

## Mecánica Estadística

### Práctica 2 - Colectividad Microcanónica

Suponiendo que la entropía  $S$  y la cantidad de microestados  $\Omega$  de un sistema físico están relacionadas por una función arbitraria  $f$  tal que:

$$S = f(\Omega),$$

demuestre que el carácter extensivo de  $S$  y el multiplicativo de  $\Omega$  necesariamente requieren que  $f$  sea de la forma:

$$S = k \ln \Omega$$

Demuestre además que la entropía no puede ser de la forma:

$$S = k \ln \Omega + C$$

con  $C$  una constante no nula.

#### Aproximación de Stirling

Mostrar que  $\ln N! = \sum_{n=0}^N \ln n$ . Aproximando esta suma por una integral, obtener la aproximación de Stirling:

$$\ln N! \simeq N \ln N - N$$

Considere un sistema compuesto por  $N$  partículas no interactuantes que pueden ocupar dos estados con energías 0 y  $\epsilon$ . Si hallamos a dicho sistema en el macroestado  $(N, E)$ , halle:

- (a) la cantidad de microestados  $\Omega(N, E)$  en función de  $n$ ,
- (b) la entropía del sistema en función de  $E$ ,
- (c) la temperatura de equilibrio del sistema.

#### Defectos Puntuales en Redes Cristalinas

Los átomos que conforman un sólido cristalino se encuentran dispuestos en los vértices de una red regular (conocida como red cristalina) de manera compacta (Fig. 1a). Sin embargo, a temperaturas distintas de cero, las redes cristalinas puede presentar defectos que rompen esa regularidad, los cuales se clasifican según su geometría: defectos puntuales, lineales o tridimensionales.

Dentro de los defectos puntuales podemos hallar las *vacantes de Schottky*, las cuales consisten en que algunos átomos abandonen su posición en la red (dejando una vacante o vacío en su lugar) y migren hacia la superficie (Fig. 1b); y los *intersticios de Frenkel*, en cuyo caso los átomos migran a posiciones intersticiales de la red (Fig. 1c).

#### Vacantes de Schottky

Consideremos un cristal aislado ( $E = \text{cte}$ ) compuesto por  $N$  átomos que presenta  $n$  vacantes de Schottky. Si suponemos que cada defecto conlleva un coste energético  $\epsilon$ :

- Calcular la cantidad de microestados  $\Omega(E, N)$  en función de la cantidad de defectos  $n$ .
- Determinar la entropía del cristal.
- Obtener una expresión para la cantidad de defectos en función de la temperatura del cristal y realizar una gráfica en función de  $T$ . Calcular la fracción de defectos puntuales si  $\epsilon = 1\text{eV}$  y  $T = 300\text{K}$ .

**Dato:** Un electrónvoltio (eV) es una unidad de energía que equivale a  $1,602176565 \cdot 10^{-19}$  J.

- Calcular el calor específico del cristal y sus límites a  $T = 0\text{K}$  y  $T \rightarrow \infty$ . Realizar una gráfica del mismo en función de  $T$ .
- Teniendo en cuenta que la organización compacta de los átomos en los vértices de la red cristalina minimiza la energía interna del sistema, ¿cómo puede interpretar el hecho de que la red presente defectos puntuales (a temperatura distinta de cero) si cada defecto implica un costo energético?

### Intersticios de Frenkel

Responder los puntos (a), (b) y (c) del ejercicio anterior considerando el mismo cristal, pero que ahora presenta  $n$  átomos situados en sitios intersticiales (solo defectos de Frenkel).

**Ayuda:** Considere la red del cristal y una red dual (de intersticios) a la cual van a parar los átomos que migran. Es válido suponer que ambas redes poseen la misma cantidad de sitios.

### Paramagneto

Una sustancia paramagnética es aquella que presenta magnetización  $\mathbf{M}$  nula frente a un campo magnético externo  $\mathbf{H}$  nulo. Si por el contrario, el campo no es nulo, el paramagneto se imanta en la misma dirección que  $\mathbf{H}$ . Se pueden considerar dos clases de paramagnetismo: el regular o el de *Pauli*. El segundo se debe al gas de electrones libres de un metal, mientras que el primero se origina en la interacción de los momentos magnéticos intrínsecos de los átomos del sólido con el campo magnético externo. En este problema analizaremos un caso sencillo del magnetismo de Langevin.

