6. Considérese un conjunto (ideal) de dipolos eléctricos fijos en una red cuadrada en presencia de un campo eléctrico externo. Calcular la función de partición, entropía, momento dipolar eléctrico medio y la energía.

En primer lugar, calculamos la función de partición, a partir de la energía, y de la expresión del hamiltoniano.

$$E = -\vec{d} \cdot \vec{\varepsilon}$$

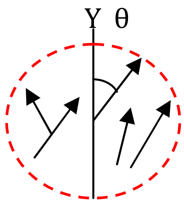
donde E es la energía, $\vec{d}$, es el momento dipolar eléctrico, y $\vec{\varepsilon}$ es campo eléctrico.

La expresión del hamiltoniano, viene dada por:

$$H = -\sum_i \vec{d}_i \cdot \vec{\varepsilon}$$

En nuestro caso en concreto, se trata de un problema en dos dimensiones, de modo que, particularizando la expresión anterior, tenemos que:

$$H = -\sum_i d_i \cdot \varepsilon \cdot \cos\theta_i$$



Dado que sobre los dipolos actúan dos influencias (el campo eléctrico y la temperatura), no podemos conocer de manera exacta la orientación de los mismos, de modo que manteniendo una posición constante, las posibilidades varían entre cero y 2π.

Dado que es un gas ideal, la expresión general de la función de partición es la que sigue.

$$Z = \xi^N$$

Que en nuestro caso, toma la forma siguiente.

$$\xi = \int_0^{2\pi} d\theta \ e^{\beta d\varepsilon \cos\theta}$$

El resultado de esta integral es una función modificada de Bessel de primera especie con $n = 0$:

$$I_n(x) = i^{-n} J_n(ix) = e^{-\frac{n\pi i}{2}} J_n(ix) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(x/2)^{n+2k}}{k! \cdot \Gamma(n+k+1)}$$

En nuestro caso:

$$I_0(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(x/2)^{2k}}{k! \cdot \Gamma(k+1)}$$

Donde $x = \beta d\varepsilon$.

Obtenemos como resultado:

$$\xi = \int_0^{2\pi} d\theta \ e^{\beta d\varepsilon \cos\theta} = 2\pi I_0(\beta d\varepsilon)$$

Volviendo a la expresión general de la función de partición, tenemos que, en definitiva,

$$\boxed{\boldsymbol{Z = [2\pi I_0(\beta d\varepsilon)]^N}}$$

Una vez obtenida la función de partición, encontrar la expresión de la entropía no será tarea difícil. Haremos uso de la expresión de la entropía en la colectividad canónica, que es la que aparece a continuación.

$$S = k_B[\log Z + \beta \bar{E}]$$

Conocido Z, tenemos:

$$Z = [2\pi I_0(\beta d\varepsilon)]^N \Rightarrow \log Z = N[\log 2\pi + \log I_0(\beta d\varepsilon)]$$

Teniendo en cuenta que,

$$\bar{E} = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} = -Nd\varepsilon \left[\frac{1}{I_0(\beta d\varepsilon)} \dot{I}_0(\beta d\varepsilon)\right]$$

Y teniendo en cuenta la relación de Bessel que dice así:

$$\dot{I}_0(\beta d\varepsilon) = I_1(\beta d\varepsilon) \Rightarrow \bar{E} = -Nd\varepsilon \frac{I_1(\beta d\varepsilon)}{I_0(\beta d\varepsilon)}$$

Sustituyendo, en la expresión de la entropía, tenemos:

$$\boxed{\boldsymbol{S = k_B N \left\{[\log 2\pi + \log I_0(\beta d\varepsilon)] - \beta d\varepsilon \left[\frac{I_1(\beta d\varepsilon)}{I_0(\beta d\varepsilon)}\right]\right\}}}$$

Para calcular ahora en momento dipolar eléctrico, partimos de la expresión que sigue.

$$\langle \overrightarrow{d_i} \rangle = \frac{d}{\xi} \int d\theta \, \vec{d} \, e^{\beta d\varepsilon \cos\theta}$$

Dado que nuestro caso, es en dos dimensiones, tenemos:

$$d_x = d \sin\theta$$

$$d_y = d \cos\theta$$

Donde θes el ángulo polar en la dirección del eje y.

De modo que calculamos cada una de las componentes.

$$\langle d_x \rangle = \frac{d}{\xi} \int_0^{2\pi} d\theta \sin\theta \, e^{\beta d\varepsilon \cos\theta} = 0$$

$$\langle d_y \rangle = \frac{d}{\xi} \int_0^{2\pi} d\theta \cos\theta \, e^{\beta d\varepsilon \cos\theta} = 2\pi I_1(\beta d\varepsilon)$$

Así, uniendo ambos resultados, tenemos:

$$\boxed{\langle\vec{\boldsymbol{d}}\rangle = \frac{\boldsymbol{d}}{\boldsymbol{\xi}}[2\pi \boldsymbol{I_1}(\boldsymbol{\beta d \varepsilon})]\vec{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{y}}}$$

Calcular la energía fue necesario anteriormente para obtener, a partir de ella, la entropía. Recordemos, lo que obtuvimos fue lo siguiente.

$$\boxed{\overline{\boldsymbol{E}} = -\boldsymbol{N d \varepsilon}\frac{\boldsymbol{I_1}(\boldsymbol{\beta d \varepsilon})}{\boldsymbol{I_0}(\boldsymbol{\beta d \varepsilon})}}$$