

Física Teórica 3 – 2do. cuatrimestre de 2014

Algunos problemas resueltos de la Guía 6 (2da. parte)

Problema 4	1
Problema 6	6

Problema 4

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

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

■ **Solución.** A modo de repaso, deduciremos las ecuaciones fundamentales y luego resolveremos lo que pide el problema. Todo empieza con la función de partición en el ensamble gran canónico para fermiones:

$$Z = \prod_i \sum_{n=0}^1 z^n e^{-n\beta\epsilon_i} = \prod_i (1 + ze^{-\beta\epsilon_i}).$$

La productoria es sobre todos los estados de una sola partícula. En el caso de un gas ideal, esos estados estarán caracterizados por cierto valor del impulso y un dado número de variables asociadas a los grados de libertad internos, como el espín. Supongamos para fijar ideas que hay un único grado de libertad interno, caracterizado por una variable discreta s que puede tomar g valores. Entonces

$$Z = \prod_{\mathbf{p}, s} [1 + ze^{-\beta\epsilon_s(\mathbf{p})}].$$

Si la energía no depende de s , para cada valor de \mathbf{p} habrá g factores idénticos,

$$Z = \prod_{\mathbf{p}} [1 + ze^{-\beta\epsilon(\mathbf{p})}]^g.$$

En el caso general el logaritmo de Z queda en términos de una suma

$$\log Z = \sum_{s=1}^g \sum_{\mathbf{p}} \log [1 + ze^{-\beta\epsilon_s(\mathbf{p})}].$$

Al hacer tender V a infinito, la suma sobre \mathbf{p} puede reemplazarse por una integral. Hay varias maneras de plantearlo, pero el resultado termina siendo el que se ha usado ya para gases ideales clásicos,

$$\sum_{\mathbf{p}} \rightarrow V \int \frac{d^3p}{h^3}.$$

Entonces queda

$$\log Z = \frac{V}{h^3} \sum_{s=1}^g \int d^3p \log [1 + ze^{-\beta\epsilon_s(\mathbf{p})}].$$

Si la energía no depende de s , resulta

$$\log Z = \frac{gV}{h^3} \int d^3p \log [1 + ze^{-\beta\epsilon(\mathbf{p})}]. \quad (1)$$

El número de partículas y la energía se calculan a partir de las derivadas del logaritmo de Z ,

$$N = z \frac{\partial \log Z}{\partial z} = \frac{V}{h^3} \sum_{s=1}^g \int d^3p \frac{1}{1 + \exp \{\beta [\epsilon_s(\mathbf{p}) - \mu]\}},$$

$$U = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} = \frac{V}{h^3} \sum_{s=1}^g \int d^3p \frac{\epsilon_s(\mathbf{p})}{1 + \exp \{\beta [\epsilon_s(\mathbf{p}) - \mu]\}}.$$

Por otro lado, si en la Ec. (1) se integra por partes, usando la relación

$$\int d^3p f(\mathbf{p}) = \frac{1}{3} \int d^3p [\nabla \cdot (f\mathbf{p}) - \mathbf{p} \cdot \nabla f],$$

y descartando el término de superficie, resulta

$$\log Z = \frac{\beta V}{3h^3} \sum_{s=1}^g \int d^3p \frac{\mathbf{p} \cdot \nabla \epsilon_s(\mathbf{p})}{1 + \exp \{\beta [\epsilon_s(\mathbf{p}) - \mu]\}}.$$

Un conjunto de resultados interesantes se obtienen si $\epsilon_s(\mathbf{p}) = \alpha_s p^w$. Por ejemplo,

$$\log Z = \frac{\beta V}{3h^3} \sum_{s=1}^g \int d^3p \frac{w\epsilon_s(\mathbf{p})}{1 + \exp \{\beta [\epsilon_s(\mathbf{p}) - \mu]\}} = \frac{w\beta U}{3}.$$

