble canónico al microcanónico que a la inversa. En el lenguaje de los problemas de combinatoria, ¿qué es $Z(\beta)$ en relación a $\Omega(E)$?

f) En el ensamble canónico, calcule la energía media y la entropía como funciones de β y escriba la entropía como función de la energía media. Compare con los resultados del ensamble microcanónico.

g) En el ensamble canónico, considere un elemento determinado del sistema. ¿Cuál es, en función de la temperatura, la probabilidad de encontrar a este elemento en cada uno de los estados posibles?

h) La misma pregunta, pero en el ensamble microcanónico. ¿Cómo se comparan estas probabilidades con las calculadas en el ensamble canónico? ¿Cómo puede interpretarse este resultado? ¿De qué condiciones depende?

i) Demuestre que, en general, la variancia de la energía en el ensamble canónico es

$$\sigma_E^2 = \left\langle \left(E - \langle E\rangle\right)^2 \right\rangle = \langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2 = -\frac{\partial\langle E\rangle}{\partial\beta}.$$

j) Calcule la fluctuación relativa $\sigma_E/\langle E\rangle$ para el sistema de los dos niveles. La equivalencia con el ensamble microcanónico requiere que $\sigma_E/\langle E\rangle \ll 1$. ¿Bajo qué condiciones esto es cierto?

2. Un sistema está compuesto por N elementos distinguibles, no interactuantes. Los estados de cada elemento están numerados por un índice $n_i = 0, 1, \ldots,$ con $i = 1, \ldots, N$. Un elemento en el estado n tiene energía $E_n = \hbar\omega n$.

   a) Muestre que la energía del sistema puede tomar los valores $E_m = \hbar\omega m$, donde $m = 0, 1, \ldots$

   b) Calcule la multiplicidad $\Omega(m)$ del macroestado con energía E_m.

   c) Asumiendo que m y $N - m$ son mucho mayores que 1, calcule la entropía, primero como función de la energía y luego como función de β.

   d) Calcule la función de partición en el ensamble canónico.

   e) Encuentre la energía media y el calor específico y grafíquelos como función de β.

   f) Calcule la entropía y compare el resultado con el del ensamble microcanónico.

3. **El método del término máximo**. Muchas veces es necesario calcular sumas de la forma

$$Z = \sum_{j=1}^{N} \sigma(N, j),$$

donde $N \gg 1$. Estas sumas no suelen tener una expresión en términos de funciones elementales y, además, no estamos interesados en Z, sino en $\log Z$. Muestre que si

$$\log \sigma(N, j) = N g\left(\tfrac{j}{N}\right) + o(N),$$

y $g(x)$ alcanza en $[0, 1]$ su máximo en un único punto x^* en el interior del intervalo, entonces

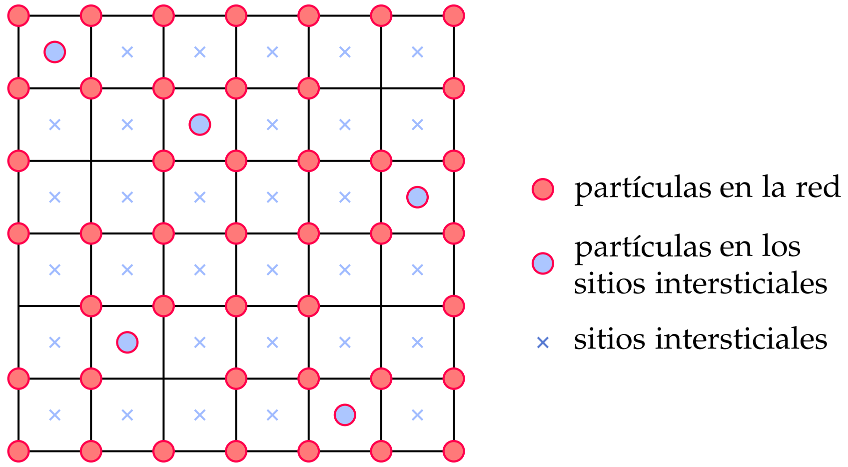
$$\lim_{N\to\infty} \tfrac{1}{N} \log Z = \lim_{N\to\infty} \text{máx}\, \tfrac{1}{N} \log \sigma(N, j) = g(x^*).$$

Esto justifica la aproximación $\frac{1}{N} \log Z \simeq g(x^*)$ cuando $N \gg 1$. Este resultado, con algunas variaciones, se usa en muchos problemas.

