Facultad de Ciencias

Universidad Autónoma de México
Física Estadística
Tarea 2 – 4.1

Profesores:
Dr. Ricardo Atahualpa Solórzano Kraemer
Alumno: Sebastián González Juárez
sebastian_gonzalezj@ciencias.unam.mx

4.1 En un sólido cristalino monoatómico, cada átomo puede ocupar una posición reticular de la estructura cristalina, o bien, una posición intersticial. La energía de un átomo en una posición intersticial es mayor que la de uno en la retícula. La diferencia entre ambas energías es ϵ. Suponga que el número de posiciones intersticiales es igual al número de posiciones de la estructura; esto es, igual al número de átomos N.

Calcula la entropía del cristal en el estado donde exactamente n de los N átomos están en posición intersticial.

¿Cuál es la temperatura del cristal en este estado si el cristal está en equilibrio térmico?

Sol.

Este sistema tiene en N átomos, donde n están en posiciones intersticiales, de modo que N - n están en posiciones reticulares. El número de formas de elegir n átomos de N para colocarlos en posiciones intersticiales es:

$$\Omega = \binom{N}{n} = \frac{N!}{n!\,(N-n)!}$$

Usando la fórmula de Boltzmann para la entropía: $S = k_B \ln \Omega$

$$S = k_B \ln\left(\frac{N!}{n!\,(N-n)!}\right)$$

Aproximando con Stirling: $\ln\, x! \approx x\,\ln x - x$

$$\begin{aligned} S &\approx k_B\left[\ln N! - \ln n! - \ln(N-n)!\right] \\ &\approx k_B\left[(N\ln N - N) - (n\ln n - n) - \big((N-n)\ln(N-n) - (N-n)\big)\right] \\ &\approx k_B\left[N\ln N - N - n\ln n + n - (N-n)\ln(N-n) + N - n\right] \\ &\approx k_B\left[N\ln N - n\ln n - (N-n)\ln(N-n)\right] \end{aligned}$$

Cada átomo en posición intersticial tiene una energía adicional ϵ, por lo que la energía total del sistema es: $E = n\,\epsilon$

Recordemos que:

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)$$

Donde:

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{\partial S}{\partial n} \cdot \frac{\partial n}{\partial E} = \frac{\partial S}{\partial n} \cdot \frac{1}{\epsilon}$$

$$\frac{\partial S}{\partial n} \approx k_B[-\ln n - 1 + \ln(N-n) + 1] = k_B\left[\ln\left(\frac{N-n}{n}\right)\right]$$

Por lo tanto:

$$\frac{1}{T} = \frac{k_B}{\epsilon} \ln\left(\frac{N-n}{n}\right)$$

Despejando:

$$T = \frac{\epsilon}{k_B \ln\left(\frac{N-n}{n}\right)}$$