

## TEMA 3

### INTERACCIÓN DÉBIL

#### • FACTORIZACIÓN DO VOLUME FÍSICO

Un sistema de  $N$  constituintes e  $\zeta_N$  graos de liberdade é un problema de  $N$  corpos. A descrición dos seus microestados exige a especificación conxunta dos graos de liberdade de todos os constituintes, o que dificulta a descrición estatística de sistemas reais nos que existe interacción entre os seus constituintes.

Sen embargo, existen sistemas físicos cuxos constituintes ou ben non interaccionan entre eles ou fano de xeito que a enerxía das interaccións é moito menor que as súas enerxías propias.

↳ **Interacción débil**  $\Rightarrow$  Podemos despreziar o efecto das interaccións

$$H(q_1, \dots, q_N) = \sum_i H_i(q_i) + \sum_{i,j} H_{ij}(q_i, q_j) + \sum_{i,j,k} H_{ijk}(q_i, q_j, q_k) + \dots \Rightarrow H(q_1, \dots, q_N) \approx \sum_i H_i(q_i)$$

Autoestados do hamiltoniano:  $H_i(q_i) |\phi_i\rangle = \epsilon_i |\phi_i\rangle$

$$H(q_1, \dots, q_N) |\phi_1, \dots, \phi_N\rangle = \sum_i \epsilon_i |\phi_1, \dots, \phi_N\rangle = E_N |\phi_1, \dots, \phi_N\rangle$$

$$E_N = \sum_i \epsilon_i$$

Como os subsistemas son estatisticamente independentes, a distribución de probabilidade do microestado é o produto das probabilidades das funcións de distribución individuais  $\Rightarrow P_e = \prod_i p_i$

Ademais, o número de estados do sistema global é o produto dos estados de cada subsistema por separado:

$$\Gamma_N(E_N) = \prod_i \Gamma_i(\epsilon_i)$$

No caso de que os constituintes sexan indistinguibles (idénticos e non localizables), hai que modificar a expresión anterior descontando o número de permutacións das partículas que conducen ao mesmo estado:

$$\Gamma_N(E_N) = \frac{1}{N!} \prod_i \Gamma_i(\epsilon_i)$$

Uma consequência deste resultado é a aditividade da entropia em sistemas independentes:

$$S(E) = k_B \ln [P(E)] = k_B \sum_i^N \ln (P_i) = \sum_i S_i(E_i).$$

## • FACTORIZACIÓN DA FUNCIÓN DE PARTICIÓN

$$Z_N(T, V, N) = \sum_{\epsilon_1, \dots, \epsilon_N} e^{-\beta \epsilon} = \sum_{\epsilon_1, \dots, \epsilon_N} e^{-\beta \sum_{i=1}^N \epsilon_i} \Rightarrow Z_N(T, V, N) = \prod_{i=1}^N \sum_{\epsilon_i} e^{-\beta \epsilon_i} = \prod_{i=1}^N Z_i$$

Para subsistemas indistinguibles:

$$Z_N = \frac{Z_1^N}{N!}$$

Também se pode factorizar a función de distribución da colectividade gran canónica:

$$\Xi = \sum_{\epsilon} e^{-\beta(E_{\epsilon} - \mu N_{\epsilon})} \Rightarrow \Xi = \prod_{i=1}^N \sum_{\epsilon_i} e^{-\beta(\epsilon_i^{(1)} - \mu N_i^{(2)})} = \prod_{i=1}^N \xi_i \quad E_{\epsilon} = \sum_i \epsilon_i^{(1)} \quad , \quad N_{\epsilon} = \sum_i N_i^{(2)}$$

## SISTEMAS FACTORIZABLES CON ESPECTRO DISCRETO DE ENERGÍA

Consideramos un sistema físico formado por  $N$  constituyentes independientes e distinguibles en equilibrio térmico. Suponemos ademais que os graos de liberdade relevantes conducen a un espectro discreto de enerxía, e consideramos que os seus microestados descríbense mediante un conxunto de números cuánticos ( $r$ ). Para sistemas ideais:

$$H = \sum_i H_i + \underbrace{H_{int}}_{H \text{ de interacción}} \xrightarrow{H_{int} \ll H_i} H \approx \sum_i H_i \Rightarrow \text{Non hai acoplamento de coordenadas de diferentes partículas}$$

