Problema de microcanónico

Enunciado

Considere un sistema de N partículas indistinguibles, cada una de las cuales puede tener dos energías, 0 y $\epsilon > 0$. El nivel fundamental no está degenerado, mientras que el nivel excitado tiene degeneración g.

(a) En el ensamble microcanónico, calcule la entropía del sistema en función de su energía E, asumiendo $E/\epsilon, g \gg 1$.

(b) Calcule la energía en función de la temperatura. Este sistema tiene una temperatura máxima; ¿cuál es?

(c) Suponiendo $g = \alpha V$, donde α es una constante, calcule la presión en función de la temperatura.

(d) ¿Cuánto vale el potencial químico de este sistema? Discuta su respuesta.

Resolución

(a) Empezamos escribiendo N y E en términos del número N_0 de partículas con energía 0 y el número N_ϵ de partículas con energía ϵ,

$$N = N_0 + N_\epsilon \qquad E = N_\epsilon \epsilon. \tag{1}$$

De estas ecuaciones despejamos N_0 y N_ϵ,

$$N_0 = N - \frac{E}{\epsilon} \qquad N_\epsilon = \frac{E}{\epsilon}. \tag{2}$$

En el microcanónico N y E están fijos, y por lo tanto N_0 y N_ϵ también lo están. ¿Cuántos microestados hay compatibles con un dado valor de estas cantidades? Como las partículas son indistinguibles, la única libertad que nos dejan los vínculos es la de distribuir las N_ϵ partículas con energía ϵ entre los g estados con esa energía. Éste es un problema de libros indistinguibles en cajas distinguibles, así que el número de microestados es

$$\Omega = \binom{N_\epsilon + g - 1}{N_\epsilon}. \tag{3}$$

Sacando el logaritmo y aplicando Stirling obtenemos la entropía,

$$\begin{aligned} S &= k\left[(N_\epsilon + g - 1)\ln(N_\epsilon + g - 1) - N_\epsilon \ln N_\epsilon - (g-1)\ln(g-1)\right] \\ &\simeq k\left[(N_\epsilon + g)\ln(N_\epsilon + g) - N_\epsilon \ln N_\epsilon - g\ln g\right], \end{aligned} \tag{4}$$

donde en el último paso hemos usado que $N_\epsilon, g \gg 1$. Esta ecuación, junto con la segunda ecuación en (2), es la respuesta a este ítem.

(b) Usemos la definición de la temperatura,

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_N = \frac{1}{\epsilon}\frac{dS}{dN_\epsilon} = \frac{k}{\epsilon}\ln\left(\frac{N_\epsilon + g}{N_\epsilon}\right) = \frac{k}{\epsilon}\ln\left(1 + \frac{g}{N_\epsilon}\right). \tag{5}$$

Exponenciando despejamos N_ϵ, y multiplicando el resultado por ϵ obtenemos

$$E = \frac{g\epsilon}{e^{\beta\epsilon} - 1}, \tag{6}$$

lo cual responde a la primera pregunta de este ítem. En cuanto a la segunda pregunta, usando que $N_\epsilon \leq N$ en la ecuación (5) obtenemos

$$\frac{1}{T} \geq \frac{k}{\epsilon}\ln\left(1 + \frac{g}{N}\right) \tag{7}$$

y por lo tanto

$$T \leq \frac{\epsilon}{k\ln\left(1 + \frac{g}{N}\right)}, \tag{8}$$

así que el lado derecho de esta desigualdad es la máxima temperatura que puede alcanzar el sistema.

(c) Apliquemos la definición de la presión,

$$\frac{p}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{E,N} = \alpha\left(\frac{\partial S}{\partial g}\right)_{N_\epsilon} = \alpha k\ln\left(\frac{N_\epsilon + g}{g}\right) = \alpha k\ln\left(\frac{N_\epsilon}{g} + 1\right). \tag{9}$$

Usando el resultado (6) para la energía (que dividido por ϵ da N_ϵ) obtenemos

$$p = \alpha kT\ln\left(\frac{1}{e^{\beta\epsilon} - 1} + 1\right) = \alpha kT\ln\left(\frac{e^{\beta\epsilon}}{e^{\beta\epsilon} - 1}\right), \tag{10}$$

lo cual responde a la pregunta de este ítem.

(d) La entropía de este sistema, ecuación (4), depende sólo de E, no de N, y por lo tanto el potencial químico se anula,

$$\frac{\mu}{T} = -\left(\frac{\partial S}{\partial N}\right)_E = 0. \tag{11}$$

Esto es así porque el número de microestados sólo es sensible a cuántas partículas haya con energía ϵ. Si agregamos una partícula al sistema manteniendo la energía fija, ese número no cambia y por lo tanto tampoco lo hace la entropía. Sería distinto si hubiera más de un estado con energía 0: entonces sí que al agregar una partícula manteniendo la energía fija cambiaría el número de microestados, y por lo tanto el potencial químico sería no nulo.