

Física Teórica 3

Serie 4: Ensembles

2^{do} Cuatrimestre de 2012

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 $n = 0, 1, 2, \dots$. Supongamos que este oscilador está en contacto con un reservorio térmico a temperatura T , tal que $kT/\hbar\omega \ll 1$.

- Encontrar la razón entre la probabilidad del oscilador de estar en el primer estado excitado y la correspondiente al fundamental.
- 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 *distinguidos* de frecuencia ν , con niveles de energía $(n + 1/2)h\nu$ para $n = 0, 1, 2, \dots$. La energía media del sistema vale:

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

- Encontrar la función de partición del sistema.
- Hallar el valor de $\beta = 1/k_B T$.
- Hallar una expresión para la entropía S .
- 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 .

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

- a) 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.

- b) 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 el número cuántico magnético $j, j-1, \dots, -j+1, -j$, 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 ($g\mu_B j H \ll k_B T$) 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 $E = -\vec{\mu} \cdot \vec{H}$.

- a) Calcule la magnetización y la susceptibilidad en este modelo
- b) Verifique que se obtienen los resultados del problema anterior en el límite $j \rightarrow \infty$, 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:

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

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 *distinguidas* 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:

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

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 $\Omega(n) e^{-\beta n W}$ 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* ω 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 μ 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.

Problema 14 Un fluido de partículas que interactúan con un potencial repulsivo puede ser modelado como un "gas reticular". Considere un recipiente dividido en N celdas, cada una de volumen v , comparable al volumen de una partícula, que pueden ocuparse de la siguiente forma:

- Una celda desocupada o una ocupada por una sola partícula tienen ambas energía 0.
 - Una celda ocupada por 2 partículas tiene energía ϵ ,
 - Ninguna celda puede estar ocupada por más de 2 partículas.
- Usando el ensamble gran canónico:

- a) Encuentre la energía media por celda, la concentración de partículas c (número de partículas dividido por N) y la presión p en términos de la temperatura y del potencial químico.
- b) Encuentre expresiones aproximadas para la energía media por celda y para la presión en términos de T y c en los límites en que c es muy pequeña y muy cercana a su máximo valor.