Consultas guía 4

Facundo Rost

Física Teórica 3 - 1er cuatrimestre 2020

1. Ejer 7

Para una partícula libre relativista, siendo $p \equiv \|\vec{p}\|$:

$\epsilon(p) = \sqrt{c^2p^2 + m^2c^4}$

Para una partícula en el límite poco relativista: Si $cp \ll mc^2$, entonces aproximamos: $\epsilon(p) \simeq mc^2 + \dfrac{p^2}{2m}$

Para una partícula en el límite ultrarrelativista: Si $|cp| \gg mc^2$, entonces aproximamos: $\epsilon(p) \simeq cp$. En particular una partícula con $m = 0$ es ultrarrelativista siempre.

Para calcular la función de partición gran canónica, necesito antes calcular la densidad de estados $g(\epsilon)$

Para ello, planteamos lo siguiente:

$$\sum_{i\ \in\ \text{estados}} f(\epsilon_i) = \int_{\epsilon_{min}}^{\epsilon_{max}} d\epsilon\ g(\epsilon)\ f(\epsilon) \tag{1}$$

Calculamos la sumatoria, considerando que un estado monoparticular viene descripto por un punto (q, p) del espacio de fases y la proyección $s_z = \pm 1/2$ de spin en el eje z (que puede tomar $g_s = 2s + 1 = 2$ valores distintos pues $s = 1/2$ para el electrón). Consideremos también que la dimensión del espacio es $d = 3$:

$$\begin{aligned}
\sum_{i\,\in\,\text{estados}} f(\epsilon_i) &= \sum_{s_z=\pm 1/2} \int \frac{d^3q d^3p}{h^3}\, f(\overbrace{\epsilon(\vec{q},\vec{p})}^{=\epsilon(p)=cp})\\
&= \overbrace{\left(\sum_{s_z=\pm 1/2}\right)}^{=g_s=2s+1=2} \frac{1}{h^3} \overbrace{\left(\int d^3q\right)}^{=V} \int \overbrace{d^2\Omega}^{=\sin\theta d\theta d\varphi} \; dpp^2 f(\epsilon = cp)\\
&= g_s \frac{V}{h^3} 4\pi \int_0^\infty dp\; p^2\; f(\epsilon(p)=cp) = g_s \frac{V}{h^3} 4\pi \int_0^\infty \frac{d\epsilon}{c} \left(\frac{\epsilon}{c}\right)^2 f(\epsilon)\\
&= \int_0^\infty d\epsilon\; \underbrace{\left(g_s 4\pi \frac{V}{h^3c^3}\, \epsilon^2\right)}_{=g(\epsilon)} f(\epsilon)
\end{aligned} \tag{2}$$

donde se sumó e integró sobre las variables de las cuales no dependía ϵ; y después se realizó el cambio de variable $p \to \epsilon(p) = cp$ (con $d\epsilon = cdp$).

Con $g(\epsilon)$ podemos calcular $\ln Z_{GC}$ con la ecuación (26) del repaso teórico de Guillem:

$$\begin{aligned}
\ln Z_{GC} &= +\int_0^\infty d\epsilon\; g(\epsilon)\; \ln(1+ze^{-\beta\epsilon})\\
&= g_s 4\pi \frac{V}{h^3c^3} \int_0^\infty d\epsilon\; \epsilon^2\; \ln(1+ze^{-\beta\epsilon})\\
&= g_s 4\pi \frac{V}{h^3c^3} \left(\frac{\epsilon^3}{3} \ln(1+ze^{-\beta\epsilon})\Big|_0^\infty - \int_0^\infty d\epsilon\; \frac{\epsilon^3}{3} \frac{-\beta z e^{-\beta\epsilon}}{1+ze^{-\beta\epsilon}} \right)\\
&= g_s \frac{4\pi}{3} \frac{V}{h^3c^3} \int_0^\infty d\epsilon\; \epsilon^3 \frac{\beta z e^{-\beta\epsilon}}{1+ze^{-\beta\epsilon}} = g_s \frac{4\pi}{3} \frac{V}{h^3c^3} \int_0^\infty d\epsilon\beta\; \epsilon^3 \frac{1}{z^{-1}e^{+\beta\epsilon}+1}\\
&= g_s \frac{4\pi}{3} \frac{V}{h^3c^3} \frac{1}{\beta^3} \underbrace{\int_0^\infty dx\; \frac{x^3}{z^{-1}e^{+x}+1}}_{=\Gamma(4) I_4^+(z) = \Gamma(4) f_4(z)} = g_s \frac{4\pi}{3} \frac{V}{h^3c^3} \frac{1}{\beta^3}\, \Gamma(4) f_4(z)\\
&= 8\pi g_s \frac{V}{h^3c^3} \frac{1}{\beta^3}\, f_4(z)
\end{aligned} \tag{3}$$

