Clase 7 - Mecánica Estadística

Duración: 1:10 hrs.
Publicada el 27 de septiembre de 2016

Prof. Álvaro Núñez

1. Conceptos Básicos

- Ejemplo: sistema paramagnetico de spin 1/2.
- Ejemplo: Modelo de Einstein para un sólido.

2. Ejemplo: Sistema Paramagnético de spin 1/2 (microcanónico)

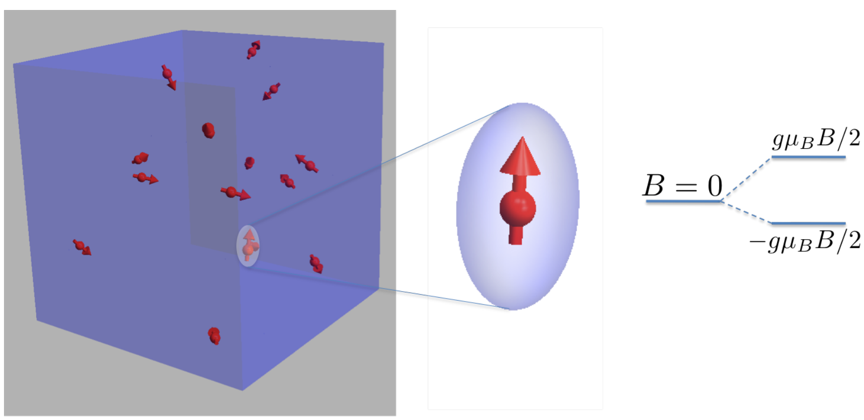

Figura 1: Sistema de momentos magnéticos diluídos.

- Consideramos un sistema con spines aislados entre sí.
- Una aproximación razonable en ciertos sistemas consiste en despreciar las interacciones entre spines: este modelo es apropiado para diversos materiales (particularmente celebres son las sales paramagneticas como $MnSO_4 \cdot 4H_2O$.)
- La construcción de modelos simplificados que capturen la física de sistemas complejos, si bien no es parte del formalismo de la mecánica estadística, es un aspecto consustancial con el éxito de la misma.
- Disponemos de N momentos magnéticos de spin 1/2.

- Si n de ellos estan up, tenemos una magnetización igual a $M = \mu\left(n - \frac{N}{2}\right)$ y una energía igual a $\mathcal{E} = -\mu B\left(n - \frac{N}{2}\right)$.
- Hay,
$$\Omega(n) = \frac{N!}{(N-n)!n!}, \tag{1}$$
posibles microestados.
- La entropía es:
$$\mathcal{S} = \log\frac{N!}{(N-n)!n!} \tag{2}$$
que, usando la aproximación de Stirling, se transforma en:
$$\mathcal{S} = N\log N - (N-n)\log(N-n) - n\log n. \tag{3}$$
y en términos de la energía obtenemos:
$$\mathcal{S}(\mathcal{E}) = N\log N - \left(\frac{\mathcal{E}}{\mu B} + \frac{N}{2}\right)\log\left(\frac{\mathcal{E}}{\mu B} + \frac{N}{2}\right) - \left(-\frac{\mathcal{E}}{\mu B} + \frac{N}{2}\right)\log\left(-\frac{\mathcal{E}}{\mu B} + \frac{N}{2}\right). \tag{4}$$
- La temperatura esta definida por:
$$\frac{1}{T} = \frac{d\mathcal{S}}{d\mathcal{E}} = \frac{1}{\mu B}\log\left(\frac{-\frac{\mathcal{E}}{\mu B} + \frac{N}{2}}{\frac{\mathcal{E}}{\mu B} + \frac{N}{2}}\right) \tag{5}$$
- Obtenemos una energía promedio de:
$$\mathcal{E} = -N\mu B\tanh\left(\frac{\mu B}{k_B T}\right) \tag{6}$$
- El calor específico se define como $\partial\mathcal{E}/\partial T$. Tiene un máximo pronunciado pero de ancho finito que se conoce como la anomalía de Schottky. Es característico de sistemas con niveles discretos. Esta relacionada con la activación de las poblaciones de dichos niveles.

