MECÁNICA ESTADÍSTICA
FIZ-0411

(Prof. Sebastián A. Reyes / Ayud. Enrico Schiappacasse / 1er semestre 2011)

Control 2

(Viernes 1 de Abril)

Una partícula se puede desplazar a lo largo de una red unidimensional de $N+1$ sitios. El sistema está sometido a un potencial externo, de manera que la energía de la partícula al ocupar el sitio j crece de la forma $E(j) = j\epsilon$ con $j = 0, 1, ..., N$ y $\epsilon > 0$.

Pensemos primero en una red de tamaño $N = 2$:

(a) Encuentre la función partición Z del sistema. (1 pto.)

(b) Calcule el valor medio de la energía. (1 pto.)

(c) Obtenga la dispersión ΔE de la energía. ¿Cuál es la dispersión para $T \to \infty$? (1 pto.)

Ahora, pensemos en una red de tamaño $N \to \infty$:

(d) Calcule la función partición del sistema. (1,5 ptos.)

(e) Determine el valor medio de la posición de la partícula. (1,5 ptos.)

(f) $\mathbf{Punto\ extra}$: Si tomamos ahora el sistema con $E(j) = |j|\epsilon$ y $-\infty < j < \infty$. Calcule la función partición y obtenga el valor medio de la posición. (+1 pto.)

(DATOS: T y ϵ.)

Solución

(a) El sistema tiene sólo tres niveles y es fácil obtener que,

$$Z = 1 + e^{-\beta\epsilon} + e^{-\beta 2\epsilon}. \tag{1}$$

(b) Consoderando las probabilidades de cada estado es fácil ver que,

$$\bar{E} = \frac{\epsilon e^{-\beta\epsilon} + 2\epsilon e^{-\beta 2\epsilon}}{1 + e^{-\beta\epsilon} + e^{-\beta 2\epsilon}}. \tag{2}$$

(c) La dispersión de la energía es,

$$\Delta E = \sqrt{< E^2 > - < E >^2} \tag{3}$$

$$= \sqrt{\frac{\epsilon^2 e^{-\beta\epsilon} + 4\epsilon^2 e^{-\beta 2\epsilon}}{1 + e^{-\beta\epsilon} + e^{-\beta 2\epsilon}} - \left(\frac{\epsilon e^{-\beta\epsilon} + 2\epsilon e^{-\beta 2\epsilon}}{1 + e^{-\beta\epsilon} + e^{-\beta 2\epsilon}}\right)^2} \tag{4}$$

Cuando $T \to \infty$ todos las exponenciales involucradas se vuelven 1. Por lo tanto,

$$\Delta E(T \to \infty) = \sqrt{\frac{2}{3}}\epsilon. \tag{5}$$

(d) Al igual que en el caso de un oscilador armónico, la función partición viene dada por una suma geométrica,

$$Z = \sum_{j=0}^{\infty} e^{-\beta\epsilon j} = \frac{1}{1 - e^{-\beta\epsilon}} \tag{6}$$

(e) El valor medio de la posición $< j >$ se puede determinar usando el valor medio de la energía,

$$\bar{E} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{\epsilon}{e^{\beta\epsilon} - 1} = \epsilon < j > \quad \to \quad < j >= \frac{1}{e^{\beta\epsilon} - 1}. \tag{7}$$

Otra forma equivalente de hacerlo es derivando respecto a la variable $\beta\epsilon$,

$$< j >= -\frac{\partial \ln Z}{\partial(\beta\epsilon)} = \frac{1}{e^{\beta\epsilon} - 1}. \tag{8}$$

(f) Ahora la función partición también involucra sumas geométricas. Diréctamente se obtiene,

$$Z = \sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{-\beta\epsilon j} = \frac{2}{1 - e^{-\beta\epsilon}} - 1 = \coth\frac{\beta\epsilon}{2}. \tag{9}$$

Por la simetría del problema es evidente que el valor medio de la posición es $< j >= 0$.