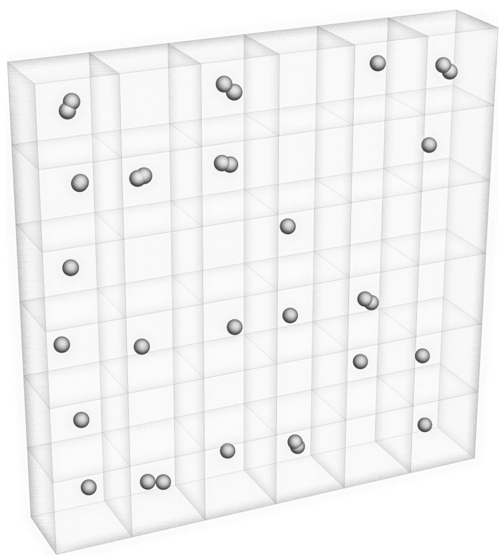
4. **Defectos de Frenkel**. Una red cristalina está formada por N partículas que pueden ocupar dos clases de sitios: los N sitios regulares de la red y N' sitios intersticiales (ver la figura de la página siguiente). Los números N y N' son mucho mayores que 1 y del mismo orden de magnitud. Cada partícula en un sitio intersticial representa un defecto Si $W > 0$ es la energía necesaria para producir un defecto, encuentre el número medio n de defectos como función de T y su varianza. Muestre que si $e^{-\beta W} \ll 1$, entonces $n \simeq \sqrt{NN'} e^{-\beta W/2}$.

   Resuelva este problema en los tres ensambles. En el ensamble microcanónico, asuma que $N - n$, $N' - n$ y n son mucho mayores que 1. En el ensamble canónico, use el método del término máximo. En el ensamble gran canónico, note que el valor medio del número de partículas tiene que ser igual a N.

Cuando N, N' y n son mucho mayores que 1, n debería ser el mismo en los tres ensambles, pero las fluctuaciones serán, en general, diferentes. En este aspecto, ¿cuál ensamble se ajusta mejor a un sistema real?

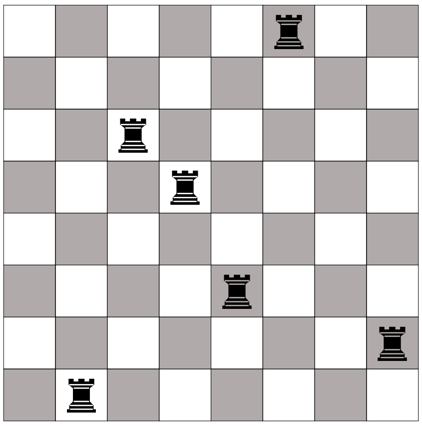


5. (Dalvit *et al.*, problema 3.24). Un fluido de partículas que interactúan con un potencial repulsivo puede ser modelado como un "gas reticular". Considere un recipiente de volumen V dividido en N celdas, cada una de volumen $v = V/N$, comparable al volumen de una partícula. Una celda desocupada u ocupada por una sola partícula tiene energía cero. Una celda ocupada por dos partículas tiene energía $\epsilon > 0$, y ninguna celda puede estar ocupada por más de dos partículas. En el ensamble gran canónico, encuentre la energía media por celda, la concentración de partículas c (número medio de partículas por celda) y la presión P en términos de la temperatura y de la fugacidad. En términos de T y c, encuentre expresiones aproximadas para la energía media por celda y para la presión en los límites en los que c es muy pequeña o muy cercana a su máximo valor. Finalmente, resuelva el problema en el ensamble canónico y compare los resultados de los dos métodos.



