

Física Estadística – Hoja de Problemas 4

Problema 1

Considérese el oscilador armónico cuántico unidimensional con Hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} k \hat{x}^2 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2, \quad (1)$$

donde $\hat{p} = -i \hbar \partial_x$ y ω es la frecuencia de oscilación ($\omega = \sqrt{k/m}$). La ecuación de Schrödinger (independiente del tiempo) viene dada por

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle, \quad (2)$$

cuyas soluciones vienen dadas por

$$\psi_n(x) = \langle x | \psi_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right), \quad (3)$$

donde $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} D^{(n)} e^{-x^2}$ son los polinomios de Hermite con $n = 0, 1, 2, \dots$. Los autovalores E_n (niveles de energía) están cuantizados y vienen dados por

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (4)$$

Pongamos este oscilador cuántico en contacto con una reserva de calor a temperatura T hasta alcanzar el equilibrio, y consideremos el caso en el que $\beta^{-1} \ll \hbar \omega$.

- i) Calcular el cociente entre las probabilidades de que el oscilador esté en su primer estado excitado y de que esté en su estado fundamental. Interpretar el resultado.
- ii) Asumiendo que sólo los estados $|\psi_0\rangle$ y $|\psi_1\rangle$ están ocupados de manera significativa, calcular la energía media del oscilador \bar{E} en función de la temperatura T .

Problema 2

Considérese un sistema aislado compuesto de un número $N \gg 1$ de átomos con espín $s = \frac{1}{2}$ localizados e interaccionando débilmente. Cada átomo tiene un momento magnético μ que puede estar orientado de manera paralela/antiparalela a un campo magnético externo H .

- i) Calcular el número de microestados del sistema $\Omega(E, N, H)$ con una energía entre E y $E + \delta E$ y parámetros externos N y H fijos.
- ii) Calcular $\beta(E)$ e invertir la relación para obtener $E = E(T)$. Determinar el rango de energías para el cual la temperatura del sistema es negativa, *i.e.* $T < 0$.
- iii) Conectar el sistema a una reserva de calor a temperatura T y calcular el valor medio de la energía \bar{E} utilizando la colectividad canónica. Comparar el resultado con el del apartado ii).

Nota: $\text{Ln}N! \approx N \text{Ln}N - N$ si $N \gg 1$ (fórmula de Stirling)

Problema 3

Calcula las contribuciones de la vibración y de la rotación a la función de partición de una molécula diatómica sabiendo que las energías están cuantificadas, respectivamente, por las expresiones

- Vibración: $E_n = (\frac{1}{2} + n) \hbar \omega$ con $n = 0, 1, 2, \dots$
- Rotación: $E_j = j(j+1) \frac{\hbar^2}{2I}$ con $j = 0, 1, 2, \dots$ y degeneración $g_j = 2j+1$

donde I es el momento de inercia perpendicular al eje que une los dos átomos.

Problema 4

Sea la entropía estándar de Gibbs

$$S = -k \sum_r P_r \log P_r, \quad (5)$$

para la función de distribución de probabilidad P_r de un sistema.

Consideremos un sistema total $A^{(0)} = A + A'$ compuesto por dos subsistemas A y A' con microestados de energía dados por $E_{rs}^{(0)}$, E_r y E'_s . Utilizaremos etiquetas rs , r y s para etiquetar microestados de $A^{(0)}$, A y A' respectivamente. Se tiene pues que la entropía del sistema total viene dada por

$$S^{(0)} = -k \sum_{rs} P_{rs}^{(0)} \log P_{rs}^{(0)}, \quad (6)$$

donde $P_{rs}^{(0)}$ es la función de distribución de probabilidad de $A^{(0)}$.

- i) Mostrar que si A y A' interactúan débilmente entonces se tiene que $S^{(0)} = S + S'$.
- ii) Mostrar que si A y A' no interactúan débilmente entonces se tiene que $S^{(0)} \leq S + S'$.
- iii) Denotando la función de distribución de probabilidad canónica

$$\tilde{P}_r = \frac{e^{-\beta E_r}}{\sum_r e^{-\beta E_r}}, \quad (7)$$

demostrar que siempre se tiene que

$$\tilde{S} \geq S, \quad (8)$$

donde S denota la entropía de Gibbs para cualquier otra función de distribución de probabilidad P_r , siempre y cuando ambas distribuciones de probabilidad den lugar al mismo valor medio de la energía \bar{E} . Esto es

$$\sum_r P_r E_r = \sum_r \tilde{P}_r E_r = \bar{E}. \quad (9)$$

Nota: $\sum_r P_r = 1$, $\sum_s P'_s = 1$, $\sum_r \sum_s P_{rs}^{(0)} = 1$ así como $P_r = \sum_s P_{rs}^{(0)}$ y $P'_s = \sum_r P_{rs}^{(0)}$.

Nota: Utilizar que $\log y \leq y - 1$ para $y > 0$.

Problema 5

Un sistema macroscópico con Hamiltoniano H está en equilibrio con una fuente de calor a la temperatura T . A nivel microscópico los autoestados del Hamiltoniano se denotan por $|r\rangle$ y los niveles de energía asociados vienen dados por E_r . Consideraremos autoestados propiamente normalizados de tal manera que $\langle r|r'\rangle = \delta_{r,r'}$.

i) Probar que la función de partición del sistema viene dada por

$$Z = \text{Tr}e^{-\beta H} \quad (10)$$

donde $\text{Tr}M$ es la traza de la matriz M en la base de autoestados del sistema.

Nota: Los elementos de matriz de un operador M vienen dados por $\langle r|M|r'\rangle$

ii) Sea A un observable (operador) del sistema que toma los valores $A|r\rangle = A_r|r\rangle$. Probar que la media térmica de A viene dada por

$$\langle A \rangle \equiv \bar{A} = \frac{\text{Tr}(A e^{-\beta H})}{Z} \quad (11)$$

Nota: El operador identidad \mathbb{I} se puede expresar como $\mathbb{I} = \sum_r |r\rangle\langle r|$. Esto se conoce como “relación de cierre”.

iii) Sea el Hamiltoniano

$$H = H_0 - AB \quad (12)$$

donde B es un campo externo fijo y A es una magnitud extensiva del sistema. Se define la susceptibilidad χ como

$$\chi = \lim_{B \rightarrow 0} \frac{\langle A \rangle - \langle A_0 \rangle}{B} \quad (13)$$

donde B se comporta como un escalar, A como un observable, $\langle A_0 \rangle = \langle A \rangle_{B=0}$ y $[AB, H_0] = 0$.

Realizar un desarrollo en serie hasta primer orden en βAB para $\langle A \rangle$ y hallar una relación entre χ y $\sigma_{A_0}^2 = \langle A_0^2 \rangle - \langle A_0 \rangle^2$.

Nota: $\frac{1}{1+x} \approx 1 - x + \dots$ si $|x| < 1$.