FÍSICA ESTADISTICA FC

Serie de ejercicios 4
Fecha de entrega: 27 de marzo de 2019

1. Considere un sistema formado por N partículas no-interactuantes, *espacialmente fijas*. Cada partícula puede estar en 6 microestados diferentes, los cuales tienen los siguientes valores de energía: $E_1 = 0$, $E_2 = \epsilon$, $E_3 = \epsilon$, $E_4 = \epsilon$, $E_5 = 2\epsilon$ y $E_6 = 2\epsilon$. El sistema está en contacto con un baño térmico a temperatura T.

   (a) Encuentre la función de partición canónica del sistema.

   (b) A partir la función de partición canónica, determine la energía media del sistema, así como su entropía.

2. Un sistema cristalino unidimensional está formado por N partículas de masa m, las cuales solamente pueden moverse alrededor de N sitios *fijos* espaciados uniformemente sobre una línea de longitud total L. La posición del i-ésimo sitio sobre la línea es $X_i = (i-1)L/(N-1)$, mientras que la energía potencial de cada partícula alrededor de su sitio correspondiente es

$$u(x_i) = u_0 \left(\frac{x_i - X_i}{\lambda} \right)^b,$$

   en donde $i = 1, ..., n$, u_0 y λ son la energía y la escala espacial típicas del potencial, respectivamente, siendo $u_0 > 0$ y $0 < \lambda \ll L/(N-1)$. El exponente $b > 0$ es un número par, es decir, el potencial siempre confina a la partícula alrededor de su sitio correspondiente, reduciéndose al caso armónico si $b = 2$. El momento la i-ésima partícula correspondiente a la coordenada espacial x_i es p_i^x.

   (a) Si el sistema se encuentra en contacto con un baño térmico a temperatura constante T, con el cual sólo puede intercambiar energía, calcule la función de partición canónica $Z(T, N, L)$ para cualquier potencial anarmónico ($b \neq 2$). Sugerencia: puede hacer uso de la identidad

$$\int_0^\infty e^{-ax^b} = \frac{1}{b} a^{\frac{1}{b}} \Gamma\left(\frac{1}{b}\right).$$

   (b) Encuentre una expresión para la entropía $S(T, N, L)$ del sistema en términos de las variables macroscópicas T, N, L, los parámetros m, u_0 y λ y la constante de Planck h. Verifique que la expresión obtenida para $S(T, N, L)$ es extensiva.

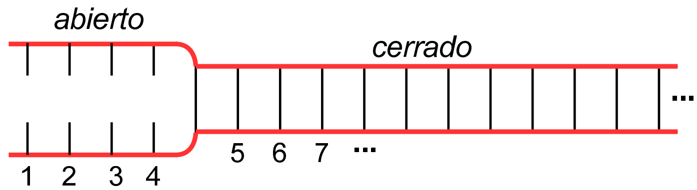

Figure 1: Figura para el ejercicio 3. En el microestado mostrado, el par de bases 4 está abierto dado que los pares 1, 2 y 3 están abiertos, mientras que los pares 5, 6, 7,..., N permanecen cerrados.

(c) Determine la energía total media $\bar{E}$ del sistema así como su capacidad calorífica C_L a longitud constante. Puede hacer uso del teorema de equipartición o llevar a cabo el cálculo directo usando la expresión explícita de la función de partición $Z(T, L, N)$.

(d) Encuentre una aproximación para la energía media del sistema para $b \gg 2$ y justifique físicamente su respuesta.

3. Un modelo muy simple para el ADN consiste en suponer que está compuesto de dos cadenas paralelas (la doble hélice, líneas rojas gruesas) con enlances intermedios (los pares de bases, segmentos negros más delgados), como se muestra en la figura 1. Cada par de bases puede estar en un estado *abierto* con energía $\epsilon > 0$ o en un estado *cerrado* con energía 0. Considere una molécula de ADN con $N \gg 1$ pares de bases en equilibrio térmico con su medio circundante a temperatura fija T. El intercambio de energía entre la molécula de ADN y su medio puede provocar que cada par de bases se abra, dando lugar a la separación de las dos cadenas. Suponga que las dos cadenas están unidas por el extremo derecho de tal forma que la molécula de ADN sólo puede abrirse por la izquierda y solamente en orden secuencial, es decir, el i-ésimo par de bases se puede abrir únicamente si los pares de bases 1, 2, ..., $i-1$ a su izquierda se han abierto.

   (a) Escriba una expresión para la energía E_i del microestado en el cuál el i-ésimo par de bases está abierto y el $(i+1)$-ésimo está cerrado.

   (b) ¿Son los pares de bases distinguibles o indistinguibles? Demuestre que la función de partición canónica del sistema está dada por

$$Z(T, N) = \frac{1 - \exp\left(-\frac{(N+1)\epsilon}{k_B T}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{\epsilon}{k_B T}\right)}.$$

Sugerencia: puede hacer uso de la serie aritmética

$$\sum_{k=0}^{N} x^k = \frac{1 - x^{N+1}}{1 - x},$$

si es necesario.

.

(c) Determine la energía media $\bar{E}$ de la molécula de ADN en términos de ϵ, T y N.

(d) Encuentre el número medio $\bar{n} = \bar{E}/\epsilon$ de pares de bases abiertos en la molécula de ADN en términos de ϵ, T y N. Explique físicamente el comportamiento de $\bar{n}$ para: 1) $k_B T \ll \epsilon$ y para ii) $k_B T \gg \epsilon$.

4. Considere una superficie (bidimensional) que contiene M sitios, los cuales pueden absorber partículas cuando la superficie se pone en contacto con un baño térmico a termperatura T y potencial químico μ. Cada sitio puede encontrarse en dos posibles microestados i: $i = 1$ *vacío*, es decir con $N_1 = 0$ partículas y energía $E_1 = 0$, o $i = 2$ *ocupado* por $N_2 = 1$ una partícula, con energía $E_2 = \epsilon$. Las partículas y los sitios son no-interactuantes, de tal forma que los sitios pueden ser considerados como sistemas independientes con energía y número de partículas variables en contacto con el baño mencionado.

   (a) Demuestre que la función de partición macrocanónica ***de cada sitio*** es

   $$Z_G(T, \mu) = 1 + \exp\left(-\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}\right),$$

   ¿Cuál es la probabilidad de que un sitio específico esté *ocupado*? ¿Cuál es la probabilidad de que esté *vacío*?

   (b) Determine el valor medio $\bar{E}$ de la energía de cada sitio, así como el número medio $\bar{N}$ de partículas por sitio. Verifique que $\bar{E} \leq \epsilon$ y $\bar{N} \leq 1$. ¿Bajo que condiciones para el potencial químico μ y/o de la temperatura T, estos valores medios son $\bar{E} = \frac{\epsilon}{2}$ y $\bar{N} = \frac{1}{2}$? Justifique físicamente su respuesta.

   (c) Determine los valores medios y las desviaciones estándar de la energía total de la superficie así como del número total de partículas absorbidas por los M sitios para valores arbitrarios T y μ de la temperatura y el potencial químico del baño térmico, respectivamente. Demuestre que las fluctuaciones térmicas de energía y de número de partículas absorbidas por la superficie tienden a cero cuando $M \gg 1$.