En el tercer renglón integramos por partes con $f(\epsilon) = \ln(1+ze^{-\beta\epsilon})$ y $h'(\epsilon) = \epsilon^2$, con $f'(\epsilon) = \dfrac{-\beta z e^{-\beta\epsilon}}{1+ze^{-\beta\epsilon}}$ y $h(\epsilon) = \int d\epsilon\; h'(\epsilon) = \int d\epsilon\; \epsilon^2 = \dfrac{\epsilon^3}{3}$. El término de borde da 0, porque al evaluar en $\epsilon = 0$ da proporcional a $\epsilon^3 = 0^3 = 0$; y porque $\lim_{\epsilon\to\infty} \frac{\epsilon^3}{3} \ln(1+ze^{-\beta\epsilon}) = 0$, para verlo más fácil se podría hacer taylor, usando $\ln(1+x) \simeq x$: $\frac{\epsilon^3}{3} \ln(1+ze^{-\beta\epsilon}) \simeq \epsilon^3 e^{-\beta\epsilon} \to 0$. Luego se hizo el cambio de variable $\epsilon \to x = \beta\epsilon$ con $dx = \beta d\epsilon$. Notar: $\Gamma(4) = (4-1)! = 3! = 3\cdot 2 = 6$.

Agarramos $\ln Z_{GC}$ y derivamos para obtener U y N:

$$\begin{aligned}
U &= -\left.\frac{\partial(\ln Z_{GC})}{\partial\beta}\right|_z = 8\pi g_s \frac{V}{h^3c^3}\, f_4(z) \left(-\left.\frac{\partial(\beta^{-3})}{\partial\beta}\right|_z\right) = 8\pi g_s \frac{V}{h^3c^3}\, f_4(z)\; 3\beta^{-4}\\
&= \left(8\pi g_s \frac{V}{h^3c^3}\, \beta^{-3}\, f_4(z)\right) 3\beta^{-1} = (\ln Z_{GC})\; 3/\beta = 3k_BT \ln Z_{GC} = 3(-\Omega) = 3pV
\end{aligned} \tag{4}$$

Por otro lado, para obtener N:

$$N = z \left.\frac{\partial(\ln Z_{GC})}{\partial z}\right|_\beta = 8\pi g_s \frac{V}{h^3c^3}\ \frac{1}{\beta^3}\ \left(z \left.\frac{\partial(f_4(z))}{\partial z}\right|_\beta \right) = 8\pi g_s \frac{V}{h^3c^3}\ \frac{1}{\beta^3}\ \overbrace{zf_4'(z)}^{=f_3(z)}$$
$$= 8\pi g_s \frac{V}{h^3c^3}\ \frac{1}{\beta^3}\ \ f_3(z) \tag{5}$$

Despejando z de ahí, obtendríamos $z = z(T,N,V)$. La anterior es una ecuación que me define de forma implícita a la función $z = z(T,N,V)$; y considerando que $z = e^{\beta\mu}$, entonces la anterior ecuación me determina también $\mu(T,N,V) = k_BT\ \ln z(T,N,V)$.

Observación:

$$\frac{U}{N} = \frac{3\beta^{-4}f_4(z)}{\beta^{-3}f_3(z)} = 3\beta^{-1}\frac{f_4(z)}{f_3(z)} = 3k_BT\frac{f_4(z)}{f_3(z)} \implies U = 3Nk_BT\ \frac{f_4(z)}{f_3(z)} = U = 3pV$$
$$\implies p = \frac{Nk_BT}{V}\ \frac{f_4(z)}{f_3(z)} \tag{6}$$

OJO: Tener en cuenta que $z = z(T,N,V)$.

