MECÁNICA ESTADÍSTICA **CURSO 2010**

Nombre:
N^o Alumno:

1ra Fecha
(*15/07/10*)

1. *Gas ideal de partículas con estructura interna.* Considere un mol de partículas indistinguibles (peso molecular 30 g/mol) en contacto con un baño térmico. Las condiciones son tales que las interacciones entre las partículas pueden ser despreciadas, y que los grados de libertad traslacionales de sus centros de masa pueden tratarse clásicamente. El hamiltoniano del gas puede escribirse como $H_N = \sum_i \frac{\mathbf{p_i^2}}{\mathbf{2M}} + v(\mathbf{r_i}) + \sum_\mathbf{i} \hat{\mathbf{h}}_\mathbf{i}$, donde $\hat{\mathbf{p}}_i$ es el operador cantidad de movimiento del centro de masa, M la masa de las partículas, y $\hat{h}_i$ un operador hamiltoniano que actúa en un espacio de Hilbert correspondiente a las variables internas (electrónicas y nucleares). $v(\mathbf{r})$ es un potencial que confina a las partículas dentro de un volumen V.

   Existen infinitos niveles asociados al estado electrónico de cada partícula. El estado electrónico fundamental (con energía ε_0) está doblemente degenerado (degeneración 2). El primer estado excitado (de energía ε_1) tiene degeneración 4, y se encuentra separado del anterior por una energía $\Delta = 0.01eV$. Entre los niveles restantes, el de menor energía es el nivel ε_2: se encuentra separado del fundamental por energías del orden de 3 eV.

   En cuanto a los estados del núcleo, para cada partícula importan solamente 6 estados no degenerados. Sus energías pueden escribirse como $\varepsilon_n(i) = \varepsilon_n^0 + \delta \times i$, con $i = 0, ..., 5$; $\delta = 10^{-5}$ eV. (Los niveles nucleares restantes se encuentran congelados a las temperaturas de estudio).

   a) Calcule la función de partición del gas para temperaturas entre 30 y 1500 K. Justifique cada una de las aproximaciones o suposiciones *utilizadas.*

   b) ¿ Cuántas partículas se encontrarán en el primer *nivel* electrónico excitado (ε_1) a $T = 30K$? ¿ Cuántas a $T = 1500K$? ¿Cuántas de estas últimas tendrán (aproximadamente) una velocidad *en el eje* x comprendida entre $200m/s$ y $204m/s$?

   c) Calcular la energía total del sistema. Graficarla esquemáticamente en función de la temperatura, indicando los límites de alta y baja temperatura. Marque aproximadamente la temperatura característica a la que comienza a descongelarse el primer nivel electrónico.

   ch) Encontrar la entropía del sistema. Discriminar la contribución traslacional y la de los grados de libertad internos. Para esta última contribución, encontrar los límites de alta y baja temperatura; explicar.

2. Considere un gas ideal de Bose–Einstein en tres dimensiones, compuesto de moléculas independientes de masa m que tienen un grado interno de libertad. Los bosones en el estado fundamental tienen energía $\epsilon_0 = p^2/2m$ y en el estado excitado $\epsilon_1 = p^2/2m + \Delta$.

a) Notaremos el valor usual de la temperatura de condensación (es decir, la temperatura crítica cuando no hay grados internos de libertad) como T^0_{BE}. Encuentre si la existencia de un grado interno de libertad aumenta o disminuye la temperatura de condensación respecto de T^0_{BE}.

b) Encuentre T_{BE}/T^0_{BE} para el caso particular en que $\Delta = 0$.

c) ¿Cuánto espera que valga T_{BE} cuando $\Delta \to \infty$?

Fórmulas y constantes útiles

Constantes:
$\mu_B/k_B \approx 0.67 K/T$; $N_A \approx 6.0 \times 10^{23}$; $h \approx 6.6 \times 10^{-34} Joule \times s$; $k_B \approx 1.38 \times 10^{-23} Joules/Kelvin$; $1 atm \approx 1.01 \times 10^5 Pascal$.