Pero puesto que $\log Z = \beta PV$, se obtiene

$$PV = \frac{wU}{3}.$$

Así, por ejemplo, para un gas de partículas no relativistas $\epsilon_s(\mathbf{p}) = p^2/(2m)$ y

$$PV = \frac{2U}{3}.$$

En cambio, para partículas ultrarrelativistas $\epsilon_s(\mathbf{p}) = cp$ y

$$PV = \frac{U}{3}.$$

Éstas son las mismas relaciones que valen para un gas de partículas clásicas. Es inmediato generalizar a d dimensiones. Para $\epsilon_s(\mathbf{p}) = \alpha_s p^w$ queda

$$PV = \frac{wU}{d}, \quad (2)$$

donde

$$U = \frac{V}{h^d} \sum_{s=1}^g \int d^d p \frac{\epsilon_s(\mathbf{p})}{1 + \exp \{ \beta [\epsilon_s(\mathbf{p}) - \mu] \}}.$$

Volviendo al problema de la guía. Para hacerlo más interesante dejemos sin especificar la dimensión d del espacio. La energía de Fermi es el potencial químico a $T = 0$. En general, el potencial químico se calcula en términos de N/V y T a partir de la ecuación que da el número medio de partículas,

$$N = \frac{gV}{h^d} \int d^d p \frac{1}{1 + \exp \{ \beta [\epsilon(\mathbf{p}) - \mu] \}}.$$

Aquí hemos supuesto que la energía no depende de los grados de libertad internos, por eso aparece el factor g . A temperatura igual a cero, el integrando toma la forma de un escalón,

$$\frac{1}{1 + \exp \{ \beta [\epsilon(\mathbf{p}) - \mu] \}} \rightarrow \Theta [\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{p})].$$

Si la energía depende sólo del módulo del impulso la integración puede hacerse en esféricas, integrando explícitamente sobre las variables angulares. La integral sobre el módulo de \mathbf{p} está acotada por la condición

$$\epsilon(p) < \epsilon_F.$$

Se define p_F como el impulso tal que $\epsilon(p_F) = \epsilon_F$. Con esto resulta

$$\frac{N}{V} = \frac{g\Omega_d}{h^d} \int_0^{p_F} dp p^{d-1} = \frac{g\Omega_d}{h^d d} p_F^d. \quad (3)$$

Supongamos en particular que $\epsilon(p) = \alpha p^w$, lo que incluye los casos clásico y ultrarrelativista. La relación entre p_F y ϵ_F es simplemente

$$p_F = \left(\frac{\epsilon_F}{\alpha} \right)^{1/w}.$$

Así podemos despejar ϵ_F a partir de la Ec. (3):

$$\epsilon_F = \alpha h^w \left(\frac{dN}{g\Omega_d V} \right)^{w/d}.$$

En el caso clásico $\alpha = (2m)^{-1}$ y $w = 2$; entonces

$$\epsilon_F = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{dN}{g\Omega_d V} \right)^{2/d}.$$

En particular, en 2 y 3 dimensiones para partículas de espín 1/2 ($g = 2$) resulta

$$\epsilon_F^{(3D)} = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3N}{8\pi V} \right)^{2/3}, \quad \epsilon_F^{(2D)} = \frac{h^2}{2m} \frac{N}{2\pi V}.$$

Si los fermiones son ultrarrelativistas es $\epsilon(\mathbf{p}) = cp$, y resulta

$$\epsilon_F^{(3D)} = ch \left(\frac{3N}{8\pi V} \right)^{1/3}, \quad \epsilon_F^{(2D)} = ch \left(\frac{N}{2\pi V} \right)^{1/2}.$$

De manera similar se calcula la energía a $T = 0$,

$$\frac{U}{V} = \frac{g\Omega_d V}{h^d} \int_0^{p_F} dp p^{d-1} \epsilon(\mathbf{p}) = \frac{g\Omega_d}{h^d} \frac{\alpha p_F^{d+w}}{(d+w)}.$$

Dividiendo esta ecuación por la Ec. (3) se obtiene un resultado sencillo para la energía por partícula en términos de la energía de Fermi,

$$\frac{U}{N} = \frac{d\alpha p_F^w}{d+w} = \frac{d}{d+w} \epsilon_F.$$

En particular, en 3 dimensiones para el gas no relativista resulta

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{5} \epsilon_F.$$

En tanto que para el gas de fermiones ultrarrelativistas queda

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{4} \epsilon_F.$$

Mediante la Ec. (2) se puede calcular la presión a $T = 0$ a partir de la energía,

