PROBLEMA 2 - Relación adicional 3

Considérese un sistema de dos partículas idénticas, cada una de las cuales puede ocupar uno de tres posibles niveles, cuyas energías son 0, ε y 2 ε. El nivel más bajo de energía tiene una degeneración doble. El sistema se encuentra en equilibrio térmico a la temperatura T. Con ayuda de un diagrama, enumera las distintas posibles configuraciones y calcula la función de partición y la energía media si las partículas obedecen la estadística de (a) Maxwell-Boltzmann, (b) Fermi-Dirac, (c) Bose-Einstein.

Este problema es un modo de ilustrar las diferencias entre las tres estadísticas: Maxwell-Boltzmann, Fermi-Dirac y Bose-Einstein.

Hay 2 partículas (*N*=2) y por tanto 4 estados de partículas, (2 de ellos están degenerados: $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$):

$$\begin{cases} \varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0 \\ \varepsilon_3 = \varepsilon \\ \varepsilon_4 = 2\varepsilon \end{cases}$$

a) Estadística de Mawell-Boltzmann:

En este caso de descripción clásica, las partículas, aunque iguales, se consideran *identificables*. Las representaremos por ello como A y B. Tendremos entonces los siguientes posibles estados del sistema:
(*r* es el estado cuántico de una partícula, R el estado cuántico del sistema completo y ε_r es la energía de la partícula en el estado *r*)

R\r	1	2	3	4
	0	0	ε	2 ε
1	A	B	0	0
2	A	0	B	0
3	A	0	0	B
4	0	A	B	0
5	0	A	0	B
6	0	0	A	B
B	B	A	0	0
8	B	0	A	0
9	B	0	0	A
10	0	B	A	0
11	0	B	0	A
12	0	0	B	A
13	AB	0	0	0
14	0	AB	0	0
15	0	0	AB	0
16	0	0	0	AB

Así pues, vemos que el número total de configuraciones posibles es 16 (= 4^2), (hay 16 estados).

- Función de partición: En el colectivo canónico, para la estadística de Maxwell-Boltzmann, la función de partición de un gas ideal viene dada por la expresión:

$$Z_N = \frac{\xi^N}{N!}$$

donde ξ es la función de partición de una partícula:

$$\xi = \sum_r e^{-\beta\varepsilon_r}$$

Luego:

$$Z_N = \frac{(\sum_r e^{-\beta\varepsilon_r})^2}{2!} = \frac{1}{2!}(e^{-\beta\varepsilon_1} + e^{-\beta\varepsilon_2} + e^{-\beta\varepsilon_3} + e^{-\beta\varepsilon_4})^2 = \frac{1}{2!}(e^{-\beta 0} + e^{-\beta 0} + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-\beta 2\varepsilon})^2$$
$$= \frac{1}{2}(2 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-2\beta\varepsilon})^2 = \frac{1}{2}[4 + (e^{-\beta\varepsilon} + e^{-2\beta\varepsilon})^2 + 4(e^{-\beta\varepsilon} + e^{-2\beta\varepsilon})]$$
$$= \frac{1}{2}(4 + e^{-2\beta\varepsilon} + e^{-4\beta\varepsilon} + 2e^{-\beta\varepsilon}e^{-2\beta\varepsilon} + 4e^{-\beta\varepsilon} + 4\, e^{-2\beta\varepsilon}) \Rightarrow$$

$$\boxed{Z_N = \frac{1}{2}(4 + 4e^{-\beta\varepsilon} + 5e^{-2\beta\varepsilon} + 2e^{-3\beta\varepsilon} + e^{-4\beta\varepsilon})}$$

En la expresión anterior queda patente que tendremos: 4 estados con energía 0, 4 estados con energía ε , 5 estados con energía 2ε, 2 estados con energía 3ε y un estado con energía 4ε, por lo tanto 16 estados posibles.