Integrales gaussianas:

$$I_n(\alpha) \equiv \int_0^\infty dx\, x^n e^{-\alpha x^2} = \frac{1}{2\,\alpha^{(n+1)/2}}\,\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right), \qquad n > -1$$

Integrales de Bose–Einstein:

$$g_n(z) \equiv \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty dx\, \frac{x^{n-1}}{z^{-1}\, e^x - 1} \qquad \forall\, n, \quad z \in [0,1]$$

siendo $g_n(1) = \sum_{l=1}^{\infty} 1/l^n \equiv \zeta(n)$ para $n > 1$.

Función zeta de Riemann:

$$\zeta(3/2) \simeq 2.612, \quad \zeta(2) = \pi^2/6, \quad \zeta(5/2) \simeq 1.341, \quad \zeta(3) \simeq 1.202, \quad \zeta(4) = \pi^4/90, \quad \ldots$$

MECÁNICA ESTADÍSTICA **CURSO 2010**

Nombre:
N^o Alumno:

2da Fecha
(*12/08/2010*)

1. Un modelo sencillo para el ADN. Una molécula de ADN consiste de dos polímeros lineales entrelazados en una hélice doble. De cada monómero se desprenden una de las cuatro bases llamadas adenina (A), guanina (G), timina (T), o citosina (C), las que conforman los distintos enlaces que unen ambos ejes. El ADN tiene M enlaces, y supondremos que cada uno de ellos puede estar en dos estados. El estado cerrado tiene asociada energía 0, y el abierto una energía $\Delta \approx 0.2eV$. El desentrelazado de la hélice doble se asemeja a la apertura de un cierre: un enlace puede abrirse solamente si todos los que están arriba ya se han abierto, como se ilustrará en el pizarrón. Debido a fluctuaciones térmicas, los enlaces se pueden abrir o cerrar espontáneamente. Estudiaremos un sistema conformado por $N = N_A$ de estas moléculas; supondremos que la temperatura es tan baja que las mismas pueden considerarse de longitud infinita.

   a) Calcular la función de partición del sistema de N moléculas.

   b) Calcular la energía media del sistema y el número promedio de enlaces abiertos.

   c) Encuentre el comportamiento de la energía a baja y a alta temperatura. Grafique esquemáticamente, y compare los resultados con el de otros sistemas conocidos.

   ch) ¿Cuántas cadenas tendrán 1 enlace abierto a temperatura ambiente?

2. Considere una mezcla de dos gases ideales. La misma consiste de N_1 átomos de masa m_1, y N_2 átomos de masa m_2. Note que los átomos de un dado tipo son mutuamente indistinguibles entre sí, pero son distinguibles de los del otro tipo. Se encuentran confinados por un potencial $\phi(\check{r})$; este potencial es cero dentro de un volumen V e infinito fuera de él.

   a) Encuentre la energía libre total del sistema y su entropía.

   b) Compare el valor de la entropía encontrado con el de un sistema de igual volumen y temperatura, pero conformado por un único tipo de átomos, con $N = N_1 + N_2$. Para simplificar la comparación, suponga que $m_1 \approx m_2$, y que $N_1 = N_2 = N/2$.

3. Un metal puede pensarse como un sólido en el que algunos electrones tienen la capacidad de desplazarse a lo largo de todo el volumen V del material. Supondremos que el sistema electrónico puede describirse como un gas de fermiones de spin 1/2.

   a) Encontrar la dependencia de $\mu(T)$ con la temperatura cuando $\lambda/v >> 1$, a orden $(kT/\varepsilon_F)^2$.

   b) $\varepsilon_F \approx 3eV$ para un metal como el Na. Calcule el cambio $\Delta\mu$ (destacando el sentido en el cual se mueve μ) si la temperatura varía entre 0 y $1000K$.
   Ayuda: Puede resultar conveniente recurrir al desarrollo de la distribucin de Fermi válido a baja temperatura (debido a Sommerfeld, 1927), $f(\varepsilon) = \theta(\mu - \varepsilon) - \frac{\pi^2}{6}(kT)^2\delta'(\varepsilon - \mu) + ...$

Fórmulas y constantes útiles

Constantes:
$\mu_B/k_B \approx 0.67 K/T$; $N_A \approx 6.0 \times 10^{23}$; $h \approx 6.6 \times 10^{-34} Joule \times s$; $k_B \approx 1.38 \times 10^{-23} Joules/Kelvin$; $1 atm \approx 1.01 \times 10^5 Pascal$.

