Mecánica Estadística

Corrección Tarea 3

Universidad del Chile, Facultad de Ciencias,
Departamento de Física, Santiago, Chile

Ayudante: Felipe González
Profesor: David Gottlieb

26 de septiembre de 2010

Problema 1

Fuera del equilibrio, no todos los estados estan ocupados con igual probabilidad. El estado de mayor energía que se puede conseguir es el estado en el cual todas las partículas tienen energía ε, por lo tanto, la energía total será $E = N\varepsilon$. El máximo valor posible de E/N es, entonces, ε.
En equilibrio termodinámico, todos los estados están ocupados con igual probabilidad (estado de máxima entropía), es decir, es tan probable encontrar una partícula con energía 0 como encontrar una con energía ε. Esto nos dice que hay tantas partículas en el primer estado de energía como en el segundo, es decir, $n_0 = N/2$ partículas con energía 0 y $n_\varepsilon = N/2$ partículas con energía ε, lo cual da una energía

$$E = n_0 \cdot 0 + n_\varepsilon \varepsilon = \frac{N}{2}\varepsilon.$$

En equilibrio termodinámico, podemos aplicar la mecánica estadística del equilibrio, para la cual funciona la expresión

$$< E >= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z,$$

con Z la función partición del sistema, que en este caso resulta ser

$$Z(T, V, N) = (1 + e^{-\beta\varepsilon})^N.$$

Con esto, la energía promedio queda como

$$< E >= \frac{N\varepsilon}{1 + e^{\beta\varepsilon}},$$

cuyo límite, cuando $T \to \infty$, es precisamente $< E >= \frac{N\varepsilon}{2}$, como habíamos predicho. Finalmente, la entropía la podemos deducir de la relación

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N} = \left(\frac{\partial (kT \ln Z)}{\partial T}\right)_{V,N} = k \ln Z + kT \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}\right)_{V,T} \frac{\partial \beta}{\partial T} = k \ln Z + \frac{< E >}{T}$$

de onde obtenemos

$$s = \frac{S}{N} = k \ln(1 + e^{-\varepsilon/kT}) + \frac{(\varepsilon/T)}{1 + e^{\varepsilon/kT}}.$$

Cuando $T \to \infty$, la entropía por partícula queda $s = k \ln(2)$, que es justamente lo que precide el ensamble microcanónico ($s = k \ln \Omega$, con $\Omega = 2$ microestados).

Problema 2

Las partículas son distinguibles por lo que no es necesario dividir la función partición por $N! = 3!$. Para encontrarla, necesitamos tener claro cuales son los estados a los cuales puede acceder el sistema. Las posibles energías (estados) que puede tomar este sistema de 3 partículas es

$$\begin{aligned}
E_1 &= \varepsilon_{11} + \varepsilon_{21} + \varepsilon_{31} \\
E_2 &= \varepsilon_{11} + \varepsilon_{21} + \varepsilon_{32} \\
E_3 &= \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{31} \\
E_4 &= \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{32} \\
E_5 &= \varepsilon_{12} + \varepsilon_{21} + \varepsilon_{31} \\
E_6 &= \varepsilon_{12} + \varepsilon_{21} + \varepsilon_{32} \\
E_7 &= \varepsilon_{12} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{31} \\
E_8 &= \varepsilon_{12} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{32}
\end{aligned} \tag{1}$$

Por lo tanto, haciendo la suma sobre todos los estados, la función partición resulta ser

$$Z(T, V, 3) = \sum_{n=1}^{8} e^{-\beta E_n}.$$

La entropía es

$$S = k \ln Z + \frac{kT}{Z}\frac{\partial Z}{\partial T}$$

la cual tiende a $S = k\ln(8)$ para $T \to \infty$ (nuevamente, 8 microestados posibles en el microcanónico). Curiosamente, la energía

$$< E >= -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{1}{Z}\sum_{n=1}^{8} E_n e^{-\beta E_n}$$

tiende a $< E >= \frac{1}{8}\sum_{n=1}^{8} E_n$ en ese límite, la cual resulta ser el promedio entre todas las energías posibles; pero no es una energía accesible al sistema, ya que éste sólo puede tener una de las ocho energías mencionadas.

Problema 3

La suma sobre todos los estados es

$$Z = (1 + 2e^{-\beta\varepsilon_1} + 2e^{-\beta\varepsilon_2} + e^{-\beta\varepsilon_3}).$$

De aquí obtenemos

$$\begin{aligned}
< E >&= \frac{\sum g(E_n) E_n e^{-\beta E_n}}{Z} = \frac{(2\varepsilon_1 e^{-\beta\varepsilon_1} + 2\varepsilon_2 e^{-\beta\varepsilon_2} + \varepsilon_3 e^{-\beta\varepsilon_3})}{(1 + 2e^{-\beta\varepsilon_1} + 2e^{-\beta\varepsilon_2} + e^{-\beta\varepsilon_3})} \\
< E^2 >&= \frac{\sum g(E_n) E_n^2 e^{-\beta E_n}}{Z} = \frac{(2\varepsilon_1^2 e^{-\beta\varepsilon_1} + 2\varepsilon_2^2 e^{-\beta\varepsilon_2} + \varepsilon_3^2 e^{-\beta\varepsilon_3})}{(1 + 2e^{-\beta\varepsilon_1} + 2e^{-\beta\varepsilon_2} + e^{-\beta\varepsilon_3})}
\end{aligned}$$

de donde es inmediato obtener la desviación cuadrática media $\Delta E^2 =< E^2 > - < E >^2$.