Física Teórica 3 − 2do. cuatrimestre de 2013

Guía 7: *estadística cuántica I*

1. Una partícula está confinada en una caja cúbica de volumen V. Su hamiltoniano es $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$.

   (a) Encuentre los autoestados y las autoenergías de $\hat{H}$ suponiendo condiciones de contorno i) periódicas; ii) homogéneas, con el origen de coordenadas en un vértice de la caja; iii) homogéneas, con el origen de coordenadas en el centro de la caja.

   (b) Escriba la función de partición canónica como una suma sobre los autoestados del hamiltoniano para cada una de las alternativas del ítem anterior.

   (c) Muestre que a medida que V aumenta la variación de términos consecutivos en la suma (ordenados según el orden creciente de energías) es cada vez más lenta.

   (d) Para V suficientemente grande, la suma puede aproximarse por una integral: ¿cuál es la condición que permite dar ese paso? Escriba la versión integral de la función de partición para los tres casos planteados más arriba y demuestre que coinciden entre sí.

2. Considere un sistema formado por dos partículas no interactuantes que pueden estar en cualesquiera de tres estados, con energías 0, ε y 2ε. El sistema está en contacto con un foco térmico a temperatura T.

   (a) Escriba una expresión para la función de partición Z si:

      i. las partículas son distinguibles pero la función de partición se corrige con un factor $1/N!$.

      ii. las partículas obedecen a la estadística de Bose−Einstein.

      iii. las partículas obedecen a la estadística de Fermi−Dirac.

   (b) Grafique la energía media en cada caso y compare.

   (c) Analice los tres casos cuando $kT \gg \epsilon$, identificando, en los sistemas cuánticos, la primera corrección respecto del comportamiento clásico.

3. Un sistema está formado por dos partículas idénticas no interactuantes. Los autoestados de energía del hamiltoniano de una partícula están etiquetados de modo que el autoestado k tiene energía $\epsilon(k)$, donde k es un índice discreto. La función de partición está dada entonces por

$$Z_2(\beta) = \sum_{k_1,k_2}{}' e^{-\beta\epsilon(k_1)} e^{-\beta\epsilon(k_2)},$$

   donde el significado de $\sum'$ depende de si las partículas son bosones o fermiones. Notar que en el caso clásico, la suma no tiene ninguna restricción, pero se incluye un factor $1/2!$ ad hoc.

   (a) Organizando la suma según la multiplicidad de cada par de niveles (k_1, k_2), demostrar que

$$\begin{aligned} Z(\beta) &= \frac{1}{2!} Z_1(\beta)^2 \pm \frac{1}{2} Z_1(2\beta) \\ &= Z_{\text{cl}}(\beta) \pm \frac{1}{2} Z_1(2\beta), \end{aligned}$$

   donde el signo más (menos) corresponde a bosones (fermiones).

(b) Encontrar un resultado análogo para el problema de 3 partículas idénticas, es decir, escribir Z en términos de productos y sumas de Z_1 evaluada en múltiplos enteros de β.

(c) ¿Cuál debería ser la forma general de la función de partición de N partículas idénticas no interactuantes escrita en términos de la función de partición de una sola partícula?

(d) Usando los resultados anteriores y la forma integral de Z_1 obtenida en 1d, escriba la función de partición para 2 y 3 partículas, tanto en el caso bosónico como fermiónico, asumiendo que las partículas están en una caja de volumen $V \gg \lambda_T^3$. Analice el régimen de alta temperatura.

(e) Calcule y grafique la energía media por partícula para los sistemas de 2 y 3 partículas.

(f) Para un sistema de partículas en una caja, cada suma irrestricta sobre los autoestados de una partícula aporta un factor V. Teniendo esto en cuenta y siguiendo el método aplicado a los casos de 2 y 3 partículas, encuentre la primera corrección cuántica (medida en potencias inversas de V) a la función de partición del gas clásico, distinguiendo entre fermiones y bosones:

$$Z = \frac{Z_1^N}{N!}\left[1 + \frac{1}{V}\ldots + \mathcal{O}(V^{-2})\right].$$

(g) Siguiendo con el ítem anterior y tomando como caso de referencia un mol de O_2 a 300 K, ¿tiene sentido truncar el desarrollo de Z en potencias de $1/V$ luego del primer término no trivial para obtener un Z aproximado?

(h) A partir del desarrollo para Z, encuentre la primera corrección a la energía libre de Helmholtz.

(i) Tomando de nuevo como referencia un mol de O_2 a 300 K, la pregunta ahora es: ¿tiene sentido truncar el desarrollo de F/N en potencias de $1/V$ luego del primer término no trivial para obtener un F aproximado?

(j) Con todo lo anterior, encuentre la primera corrección cuántica a la ecuación de estado del gas ideal clásico de N partículas, distinguiendo entre fermiones y bosones.

Estadística de Fermi−Dirac

4) Para un gas ideal de N electrones en un volumen V:

(a) Calcular la energía de Fermi.

(b) Calcular la energía total E a $T = 0$.

