Física Estadística
Relación 4: Colectividad canónica

Problema 1. Calcule la función de partición canónica para un gas ideal clásico formado por N partículas sin interacción confinadas en un volumen V, utilizando la definición de la función de partición canónica clásica.

Problema 2. Consideremos un sistema ideal formado por dos partículas, cada una de las cuales puede estar en tres niveles diferentes de energía, de valores $0, \epsilon, 3\epsilon$. El sistema está en equilibrio a temperatura T. Obtenga la función de partición canónica para partículas distinguibles e indistinguibles:

1. Realizando el contaje directo sobre las energías E_n accesibles para el sistema.
2. Aplicando la propiedad de factorización, $Z = Z_1^N$ para partículas distinguibles o $Z = Z_1^N/N!$ para partículas indistinguibles, donde Z_1 es la función de partición canónica para una partícula.

Problema 3. Un sistema está compuesto por N partículas distinguibles e independientes (sin interacción), cada una de las cuales presenta únicamente tres estados, no degenerados, con energías 0, b y $2b$. Suponiendo que el sistema está en equilibrio a temperatura T, emplee la colectividad canónica para calcular la energía interna del sistema, el número de ocupación medio del estado fundamental y el calor específico a volumen constante en el límite $\frac{b}{k_B T} \ll 1$.

Problema 4. Un gas está formado por partículas idénticas de masa m sobre las que actúa el campo gravitatorio terrestre en la dirección $-\hat{z}$. Dicho gas se encuentra confinado en una columna vertical de sección S y altura L, donde se supone que la temperatura es uniforme e igual a T. Se pide:

1. Calcular la función de partición canónica del sistema suponiendo un comportamiento clásico.
2. Demostrar que la energía interna del sistema es igual a la de un gas ideal clásico con 5 grados de libertad cuadráticos por partícula para temperaturas bajas, y un gas con 3 grados de libertad cuadráticos por partícula para temperaturas altas.
3. Despreciando las interacciones entre partículas, calcular la altura media de las partículas en el cilindro.

Problema 5. Un sistema está formado por N partículas distinguibles e independientes que pueden estar en tres niveles de energía no degenerados, con energías $\{-\varepsilon,\ 0,\ \varepsilon\}$. Dicho sistema se encuentra en equilibrio con un baño térmico a temperatura T. Empleando la colectividad canónica, encuentre:

1. La energía libre de Helmholtz.
2. La entropía, la energía interna y el calor específico a volumen constante del sistema.
3. El número de ocupación medio de los diferentes niveles de energía, y sus límites cuando $T \to \infty$ y $T \to 0$.

Problema 6. Un recipiente de volumen V contiene N moléculas (idénticas e independientes) de un gas ideal a temperatura T. La energía de cada molécula puede expresarse como:

$$\varepsilon_k = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) + k\Delta$$

donde $k = 0, 1, 2, \ldots$ es un número cuántico interno y Δ el espaciado entre niveles energéticos internos de las moléculas. Obtenga la energía libre de Helmholtz y la ecuación de estado del sistema.

Problema 7. Un gas clásico está constituido por N moléculas dipolares idénticas que no interactúan entre sí confinadas en un volúmen V, a temperatura uniforme T, y que se encuentran sometidas a la acción de un campo eléctrico externo. Bajo estas condiciones, el Hamiltoniano de una molécula dipolar viene dado por:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) + \frac{1}{2I}\left(p_\theta^2 + \frac{p_\phi^2}{\sin^2\theta}\right) - \mu\cos\theta$$

donde la primera parte cinética del Hamiltoniano se refiere al movimiento del centro de masas de la molécula, mientras que la segunda parte hace referencia a los grados de libertad rotacionales, siendo m es la masa de la molécula, I su momento de inercia y μ su momento dipolar. Obtened la energía libre de Helmholtz y comprobad que se trata de una magnitud extensiva.

Problema 8. Una fibra muscular polimérica de longitud variable L está suspendida de un punto fijo, dentro de una solución a temperatura T, y lleva un peso de masa m en su extremo. El polímero puede ser modelado como un conjunto de N monómeros (de masa despreciable) encadenados en serie para formar la fibra. Cada monómero puede estar en un estado *relajado* 0, de energía ϵ_0 y longitud a_0, o en un estado *contraído* 1, de energía $\epsilon_1 = \epsilon_0 + \Delta$ ($\Delta > 0$) y longitud $a_1 = a_0 - b$ ($0 < b < a_0$). Teniendo en cuenta la energía potencial gravitatoria de la masa m suspendida, realizar las siguientes tareas:

