Mecánica Estadística

Evaluación continua. Segundo control

13/05/2022

Problemas

Nota: Debe elegirse uno de los dos ejercicios propuestos a continuación.

1. *Transferencia electrónica electrodo-electrolito.* Consideremos un modelo muy simplificado de transistor MOSFET de un determinado material consistente en un condensador plano paralelo de área A y capacidad C, con N_0 electrones confinados en una región de anchura despreciable en la parte interna de la placa cargada negativamente (Fig. 1).

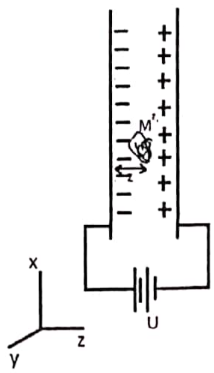


Figura 1: Esquema general del transistor en contacto con el gas.

a) (*6 puntos*) Obténgase la energía de Fermi en ausencia y en presencia de un potencial externo aplicado, U, con el que el transistor adquiere una carga q.

b) (*4 puntos*) Supóngase ahora que ponemos el transistor en un recipiente de volumen V en contacto con un gas a la temperatura T en el que existen partículas $M^{z\pm}$ en densidades $N_\pm/V$ cargadas positiva y negativamente, respectivamente. Si una partícula de carga positiva cuyo orbital de menor energía desocupado (E_{LUMO}) es menor que E_F entra en contacto con el transistor por debajo de una distancia crítica δ se reduce de acuerdo con la reacción $M^{z+} + e^- \to M^{z+-1}$. Despreciando la interacción entre las partículas cargadas (i.e., considerando que el gas en contacto con el termostato es ideal), obténgase la fracción de partículas reducidas cuando el potencial del electrodo es U.
Nota: Escríbase el hamiltoniano de una partícula cargada a una distancia z en la perpendicular de la placa después de calcular la energía potencial de una partícula a esa distancia.

2. *Gas ideal en contacto con una pared: adsorción deslocalizada.* Consideremos un gas ideal formado por N partículas independientes de masa m en equilibrio térmico a la temperatura T en el interior de un recipiente de volumen V situado en una región del espacio donde existe un campo eléctrico $\vec{E}$. Cada una de las partículas del sistema posee un dipolo eléctrico $\vec{p}$ que se acopla al campo eléctrico. Así, el hamiltoniano de una partícula del gas es:

$$H_i = \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} - \vec{p}\vec{E}$$

Suponiendo que los grados de libertad traslacionales y los de orientación de los dipolos eléctricos pueden tratarse clásicamente, calcúlese:

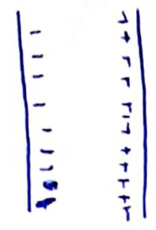
i) (*4 puntos*) La función de partición canónica del sistema.

ii) (*3 puntos*) La polarización media del sistema.

iii) (*3 puntos*) Consideremos ahora la superficie A del recipiente que puede adsorber, de manera independiente y no localizada, partículas del adsorbato constituido por el gas ideal anterior en contacto con la superficie. Estando el gas tridimensional y el gas bidimensional a la misma temperatura, aplicar la condición de equilibrio para determinar el número medio de partículas adsorbidas por unidad de área $\bar{N}/A$ en función de T y N/V, y la energía media por partícula adsorbida.

María Durán

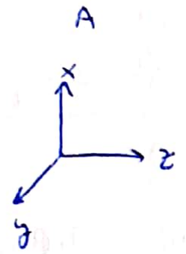
① N_0 C a) Energía de Fermi



gas e^- 2D

$$\varepsilon_F = \mu(T=0) \quad / \quad \bar{N} = \sum \bar{n}_r = \sum \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_r-\mu)}+1}$$

$$\bar{N} = \int_0^\infty d\varepsilon\, g(\varepsilon) \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_r-\mu)}+1} \underset{T=0}{=} \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, g(\varepsilon) \quad (*)$$



Dens. estados $\Rightarrow$ $N(k) = \dfrac{V_2(k)}{(2\pi/a)^2} = \dfrac{A}{4\pi^2}\pi k^2 g_s = 2\cdot\dfrac{A}{4\pi^2}\cdot\pi k^2 =$

$$= \frac{A}{2\pi}k^2 = \frac{A}{2\pi}\frac{2mE}{\hbar^2} = N(E)$$

No rel $\Rightarrow$ $k = \sqrt{2Em/\hbar^2}$

$$g(E) = \frac{dN(E)}{dE} = \frac{Am}{\pi\hbar^2} \;//$$

$$(*) \quad \bar{N} = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \frac{Am}{\pi\hbar^2} = \frac{\varepsilon_F \cdot Am}{\pi\hbar^2} = N_0$$

$$\varepsilon_F = \frac{\pi\hbar^2 N_0}{A\cdot m}$$ $\rightarrow$ energía de Fermi