Neste caso, a función de partición canónica é:

$$Z_N = Z_1^N \Leftrightarrow Z_1^N = \sum_{r \text{ (estados)}} e^{-\beta \epsilon_r^{(1)}} = \sum_{k \text{ (niveis)}} g_k e^{-\beta \epsilon_k^{(1)}} \quad \text{Dexeneración do nivel } k\text{-ésimo}$$

Consideremos agora que o sistema está formado por  $N$  subsistemas independentes e distinguibles, cada un dos cales ten un espectro con  $s$  niveis de enerxía que suponemos non dexenerados.

$$H \approx \sum_{i=1}^N H_i \quad (H_{int} \ll H_i)$$

$$H_i |\psi_n^{(i)}\rangle = E_{n_i} |\psi_n^{(i)}\rangle \quad n_i = 1, 2, \dots, S$$

Neste caso a función de partición adopta a seguinte forma:

$$Z_N = Z_1^N \Leftrightarrow Z_1 = \sum_{n_k=0}^S e^{-\beta E_{n_k}}$$

Para continuar necesitamos coñecer a forma concreta do espectro de enerxía.

Para **niveis equiespaciados**:

$$E_{n_i+1} - E_{n_i} = \lambda = \text{cte.} \Leftrightarrow E_{n_i} = n_i \lambda \quad (n=0, 1, \dots, S)$$

$$\circ Z_1 = \sum_{n_k=0}^S e^{-\beta n_k \lambda} = \frac{1 - e^{-\beta \lambda (S+1)}}{1 - e^{-\beta \lambda}}$$

Progresión xeométrica:  $\sum_{i=0}^N r^i = \frac{1 - r^{N+1}}{1 - r}$

Deste xeito, a enerxía libre de Helmholtz do sistema GLOBAL será:

$$F = -k_B T \ln(Z_N) = -k_B T \ln \left( \frac{1 - e^{-\beta \lambda (S+1)}}{1 - e^{-\beta \lambda}} \right)^N = -N k_B T \ln(1 - e^{-\beta \lambda (S+1)}) + N k_B T \ln(1 - e^{-\beta \lambda})$$

Isto permite a caracterización completa termodinámica do sistema.

• **Enerxía interna**

$$\bar{E} = - \left( \frac{\partial \ln(Z_N)}{\partial \beta} \right)_N = - \frac{N(S+1)\lambda}{e^{\beta(S+1)\lambda} - 1} + \frac{N\lambda}{e^{\beta\lambda} - 1}$$

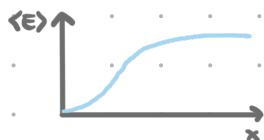
• **Capacidade calorífica**

$$C_x = \left( \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_x = \left( \frac{\partial \bar{E}}{\partial \beta} \right)_x \left( \frac{\partial \beta}{\partial T} \right)_x = - \frac{1}{k_B T^2} \left( \frac{\partial \bar{E}}{\partial \beta} \right)_x \stackrel{x = \beta \lambda}{=} N k_B \left[ \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} - \frac{(S+1)^2 x^2 e^{(S+1)x}}{(e^{(S+1)x} - 1)^2} \right]$$

Casos límites:

$$\bullet X \rightarrow 0 \quad (T \rightarrow \infty, \lambda \rightarrow 0) \Rightarrow C_x \rightarrow 0$$

O sistema deixa de absorber enerxía aínda que T siga aumentando porque os **niveis de enerxía son finitos**. Chégase a un punto no que  $E = \text{cte.}$  e polo tanto  $C_x = \left( \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_x = 0$ .