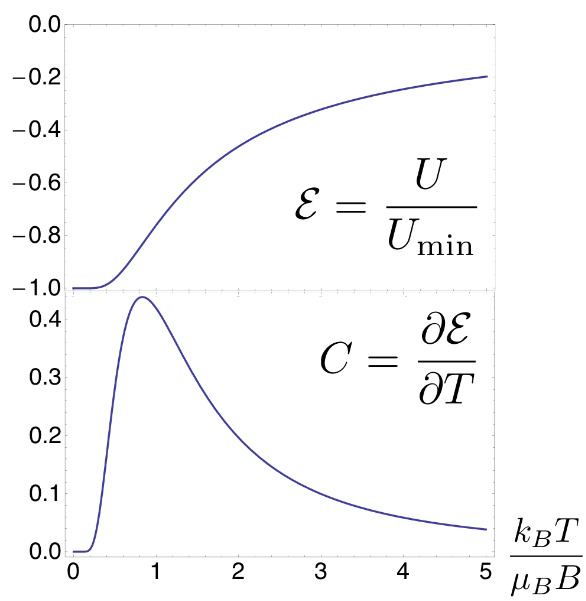

Figura 2: Energía promedio por spin en función de $\frac{k_B T}{\mu_B B}$ y calor específico.

- El momento magnético promedio como función del campo y la temperatura es descrito por la función de Brillouin.
- La susceptibilidad magnética es:

$$\chi = \frac{N\mu^2}{T}$$

que se conoce como ley de Curie. Fue determinada experimentalmente por Pierre Curie.

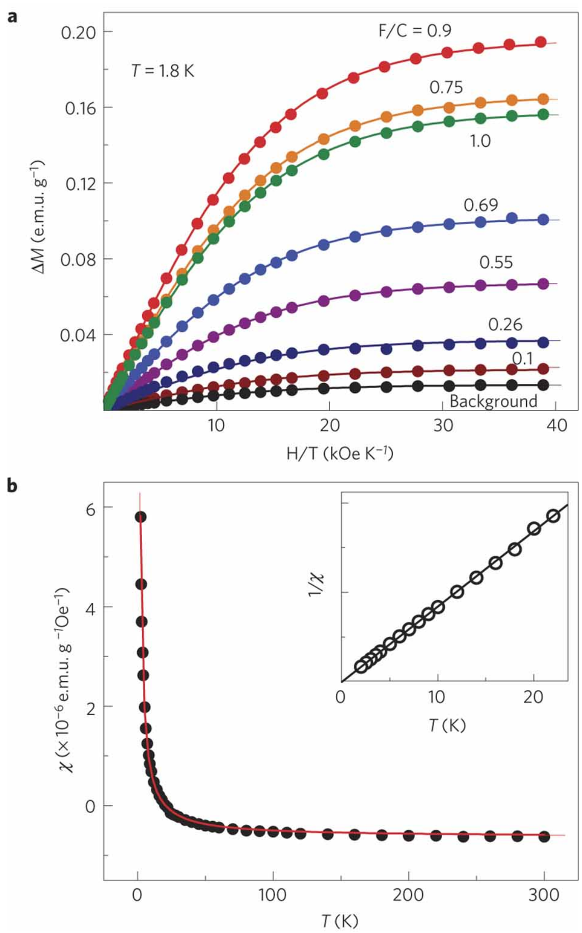

Figura 3: Para grafeno con adatomos de fluor que se comportan como spin 1/2. (a) Momento magnético como función del campo. (b) Susceptibilidad como función de la temperatura. Tomado de Spin-half paramagnetism in graphene induced by point defects, Nature Physics 8, 199–202 (2012),doi:10.1038/nphys2183

3. Oscilador armónico cuántico: modelo de Einstein para el calor específico de un sólido.

Consideremos un sistema consistente en varios osciladores (distinguibles) armónicos con energía:

$$\mathcal{E}_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{7}$$

Este modelo corresponde a la propuesta de Einstein para los grados de libertad vibracionales de un sólido. El espacio de estados es $(n^{(1)}, \cdots, n^{(N)})$ indicando el estado de número de cada oscilador.

