Física Teórica 3
Serie 3: Ensambles

1^{er} Cuatrimestre de 2010

Problema 1: Un oscilador armónico unidimensional tiene niveles de energía dados por $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ donde ω es la frecuencia característica del oscilador y $n = 0, 1, 2, ...$ Supongamos que este oscilador está en contacto con un reservorio térmico a temperatura T, tal que $kT/\hbar\omega \ll 1$.

a) Encontrar la razón entre la probabilidad del oscilador de estar en el primer estado excitado y la correspondiente al fundamental.

b) Suponiendo que únicamente el fundamental y el primer excitado están apreciablemente ocupados, hallar la energía media del oscilador en función de T.

Problema 2: Se tienen N osciladores armónicos *distinguibles* de frecuencia ν, con niveles de energía $(n + 1/2)h\nu$ para $n = 0, 1, 2, \ldots$. La energía media del sistema vale:

$$\langle E\rangle = \frac{1}{2}Nh\nu + M_0 h\nu$$

a) Encontrar la función de partición del sistema.

b) Hallar el valor de $\beta = 1/k_B T$.

c) Hallar una expresión para la entropía S.

d) Demostrar que el número de configuraciones está dado por

$$\Omega(M_0) = \frac{(N + M_0 - 1)!}{M_0!(N - 1)!}$$

esto es, el número de combinaciones con repetición de N elementos tomados de a M_0.

e) Comparar $\ln\Omega$ con la entropía S calculada en el punto c).

f) Obtener una expresión de $\langle E\rangle$ en términos de β y calcular el calor específico a volumen constante c_V.

Problema 3: Se tienen dos espines, uno de momento magnético μ_1 y otro de momento magnético μ_2. Cada uno puede estar en los estados + ó −. Hay un campo magnético H de modo que las energías de los estados de cada spin son:

$$E(1,+) = -\mu_1 H \qquad E(1,-) = \mu_1 H$$

$$E(2,+) = -\mu_2 H \qquad E(2,-) = \mu_2 H$$

Se sabe que la energía total promedio del sistema de los dos espines es $-E_0$, siendo $E_0 \ll H\,(\mu_1^2 + \mu_2^2)^{1/2}$.

a) Halle la distribución de probabilidades correspondiente al equilibrio.

b) Sabiendo que las contribuciones a la magnetización son $m_i(\pm) = \pm\mu_i$, halle el valor total promedio de la magnetización.

Nota: tenga en cuenta que la temperatura no es dato del problema, no obstante si necesita hallarla se sugiere suponer a priori que ésta es alta y finalmente verificar que dicha suposición era correcta de acuerdo con los datos del problema.

Problema 4: Se tiene un gas ideal diatómico consistente de N moléculas de momento dipolar eléctrico μ. Muestre que la polarización eléctrica P está dada por:

$$P = \frac{N}{V}\left(\coth(\frac{\mu\mathcal{E}}{k_BT}) - \frac{k_BT}{\mu\mathcal{E}}\right)\mu$$

siendo V el volumen del gas y $\mathcal{E}$ el campo eléctrico externo. Pruebe que si $|\mu\mathcal{E}| \ll k_BT$, entonces la constante dieléctrica del gas vale:

$$\epsilon = 1 + 4\pi\frac{N}{V}\frac{\mu^2}{3k_BT}$$

Despreciar la polarización inducida de las moléculas, y asumir que el campo eléctrico actuante sobre cada molécula es simplemente $\mathcal{E}$. Recordar que $D = \mathcal{E} + 4\pi P = \epsilon\mathcal{E}$.

Problema 5: Modelo cuántico para una sustancia paramagnética

Suponga que un momento magnético puede tomar cualquiera de los valores discretos $g\mu_B m$ para su proyección sobre la dirección del campo magnético H, siendo m el número cuántico magnético $j, j-1, ..., -j+1, -j$, g el factor de *Landé*, μ_B el Magnetón de *Bohr*.

a) Calcule la magnetización M de un cuerpo que contiene n de tales momentos magnéticos por unidad de volumen.

b) Evalúe la susceptibilidad magnética para un campo débil a alta temperatura ($g\mu_B jH \ll k_BT$) y compare este resultado con la *ley de Curie*. Suponga que la interacción entre momentos magnéticos es despreciable.

Problema 6: Modelo clásico de Langevin para una sustancia paramagnética

Antes del surgimiento de la mecánica cuántica *Langevin* explicó el paramagnetismo suponiendo que cada ión paramagnético posee un momento magnético permanente $\vec{\mu}$ libre de orientarse en todas direcciones (de módulo fijo) y que, sometido a un campo $\vec{H}$, posee una energía $E = -\vec{\mu}\cdot\vec{H}$.

a) Calcule la magnetización y la susceptibilidad en este modelo

b) Verifique que se obtienen los resultados del problema anterior en el límite $j \to \infty$, identificando $|\vec{\mu}| = \mu_B g\, j$.
Sugerencia: si ha resuelto el problema 4, no se necesitan hacer muchas cuentas para resolver este problema.

Problema 7: Ausencia de magnetismo en mecánica clásica

Muestre que la susceptibilidad magnética de un sistema que obedece a la mecánica y a la estadística clásica es estrictamente nula (*Teorema de Bohr-Van Leeuwen*).