- $x \rightarrow \infty$  ( $T \rightarrow 0, \lambda \rightarrow \infty$ )  $\Rightarrow C_x \rightarrow 0$

Vemos que os resultados son compatibles co 3º ppo., pois predín a andación da capacidade calorífica cando  $T \rightarrow 0$ .

### • Entropía do sistema.

$$S = k_B \ln(Z) + \frac{\bar{E}}{T} = N k_B \ln(1 - e^{-\beta \lambda (s+1)}) - N k_B \ln(1 - e^{-\beta \lambda}) - \frac{N k_B (s+1) \beta \lambda}{e^{\beta (s+1) \lambda} - 1} + \frac{N k_B \beta \lambda}{e^{\beta \lambda} - 1}$$

E facendo  $x = \beta \lambda$ :

$$\frac{S}{N k_B} = \ln(1 - e^{-(s+1)x}) - \ln(1 - e^{-x}) - \frac{(s+1)x}{e^{(s+1)x} - 1} + \frac{x}{e^x - 1}$$

Casos límite:

- $x \rightarrow 0$  ( $T \rightarrow \infty, \lambda \rightarrow 0$ )  $\Rightarrow \frac{S}{N k_B} \rightarrow \ln(s+1)$

Todos os niveis de enerxía son accesibles.

- $x \rightarrow \infty$  ( $T \rightarrow 0, \lambda \rightarrow \infty$ )  $\Rightarrow \frac{S}{N k_B} \rightarrow 0$

Todos as partículas están no estado fundamental

## • SISTEMA DE 2 NIVEIS DE ENERXÍA $\Rightarrow S=1$

Consideramos un sistema en equilibrio térmico con  $N$  constitúentes, cuns graos de liberdade asociados a un espectro formado por 2 niveis de enerxía: 0 e  $\epsilon$ .

$$H_{2n} |\psi_i\rangle = E_i |\psi_i\rangle \quad \begin{cases} E_0 = 0 \\ E_1 = \epsilon \end{cases}$$

A función de partición é polo tanto (facendo  $s=1$  e  $\lambda = \epsilon$ )

$$Z_1 = \sum_{n_k=0}^1 e^{-\beta E_{n_k}} = 1 + e^{-\beta \epsilon}$$

Co cal a función de partición do sistema global é:  $Z_N = (1 + e^{-\beta \epsilon})^N$



## ◦ SISTEMAS PARAMAGNÉTICOS DE PARTÍCULAS INDEPENDENTES $\Rightarrow$ S FINITO

Campo magnético  $\vec{B}$   $\Rightarrow$  magnetización media por unidade de volume  $\vec{M} \parallel \vec{B}$    
 $\nearrow$  Antiparalelo: Diamagnetismo   
 $\searrow$  Paralelo: Paramagnetismo

Consideremos un corpo macroscópico en equilibrio térmico con foco a temperatura  $T$  e formado por  $N$  constituintes independentes e distinguibles (fixos nunha rede cristalina).

Cada constituinte presenta un momento magnético  $\vec{\mu}$  asociado a un momento angular  $\vec{J}$  que se orienta ao azar debido á enerxía térmica en ausencia do campo externo ( $\vec{H} = 0$  neste caso).

$$\vec{\mu} = g \frac{e}{2m_e} \vec{J} \quad \Leftarrow \quad g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (\text{Factor de Landé})$$

En presenza do campo magnético o hamiltoniano será:

$$H = \sum_{i=1}^N H_i = \sum_{i=1}^N (\underbrace{H_{0i}}_{\substack{\text{Energías propias} \\ \text{das partículas}}} - \vec{\mu}_i \cdot \vec{B}) = \sum_{i=1}^N (H_{0i} - g \frac{e}{2m_e} \vec{J}_i \cdot \vec{B})$$

$\hookrightarrow$  Orixe arbitrario de enerxías

A partir de agora imos considerar só o hamiltoniano asociado aos graos de liberdade magnéticos.