$$PV = \frac{w}{d+w} N \epsilon_F.$$

Cuando la energía es función únicamente del módulo del impulso (y acaso de los grados de libertad internos) es usual escribir las integrales anteriores cambiando la variable de integración p por ϵ . En particular, cuando uno calcula las cosas en $T = 0$, esta sustitución deja todos los resultados ya expresados en términos de la energía de Fermi. Sin embargo no siempre resulta ventajoso hacer el cambio de variables, a veces es menos trabajo seguir haciendo todo en términos del impulso. Uno está interesado en calcular integrales de la forma

$$I = \frac{gV}{h^d} \int d^d p F[\epsilon(p)], \quad (4)$$

donde F depende de p a través de la energía. En esta integral $gV d^d p / h^d$ es igual al número de estados de una sola partícula en el elemento de volumen $d^d p$. Aquí estamos suponiendo que la energía no depende de los grados de libertad internos, de ahí que aparezca el factor g . Puesto que F depende sólo de la energía, el objetivo es transformar la integral anterior a algo de la forma

$$I = \int d\epsilon D(\epsilon) F(\epsilon),$$

donde ahora $D(\epsilon)d\epsilon$ representa el número de estados de una sola partícula contenidos en el intervalo de energías $d\epsilon$.

La integración angular en (4) se puede hacer de manera inmediata,

$$I = \frac{g\Omega_d V}{h^d} \int_0^\infty dp p^{d-1} F[\epsilon(p)].$$

Supongamos, como antes, que $\epsilon(p) = \alpha p^w$, entonces

$$p^{d-1} dp = \frac{1}{d} dp^d = \frac{1}{w\alpha^{\frac{d}{w}}} \epsilon^{\frac{d}{w}-1} d\epsilon.$$

Luego,

$$I = \frac{g\Omega_d V}{w\alpha^{\frac{d}{w}} h^d} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{\frac{d}{w}-1} F(\epsilon) = \int_0^\infty d\epsilon D(\epsilon) F(\epsilon),$$

donde

$$D(\epsilon) = \frac{g\Omega_d V}{w\alpha^{\frac{d}{w}} h^d} \epsilon^{\frac{d}{w}-1}.$$

Por ejemplo, en $d = 3$ y con $\epsilon = p^2/2m$, es

$$D(\epsilon) = \frac{2gV\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \epsilon^{1/2}.$$

Así, por ejemplo, uno puede calcular el número medio de partículas y la energía a $T = 0$ como

$$\frac{N}{V} = \frac{2g\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon^{1/2} = \frac{4g}{3h^3} \pi(2m)^{3/2} \epsilon_F^{3/2},$$

$$\frac{U}{V} = \frac{2g\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon^{3/2} = \frac{4g}{5h^3} \pi(2m)^{3/2} \epsilon_F^{5/2}.$$

El cociente entre ambas densidades da, igual que antes,

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{5} \epsilon_F.$$

Para temperaturas distintas de cero quedan las siguientes integrales

$$\frac{N}{V} = \frac{2g\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{1 + z^{-1}e^{\beta\epsilon}},$$

$$\frac{U}{V} = \frac{2g\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{3/2}}{1 + z^{-1}e^{\beta\epsilon}}.$$

Integrales similares aparecen con frecuencia, así que se definen de un modo convencional como

$$f_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty dx \frac{x^{\nu-1}}{1 + z^{-1}e^x}. \quad (5)$$

Entonces, por ejemplo,

$$\frac{N}{V} = \frac{2g\pi\Gamma(\frac{3}{2})(2mkT)^{3/2}}{h^3} f_{3/2}(z),$$

$$\frac{U}{V} = \frac{2g\pi\Gamma(\frac{5}{2})(2mkT)^{3/2}}{h^3} kT f_{5/2}(z).$$

En términos de la longitud de onda térmica

$$\lambda = \left(\frac{h^2}{2\pi mkT} \right)^{1/2},$$

y usando que $\Gamma(\frac{1}{2}) = \pi^{1/2}$, resulta

$$\frac{N}{V} = \frac{g}{\lambda^3} f_{3/2}(z),$$

$$\frac{U}{V} = \frac{3}{2} \frac{g}{\lambda^3} kT f_{5/2}(z).$$

A partir de la relación $U = \frac{3}{2}PV$, combinando las dos ecuaciones anteriores se obtiene

$$PV = NkT \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)}.$$

Problema 6

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

- Halle una expresión para PV/kT en función de la temperatura y el potencial químico.
- Halle la energía de Fermi en términos del número medio de partículas a temperatura cero.
- Muestre que el potencial químico viene dado, como función de la temperatura, por:

