Facultad de Ciencias

Universidad Autónoma de México
Física Estadística
Tarea 2 – 4.11
Profesores:
Dr. Ricardo Atahualpa Solórzano Kraemer
Alumno: Sebastián González Juárez

sebastian_gonzalezj@ciencias.unam.mx

4.11. Sólido de Einstein en el ensamble microcanónico. Consideremos un conjunto de N osciladores armónicos unidimensionales localizados, no interactuantes, con la misma frecuencia ω. La energía del sistema será

$$\boldsymbol{E(n_1,\ldots,n_N) = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \ldots + \left(n_N + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(M + \frac{N}{2}\right)\hbar\omega}$$

donde $\boldsymbol{M = n_1 + \ldots + n_N}$, $\boldsymbol{n_i = 0, 1, 2, \ldots}$ con i = 1, . . ., N.

En este sentido, M es el número de quantos de energía que tiene nuestro sistema.

a) Calcula $\Omega = \Omega$ (E, N). Hint: Para encontrar el conjunto de microestados nos tenemos que preguntar cómo distribuir $M = E/\hbar\omega - N/2$ quantos de energía entre los N osciladores.
b) Obtén la entropía en el límite termodinámico. Hint: Usa $n \approx n - 1$ para $n \gg 1$.
c) Calcula la temperatura y despeja para E. Compara esto con $\langle E \rangle = -\partial \log Z/\partial\beta$ del ensamble canónico. ¿Obtienes lo mismo?

a)

La energía total del sistema es: $E = \left(M + \frac{N}{2}\right)\hbar\omega$

Despejando M: $M = \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{N}{2}$

El número de microestados $\Omega(E, N)$ es el número de formas de distribuir M cuantos indistinguibles (bosones) en N osciladores distinguibles. Lo mismo que hemos hecho varias veces con las "estrellas y barras", donde:

$$\Omega(E, N) = \binom{M + N - 1}{N - 1} = \frac{(M + N - 1)!}{M!\,(N - 1)!}$$

b)

La entropía es: $S(E, N) = k_B \ln \Omega\,(E, N)$. Usamos la aproximación de Stirling:

$$\begin{aligned} S(E,N) &= k_B \ln \frac{(M + N - 1)!}{M!\,(N - 1)!} \\ &\approx k_B[(M + N - 1)\ln(M + N - 1) - (M + N - 1) - M \ln M + M - (N - 1)\ln(N - 1) \\ &\qquad + (N - 1)] \end{aligned}$$

Para $M, N \gg 1$, tenemos $M + N - 1 \approx M + N$, por lo tanto:

$$S \approx \mathrm{k_B}[(M+N)\ln(M+N) - M\ln M - N\ln N]$$

Sustituyendo $M = \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{N}{2}$:

$$S(E,N) \approx k_B\left[\left(\frac{E}{\hbar\omega}+\frac{N}{2}\right)\ln\left(\frac{E}{\hbar\omega}+\frac{N}{2}\right)-\left(\frac{E}{\hbar\omega}-\frac{N}{2}\right)\ln\left(\frac{E}{\hbar\omega}-\frac{N}{2}\right)-N\ln N\right]$$

c)

La temperatura se define como: $\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_N$

$$\frac{\partial S}{\partial E} = k_B\left[\frac{1}{\hbar\omega}\ln\left(\frac{E}{\hbar\omega}+\frac{N}{2}\right)+\frac{1}{\hbar\omega}-\frac{1}{\hbar\omega}\ln\left(\frac{E}{\hbar\omega}-\frac{N}{2}\right)-\frac{1}{\hbar\omega}\right] = \frac{k_B}{\hbar\omega}\ln\left(\frac{\frac{E}{\hbar\omega}+\frac{N}{2}}{\frac{E}{\hbar\omega}-\frac{N}{2}}\right)$$

Por lo tanto: $\frac{1}{T} = \frac{k_B}{\hbar\omega}\ln\left(\frac{E+\frac{N}{2}\hbar\omega}{E-\frac{N}{2}\hbar\omega}\right)$

Despejando E:

$$\ln\left(\frac{E+\frac{N}{2}\hbar\omega}{E-\frac{N}{2}\hbar\omega}\right) = \frac{\hbar\omega}{k_B T} \Rightarrow \frac{E+\frac{N}{2}\hbar\omega}{E-\frac{N}{2}\hbar\omega} = e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \Rightarrow E + \frac{N}{2}\hbar\omega = Ee^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - \frac{N}{2}\hbar\omega e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}$$

$$\Rightarrow E\left(1 - e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}\right) = -\frac{N}{2}\hbar\omega\left(1 + e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}\right)$$

$$E = \frac{N}{2}\hbar\omega \cdot \frac{1 + e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} = \frac{N}{2}\hbar\omega \cdot \frac{e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} + 1}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}} = \frac{N}{2}\hbar\omega \cdot \frac{e^{-\beta\hbar\omega}+1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} = \frac{N}{2}\hbar\omega\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)$$

d)

En el ensamble canónico, la energía promedio de N osciladores independientes es:

$$\langle E\rangle = N\left(\frac{\hbar\omega}{2}+\frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1}\right) = N\left(\frac{\hbar\omega}{2}\coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\right) = \frac{N}{2}\hbar\omega\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)$$

Esto coincide exactamente con el resultado del ensamble microcanónico.