Considerando que o campo vai no sentido positivo do eixo  $Z$ , podemos reexpresar o hamiltoniano da partícula  $i$ -ésima do seguinte xeito:

$$H_i = - \vec{\mu}_i \cdot \vec{B} = - g \frac{e}{2m_e} J_{zi} B$$

$\hookrightarrow$  Cada nodo da rede (ións, átomos,...)

$$\circ J_i^2 |j_i, m_{j_i}\rangle = \hbar^2 j_i(j_i+1) |j_i, m_{j_i}\rangle$$

$$(-j_i \leq m_{j_i} \leq j_i)$$

$$\circ J_{zi} |j_i, m_{j_i}\rangle = \hbar m_{j_i} |j_i, m_{j_i}\rangle$$

Deste xeito, os autoestados e autovalores de  $H_i$  son:

$$H_i |j_i, m_{j_i}\rangle = E_{m_{j_i}} |j_i, m_{j_i}\rangle$$

$$E_{m_{j_i}} = -g \mu_B m_{j_i} B$$

$\hookrightarrow$  Só depende de 1 número cuántico  $\Rightarrow$  NON DEGENERADO

$\hookrightarrow$  Temos  $2j_i+1$  niveis de enerxía non degenerados e equiespaciados

$$\hookrightarrow \Delta = |E_{m_{j_i}+1} - E_{m_{j_i}}| = g \mu_B B$$

Podemos calcular entón a función de partición canónica:

$$Z_1 = \sum_{m_j = -j}^{+j} e^{-\beta E_{m_j}} = \sum_{m_j = -j}^{+j} e^{\beta m_j g \mu_B B} = \frac{e^{-\beta g \mu_B B j} - e^{\beta g \mu_B B (j+1)}}{1 - e^{\beta g \mu_B B}} = \frac{\sinh[\beta g \mu_B B (j+1/2)]}{\sinh[\beta g \mu_B B / 2]}$$

Suma geométrica

$$Z_N = (Z_1)^N$$

Temperatura entón:

$$\ln(Z_N) = -\frac{F(T, N)}{k_B T} = N \ln[\sinh(\beta g \mu_B B (j+1/2))] - N \ln[\sinh(\beta g \mu_B B / 2)]$$

• Energía interna

$$\bar{E} = -\left(\frac{\partial \ln(Z_N)}{\partial \beta}\right)_{N, B} = -N g \mu_B j B j (\beta g \mu_B B)$$

Función de Brillouin

$$B_j(x) = \frac{j+1}{2j} \coth\left(\frac{j+1}{2j} x\right) - \frac{1}{2j} \coth\left(\frac{x}{2j}\right)$$

No caso de  $j=1/2$  (como os electróns), temos  $B_{1/2}(x) = \tanh(x)$ , e así:

$$\bar{E} = -\frac{N g \mu_B B}{2} \tanh(\beta g \mu_B B)$$

• Capacidade calorífica

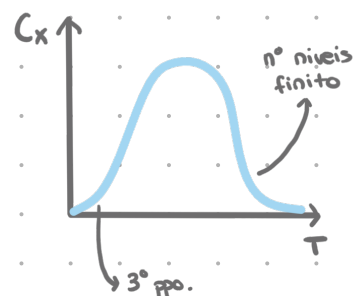
$$C_x = \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial T}\right) = \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial \beta}\right) \left(\frac{\partial \beta}{\partial T}\right) = -\frac{1}{k_B T^2} \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial \beta}\right) = N k_B \frac{(\beta g \mu_B B / 2)^2}{\cosh^2(\beta g \mu_B B / 2)}$$

Casos límite:

$$\bullet x \rightarrow 0 \quad (T \rightarrow \infty) \Rightarrow C_x = N k_B \frac{x^2}{\left(\frac{1+x+1-x}{2}\right)^2} \propto x^2 \rightarrow 0$$

Taylor 1ª orde

$$\bullet x \rightarrow \infty \quad (T \rightarrow 0) \Rightarrow C_x = N k_B \frac{x^2}{\left(\frac{e^x + e^{-x}}{2}\right)^2} \propto x^2 e^{-2x} \rightarrow 0$$