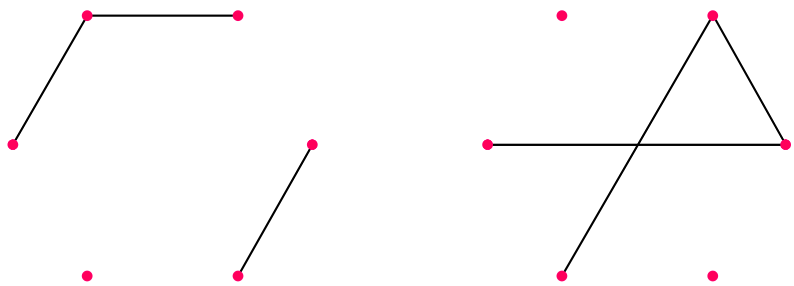
6. Un sistema está formado por las N^2 casillas fijas y distinguibles de un tablero cuadrado de ajedrez, con $N \gg 1$. Cada casilla puede estar en dos estados: en uno de los estados está ocupada por una torre y su energía es $\epsilon > 0$; en el otro estado, está *vacía* y su energía es 0. Hay, además, una energía de interacción entre las casillas. Si las torres ocupan posiciones no atacantes, la energía de interacción es 0. Si hay dos torres en posición de atacarse entre sí, la energía de interacción es infinita. El sistema está a temperatura T.

   a) Primero póngase de acuerdo en cuál es el sistema: ¿las casillas o las torres?
   b) Encuentre el número medio de torres sobre el tablero en función de N, T y ϵ.
   c) Calcule la entropía del tablero.



Una configuración de torres no atacantes en un tablero de 8×8.

7. Un grafo es un conjunto de vértices o nodos distinguibles, donde cada par de nodos puede estar conectado a lo sumo por una arista. Los estados del grafo se especifican indicando qué pares de nodos están conectados por una arista. En la figura se muestran dos estados posibles de un grafo con seis nodos y tres aristas.



   Considere un grafo con k nodos y suponga que cada arista tiene una energía $\epsilon > 0$.

   a) ¿Cuál es el número máximo de aristas N?
   b) Calcule el número medio de aristas en función de β.
   c) El grado g de un nodo es igual al número de aristas que se conectan con él. Elegido un cierto nodo, escriba la distribución de probabilidad para g y calcule su valor medio como función de la temperatura.

8. **Gas ideal**

   a) Resuelva el gas ideal en el ensamble microcanónico calculando el volumen de la región acotada por la superficie de energía E,

   $$S(E,V,N) = k \log \Omega(E,V,N), \quad \text{donde} \quad \Omega(E,V,N) = \int_{\sum p_i^2 \leqslant 2mE} \frac{d^{3N}r\, d^{3N}p}{h^{3N}\, N!}.$$

   b) Encuentre la función de partición $Z(\beta,V,N)$ del gas ideal en el ensamble canónico. Calcule F, U, S, P y μ como funciones de T, V y N. Compare con los resultados del ensamble microcanónico.

   c) Encuentre la función de partición $\mathcal{Z}(\beta,V,z)$ del gas ideal en el ensamble gran canónico. Obtenga la ecuación de estado y la fugacidad $z(T,V,N)$. Calcule $S(T,V,N)$ y compare con los resultados de los otros ensambles.

   d) Resuelva el gas ideal en los tres ensambles para el caso bidimensional: c_V, $S(T,V,N)$, $U(T,V,N)$, $P(T,V,N)$ y $z(T,V,N)$.

   e) Resuelva el gas ideal en dos y tres dimensiones, en los tres ensambles si ahora las partículas son ultrarrelativistas, $\epsilon(\mathbf{p}) = cp$.