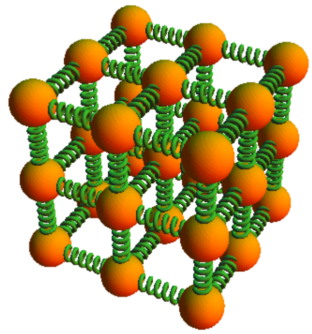

Figura 4: Caricatura del modelo de Einstein.

La energía total es:

$$E\left(n^{(1)},\cdots,n^{(N)}\right)=\hbar\omega\left(\sum_{\alpha}n^{(\alpha)}+\frac{N}{2}\right)\equiv\hbar\omega(M+\frac{N}{2}) \tag{8}$$

donde hemos definido $M=\sum_{\alpha}n^{(\alpha)}$. El número de estados que satisfacen $E=E\left(n^{(1)},\cdots,n^{(N)}\right)$ corresponden al número de maneras de escribir $M=E/\hbar\omega-N/2$ como la suma de N enteros no negativos. Para determinar esta degeneración consideramos el siguiente problema combinatorio. Supongamos que tenemos M bolas blancas y $N-1$ bolas rojas. Tomamos el total de bolas y las revolvemos. Ahora contamos las primeras n_1 bolas blancas consecutivas antes de la primera roja. Luego contamos las siguientes n_2 bolas blancas entre la primera y segunda bolas rojas y así consecutivamente. Los N números generados claramente satisfacen $M=\sum_{\alpha}n^{(\alpha)}$. Ahora tenemos que contar cuantos arreglos distintos hay. Evidentemente tenemos:

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

posibles arreglos. Calculamos la entropía y obtenemos:

$$E=\frac{1}{2}N\hbar\omega+\frac{N\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1}$$

El calor específico:

$$C=N\frac{(\beta\hbar\omega)^2e^{\beta\hbar\omega}}{(e^{\beta\hbar\omega}-1)^2}$$

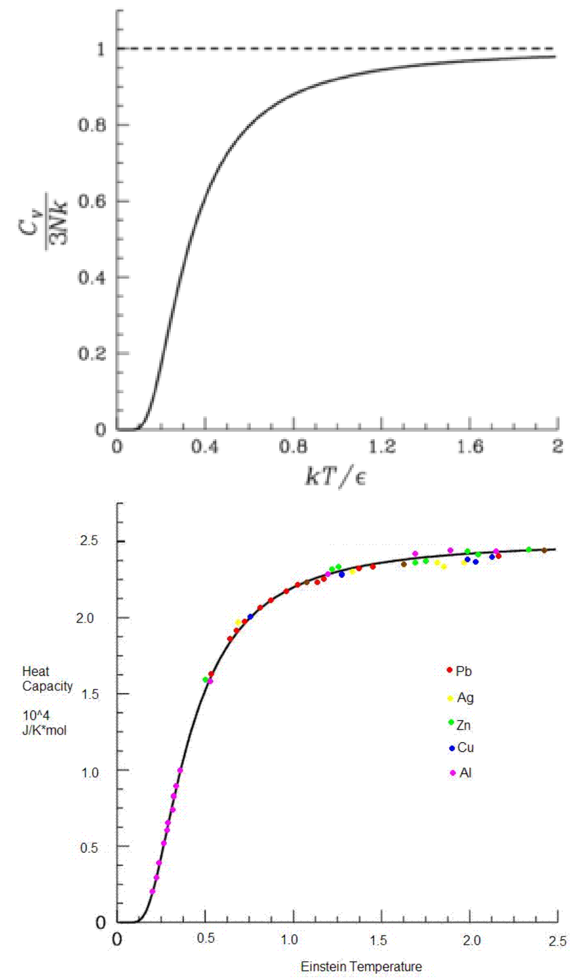

Figura 5: Calor específico en el modelo de Einstein.