

Física Teórica 3 – 1er. cuatrimestre de 2012

Guía 5: Conjuntos estadísticos

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 $n = 0, 1, 2, \dots$. 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 .

2. Se tienen N osciladores armónicos distinguibles de frecuencia ν , con niveles de energía $(n + 1/2)\hbar\omega$, para $n = 0, 1, 2, \dots$. La energía media del sistema vale

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2}N\hbar\omega + M_0\hbar\omega.$$

- (a) Encontrar la función de partición del sistema.
- (b) Hallar el valor de $\beta = 1/kT$.
- (c) Hallar una expresión para la entropía S .
- (d) Demostrar que el número de configuraciones está dado por

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

- (e) Comparar $\log \Omega$ con la entropía S calculada en el ítem (c).
- (f) Obtener $\langle E \rangle$ en términos de β y calcular el calor específico a volumen constante.

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, $+$ o $-$. Hay un campo magnético H , de modo que las energías de los estados de cada espín son:

$$\begin{aligned} E(1, +) &= -\mu_1 H & E(1, -) &= \mu_1 H \\ E(2, +) &= -\mu_2 H & E(2, -) &= \mu_2 H. \end{aligned}$$

Se sabe que la energía total promedio del sistema de los dos espines es $-E_0$, siendo $E_0 \ll H\mu_i$.

- (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 en función de la energía E_0 . **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.

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

$$\mathbf{P} = \frac{N}{V} \mu \left[\coth \left(\frac{\mu \mathcal{E}}{kT} \right) - \frac{kT}{\mu \mathcal{E}} \right] \hat{n}, \quad (1)$$

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

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

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

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, que puede tomar los valores $j, j-1, \dots, -j+1, -j$; g el factor de Landé, y μ_B el magnetón de Bohr. Calcule la magnetización M de un cuerpo que contiene n de tales momentos magnéticos por unidad de volumen. Evalúe la susceptibilidad magnética para un campo débil a alta temperatura ($g\mu_B j H \ll kT$) y compare este resultado con la ley de Curie. Suponga que la interacción entre momentos magnéticos es despreciable.

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 $\boldsymbol{\mu}$, libre de orientarse en todas direcciones (de módulo fijo) y que, sometido a un campo \mathbf{H} , posee una energía $E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{H}$. Calcule la magnetización y la susceptibilidad en este modelo y verifique que se obtienen los resultados del problema anterior en el límite $j \rightarrow \infty$, identificando $|\boldsymbol{\mu}| = \mu_B g j$. Sugerencia: si ha resuelto el Problema 4, no necesita hacer muchas cuentas para resolver este 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

$$H = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2m_j} \left[\mathbf{p}_j - \frac{e_j}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_j) \right]^2 + U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N).$$

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

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 .
- Calcule su temperatura y el rango de E_0 en la que es positiva.
 - Calcule la entropía y compare con la calculada en (a).
- (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.
- Calcule la temperatura y el potencial químico.
 - Calcule la entropía, compare con las calculadas anteriormente.
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.
10. Se tiene una cadena unidimensional formada por N segmentos ($N \gg 1$) de longitud a . Las uniones pueden girar libremente de modo tal que la energía de la cadena no depende de cómo está plegada, o sea del valor de su longitud x .
- Suponga que la longitud se fija en un valor determinado. Calcule la entropía. ¿Qué ensambles se pueden usar?
 - ¿A que valor de x corresponde la entropía máxima? Calcularla.
 - 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 estirla, de modo tal que la longitud de equilibrio es x_0 . 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_0 , 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

$$F = -T \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)_{x=x_0}$$

y halle la expresión para $F(x_0)$.

- (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 $\langle x \rangle = x_0$ entonces $\lambda = -F/kT$.

11. Se tienen N átomos iguales formando una red cristalina perfecta. Si se extraen n átomos de sus lugares en la red (con $1 \ll n \ll N$) 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. Halle el valor de $\langle E \rangle = W\langle n \rangle$ y de allí muestre que

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

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

12. Se tienen N átomos iguales formando una red cristalina perfecta. Si se extraen n átomos de sus lugares en la red (con $1 \ll n \ll N$), se obtienen n defectos de tipo Schottky. La temperatura es un dato del problema. Si la energía de formación de un defecto es ω , muestre que

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

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 $-E_0$, respecto al mismo origen que se toma para las energías del gas.

- (a) Halle el número medio de moléculas adsorbidas, $\langle n \rangle$, conocida la temperatura y el potencial químico del gas.
- (b) Recordando que el potencial químico del gas se escribe $\mu = kT \log(\beta p) + \frac{3}{2}kT \log(h^2\beta/2\pi m)$, muestre que

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

donde p es la presión del gas y

$$p_0(T) = \left(\frac{2\pi m}{\beta h^2} \right)^{3/2} kT e^{-\beta E_0}.$$

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