Física Estadística.
Prueba de clase 1

January 27, 2010

1. *Defina y explique las principales características de un "Gas ideal clásico", un "Gas de Boltzmann" y un "Gas perfecto" (4 puntos).*

2. *Considere un cristal (ideal) compuesto por N átomos. El retículo tiene N vértices (sitios que pueden ser ocupados por átomos), y otros N puntos entre estos sitios que también pueden ser ocupados. La energía necesaria para mover un átomo de un sitio reticular a un punto entre sitios es E. El número de defectos del cristal (átomos entre sitios) es n. Obtenga:*
a) La energía interna del sistema (1 punto).
b) Su entropía. Dé una expresión aproximada para $n \gg 1$ (1 punto).
c) El número de defectos n cuando el sistema está en equilibrio termodinámico a temperatura T (1 punto).

a) Sea U_0 la energía interna cuando ningún átomo ocupa los sitios entre vértices. Cuando se ocupan n sitios, la energía interna es

$$U = U_0 + nE.$$

b) Hay C_n^N formas de elegir n átomos de los N vértices, y C_n^N formas de situarlas en N sitios entre vértices, luego $\Omega = (C_n^N)^2$. La entropía es por tanto:

$$S = k \ln \Omega = 2k \ln \frac{N!}{n!(N-n)!}.$$

Cuando $n \gg 1$ y $(N-n) \gg 1$, podemos usar la aproximación de Stirling $[\ln(x!) \simeq x \ln x - x]$, de manera que

$$S \simeq 2k[N \ln N - n \ln n - (N-n)\ln(N-n)].$$

c) A temperatura y volumen fijos, la energía libre se minimiza en el equilibrio. De $F = U_0 + nE - TS$ y $\partial F/\partial n = 0$ tenemos

$$n = \frac{N}{e^{E/(2kT)} + 1}.$$

3. *Utilizando la función de partición canónica, demuestre que la capacidad calorífica a volumen constante está relacionada con las fluctuaciones de la energía, E, a través de la fórmula de Einstein (3 puntos):*

$$C_V = \frac{1}{kT^2}(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2).$$

La función de partición es

$$Z = \sum_n \exp(-\beta E_n),$$

donde la suma es sobre los posibles estados del sistema. Por tanto, la energía interna es

$$U = \langle E \rangle = \frac{\sum_n E_n \exp(-\beta E_n)}{\sum_n \exp(-\beta E_n)} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z,$$

donde consideramos que los $\{E_n\}$ son constantes. Para $\langle E^2 \rangle$, tenemos

$$\langle E^2 \rangle = \frac{\sum_n E_n^2 \exp(-\beta E_n)}{\sum_n \exp(-\beta E_n)} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} Z = \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \right) + \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \right)^2.$$

Por un lado tenemos

$$\frac{\partial U}{\partial T} = -\frac{1}{kT^2} \frac{\partial U}{\partial \beta};$$

por otro,

$$\frac{\partial U}{\partial \beta} = -\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln Z = U^2 - \langle E^2 \rangle.$$

Luego, como mantener el conjunto $\{E_n\}$ constante es equivalente a mantener constante el volumen, la capacidad calorífica a volumen constante viene dada por la fórmula de Einstein:

$$C_V = \frac{1}{kT^2}(\langle E^2 \rangle - U^2).$$