Mecánica Estadística

Corrección Tarea 4

Universidad del Chile, Facultad de Ciencias,
Departamento de Física, Santiago, Chile

Ayudante: Felipe González
Profesor: David Gottlieb

5 de octubre de 2010

Problema 1

En coordenadas esféricas, el lagrangiano del sistema toma la forma

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2}m\|\dot{\mathbf{r}}\| = \frac{1}{2}mr^2(\dot{\theta}^2 + \sin^2\theta\dot{\varphi}^2).$$

Por lo tanto, dado que los momentos canónicos son $p_\theta = \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\theta}} = mr^2\dot{\theta}$ y $p_\varphi = \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\varphi}} = mr^2 sin^2\theta\dot{\varphi}$, el hamiltoniano queda

$$\mathscr{H}(\theta, \varphi, \dot{\theta}, \dot{\varphi}) = \frac{p_\theta^2}{2mr^2} + \frac{p_\varphi^2}{2mr^2\sin^2\theta}.$$

La función partición por partícula será

$$Z_1 = \int e^{-\frac{\beta p_\theta^2}{2mr^2} - \frac{\beta p_\varphi^2}{2mr^2\sin^2\theta}}\,d\theta\,d\varphi\,dp_\theta\,dp_\varphi = 2\pi mAkT,$$

con $A = 4\pi r^2$.

En coordenadas toroidales,

$$x = (b + a\cos\alpha)\cos\beta, \quad y = (b + a\cos\alpha)\sin\beta, \quad z = a\sin\alpha,$$

utilizando el mismo procedimiento, se obtiene

$$\mathscr{H} = \frac{p_\alpha^2}{2ma^2} + \frac{p_\beta^2}{2m(b + a\cos\alpha)},$$

para el cual

$$Z_1 = \int e^{-\beta\mathscr{H}} = 2\pi mAkT.$$

Como en ambos casos la función partición es la misma, las ecuaciones de estado son las mismas:

$$U = -\frac{\partial\ln Z}{\partial\beta} = NkT, \qquad PA = NkT.$$

Problema 2

Tenemos que

$$\frac{< p_i^2 >}{2m_i} = \frac{\int (p_i^2/2m_i) e^{-\beta p_i^2/2m_i} dp_i \int e^{-\beta E'} dq_1 \cdots dp_N}{\int e^{-\beta p_i^2/2m_i} dp_i \int e^{-\beta E'} dq_1 \cdots dp_N}$$

donde hemos factorizado la parte que depende de p_i y E' es la energía que sobra. La segunda integral se cancela con el término en el denominador, quedando

$$\frac{< p_i^2 >}{2m_i} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \int_{\infty}^{\infty} e^{-\beta p_i^2/2m_i} dp_i = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left[\sqrt{\frac{2m_i}{\beta}} \int_{\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy \right] = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \sqrt{\beta} = \frac{kT}{2}.$$

Esto es independiente del potencial, por lo que queda demostrado el caso más general.
El término $< q_i^2 >$ se calcula de la misma manera, llevando a

$$\frac{k_i}{2} < q_i^2 >= \frac{kT}{2}.$$

La energía promedio da

$$E =< H >= \left\langle \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{k_i}{2} q_i^2 \right\rangle = 3N \frac{kT}{2} + 3N \frac{kT}{2} = 3NkT,$$

cuya derivada da el calor específico

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = 3Nk,$$

la cual es la ley de Dulong-Petit.
Finalmente, el promedio general es

$$\left\langle x_i \frac{\partial H}{\partial x_j} \right\rangle = \frac{\displaystyle\int e^{-\beta E} x_i \left(\frac{\partial H}{\partial x_j} \right) \prod_k dx_k}{\displaystyle\int e^{-\beta E} \prod_k dx_k} = -\frac{1}{\beta} \frac{\displaystyle\int x_i \left(\frac{\partial e^{-\beta E}}{\partial x_j} \right) \prod_k dx_k}{\displaystyle\int e^{-\beta E} \prod_k dx_k}.$$

Integrando por partes, obtenemos

$$\left\langle x_i \frac{\partial H}{\partial x_j} \right\rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\displaystyle\int \left(e^{-\beta E} x_i \right)\Big|_{x_j=-\infty}^{\infty} \prod_k{}' dx_k - \int e^{-\beta E} \left(\frac{\partial x_i}{\partial x_j} \right) \prod_k dx_k}{\displaystyle\int e^{-\beta E} \prod_k dx_k}.$$

donde la pitatoria prima se refiere a todos los términos x_i excepto $i = j$. Si $i \neq j$, el primer término en el numerador se anula. Si x_j es uno de los q_j, como U es finito en $\pm\infty$, el término se anula también. Si $i = j > N$, entonces, por regla de l'Hôpital, el primer término también da cero. En el segundo término, $\partial x_i / \partial x_j = \delta_{ij}$, con lo cual la expresión queda

$$\left\langle x_i \frac{\partial H}{\partial x_j} \right\rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\int e^{-\beta E} \delta_{ij} \prod_k dx_k}{\int e^{-\beta E} \prod_k dx_k} = \delta_{ij} kT.$$

Problema 3

La función partición del sistema es

$$Z = \sum_{j=0} \infty (2j+1) e^{-\beta j(j+1)h^2/8\pi^2 ma^2}.$$

Sea $x^2 \equiv \frac{h^2}{8\pi^2 ma^2 kT}$. Si $kT \gg 1$, $x \ll 1$, luego

$$\begin{aligned} Z &= 2e^{x^2/4} \sum_{j=0}^{\infty} (j+1/2) e^{-\beta(j+1/2)x^2} \\ &= 2e^{x^2/4} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\varepsilon_j}{x} e^{-\varepsilon_j^2} \end{aligned} \tag{1}$$

donde definimos $\varepsilon_j = \left(j + \frac{1}{2}\right) x$. Notamos que $\Delta\varepsilon_j = \varepsilon_{j+1} - \varepsilon_j = x$. Con esto,

$$\begin{aligned} Z &= 2e^{x^2/4} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\varepsilon_j}{x^2} x e^{-\varepsilon_j^2} \\ &= 2\frac{e^{x^2/4}}{x^2} \sum_{j=0}^{\infty} \varepsilon_j x e^{-\varepsilon_j^2} \\ &= 2\frac{e^{x^2/4}}{x^2} \sum_{j=0}^{\infty} \varepsilon_j e^{-\varepsilon_j^2} \Delta\varepsilon \\ &\approx 2\frac{e^{x^2/4}}{x^2} \int_0^{\infty} \varepsilon e^{-\varepsilon^2} d\varepsilon \\ &= \frac{1}{x^2} e^{x^2/4} \\ &= \frac{1}{x^2} + \frac{1}{4} \\ &\approx \frac{8\pi^2 ma^2 kT}{h^2}. \end{aligned} \tag{2}$$

Con esta función aproximada, la energía queda

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

y el calor específico,

$$C_V = k.$$

Para bajas temperaturas, nos quedamos con los primeros términos en la serie de Z:

$$Z \approx 1 + 3e^{-\theta/T}$$

con $\theta = \frac{h^2}{4\pi^2 ma^2 k}$. Aqui

$$U = \frac{3k\theta e^{-\theta/T}}{1 + 3e^{-\theta/T}}, \qquad C_V = \frac{3k(\theta/T)^2 e^{-\theta/T}}{(1 + 3e^{-\theta/T})^2}$$