Física Estadística
Trabajo Práctico 5:Conjunto Gran Canónico

29 de mayo de 2020

1. Si

$$\Psi = -k_B T \ln \mathcal{Z} \tag{1}$$

es el potencial de Landau (o Gran Canónico), donde $\mathcal{Z}$es la gran función de partición. Demuestre que,

$$U = -\left(\frac{\partial(\beta\Psi)}{\partial\beta}\right)_{\beta\mu} \tag{2}$$

$$N = -\left(\frac{\partial\Psi}{\partial\mu}\right)_{T} \tag{3}$$

$$S = \left(\frac{\partial\Psi}{\partial T}\right)_{\mu} \tag{4}$$

Recuerde que en términos de variables termodinámicas el gran potencial es

$$\Psi = U - TS - \mu N \tag{5}$$

Esta es la definición de Callen y la adoptada en este curso. Hay autores que lo definen de otra manera.

Ayuda: Derivar la Ec. 1 para todos los casos. Para las Ecs. 2 y 3 recordar que $\langle A\rangle = \sum_j A_j e^{-\beta A_j}/\mathcal{Z}$. Para la Ec. 4 comparar con Ec. 5.

2.

a) Si $z_1$es la función de partición de un objeto distinguible, mostrar que para un sistema con N de tales objetos valen, en el formalismo canónico, las siguientes expresiones.

$$\begin{aligned} U_C\left(T,V,N\right) =& -\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}\right)_{V,N} = Nk_BT^2\frac{\tilde{z}_1}{z_1} \\ F_C\left(T,V,N\right) =& -k_BT\ln Z = -Nk_BT\ln z_1 \\ S_C\left(T,V,N\right) =& \frac{U_C-F_C}{T} = Nk\left(T\frac{\tilde{z}_1}{z_1}+\ln z_1\right) \end{aligned}$$

donde $\tilde{z}_1 = \left(\frac{\partial z_1}{\partial T}\right)_V$

b) Recordando que la gran función de partición puede escribirse como

$$\mathcal{Z}(T,V,\mu) = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} Z(T,V,N) = \sum_{N=0}^{\infty}\left[e^{\beta\mu}z_1(T,V)\right]^N$$

Mostrar que las magnitudes termodinámicas en el gran canónico pueden escribirse como

$$\begin{aligned} N =& \langle N\rangle_G = \left(\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial(\beta\mu)}\right)_{T,V} = \frac{e^{\beta\mu}z_1}{1-e^{\beta\mu}z_1} \\ \mu =& -k_BT\ln\left(\frac{(N+1)z_1}{N}\right) \\ U_G(T,V,N) =& -\left(\frac{\partial(\ln\mathcal{Z})}{\partial\beta}\right)_{\beta\mu,V} = Nk_BT^2\frac{\tilde{z}_1}{z_1} \\ S_G(T,V,N) =& \frac{U_G-F_G}{T} \\ =& Nk_BT\frac{\tilde{z}_1}{z_1} - k_B\left[N\ln N-(N+1)\ln(N+1)-N\ln z_1\right] \end{aligned}$$

c) Observe que S_C es distinta de S_G. Muestre que en el límite termodinámico la diferencia entre ambos tiende a cero.

Ayuda: Ver Dalvit problema 3.29

3. Un sistema consiste en Nsitios y N electrones. En un sitio determinado hay sólo un orbital accesible, pero puede estar ocupado por $0, 1, 2$ electrones. La energía del sitio es cero si está vacío o bien si hay sólo un electrón. Si hay dos, la energía es ϵ. Adicionalmente hay un campo magnético que actúa sólo sobre los espines de los electrones.

- a- Calcule el potencial químico en función de la temperatura y del campo magnético aplicado.

Ayuda: Ver Callen sección 17.3

- b- Encuentre la capacidad calorífica del sistema.

Ayuda: Utilizar $C_V = \frac{\partial U}{\partial T}$ y $U = -\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta}$

- c- Determine la susceptibilidad magnética para campos pequeños.

Ayuda: La susceptibilidad magnética es $\chi = M/H$ donde $M = -\partial F/\partial H$ es la magnetización y Hel campo eléctrico. Para pequeños campos $\cosh x \approx 1; \sinh x \approx x$.

4. Considere un nivel de energía ϵ_k, utilice el formalismo gran canónico y distinguiendo el caso de partículas que obedecen o no el principio de exclusión de Pauli (fermiones o bosones) evalúe los siguientes puntos:

- a- Calcule la gran función de partición para ese nivel de energía ϵ_k.
- b- Escriba el potencial de Landau para ese nivel.
- c- Calcule el número medio de ocupación.
- d- Encuentre la energía media del mismo.

Ayuda: Ver Callen capítulo 18