- Energía media:

$$\langle E\rangle = -\frac{\partial lnZ}{\partial\beta} = -\frac{\frac{\partial Z}{\partial\beta}}{Z} = -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\beta}$$

Luego:

$$\langle E\rangle = \frac{\varepsilon}{2Z}(4e^{-\beta\varepsilon} + 10e^{-2\beta\varepsilon} + 6e^{-3\beta\varepsilon} + 4e^{-4\beta\varepsilon}) \Rightarrow$$

$$\boxed{\langle E\rangle = \frac{4\varepsilon e^{-\beta\varepsilon} + 10\varepsilon e^{-2\beta\varepsilon} + 6\varepsilon e^{-3\beta\varepsilon} + 4\varepsilon e^{-4\beta\varepsilon}}{4 + 4e^{-\beta\varepsilon} + 5e^{-2\beta\varepsilon} + 2e^{-3\beta\varepsilon} + e^{-4\beta\varepsilon}}}$$

c) Estadística de Bose-Einstein:

En cuanto se considera la descripción cuántica, (las partículas son ahora *bosones*), las partículas dejan de ser identificables, para ser *partículas idénticas*, indistinguibles, A = B, por lo que representaremos a ambas partículas por A. Teniendo en cuenta que para $\varepsilon = 0$, g =2, tendremos entonces los siguientes posibles estados del sistema:

R\r	1	2	3	4
	0	0	ε	2 ε
1	AA	0	0	0
2	0	AA	0	0
3	0	0	AA	0
4	0	0	0	AA
5	A	A	0	0
6	A	0	A	0
B	A	0	0	A
8	0	A	0	A
9	0	0	A	A
10	0	A	A	0

Luego, el número total de configuraciones posibles es 10, (hay 10 estados).

- Función de partición:

$$Z = \sum_R e^{-\beta E_R}$$

$$Z = e^{-2\beta\cdot 0} + e^{-2\beta\cdot 0} + e^{-2\beta\varepsilon} + e^{-2\beta 2\varepsilon} + e^{-\beta(0+0)} + e^{-\beta(0+\varepsilon)}$$

$$+e^{-\beta(0+2\varepsilon)} + e^{-\beta(0+2\varepsilon)} + e^{-\beta(\varepsilon+2\varepsilon)} + e^{-\beta(0+\varepsilon)} \Rightarrow$$

$$\boxed{Z = 3 + 2e^{-\beta\varepsilon} + 3e^{-2\beta\varepsilon} + e^{-3\beta\varepsilon} + e^{-4\beta\varepsilon}}$$

- Energía media :

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta}$$

Luego:

$$\langle E \rangle = \frac{\varepsilon}{Z}(2e^{-\beta\varepsilon} + 6e^{-2\beta\varepsilon} + 3e^{-3\beta\varepsilon} + 4e^{-4\beta\varepsilon}) \Rightarrow$$

$$\boxed{\langle E \rangle = \frac{2\varepsilon e^{-\beta\varepsilon} + 6\varepsilon e^{-2\beta\varepsilon} + 3\varepsilon e^{-3\beta\varepsilon} + 4\varepsilon e^{-4\beta\varepsilon}}{3 + 2e^{-\beta\varepsilon} + 3e^{-2\beta\varepsilon} + e^{-3\beta\varepsilon} + e^{-4\beta\varepsilon}}}$$

b) Estadística de Fermi-Dirac:

Ahora, además de considerarse partículas *indistinguibles*,(las partículas son *fermiones),* sucede que *no puede haber más de una partícula en un mismo estado* (principio de exclusión de Pauli), por lo que descartaremos los casos en los que las dos partículas estén juntas. Resulta entonces que para el sistema sólo son posibles los siguientes estados:

R\r	1	2	3	4
	0	0	ε	2 ε
1	A	A	0	0
2	A	0	A	0
3	A	0	0	A
4	0	A	A	0
5	0	A	0	A
6	0	0	A	A

Luego, el número total de configuraciones posibles es 6, (hay 6 estados).

- Función de partición:

$$Z = \sum_R e^{-\beta E_R}$$

$$Z = e^{-\beta(0+0)} + e^{-\beta(0+2\varepsilon)} + e^{-\beta(0+\varepsilon)} + e^{-\beta(\varepsilon+2\varepsilon)} + e^{-\beta(0+2\varepsilon)} \Rightarrow$$

$$\boxed{Z = 1 + 2e^{-\beta\varepsilon} + 2e^{-2\beta\varepsilon} + e^{-3\beta\varepsilon}}$$

- Energía media :

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta} \Rightarrow \boxed{\langle E \rangle = \frac{2\varepsilon e^{-\beta\varepsilon} + 4\varepsilon e^{-2\beta\varepsilon} + 3\varepsilon e^{-3\beta\varepsilon}}{1 + 2e^{-\beta\varepsilon} + 2e^{-2\beta\varepsilon} + e^{-3\beta\varepsilon}}}$$