FÍSICA TEÓRICA 3 - 2009 2c - Primer parcial (19/10)

(Entregar **Problemas** y **Preguntas** por separado; cada problema en hojas separadas.)

Problemas

Problema 1: Un sistema está formado por N partículas independientes y distinguibles, confinadas a moverse en dos dimensiones sobre un área $\mathcal{A}$. Este movimiento de traslación puede ser considerado clásicamente, $\epsilon_{\text{trasl}} = p^2/2m$. Cada partícula tiene, además, un grado de libertad interno, correspondiente a un oscilador armónico cuántico unidimensional, con niveles de energía $\epsilon_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$.

a) Calcule la función de partición del sistema de las N partículas.

b) Calcule la energía media del sistema, $U(\beta)$.

c) Calcule el calor específico $c_{\mathcal{A}}$. Encuentre sus valores límites para $T \longrightarrow 0$ y $T \longrightarrow \infty$. ¿Para qué rango de valores de T el sistema se comportará aproximadamente como un gas monoatómico bidimensional?

Problema 2: Zipper molecular. En su fase ligada, cada molécula de ADN está formada por dos largas cadenas, unidas entre sí formando una doble hélice. Al aumentar la temperatura, las uniones entre las cadenas tienden a romperse. A temperaturas suficientemente elevadas, las cadenas se separan totalmente. Este proceso es reversible.

El modelo más sencillo para este fenómeno es el de "zipper molecular". El sistema consiste en una serie de N uniones entre dos cadenas. Las uniones pueden abrirse sólo a partir de uno de los extremos del zipper, la última unión, en el otro extremo, siempre está fija. Si las primeras p uniones están rotas, romper la unión número $p + 1$ requiere una energía ϵ, pero esta energía es infinita si las p uniones anteriores están sanas. Vale decir, los estados posibles de las uniones son como el que muestra la figura 2 a. Además, cada unión que ha sido rota puede tomar $G > 1$ orientaciones diferentes, es decir, su estado tiene una degeneración G. El zipper se considera abierto cuando las $N - 1$ uniones están rotas.

a) Calcule la función de partición $Z(x)$ para uno de estos zippers, donde $x = G\,e^{-\beta\epsilon}$.

b) Calcule el valor medio $n(x)$ del número de uniones rotas. Encuentre n para $T \longrightarrow 0$ y $T \longrightarrow \infty$. ¿A qué valores de x corresponden esos límites?

c) Escriba la entropía $S(x)$.

d) Si hay M zippers, dado x, ¿cuántos de ellos en promedio estarán abiertos?

e) Punto extra 1: Definiendo $x = 1 + \eta$ y desarrollando alrededor de $\eta = 0$, investigue el comportamiento de $Z(x)$ alrededor de $x = 1$ hasta orden η^2. De ahí calcule $n(1)$ y $n'(1)$. Con esto y con los valores límites encontrados en (b), asumiendo además $G \gg 1$, grafique cualitativamente $n(x)$. ¿A qué función tiende $n(x)$ para $N \longrightarrow \infty$? Discuta, interprete... en fin, concluya cosas.

f) Punto extra 2: Calcule la función de partición si ahora el zipper puede abrirse desde los dos extremos hasta separarse completamente (fig. 2 b).

Problema 3: Equilibrio sólido-vapor. Considere un sistema de dos fases (sólido y vapor) en equilibrio, contenido en un volumen V y a temperatura T. Las dos fases pueden intercambiar partículas entre sí y con un reservorio.

a) ¿Cuál es la condición de equilibrio termodinámico entre las dos fases?

b) Calcule la función de partición gran canónica del gas, supuesto ideal y monoatómico.

c) Muestre que la fugacidad del gas puede escribirse como $z_{\text{gas}} = \dfrac{N_{\text{gas}}}{V_{\text{gas}} f(T)}$.

d) El sólido puede representarse como un conjunto de osciladores armónicos cuánticos localizados (distinguibles), con 3 osciladores por cada átomo. La energía de cada oscilador es $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega - \epsilon/3$. Calcule la función de partición gran canónica del sólido y muestre que su fugacidad puede escribirse como

$$z_{\text{sol}} = \frac{N_{\text{sol}}}{N_{\text{sol}} + 1} \frac{1}{g(T)} \simeq \frac{1}{g(T)}.$$

e) Por último, muestre que la presión de equilibrio del vapor con el sólido es

$$p(T) = kT \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} \left[2 \sinh \left(\frac{\hbar\omega}{2kT} \right) \right]^3 e^{-\epsilon/kT}.$$

Preguntas

a) Sea una variable estocástica caracterizada por $P_1(y,t)$ y $W_t(y,y')$ (densidad de probabilidad de un cuerpo y densidad de probabilidad de transición por unidad de tiempo).

   i) ¿Qué forma adopta la ecuación maestra correspondiente?

   ii) ¿Cuál es el significado de la condición de equilibrio?

b) Significado del Teorema de Liouville.

c) Dé 2 expresiones de la entropía en el ensamble microcanónico y justifique su equivalencia.

d) Sea un sistema clásico. La expresión de la función de partición canónica es

$$Q_N(V,T) = \int \frac{d^{3N}q\, d^{3N}p}{N!\, h^{3N}}\, e^{-\beta H(q,p)}$$

   i) ¿Por qué se incluye el término $1/N!$?

   ii) Significado de h^3.

   iii) Si la densidad de puntos en Γ decae como $e^{-\beta H(q,p)}$, ¿cómo es posible obtener un pico en la distribución en energía?