Facultad de Ciencias

Universidad Autónoma de México
Física Estadística
Tarea 3 – 2.1
Profesores:
Dr. Ricardo Atahualpa Solórzano Kraemer

Alumno: Sebastián González Juárez

sebastian_gonzalezj@ciencias.unam.mx

2.1. ¿Cuál es la entropía del modelo de Debye? Estudiar los límites de bajas y altas temperaturas

Sol.

La entropía se obtiene integrando la capacidad calorífica:

$$S(T) = \int_0^T \frac{C_V(T')}{T'} dT'$$

Donde la expresión de C_V en el modelo de Debye:

$$C_V(T) = 9Nk_B\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x-1)^2} dx \quad \left(x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)$$

A. Límite de Bajas Temperaturas $(T \ll \Theta_D)$

A bajas T, el límite superior de la integral $\Theta_D/T \to \infty$. La integral converge a:

$$\int_0^\infty \frac{x^4 e^x}{(e^x-1)^2} dx = \frac{4\pi^4}{15}$$

Entonces:

$$C_V(T) \approx 9Nk_B\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \cdot \frac{4\pi^4}{15} = \frac{12\pi^4}{5} N k_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3$$

Sustituyendo C_V en la integral para S:

$$S(T) = \int_0^T \frac{1}{T'} \cdot \frac{12\pi^4}{5} N k_B \left(\frac{T'}{\Theta_D}\right)^3 dT' = \frac{12\pi^4}{5}\frac{Nk_B}{\Theta_D^3}\int_0^T T'^2 dT' = \frac{12\pi^4}{5}\frac{Nk_B}{\Theta_D^3}\cdot\frac{T^3}{3}$$

$$S(T) = \frac{4\pi^4}{5} N k_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3$$

B. Límite de Altas Temperaturas $(T \gg \Theta_D)$

A altas T, $x = \hbar\omega/k_B T \to 0$. Usamos la aproximación $e^x \approx 1 + x$:

$$\frac{x^4 e^x}{(e^x-1)^2} \approx \frac{x^4(1+x)}{x^2} = x^2 + x^3$$

La integral queda:

$$\int_0^{\Theta_D/T} (x^2 + x^3)dx = \frac{x^3}{3} + \frac{x^4}{4}\bigg|_0^{\Theta_D/T} \approx \frac{1}{3}\left(\frac{\Theta_D}{T}\right)^3$$

Entonces:

$$C_V(T) \approx 9Nk_B\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \cdot \frac{1}{3}\left(\frac{\Theta_D}{T}\right)^3 = 3Nk_B.$$

Esto recupera la ley de Dulong-Petit, aunque en otros lugares vi que dan directo este resultado el cual establece que, a altas temperaturas, cada átomo aporta $3k_B$ al calor específico molar debido a los tres grados de libertad vibracionales.

Sustituyendo $C_V \approx 3Nk_B$:

$$S(T) = \int_0^T \frac{3Nk_B}{T'}\, dT' = 3Nk_B \int_0^T \frac{1}{T'}\, dT'$$

Si evaluamos la integral desde 0 hasta T, surge un problema:

$$\int_0^T \frac{1}{T'}\, dT' = \ln(T')|_0^T = \ln(T) - \ln(0)$$

Pues $\ln(0)$ no está definido, lo que significa que la integral es divergente en el límite inferior.

Para evitar la singularidad en $T' = 0$, introducimos un límite inferior finito T_0, que actúa como constante de integración:

$$S(T) = 3Nk_B \int_{T_0}^T \frac{1}{T'}\, dT' = 3Nk_B[\ln(T) - \ln(T_0)] = 3Nk_B \ln\left(\frac{T}{T_0}\right)$$

Aquí, T_0 es una temperatura de referencia que evita la divergencia y da significado físico a la expresión.

$$S(T) = \int_0^T \frac{3Nk_B}{T'}\, dT' = 3Nk_B \ln\left(\frac{T}{T_0}\right)$$

Eligiendo $T_0 = \Theta_D$ tenemos una mejor comparación con el límite de bajas temperaturas,

$$S(T) \approx 3Nk_B\left[\ln\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)\right]$$

Por otro lado, también encontré que, si se desea ajustar la entropía para que empalme suavemente con la expresión obtenida en bajas temperaturas, se puede añadir una constante adicional:

$$S(T) \approx 3Nk_B\left[\ln\left(\frac{T}{\Theta_D}\right) + 1\right]$$

Lo cual no cambia la dependencia logarítmica con la temperatura, pero sirve para mejorar el acuerdo con el valor exacto de la entropía obtenida al integrar la expresión completa del modelo de Debye.