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

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

■ **Solución.** (a) Para el primer punto basta con calcular la función de partición,

$$\beta PV = \log Z = \frac{gA}{h^2} \int d^2p \log [1 + ze^{-\beta\epsilon(p)}].$$

La energía es $\epsilon(p) = p^2/(2m)$. Esto ya lo hemos calculado de manera general en el problema anterior. Repetimos aquí los pasos fundamentales: primero se escribe la integral en polares y luego se integra por partes respecto del módulo del impulso,

$$\log Z = \frac{gA}{h^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty dp p \log [1 + ze^{-\beta\epsilon(p)}] = \frac{2\pi gA\beta}{h^2} \int_0^\infty dp \frac{p^3}{2m} \frac{ze^{-\beta\epsilon(p)}}{1 + ze^{-\beta\epsilon(p)}}.$$

Es posible formar el diferencial de ϵ y cambiar a esa variable. Reordenando un poco los términos queda

$$\log Z = \frac{2\pi g A m \beta}{h^2} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon}{1 + z^{-1} e^{\beta\epsilon}}.$$

Por último, definiendo $x = \beta\epsilon$, la dependencia en la temperatura puede hacerse más explícita

$$\log Z = \frac{2\pi g A m k T}{h^2} \int_0^\infty dx \frac{x}{1 + z^{-1} e^x}. \quad (6)$$

Con esto ya puede escribirse la respuesta al primer punto del problema:

$$\beta PV = \frac{2\pi g A m k T}{h^2} \int_0^\infty dx \frac{x}{1 + z^{-1} e^x} = \frac{2\pi g A m k T}{h^2} f_2(z).$$

Las funciones f_ν quedaron definidas en la Ec. (5).

(b) A temperatura cero

$$\frac{N}{A} = \frac{2\pi g}{h^2} \int_0^{p_F} dp p = \frac{2\pi g p_F^2}{2h^2} = \frac{2\pi g m \epsilon_F}{h^2} \quad \Rightarrow \quad \epsilon_F = \frac{h^2}{2\pi g m} \frac{N}{A}.$$

(c) Para calcular el potencial químico se parte de la ecuación que da el número de partículas

$$\frac{N}{A} = \frac{g}{h^2} \int d^2 p \frac{1}{1 + z^{-1} e^{-\beta\epsilon(p)}}.$$

La integral puede hacerse de manera explícita en un par de pasos,

$$\begin{aligned} \frac{N}{A} &= \frac{2\pi g m}{h^2} \int_0^\infty d\left(\frac{p^2}{2m}\right) \frac{1}{1 + z^{-1} e^{-\beta\epsilon(p)}} = \frac{2\pi g m}{h^2} \int_0^\infty \frac{d\epsilon}{1 + z^{-1} e^{\beta\epsilon}} \\ &= \frac{N k T z}{A \epsilon_F} \int_0^1 \frac{d(e^{-\beta\epsilon})}{1 + z e^{-\beta\epsilon}} = \frac{N k T}{A \epsilon_F} \log(1 + z). \end{aligned}$$

Entonces

$$\epsilon_F = k T \log(1 + e^{\beta\mu}).$$

Invirtiéndolo,

$$\mu = k T \log(e^{\beta\epsilon_F} - 1). \quad (7)$$

Puesto que interesa ver qué tanto se aparta μ de la energía de Fermi conviene reescribir la ecuación anterior como

$$\mu = \epsilon_F + k T \log(1 - e^{-\beta\epsilon_F}).$$

A temperaturas mucho menores que la energía de Fermi, la exponencial dentro del logaritmo es un número muy pequeño, por lo tanto resulta

$$\mu \approx \epsilon_F - kT e^{-\beta \epsilon_F}.$$

Es decir, a bajas temperaturas las correcciones al potencial químico respecto de la energía de Fermi son exponencialmente pequeñas. En contraste, en tres dimensiones las correcciones al potencial químico van como T^2 .

