Física Teórica 3 – 2do. cuatrimestre de 2014

Guía 6: *gases cuánticos – estadística de Fermi-Dirac*

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.

   (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 valores crecientes de la energía) es cada vez más lenta.

   (d) En base a lo anterior, ¿cuál es la condición que permite aproximar la suma por una integral?

   (e) Escriba la forma integral de la función de partición para las dos condiciones de contorno planteadas más arriba y demuestre que coinciden entre sí.

2. Considere un sistema formado por 2 partículas no interactuantes que pueden estar en cualesquiera de 3 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) Calcule y grafique la energía media U en cada caso y compare.

   (c) Analice Z y U en los tres casos cuando $kT \gg \epsilon$, calculando en los sistemas de partículas indistinguibles la primera corrección respecto del comportamiento clásico (el caso i).

3. Un sistema está formado por 2 partículas idénticas no interactuantes. Los autoestados de energía de una partícula están etiquetados por un índice discreto. La energía del autoestado i es ϵ_i. La función de partición canónica está dada por

$$Z_2(\beta) = {\sum_{i,j}}' e^{-\beta\epsilon_i} e^{-\beta\epsilon_j},$$

   donde el significado de $\sum'$ depende de si las partículas son bosones o fermiones. En el caso clásico la suma no tiene restricciones pero se incluye un factor $1/2!$ (a esto se lo llama estadística de Boltzmann).

   (a) A partir de la suma sin restricciones $\sum_{i,j}$, teniendo en cuenta la multiplicidad de cada par no ordenado de autoestados (i, j) [por ejemplo, el par $(1, 2)$ aparece 2 veces, pero el par $(1, 1)$ aparece una sola vez], demostrar que

$$Z_2(\beta) = \frac{1}{2} Z_1(\beta)^2 \pm \frac{1}{2} Z_1(2\beta),$$

   donde el signo más corresponde a bosones y el menos a fermiones. Notar que el primer término es el resultado correspondiente a la estadística de Boltzmann.

(b) Encontrar un resultado análogo para el problema de 3 partículas idénticas, es decir, escribir Z_3 en términos de productos y sumas de $Z_1(n\beta)$, donde los n son enteros.

(c) *A partir de los casos sencillos de 2 y 3 partículas, ¿qué estructura puede conjeturarse para la función de partición de N partículas idénticas no interactuantes en términos de la función de partición de una sola partícula?

(d) Para un sistema de partículas libres 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:

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

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

(f) A partir del desarrollo para Z, encuentre la primera corrección en potencias de $1/V$ a la energía libre de Helmholtz,

$$-\beta F = \log Z = \log\left(\frac{Z_1^N}{N!}\right) + \frac{1}{V} \quad \text{primera corrección cuántica} \quad + \mathcal{O}(V^{-2}).$$

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

(h) A partir de lo anterior, encuentre la primera corrección cuántica a la ecuación de estado $p(V, N, T)$ 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

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

*Éste y los siguientes ítems son opcionales.

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

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

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) Para un gas de electrones bidimensional confinado en un área A:

(a) Halle una expresión para PA/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.

7) Considere un gas de electrones en el límite ultrarrelativista; en ese caso la energía de una partícula está relacionada con su impulso mediante $\epsilon(p) = cp$, donde p está cuantizado exactamente igual que para las partículas no relativistas.

(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 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?

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 pueden 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) Un gas de N fermiones no interactuantes, de espín $1/2$, está en un potencial armónico isotrópico, $V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$. Los estados de una partícula en este potencial están dados por 3 números, n_x, n_y y n_z, enteros mayores o iguales que cero, y la energía de cada estado es

$$\epsilon_{n_x,n_y,n_z} = (n_x + n_y + n_z)\hbar\omega.$$

(El cero de energía se ha redefinido para anular la energía del nivel fundamental.) Cuando además hay un campo magnético externo, la energía de los fermiones adquiere un término igual a $s\mu_B H$, donde $s = \pm 1$ es el signo de la proyección del espín en la dirección del campo. El gas está a $T = 0$.

(a) Halle el valor máximo de N tal que todos los espines sean paralelos entre sí cuando hay un campo magnético $H > 0$. ¿Cuánto vale la energía por partícula en ese caso?

(b) Asumiendo que la energía de Fermi es mayor que $\mu_B H$, escriba la magnetización M en términos de la energía de Fermi y de los datos del problema.

(c) Calcule la susceptibilidad por partícula,

$$\chi = \frac{1}{N} \left.\frac{\partial M}{\partial H}\right|_{H=0}.$$

Ayuda: para pasar de la suma sobre estados a una integral, calcule el número $g(n)$ de estados de una partícula con una dada energía $E_n = n\hbar\omega$ (que equivale a distribuir n libros iguales en 3 cajas distinguibles), reescriba la suma sobre estados como una suma sobre n con multiplicidad $g(n)$, y por último aproxime la suma por una integral, asumiendo que las contribuciones dominantes provienen de términos con $n \gg 1$.

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 $T > 0$.