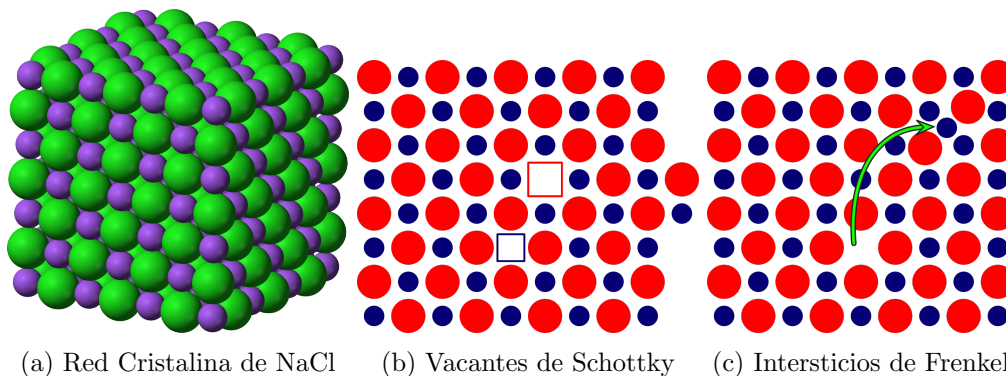


Figura 1: Redes cristalinas y defectos puntuales

Supongamos un paramagneto inmerso en un campo magnético  $H$  orientado en la dirección del eje  $z$ . Consideremos que el paramagneto está compuesto por  $N$  momentos magnéticos individuales (y no interactuantes entre sí) de manera tal que la proyección de cada momento magnético en el eje  $z$  puede ser  $\pm\mu_B$  ( $\mu_B = e\hbar/2m_e c = 9,273 \times 10^{-24} \text{ J/T}$  se conoce como el magnetón de Bohr). La magnetización total del sistema estará dada por  $M = m\mu_B$ , donde  $N/2 + m/2$  y  $N/2 - m/2$  son las cantidades de momentos magnéticos que apuntan hacia arriba y hacia abajo, respectivamente. Vamos a considerar también que el sistema “paramagneto + campo magnético” es un sistema aislado, es decir,  $E = -\mathbf{M} \cdot \mathbf{H} = \text{cte}$ .

- (a) Encontrar una expresión analítica para el número de estados microscópicos  $\Omega(N, M)$  correspondientes a una magnetización total  $M$ .
- (b) Usando la relación  $\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_V$ , hallar la ecuación de estado de los paramagnetos:

$$M = N\mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B H}{k_B T}\right).$$

- (c) Realizar una gráfica de  $M$  vs  $\mu_B H/k_B T$ . ¿Qué sucede con la magnetización a altas temperaturas? ¿Qué sucede con la magnetización a bajas temperaturas?

**Ayuda:** Cuando hablamos de bajas temperaturas nos referimos a que  $k_B T \ll \mu_B H$ , mientras que altas temperaturas significa que  $k_B T \gg \mu_B H$ .

- (d) La Ley de Curie (obtenida experimentalmente por Pierre Curie en 1896) establece que la magnetización de un paramagneto es directamente proporcional al campo magnético externo e inversamente proporcional a la temperatura:

$$M \propto \frac{H}{T}$$

Determinar el rango de validez de la Ley de Curie a partir de la gráfica realizada en (c) (¿altas o bajas temperaturas?).

Obtener la Ley de Curie a partir de un desarrollo en series de Taylor de la magnetización obtenida en (b).

- (e) Si consideramos un paramagneto compuesto por  $N = 10^{24}$  momentos magnéticos a  $T = 300\text{K}$  y sometido a un campo magnético externo  $H = 10^{-3}T$ , ¿cuál es la energía necesaria para invertir totalmente la magnetización  $M$ ?
- (f) Calcular el calor específico del paramagneto y realizar una gráfica del mismo en función de  $\mu_B H/k_B T$ . ¿Cómo podemos interpretar el pico que presenta el calor específico?

## Sólido de Einstein

Uno de los primeros modelos que se propusieron para describir las vibraciones de un sólido cristalino es el de Einstein. El mismo considera cada uno de los  $N$  átomos del sólido vibrando alrededor de su posición de equilibrio y de manera independiente. Además, presupone que todos los átomos oscilan con la misma frecuencia  $\omega$ . Si consideramos a cada átomo como un oscilador armónico cuántico 3D, cada uno posee niveles de energía discretos

( $n = 1, 2, 3, \dots$ ) y por ende, la energía total del sistema ( $E$ ) puede distribuirse entre los distintos osciladores en  $E/\hbar\omega$  cuantos de energía.

- (a) Calcular la cantidad de microestados  $\Omega(E, N, V)$ :

$$\Omega(E, N, V) = \frac{(3N - 1 + E/\hbar\omega)!}{(3N - 1)!(E/\hbar\omega)!}$$

- (b) Obtener una expresión para la energía total  $E$  en función de la temperatura y analizar los límites a la temperatura del cero absoluto y a temperaturas altas ( $T \rightarrow \infty$ ).
- (c) Calcular el calor específico del sólido de Einstein. Analizar los casos de  $T = 0\text{K}$  y  $T \rightarrow \infty$ . Realizar una gráfica del  $C_v$  en función de  $T$  (utilizar Software como wxMaxima).

**Ayuda 1:** Los niveles de energía de un oscilador armónico cuántico unidimensional vienen dados por:  $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ .

**Ayuda 2:** Al considerar cada átomo como un oscilador 3D, podemos asumir que el sólido de  $N$  átomos es equivalente a un sistema de  $3N$  osciladores armónicos 1D. Además, podemos realizar un corrimiento de la energía total del sistema y de esta manera considerar nula la energía de punto cero del oscilador.