Si ahora $U \neq 0$ $\rightarrow$ cargo el condensador

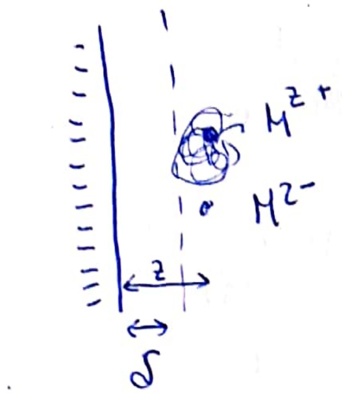
$q \Rightarrow N_0 + \Delta N$

pongo una carga, hay entonces ΔN e^- más

$$N_0 + \frac{q}{e^-} = N_0 + \frac{C\cdot U}{e} \qquad \varepsilon_F = \frac{\pi\hbar^2}{Am}\left(N_0 + \frac{CU}{e}\right)$$

$\rightarrow$ cuantas veces pongo 1 e^-

b)

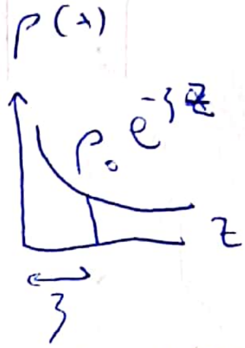


igual al caso del campo grav.

$$M^{Z+} + e^- \longrightarrow M^{Z-1}$$

$$E_{pot}(z) = Z_+ e\Big[\overbrace{\frac{\sigma}{2\varepsilon_0}\cdot d}^{V(d)} + U\Big]$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \Big[Z_+ e\Big(\frac{\sigma}{2\varepsilon_0} z + U\Big)\Big] \quad (1)$$



$$P(z) = \int \frac{d\bar p}{h^3}\int dx\,dy\ \underbrace{P(\bar r, p)}_{\frac{e^{-\beta H(r,p)}}{Z}} = \int \frac{d\bar p}{h}\int \frac{e^{-\beta p^2/2m}\ e^{-\beta Z_+ eU} \cdot e^{-\beta Z_+ e\frac{\sigma}{2\varepsilon_0}z}}{Z} \quad (\star)$$

es lo que coloco aquí

la z que va dividiendo

$$Z = \int \frac{d\bar p}{h^3}\int dx\,dy\,dz\ e^{-\beta H(\bar r, \bar p)}$$

$$P(z) = \beta\,\frac{Z_+ e\sigma}{2\varepsilon_0}\, e^{-\beta Z_+ \frac{e}{2\varepsilon_0}\sigma z}$$

$$(\star)\quad P(z) = \frac{\int \cancel{\frac{dp}{h^3}} \int \cancel{dx\,dy}\ \cancel{e^{-\beta p^2/2m}}\ \cancel{e^{-\beta Z_+ eU}} \cdot e^{-\beta Z_+ e\frac{\sigma}{2\varepsilon_0}z}}{\int \cancel{\frac{dp}{h^3}} \int \cancel{dx\,dy}\,dz\ \cancel{e^{-\beta p^2/2m}}\ \cancel{e^{-\beta Z_+ eU}} \cdot e^{-\beta Z_+ e\frac{\sigma}{2\varepsilon_0}z}} = \frac{e^{-\beta Z_+ e\frac{\sigma}{2\varepsilon_0}z}}{\int_0^\infty dz\ e^{-\beta Z_+ e\frac{\sigma}{2\varepsilon_0}z}} =$$

$$= \frac{\beta Z_+ e\sigma}{2\varepsilon_0}\cdot e^{-\beta Z_+ e\frac{\sigma}{2\varepsilon_0}z} \quad (2)$$

$$N^* = \int_0^\delta \underbrace{N\cdot P(z)}_{N(z)}\,dz = N\Big(1 - e^{-\beta Z_+ e\frac{\sigma}{2\varepsilon_0}\delta}\Big) \quad (4)$$

$$\frac{N^*}{N} = \Big(1 - e^{-\beta Z_+ e\frac{\sigma}{2\varepsilon_0}\delta}\Big)$$

(2) $H_i = \frac{\bar{p}_i^2}{2m} - \underbrace{\bar{p}\bar{E}}_{\text{dipolo}} = \frac{\bar{p}_i^2}{2m} - e\bar{E}$ $\qquad p =$

a) $Z_N = \frac{(Z_1)^N}{N!}$ (1)