• Magnetización

$$\bar{M} = -\frac{\langle E \rangle}{B} = -\left(\frac{\partial F}{\partial B}\right)_T = k_B T \left(\frac{\partial \ln(Z_N)}{\partial B}\right) = N g \mu_B j B j (\beta g \mu_B B)$$

Casos límite:

- $x \rightarrow 0 \quad (T \rightarrow \infty) \Rightarrow B_j(x = \beta g \mu_B j B) \rightarrow \frac{(j+1)}{3j} \beta g \mu_B j B$

$$\bar{M} \rightarrow \frac{N g \mu_B (j+1)}{2 K_B} \frac{B}{T} \quad (\text{Lei de Curie})$$

- $x \rightarrow \infty \quad (T \rightarrow 0) \Rightarrow B_j(x = \beta g \mu_B j B) \rightarrow 1$

$$\bar{M} \rightarrow N g \mu_B j = N \mu$$

1)  $j = 1/2$

$$\bar{M} = \frac{N g \mu_B}{2} B_{1/2}(\beta g \mu_B j B) = \frac{N g \mu_B}{2} \tanh(\beta g \mu_B j B)$$

$$Z = \sum_i e^{-\beta \epsilon_i} \Rightarrow \epsilon = \int d\Omega e^{\mu_B B \cos \theta}$$

2)  $j \rightarrow \infty \Rightarrow$  As orientações formam um contínuo (sem infinitas)  $\Rightarrow \sum_i \rightarrow \int d\Omega$

$$B_\infty(x) = \coth(x) - \frac{1}{x} = L(x) \quad \text{Função de Langevin}$$

$$\bar{M} = N \mu L(\beta g \mu_B j B) \Rightarrow \text{Expresión clásica}$$

## • SISTEMA DE OSCILADORES ARMÓNICOS INDEPENDENTES $\Rightarrow S \rightarrow \infty$

Consideremos un sistema de  $N$  osciladores unidimensionales independientes e distinguibles en equilibrio a temperatura  $T$ .

Autoestados e autovalores:

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle \quad \begin{cases} H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 = (a^\dagger a + \frac{1}{2}) \hbar \omega \\ E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega \quad (n=0,1,2,\dots) \end{cases}$$

Então um espectro formado por um conjunto discreto de INFINITOS níveis de energia equiespaciados.   
  $\rightarrow C_x$  não tende a 0 quando  $T \rightarrow \infty$

Calculamos a função de partição.

$$\mathcal{E}_1 = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega} = \frac{e^{-\beta \hbar \omega / 2}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega / 2} - e^{-\beta \hbar \omega / 2}} = \frac{1}{2 \sinh\left(\frac{\beta \hbar \omega}{2}\right)}$$

Serie geométrica:  $\sum_{n=0}^{\infty} ar^n = \frac{a}{1-r}$

$$Z_N = (\mathcal{E}_1)^N$$

• Energía interna

$$\bar{E} = - \left( \frac{\partial \ln(\mathcal{E}_N)}{\partial \beta} \right)_N = N \frac{\hbar \omega}{2} \frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}} = N \frac{\hbar \omega}{4} \coth(x)$$

• Capacidad calorífica

$$C_V = \left( \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_V = \left( \frac{\partial \bar{E}}{\partial \beta} \right)_V \left( \frac{\partial \beta}{\partial T} \right)_V = - \frac{1}{k_B T^2} \left( \frac{\partial \bar{E}}{\partial \beta} \right)_V = 4 N K_B \frac{x^2}{(e^x - e^{-x})^2} = N K_B (\beta \hbar \omega)^2 \frac{e^{\beta \hbar \omega}}{(e^{\beta \hbar \omega} - 1)^2}$$

$x = \frac{\beta \hbar \omega}{2}$

Casos límite:

•  $\beta \hbar \omega \rightarrow \infty$  ( $T \rightarrow 0$ )  $\Rightarrow C_V \rightarrow 0$

•  $\beta \hbar \omega \rightarrow 0$  ( $T \rightarrow \infty$ )  $\Rightarrow C_V \rightarrow N K_B$