

### Física Teórica 3

Serie 5: Conjuntos estadísticos - 2do cuatrimestre de 2005

**Problema 1:** Un oscilador armónico unidimensional tiene niveles de energía dados por  $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$  donde  $\omega$  es la frecuencia característica del oscilador y  $n = 0, 1, 2, \dots$ . 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  $\nu$ , con niveles de energía  $(n + 1/2)h\nu$  para  $n = 0, 1, 2, \dots$ . La energía media del sistema vale

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2}Nh\nu + M_0h\nu$$

- 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

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

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  $\beta$  y calcular el calor específico a volumen constante.

**Problema 3:** Se tienen dos espines, uno de momento magnético  $\mu_1$  y otro de momento magnético  $\mu_2$ . Cada uno puede estar en los estados  $+$  ó  $-$ . Hay un campo magnético  $H$  de modo que las energías de los estados de cada espin 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  $\mu$ . Muestre que la polarización eléctrica  $P$  está dada por:

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

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

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

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  $m =$  número cuántico magnético  $= j, j-1, \dots, -j+1, -j$ ,  $g =$  factor de Landé,  $\mu_B =$  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 ( $g\mu_B j H \ll k_B T$ ) 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  $E = -\vec{\mu} \cdot \vec{H}$ . 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  $|\vec{\mu}| = \mu_B g j$ . Sugerencia: si se ha resuelto el prob. 4, no se necesita 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

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

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,  $\alpha$  o  $\beta$ . La longitud del estado  $\alpha$  es  $a$  y la del  $\beta$  es  $b$ , y las energías son respectivamente  $E_\alpha$  y  $E_\beta$ . 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 girar libremente de modo tal que la energía de la cadena no depende de cómo está doblada, o sea del valor de su longitud  $x$ .

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

b) ¿A que 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 estirla, 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  $\lambda$ , despeje  $\lambda$  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. 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  $\Omega(n)e^{-\beta n W}$  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  $\omega$  y la temperatura, muestre que

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

**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 del gas.

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

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

donde  $p$  es la presión del gas y

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

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