Ayuda: el Hamiltoniano para un sistema de partículas cargadas en un campo magnético es:

$$H = \sum_{j=1}^{N}\frac{1}{2m_j}\{p_j + \frac{e_j}{c}A(\bar{r}_j)\}^2 + U(\bar{r}_1, \ldots, \bar{r}_N)$$

siendo A el potencial vectorial del cual se deriva el campo magnético. ¿ Existe alguna contradicción entre este problema y el anterior?.

Problema 8: Sea un sistema de partículas distinguibles y no interactuantes cada una de las cuales puede tener dos posibles valores de energía: $-\epsilon$ y $+\epsilon$.

a) Suponiendo que dicho sistema está aislado y consiste de N_0 partículas con una energía total E_0, calcule su entropía suponiendo $N_0 \pm E_0/\epsilon \gg 1$.

b) Suponga ahora que el sistema de N_0 partículas es cerrado y su energía *media* vale E_0.

   I) Calcule su temperatura y el rango de E_0 en la que ésta es positiva.
   II) Calcule la entropía y compare con la calculada en a). Discuta.

c) Finalmente suponga que el sistema es abierto con N_0 y E_0 como su número medio de partículas y su energía media respectivamente.

   I) Calcule la temperatura y el potencial químico.
   II) Calcule la entropía, compare con las calculadas anteriormente y discuta.

Problema 9: Se tiene una cadena lineal de N unidades, formando una molécula elástica. Cada unidad puede estar en dos estados, α o β. La longitud del estado α es a y la del β es b, y las energías son respectivamente E_α y E_β. Halle los valores de $\langle E\rangle$ y $\langle L\rangle$ conociendo la temperatura y la tensión F sobre la molécula.

Problema 10: Se tiene una cadena **unidimensional** formada por N segmentos ($N \gg 1$) de longitud a. Las uniones pueden estar libremente en dos posiciones, de modo tal que la energía de la cadena no depende de cómo está doblada, o sea del valor de su longitud total x.

a) Suponga que la longitud se fija en un valor determinado.¿Cómo debe calcular la entropía? (Utilice la aproximación de *Stirling*)

b) ¿A qué valor de x corresponde la entropía máxima? Calcularla.

c) Suponga que la cadena se halla en contacto con un foco térmico a temperatura T. Sobre ella se aplica una fuerza F de magnitud constante que tiende a estirarla, de modo tal que la longitud de equilibrio es x_o. El equilibrio implica que la entropía total (cadena + foco térmico) es un máximo.
Recordando que si se varía la longitud en dx alrededor de x_o, la fuerza entrega a la cadena un trabajo, y que este trabajo se entrega en forma de calor (ya que la energía interna de la cadena no depende de su longitud), muestre que:

$$F = -k_B T \left(\frac{dS}{dx}\right)_{x=x_o}$$

y halle la expresión para $F(x_o)$.

d) Suponga ahora $\langle x\rangle$ conocido. Si calcula la función de partición como:

$$Z = \sum_{x=-Na}^{Na} \Omega(x) e^{-\lambda x} = \sum_{n=0}^{N} \frac{N!}{n!(N-n)!} e^{-\lambda(2n-N)a}$$

calcule $\langle x\rangle$ en función de λ, despeje λ en función de $\langle x\rangle$ y muestre que si $\langle x\rangle = x_o$ entonces $\lambda = -F/k_B T$.

Problema 11: Se tienen N átomos iguales formando una red cristalina perfecta. Si se extraen n átomos ($1 \ll n \ll N$) de sus lugares en la red y se los coloca en posiciones intersticiales, se obtienen n defectos de tipo *Frenkel*. El número N' de posiciones intersticiales en la red es del orden de magnitud de N. Sea W la energía necesaria para producir un defecto *Frenkel*. La temperatura es un dato del problema.

a) Halle el valor de $\langle E\rangle = W\langle n\rangle$ y de allí muestre que:

$$\langle n\rangle \propto \sqrt{NN'}e^{-\beta W/2}$$

b) Grafique cualitativamente $\Omega(n)e^{-\beta nW}$ en función de n.

Problema 12: Se tienen N átomos iguales formando una red cristalina perfecta. Si se extraen n átomos ($1 \ll n \ll N$) de sus lugares en la red, se obtienen n defectos de tipo *Schottky*. Dada la energía por defecto *Schottky* ω y la temperatura, muestre que:

$$\langle n\rangle \propto Ne^{-\beta\omega}$$

Problema 13: Considere una superficie adsorbente que tiene N lugares, cada uno de los cuales puede adsorber una molécula del gas. La superficie se halla en contacto con un gas ideal monoatómico. La energía de la molécula adsorbida vale $-E_o$ respecto al mismo origen que se toma para las energías del gas.

a) Halle el valor de $\langle n\rangle$ (el número medio de moléculas adsorbidas) conociendo la temperatura y el potencial químico μ del gas.

b) Recordando que el potencial químico del gas se escribe $\mu = k_BT\ln(\beta p)+\frac{3}{2}k_BT\ln(h^2\beta/2\pi m)$, muestre que

$$\Theta = \frac{\langle n\rangle}{N} = \frac{p}{p+p_0(T)}$$

donde p es la presión del gas y

$$p_o(T) = (\frac{2\pi m}{\beta h^2})^{3/2}k_BTe^{-\beta E_o}$$

c) Si el número total de moléculas del gas (incluyendo a las adsorbidas) es N_0, calcule la entropía total del sistema.