9. En dos dimensiones, el problema del gas ideal relativista de partículas con energía

   $$\epsilon(\mathbf{p}) = \sqrt{(mc^2)^2 + (pc)^2}$$

   puede resolverse en términos de funciones elementales.

   a) Calcule la función de partición canónica para N partículas.

   b) Encuentre la ecuación de estado, $P(T,A,N)$, donde A es el área ocupada por el gas.

   c) Encuentre la entropía por partícula, $s(T,A,N)$.

   d) Encuentre la energía por partícula, $u(T,A,N)$, y grafíquela como función de T.

   e) Encuentre el calor específico por partícula a área constante, $c_A(T,A,N)$. Grafíquelo.

   f) A partir de las funciones u y c_A, analice los límites no relativista y ultrarrelativista.

10. Un gas ideal clásico está compuesto por N partículas de masa m atrapadas en un potencial armónico isótropo, $V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$.

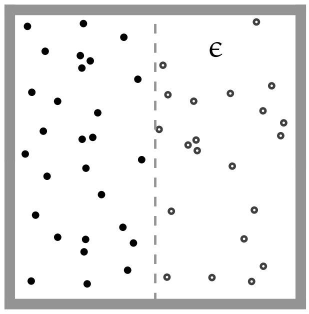
    a) Usando el ensamble microcanónico, encuentre $S(U,\omega,N)$, $U(T,\omega,N)$ y el calor específico a ω constante.

    b) Calcule la función de partición canónica. Verifique los resultados del ítem anterior.

    c) Usando el teorema de equipartición, encuentre $\langle r^2 \rangle$ para una partícula del gas. ¿Cuál es la escala típica de la densidad de partículas? ¿Cómo debe tomarse el límite $N \to \infty$ para que la densidad media permanezca acotada.

11. Cuando se calcula la función de partición de un gas ideal, debe integrarse en el espacio de fase. Considere un gas ideal bidimensional en la superficie de una esfera. Elija coordenadas generalizadas, escriba el hamiltoniano y calcule la función de partición canónica, la energía media y la ecuación de estado. Ídem para un gas ideal en la superficie de un toro no degenerado y sin auto-intersecciones.

12. Un gas ideal compuesto por N partículas de masa m está contenido en una caja cúbica de volumen $2V$. Una mitad de la caja está a potencial cero y la otra a potencial $\epsilon \geqslant 0$.

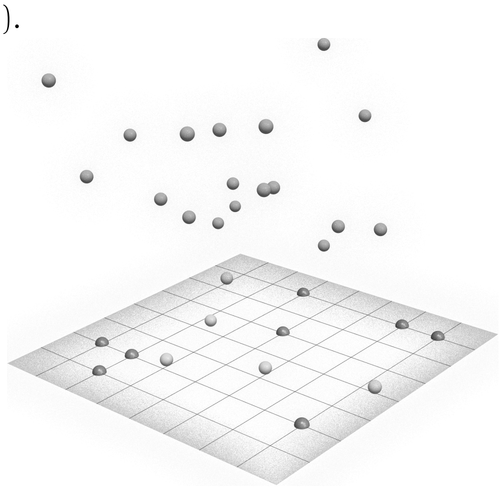


   a) Encuentre la fracción de partículas, la energía y la presión en cada mitad de la caja en función de T, V y N.
   b) Calcule la probabilidad de que haya n partículas en una mitad u otra de la caja. Verifique que los valores medios de partículas coincidan con los del ítem anterior.
   c) Calcule la varianza en el número de partículas en cada mitad de la caja. Analice los casos extremos $\epsilon = 0$ y $\epsilon \to \infty$. Grafique cada varianza como función de $x = e^{-\beta\epsilon}$.

