

## Práctica 5: Ensamblés Canónico y Gran Canónico

### Física Estadística para Física Médica

1. Considerar el sistema de dos niveles de problema 5 de la practica 4, pero en este caso el sistema esta en contacto con un baño térmico. Utilizando ahora el ensamble canónico obtener el calor especifico.
2. Un sistema está compuesto por 1 mol de partículas no interactuantes. Cada partícula tiene dos niveles de energía con distinta degeneración: el fundamental que tiene una energía  $E_0$  y degeneración  $g(E_0) = 1$ , y el primer nivel excitado con energía  $E_1 = E_0 + \Delta$  ( $\Delta = 1eV$ ) y degeneración  $g(E_1) = 4$ .
  - a) Hallar la función de partición del sistema.
  - b) ¿Cuántas partículas se encontrarán en el primer estado excitado para  $T = 1, 10, 100, 1000, \text{ y } 10000K$ ? ¿A qué temperaturas comienza a poblarse apreciablemente este estado?
  - c) Calcular la energía y la entropía del sistema. Evaluarla en los limites  $T \rightarrow 0$  y  $T \rightarrow \infty$ .
3. Una molécula de ADN consiste en dos polímeros lineales entrelazados en una hélice doble. De cada monómero se desprenden una de las cuatro bases llamadas adenina (A), guanina (G), timina (T), o citosina (C), las que conforman los distintos enlaces que unen ambos ejes. El ADN tiene  $M$  enlaces, cada uno de los cuales puede estar en dos estados. El estado cerrado tiene asociada energía nula, y el abierto una energía  $\Delta$ . El desentrelazado de la hélice doble se asemeja a la apertura de un cierre: un enlace puede abrirse solamente si todos los que están arriba ya lo han hecho. Debido a fluctuaciones térmicas, los puentes se pueden abrir o cerrar espontáneamente. El sistema está compuesto por un número  $N \gg 1$  de estas moléculas diluidas en un medio líquido y que no interactúan entre sí.
  - a) Hallar la función de partición y la energía media del sistema.
  - b) Probar que el número promedio de enlaces abiertos a temperatura  $T$  es:  $\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\beta\Delta} - 1} - \frac{M+1}{e^{\beta\Delta(M+1)} - 1}$
  - c) ¿Qué sucede a bajas temperaturas? ¿y a altas temperaturas?
4. Un tipo de virus tiene una masa de  $1,7 \cdot 10^{-14}$  g. Suponiendo a los virus como partículas en equilibrio térmico con la atmósfera, estimar cómo varía su concentración con la altura, si a nivel del suelo la misma es  $c(0)$ . Evaluar la altura característica a la que dejará de ser esperable encontrar este tipo de virus. Recuerde que  $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ .
5. Una mezcla de dos gases ideales monoatómicos se compone de  $N_1$  moléculas de masa  $m_1$  y  $N_2$  de masa  $m_2$ . Los gases están contenidos en una caja de volumen  $V$  con paredes diatérmicas e impermeables, en contacto con la temperatura ambiente  $T$ .
  - a) Calcule la función de partición del sistema
  - b) Probar que la entropía puede escribirse como la suma de las entropías de cada gas y que esto es compatible con la entropía de mezcla encontrada anteriormente.
6. Considere que una superficie con  $M$  centros de adsorción tiene  $N$  moléculas (de masa  $m$ ) de un gas adsorbidas sobre ella (por ej. oxígeno adsorbido sobre mioglobina). Una molécula adsorbida tiene una energía  $-U_0$  comparada con una libre.
  - a) Muestre que la fracción  $f$  de sitios ocupados viene dada por  $f = \frac{e^{\beta(U_0 + \mu)}}{1 + e^{\beta(U_0 + \mu)}}$ .
  - b) Halle el potencial químico de las moléculas adsorbidas.
  - c) Muestre que en equilibrio  $f = \frac{P}{P + P_0}$  donde  $P$  es la presión de gas no adsorbido y  $P_0 = (k_B T)^{\frac{5}{2}} e^{-\beta U_0} \left(\frac{2\pi m}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}$
7. Calcule el potencial químico de un gas ideal monoatómico ionizado en presencia de un campo eléctrico externo. La función energía del mismo viene dada por:  $E = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N z e \phi$  en donde  $z$  es la valencia del ion,  $e$  es la carga del electrón y  $\phi$  es la diferencia de potencial aplicada.
8. Las concentraciones de varios iones se miden tanto dentro como fuera de una célula nerviosa. Cuando el potencial eléctrico dentro de la célula es de  $-70$  mV respecto de su exterior, se miden las concentraciones que se incluyen en el cuadro de abajo. En base a estos valores y utilizando los resultados obtenidos en el ejercicio anterior, comentar sobre qué especies tienen concentraciones que son consistentes con la hipótesis de que pueden pasar libremente por la pared de la célula. Considerar  $T = 300$  K.

ion	$Cl^-$ (mM)	$Na^+$ (mM)	$K^+$ (mM)
$c(\text{interior})$	9	15	150
$c(\text{exterior})$	125	145	5