Integrales gaussianas:

$$I_n(\alpha) \equiv \int_0^\infty dx\, x^n e^{-\alpha x^2} = \frac{1}{2\,\alpha^{(n+1)/2}}\,\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right), \qquad n > -1$$

MECÁNICA ESTADÍSTICA **CURSO 2010**

Nombre:
N^o Alumno:

3ra Fecha
(*26/08/10*)

1. a) Un gas conformado por N fermiones indistinguibles con peso molecular $PM = 50g$ se encuentra confinado en un volumen V a una presión $p = 1atm$ y una temperatura por encima de $T = 30K$. Supondremos que en esas condiciones se comporta como un gas ideal. Mostrar cuantitativamente si es o no necesario utilizar estadísticas cuánticas para estudiar al sistema.

   b) Además de poseer grados de libertad de traslación, las partículas poseen un momento magnético $\vec{\mu}, |\vec{\mu}| = 10\mu_B$, cuya proyección puede tomar solamente los valores $|\vec{\mu}|$ o $-|\vec{\mu}|$. En consecuencia, cada molécula posee —además de energía cinética— energía potencial magnética: $\varepsilon_i = p_i^2/2m - s_i|\vec{\mu}|H$, donde $s_i = \pm 1$ dependiendo si la orientación de $\vec{\mu}$ con respecto al campo magnético aplicado $\overrightarrow{H}$ es paralela o antiparalela, respectivamente. Determine la función de partición del gas, y a partir de ella el valor medio de la energía total del sistema.

   c) Calcule la entropía del sistema. Identifique la contribución traslacional y la parte magnética. Para esta última (la parte magnética) encuentre los límites para $T \to \infty$ y $T \to 0$.

   ch) Calcule el calor específico total del sistema a H constante. Grafique en forma aproximada $C_V(T)$ para $H = 10Tesla$ y T entre 30 y 300 K.

   d) Para un valor dado del campo H encontrar la probabilidad $P(+)$ de que el spin de un átomo cualquiera apunte en la dirección del campo sin importar su impulso o su posición, y sin importar el impulso, la posición ni el spin de las demás partículas. Encontrar $P(-)$.

   e) Derive una expresión para la magnetización del sistema en función de H y T. Grafique $M(H)$ para una temperatura fija.

2. La densidad de estados de un gas ideal de Bose–Einstein está dada por

$$g(\epsilon) = \begin{cases} \alpha\,\epsilon^2 & \epsilon \geq 0 \\ 0 & \epsilon < 0 \end{cases}$$

   donde α es una constante (con unidades de energía^{-3}).

   (a) Explique por qué habrá transición de Bose-Einstein en este sistema. Halle la temperatura crítica T_c.

   (b) Encuentre las fracciones de partículas en el estado fundamental (N_0) y en los estados excitados (N_e) en función de T/T_c. Haga un gráfico a mano alzada de los mismos.

Fórmulas y constantes útiles

Constantes:
$\mu_B/k_B \approx 0.67K/T$; $N_A \approx 6.0 \times 10^{23}$; $h \approx 6.6 \times 10^{-34} Joule \times s$; $k_B \approx 1.38 \times 10^{-23} Joules/Kelvin$; $1atm \approx 1.01 \times 10^5 Pascal$.

Integrales gaussianas:

$$I_n(\alpha) \equiv \int_0^\infty dx\, x^n e^{-\alpha x^2} = \frac{1}{2\,\alpha^{(n+1)/2}}\,\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right), \qquad n > -1$$

Función gamma:

$$\Gamma(1) \equiv 0! = 1, \qquad \Gamma(x+1) = x\,\Gamma(x), \qquad \Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$$

Integrales de Bose–Einstein:

$$g_n(z) \equiv \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty dx\, \frac{x^{n-1}}{z^{-1}\,e^x - 1} \qquad \forall\, n, \quad z \in [0,1]$$

siendo $g_n(1) = \sum_{l=1}^\infty 1/l^n \equiv \zeta(n)$ para $n > 1$.
Función zeta de Riemann:

$$\zeta(3/2) \simeq 2.612, \quad \zeta(2) = \pi^2/6, \quad \zeta(5/2) \simeq 1.341, \quad \zeta(3) \simeq 1.202, \quad \zeta(4) = \pi^4/90, \quad \ldots$$