(d) Calcularemos el calor específico a área constante,

$$C_A = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{A,N}.$$

La energía puede obtenerse a partir de Z , tal como quedó escrita en la Ec. (6),

$$U = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} = \frac{2\pi g A m (kT)^2}{h^2} \int_0^\infty dx \frac{x}{1 + z^{-1} e^x} = \frac{2\pi g A m (kT)^2}{h^2} f_2(z) = \frac{N (kT)^2}{\epsilon_F} f_2(z). \quad (8)$$

Luego

$$C_A = \frac{2U}{T} + \frac{U}{f_2(z)} f_2'(z) \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_{A,N}.$$

De acuerdo a la Ec. (7)

$$z = e^{\beta \epsilon_F} - 1,$$

y por lo tanto

$$\left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_{A,N} = -\frac{\epsilon_F e^{\beta \epsilon_F}}{kT^2} = -\frac{1}{T} (1 + z) \log(1 + z).$$

La energía de Fermi es función de la densidad N/A , de modo que no es necesario derivarla. Por otro lado, no es difícil demostrar que $f'_\nu = z^{-1} f_{\nu-1}$, y además

$$f_1(z) = \int_0^\infty \frac{dx}{1 + z^{-1} e^x} = \log(1 + z).$$

Reuniendo todo resulta

$$\begin{aligned} \frac{C_A}{Nk} &= \frac{U}{NkT} \left\{ 2 - \frac{(1+z)}{kT} \frac{[\log(1+z)]^2}{z f_2(z)} \right\} = \frac{kT}{\epsilon_F} \left\{ 2 f_2(z) - \frac{(1+z)}{kT} \frac{[\log(1+z)]^2}{z} \right\} \\ &= \frac{2 f_2(z)}{\log(1+z)} - \frac{(1+z)}{z} \log(1+z). \end{aligned}$$

Se trata de analizar ahora el comportamiento de esta función cuando $T \rightarrow 0$, es decir, cuando $z \rightarrow \infty$. Las funciones $f_\nu(e^\xi)$ admiten un desarrollo asintótico para $\xi \rightarrow \infty$, de la forma

$$f_\nu(e^\xi) = \frac{\xi^\nu}{\Gamma(\nu+1)} + \frac{(\nu-1)\pi^2}{\Gamma(\nu)} \frac{\xi^{\nu-2}}{6} + \mathcal{O}(\xi^{\nu-4}).$$

Aplicando este resultado en la expresión para el calor específico y desarrollando el resto de las funciones que ahí aparecen queda

$$\frac{C_A}{Nk} \approx \frac{\pi^2 kT}{3 \mu}.$$

Al escribir esta ecuación se han despreciado varios términos de orden $e^{-\beta\mu}$. El propio potencial químico difiere de ϵ_F en una cantidad exponencialmente pequeña. Por lo tanto

$$\frac{C_A}{Nk} \approx \frac{\pi^2 kT}{3 \epsilon_F}.$$

A este mismo resultado puede llegarse de manera más rápida a partir de la Ec. (8), desarrollando la energía para $T \rightarrow 0$ antes de hacer el cálculo del calor específico. Así, uno encuentra

$$\frac{U}{Nk} \approx \frac{kT^2}{\epsilon_F} \left[\frac{(\beta\mu)^2}{2} + \frac{\pi^2}{6} \right] = \frac{\epsilon_F}{2k} + \frac{kT^2\pi^2}{6\epsilon_F}.$$

Entonces resulta

$$\frac{C_A}{Nk} \approx \frac{\pi^2 kT}{3\epsilon_F}.$$

No es tremendamente complicado calcular las correcciones exponenciales. Hasta orden $e^{-2\beta\epsilon_F}$ es

$$\frac{C_A}{Nk} \approx \frac{\pi^2 kT}{3\epsilon_F} - e^{-\beta\epsilon_F} \left(\frac{\epsilon_F}{kT} + 2 + \frac{2kT}{\epsilon_F} \right) - e^{-2\beta\epsilon_F} \left(\frac{\epsilon_F}{kT} + 1 + \frac{kT}{2\epsilon_F} \right).$$

La figura muestra el resultado exacto (en rojo) y las aproximaciones anteriores, con un número creciente de términos. Notar que para altas temperaturas el calor específico tiende a Nk , de acuerdo al principio de equipartición.