(c) Muestre que para cualquier temperatura se cumple $E = 3PV/2$. Usando esta relación y lo hallado en (b), encuentre una expresión para la presión P a $T = 0$.

5) (a) A partir de la expresión general del gran potencial para partículas de FD

$$\log \mathcal{Z} = \sum_{\text{est. 1 part}} \log\left(1 + e^{-\beta(\epsilon-\mu)}\right), \tag{1}$$

muestre que para un gas no relativista en el límite termodinámico y de bajas temperaturas

$$\log \mathcal{Z} = \frac{2\alpha}{5}\frac{V}{kT}\left[\mu^{5/2} + \frac{5\pi^2}{8}\mu^{1/2}\,(kT)^2\right], \tag{2}$$

donde α es una constante que depende del espín y de la masa de las partículas. *Sugerencia*: Habrá que hacer primero una integración por partes y luego usar el lema de Sommerfeld.

(b) Tomando las derivadas adecuadas, calcule N, E y P y verifique la relación $PV = 2E/3$.

(c) Defina $x = N/(\alpha V)$ y encuentre el potencial químico $\mu(x, T)$ hasta orden $(kT)^2$. A partir de este resultado encuentre $E(x, T)$ hasta el mismo orden. En particular, escriba las expresiones que resultan para μ, E y P a $T = 0$.

6) Las enanas blancas son estrellas compuestas principalmente de helio a una temperatura del orden de 10^7 K y a una densidad de unos 10^{10} kg/m^3. Muestre que los átomos de helio deben encontrarse totalmente ionizados y que el gas de electrones resultante puede considerarse como si estuviese a temperatura nula. Datos: la energía de ionización del helio es del orden de 10 eV y $k = 8.6 \times 10^{-5}$ eV/K.

7) Sea un gas de electrones en dos dimensiones sobre un área A.

(a) Halle una expresión para PV/kT en función de la temperatura y el potencial químico.

(b) Halle la energía de Fermi en términos del número medio de partículas a temperatura cero.

(c) Muestre que el potencial químico como función de la temperatura queda dado exactamente por:

$$\mu(T) = \epsilon_F\left\{1 + \frac{1}{\beta\epsilon_F}\ln\left(1 - e^{-\beta\epsilon_F}\right)\right\}.$$

(d) Calcule el calor específico si el gas está altamente degenerado y muestre que es proporcional a T.

8) Un electrón en un campo magnético H tiene una energía $\pm\mu_B H$, dependiendo de que el espín sea paralelo o antiparalelo al campo. Considere un gas de electrones a temperatura cero. Su interacción mutua y el efecto del campo magnético sobre el movimiento orbital de los electrones puede despreciarse.

(a) Halle el valor máximo de la densidad N/V tal que todos los espines sean paralelos entre sí. ¿Cuánto vale la energía del gas en ese caso?

(b) Ahora suponga como dato una energía de Fermi mayor que $\mu_B H$. Halle la magnetización y a partir de ella la susceptibilidad.

9) Considere un gas de electrones en el límite ultrarrelativista; en ese caso la energía de una partícula está relacionada con su impulso mediante $\epsilon(p) = cp$.

(a) Obtenga la relación entre E y N para $T = 0$.

(b) Obtenga $\mu(T)$ al menor orden no nulo en la temperatura.

(c) Ídem (a) y (b) para el caso bidimensional.

(d) Estrictamente hablando, la energía de los electrones está dada por $\epsilon(p) = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$, que en el límite ultrarrelativista se reduce a cp y en el límite clásico a $mc^2 + p^2/2m$. Pero en un gas de electrones a $T \neq 0$ siempre habrá partículas con energías tan altas o tan bajas como se quiera. ¿Qué es lo que define que la expresión de $\epsilon(p)$ pueda reemplazarse por su versión clásica o ultrarrelativista? ¿En qué caso habrá que trabajar con la expresión completa?

10) (Dalvit et al, Problema 4.20a.) Un recipiente de volumen V está dividido en dos compartimientos mediante un tabique impermeable, móvil y conductor del calor. En un compartimiento hay N fermiones de espín $1/2$, y en el otro N fermiones de espín $3/2$. Las dos clases de partículas tienen la misma masa. Todo el sistema está en contacto con un foco a temperatura T. Encuentre las condiciones de equilibrio termodinámico. En particular, encuentre la relación V_1/V_2 entre los volúmenes que ocupa cada gas. Haga el cálculo primero para $T = 0$ y luego encuentre la primera corrección para T finita.

11) (Dalvit et al, Problema 4.20b $-$ Expansión libre de un gas de FD.) Un gas de N partículas de espín $1/2$ ocupa un volumen V y está a temperatura 0. El sistema está aislado térmicamente. Mediante un tabique removible el volumen aumenta de V a $V + \Delta V$, con $\Delta V \ll V$. El gas se expande libremente hasta ocupar todo el volumen y finalmente llega a un nuevo equilibrio a temperatura T. Encuentre T asumiendo válida la aproximación de muy baja temperatura.