13. Una superficie con sitios adsorbentes está en equilibrio con un gas ideal de partículas de masa m, a temperatura T y presión P. Cada sitio puede adsorber una partícula. Un sitio vacío tiene energía nula. Un sitio ocupado tiene una energía $-\epsilon_0$. Muestre que la fracción media de sitios ocupados es

$$\theta(T,P) = \frac{P}{P + P_0(T)},$$

y escriba la función $P_0(T)$.

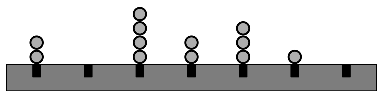


14. **El modelo BET**. Una superficie con sitios adsorbentes está en equilibrio con un gas ideal compuesto de partículas de masa m, a presión P y temperatura T. Cada sitio adsorbente es capaz de alojar un número arbitrario de partículas, formando una multicapa. Un sitio vacío tiene energía cero. Un sitio con una sola partícula adsorbida tiene energía $-\epsilon_0$; por cada partícula adicional, la contribución a la energía del sitio es $-\epsilon_1$.

    a) Encuentre la función de partición gran canónica de un sitio adsorbente.

    b) ¿Cuál es el número medio de partículas adsorbidas por sitio como función de T y P?

    c) Encuentre la fracción media de sitios ocupados como función de T y P.



15. Una superficie con sitios adsorbentes está en equilibrio con una mezcla de dos gases ideales a temperatura T. Las fugacidades de cada especie de partículas son z_1 y z_2. Cada sitio puede adsorber hasta dos partículas. Las energías de adsorción por partícula son $-\epsilon_1$ y $-\epsilon_2$, dependiendo de la clase de partícula.

    a) Encuentre el número medio de partículas por sitio de cada especie.

    b) Encuentre la fracción media de sitios para cada posible estado de ocupación.

16. Una superficie con sitios adsorbentes está en equilibrio con un gas ideal de partículas de masa m, a temperatura T y presión P. Cada sitio puede adsorber una partícula. Un sitio vacío tiene energía nula. Los estados de una partícula en un sitio ocupado se caracterizan por un número entero $n = 0, 1, \ldots$ y tienen una energía $\epsilon(n) = -\epsilon_0 + \hbar\omega n$, con $\omega \geqslant 0$. Muestre que la fracción de sitios ocupados puede escribirse igual que en el problema 13 y encuentre la función $P_0(T)$.

17. Calcule la función de partición canónica de un cuerpo rígido de masa m y momentos de inercia principales $I_1 < I_2 < I_3$ respecto de su centro de masa.

18. **Modelo cuántico para una sustancia paramagnética**. La proyección del momento magnético de una partícula en la dirección del campo magnético externo $\mathbf{B}$ es $g\mu_B m$, donde m puede tomar los valores $j, j-1, \ldots, -j+1, -j$; g es el factor de Landé y μ_B es el magnetón de Bohr. Aquí, $j \geqslant 0$ es un múltiplo de $\frac{1}{2}$, cuyo valor está fijo. Calcule la magnetización M (momento magnético por unidad de volumen) de un cuerpo que contiene n de tales partículas por unidad de volumen. Encuentre la susceptibilidad magnética, $\chi = \partial M/\partial B|_{B=0}$, y compare este resultado con la ley de Curie. Suponga que la interacción entre las partículas es despreciable.

19. **Modelo clásico de Langevin para una sustancia paramagnética**. Antes del surgimiento de la mecánica cuántica, Langevin explicó el paramagnetismo suponiendo que cada ion paramagnético posee un momento magnético permanente $\boldsymbol{\mu}$, libre de orientarse en todas las direcciones y que, sometido a un campo $\mathbf{B}$, tiene una energía $E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$. Calcule la magnetización y la susceptibilidad en este modelo y verifique que se obtienen los resultados del problema 18 en el límite $j \to \infty$, identificando $|\boldsymbol{\mu}|$ con $g\mu_B j$.