1. Calcular la función de partición canónica del polímero. Mostrar que factoriza en funciones de partición para cada monómero.
2. Calcular la energía libre de Helmholtz total, y encontrar una expresión para la longitud media del polímero $\langle L(T,f)\rangle$ en función de T y de la fuerza $f \equiv mg$ (g es la aceleración de la gravedad).
3. Estudiar la variación de $\langle L(T,f)\rangle$ con f a temperatura fija (incluyendo los límites $T \to 0$ y $T \to \infty$), así como la variación de $\langle L(T,f)\rangle$ con T para f fijo (incluyendo los límites $f \to 0$ y $f \to \infty$).
4. Estudiar si, en el límite de fuerza f pequeña, el polímero obedece la ley de Hooke, i.e. $f = -K\delta L$, donde δL es la elongación del polímero respecto a su longitud en ausencia de fuerza, y K es la constante del *muelle*. En caso afirmativo, calcular explícitamente K en función de las variables del problema.

Problema 9. Un sistema clásico compuesto por N partículas idénticas de masa m se encuentra en equilibrio térmico a temperatura T. Cada partícula puede moverse sobre un plano bidimensional horizontal de área a, donde además de su energía cinética tiene una energía de ligadura $-\epsilon$, o moverse en el espacio por encima de ese plano quedando sometida sólo a la acción del campo gravitatorio. Demuestre que el número medio de partículas en el plano es

$$N\frac{f(T)}{1+f(T)} \qquad \text{con} \quad f(T) = \beta mg\Lambda(T)\mathrm{e}^{\beta\epsilon}\,, \tag{1}$$

siendo $\Lambda(T) = h/\sqrt{2\pi mKT}$ la longitud de onda térmica. ¿Cómo quedaría modificado este resultado si, además de una energía de ligadura $-\epsilon$, las partículas adsorbidas en el plano estuvieran sujetas a un potencial armónico $V(x,y) = \frac{1}{2}\kappa(x^2+y^2)$ respecto al centro del plano? Calcule en este caso la densidad de partículas adsorbidas a distancia $r = \sqrt{x^2+y^2}$.

Problema 10. Considere un gas de N partículas clásicas puntuales de masa m en tres dimensiones. Las partículas interactúan a través de un potencial a dos cuerpos de la forma

$$\varphi(r_{ij}) = ar_{ij}^{-\nu}$$

donde $r_{ij} \equiv |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ es la distancia entre las partículas, a es una constante positiva, y ν un exponente positivo. Si este gas ocupa un volumen V a temperatura T, se pide

1. Demostrar que su función de partición canónica $Z(T,V,N)$ es una función homogénea, esto es, cumple que

   $$Z(\alpha T, \alpha^{-3/\nu}V, N) = \alpha^{3N(1/2-1/\nu)}Z(T,V,N)$$

   donde α es un factor de escala arbitrario.

2. Demostrar que su energía libre de Helmholtz $A(T,V,N)$ obedece la relación

$$T\left(\frac{\partial A}{\partial T}\right)_{V,N} - \frac{3}{\nu}V\left(\frac{\partial A}{\partial V}\right)_{T,N} = A - 3(\frac{1}{2} - \frac{1}{\nu})NkT$$

(Ayuda: derivar respecto a α la primera relación de escala y evaluar en $\alpha = 1$)

Problema 11. Considere un gas formado por N partículas clásicas e indistinguibles que no interaccionan entre sí, en equilibrio térmico a temperatura T y contenido en un recipiente esférico de volumen $V = \frac{4}{3}\pi R^3$. Un sistema de trampas ópticas genera un campo externo en la zona central del recipiente, de tal forma que cada partícula del gas posee una energía potencial $\varphi(r)$ en función de su distancia $r = |\vec{r}|$ al centro de la cavidad, con

$$\varphi(r) = \begin{cases} \varphi_0 & r \leq r_0 \\ 0 & r > r_0 \end{cases} \tag{2}$$

siendo $\varphi_0 \geq 0$ y $0 \leq r_0 \leq R$. Se pide:

1. Calcular la función de partición canónica del gas, $Z(T,V,N)$.
2. Calcular la energía libre de Helmholtz $A(T,V,N)$, y a partir de ella la ecuación de estado del gas. Discutir la ecuación de estado que resulta en los límites $\beta\varphi_0 \to 0$ y $\beta\varphi_0 \to \infty$.
3. Obtener la densidad media $\langle n(\vec{r})\rangle$ en un punto arbitrario $\vec{r}$ de la esfera, teniendo en cuenta que la función dinámica que mide la densidad en un punto, dada una configuración espacial $(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N)$ de las partículas del gas, no es más que

$$n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)\,, \tag{3}$$

donde $\delta(x)$ es la distribución delta de Dirac.