(1)

$$Z_1 = \int \frac{d\bar{p}}{h^3} d\bar{r}\, d\Omega_i\, e^{-\beta H(p_i, \theta)} = \cancel{\frac{V}{h^3}\left((2m \int d\Omega e\right.}$$

$$= \int \frac{d\bar{r} d\bar{p}}{h^3} d\Omega_i\, e^{-\beta\left(\frac{\bar{p}_i^2}{2m} - \bar{p}\bar{E}\right)} = \frac{V}{h^3}\left(\frac{2m\pi}{\beta}\right)^{3/2} \int d\Omega_i\, e^{\beta \bar{p}\bar{E}} =$$

$$= \frac{V}{h^3}\left(\frac{2m\pi}{\beta}\right)^{3/2} \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \operatorname{sen}\theta_i\, d\theta_i\, d\phi_i\, e^{\beta p E \cos\theta_i} =$$

$$= \frac{V}{h^3}\left(\frac{2m\pi}{\beta}\right)^{3/2} \cdot 2\pi\, \frac{e^{\beta p E} - e^{-\beta p E}}{\beta p E} \Rightarrow$$

$$\rightarrow Z_1 = \frac{V}{h^3}\left(\frac{2m\pi}{\beta}\right)^{3/2} \cdot 4\pi \cdot \frac{\operatorname{senh}(\beta p E)}{\beta p E}$$

$$Z_N = \frac{Z_1^N}{N!} = \frac{1}{N!}\left(\frac{V}{h^3}\right)^N \underbrace{\left(\frac{2m\pi}{\beta}\right)^{3N/2}}_{1} \underbrace{\left(\frac{4\pi\, \operatorname{senh}(\beta p E)}{\beta p E}\right)^N}_{1}$$

b) $\langle p \rangle = N \langle p_1 \rangle$ 1

$$\langle p \rangle = -\frac{\partial F}{\partial E} = \cancel{\left(\frac{V}{h^3}\right)^N \left(\frac{2m\pi}{\beta}\right)^{3N/2}} = k_B T \overset{1}{\left(\frac{\partial \ln Z_1}{\partial E}\right)}$$

$$\langle p \rangle = p \cdot \left[\operatorname{cotanh}(\beta p E) - \frac{1}{\beta p E}\right] = p \cdot \mathcal{L}(x)$$

$$\boxed{\langle p \rangle = N p\, \mathcal{L}(\beta p E)}$$ (1)

Outra forma

$\langle p_x \rangle = \langle p_y \rangle = 0$

$$\langle p \rangle = \langle p_z \rangle = p \langle \cos\theta \rangle = p \cdot \frac{\int d\Gamma \cos\theta \, e^{-\beta H_i}}{\int d\Gamma \, e^{-\beta H_i}} =$$

c) Sup. A

Condición de eq $\quad \mu^{3D} = \mu^{2D}$ 0,5

0'5

$$\mu = \frac{\partial F}{\partial N} = -K_B T \frac{\partial \ln Z_N}{\partial N} \Rightarrow$$

$$\mu^{3D} = -K_B \left[\ln \left(\frac{4\pi V}{N} \frac{\operatorname{senh}(\beta p E)}{\beta p E} \right) \left(\frac{2m\pi}{\beta h^2} \right)^{3/2} \right]$$

$$z_1^{2D} = \frac{A}{h^2} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{2/2} \underbrace{\frac{4\pi \operatorname{sen h}(\beta p E)}{\beta p E}}_{\text{esta parte no cambia}} \quad 0'5$$

$$Z_N = \frac{1}{N_a!} \left(\frac{A}{h^2} \right)^{N_a} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{N_a} \left(\frac{4\pi \operatorname{sen}(\beta p E)}{\beta p E} \right)^{N_a}$$

$$\mu^{2D} = -K_B T \left[\ln \frac{4\pi A}{N_a h^2} \frac{2\pi m}{\beta} \cdot \frac{\operatorname{senh}(\beta p E)}{\beta p E} \right]$$

$\mu^{3D} = \mu^{2D}$ 0,5

$$\boxed{\frac{N_a}{A} = \frac{N h}{V} \left(\frac{\beta}{2\pi m} \right)^{1/2}} \qquad \frac{N_a}{A}(V, N, T)$$

Outra forma $\Rightarrow$ $\Xi = \exp\left[e^{\beta\mu} Z_1^{2D}\right]$

$$\bar{N} = -\left(\frac{\partial \Psi}{\partial \mu}\right) = K_B T \cdot \frac{\partial \ln \Xi}{\partial \mu} = \frac{K_B T \cdot \beta}{K_B T \beta} \, e^{\beta\mu} \frac{4\pi A}{h^2}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)\frac{\operatorname{senh}(\beta p E)}{\beta p E}$$

μ^{3D}

0'5

$$\bar{E} = -\frac{\partial \ln Z_N}{\partial \beta} = -\left(-\frac{Na}{\beta} - \frac{Na}{\beta} + Na\, p E \coth(\beta p E)\right)$$

$$\frac{\bar{E}}{Na} = -pE \coth(\beta p E) + 2K_B T$$ 0'5

* los n: en rosa son las puntuaciones