20. Suponga que el momento magnético de un sistema es $\mathbf{m}$. En los casos más sencillos, el efecto de la interacción con un campo magnético externo $\mathbf{B}$ es la adición de un término $\beta\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$ al factor de Boltzmann. Puesto que la magnetización media no necesariamente está en la dirección del campo externo, en general la susceptibilidad es un tensor, cuyas componentes cartesianas son:

$$\chi_{ij} = \left.\frac{\partial \langle m_i \rangle}{\partial B_j}\right|_{\mathbf{B}=0}.$$

En las situaciones más simples, $\chi_{ij} = \chi\delta_{ij}$. Muestre que el tensor susceptibilidad puede escribirse como:

$$\chi_{ij} = \beta\left.\left(\langle m_i m_j \rangle - \langle m_i \rangle \langle m_j \rangle \right)\right|_{\mathbf{B}=0}.$$

La utilidad de esta expresión está en que no es necesario calcular $\langle \mathbf{m} \rangle$ como función de $\mathbf{B}$.

21. Dos dipolos magnéticos tienen momentos $\boldsymbol{\mu}_1 = \mu_0\mathbf{n}_1$ y $\boldsymbol{\mu}_2 = \mu_0\mathbf{n}_2$, respectivamente. Los versores $\mathbf{n}_i$ pueden orientarse en cualquier dirección. Los dipolos están en posiciones fijas y su energía de interacción es $E(\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\mu}_2) = -J\, \boldsymbol{\mu}_1 \cdot \boldsymbol{\mu}_2$. El sistema está en equilibrio a temperatura T y el campo magnético externo es nulo. Se define $K = \beta J \mu_0^2$.

    a) Calcule la función de partición canónica.
    b) Calcule y grafique la energía media como función de K.
    c) Encuentre la susceptibilidad como función de K y analice su comportamiento en los límites $K \to -\infty$ y $K \to \infty$. Interprete los resultados comparándolos con la susceptibilidad de un solo dipolo.

22. Una cadena lineal está formada por N elementos, donde N es par. Cada elemento puede estar en dos estados, con energías cero y $\epsilon > 0$, respectivamente. No hay una dirección privilegiada desde la cual leer la secuencia de los estados de los elementos. Por ejemplo, si $N = 4$, los estados 1000 y 0001 son indistinguibles. Se define $x = e^{-\beta\epsilon}$.

    a) Encuentre la función de partición en el ensamble canónico.
    b) ¿Es extensivo el sistema respecto a N? ¿Qué sucede en el límite $N \to \infty$?
    c) ¿Cuál es la probabilidad de que el sistema esté en una configuración simétrica? ¿Qué sucede en el límite $N \to \infty$?

23. N espines ocupan los N sitios de una cadena lineal. Cada espín puede estar en dos estados, ↓ y ↑. Un espín en el estado ↓ tiene energía cero. Un espín en el estado ↑ tiene energía ϵ. Además, no puede haber dos espines consecutivos en el estado ↑.

    a) ¿Cuál es el número $\Omega(j)$ de estados de la cadena con j espines en el estado ↑?
    b) Escriba la función de partición exacta $Z(\beta, N)$ en el ensamble canónico.
    c) Asumiendo que $N \gg 1$, encuentre la fracción media $\bar{x}(\beta)$ de espines en el estado ↑. Cuando $\beta\epsilon \to 0$, ¿a qué valor tiende $\bar{x}(\beta)$?
    d) Encuentre la dispersión cuadrática media de x, es decir, $\left\langle (x - \bar{x})^2 \right\rangle$.

    Ayuda: Para $N = 4$ y $j = 2$, hay tres estados. Si se agrega un espín ↓ al final de la cadena, el número de estados sigue siendo $\Omega(j)$, pero ahora es más fácil contarlos: las cadenas de $N+1$ espines, terminadas en un espín ↓ y que no tienen dos espines ↑ consecutivos se pueden descomponer en bloques de dos tipos: bloques de pares de espines ↑↓ y bloques de un espín ↓. Todo lo que resta es permutar esos bloques.