Queremos hacer el límite de $T \to 0 \iff \beta \to \infty$ (temperaturas bajas) a N, V constantes. Para lo cual, notamos que:

$$T \to 0 \iff \beta \to \infty \implies \underbrace{N}_{cte} = \underbrace{8\pi g_s \frac{V}{h^3c^3}}_{cte}\ \underbrace{\frac{1}{\beta^3}}_{\to 0}\ f_3(z) \implies f_3(z) \to \infty \iff z \to \infty \tag{7}$$

Entonces, en el límite de T bajas, podemos usar la aproximación de Sommerfeld, válida cuando $z \to \infty$:

$$f_\nu(z) = I_\nu^+(z) = \frac{(\ln z)^\nu}{\Gamma(\nu+1)}\left(1 + \frac{\pi^2}{6}\frac{\nu(\nu-1)}{(\ln z)^2} + \mathcal{O}((\ln z)^{-4})\right)$$
$$= \frac{\beta^\nu\mu^\nu}{\Gamma(\nu+1)}\left(1 + \frac{\pi^2}{6}\frac{\nu(\nu-1)}{(\beta\mu)^2} + \mathcal{O}((\beta\mu)^{-4})\right) \tag{8}$$

donde se reemplazó en el segundo renglón $\ln z = \beta\mu$.

Reemplazamos ésta aproximación en la expresión de U/N (relación entre U y N):

$$\frac{U}{N} = 3k_BT\frac{f_4(z)}{f_3(z)}$$
$$\simeq 3k_BT\frac{(\beta\mu)^4}{(\beta\mu)^3}\ \frac{1/\Gamma(5)}{1/\Gamma(4)}\ \left(1 + \frac{\pi^2}{6}\frac{4(4-1)}{(\beta\mu)^2} + \mathcal{O}((\beta\mu)^{-4})\right)\left(1 - \frac{\pi^2}{6}\frac{3(3-1)}{(\beta\mu)^2} + \mathcal{O}((\beta\mu)^{-4})\right)$$
$$= 3\mu\ \frac{1}{4}\ \left(1 + \frac{\pi^2}{6}\frac{4(4-1)}{(\beta\mu)^2} - \frac{\pi^2}{6}\frac{3(3-1)}{(\beta\mu)^2} + \mathcal{O}((\beta\mu)^{-4})\right)$$
$$= \frac{3}{4}\ \mu(T,N,V)\ \left(1 + \pi^2\frac{1}{(\beta\mu(T,N,V))^2} + \mathcal{O}((\beta\mu)^{-4})\right) \tag{9}$$

En el segundo renglón se usó $1/(1+\delta) \simeq 1 - \delta + \mathcal{O}(\delta^2)$, luego se usó $k_BT\beta = 1$. Se usó que $\Gamma(5) = 4\Gamma(4)$.

Evaluando en $T = 0$, obtenemos considerando que $\mu(T = 0) = \epsilon_F$, lo siguiente:

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{4}\ \epsilon_F \tag{10}$$

Necesito saber ϵ_F si quiero la expresión explícita de U/N a $T = 0$. Y necesito saber la expresión de $\mu(T, N, V)$ a temperaturas bajas (con la primera corrección no trivial) si quiero la expresión explícita de U/N a temperaturas bajas (con la primera corrección no trivial).

Obtengamos entonces $\mu(T, N, V)$, con la ecuación que nos daba N como una derivada de $\ln Z_{GC}$, que define $z(T, N, V)$:

$$N = 8\pi g_s \frac{V}{h^3c^3}\ \frac{1}{\beta^3}\ f_3(z) \implies \frac{1}{\beta^3} f_3(z) = \frac{N}{V}\frac{h^3c^3}{8\pi g_s} \tag{11}$$

usando la aprox de sommerfeld en lo anterior:

$$\frac{N}{V}\frac{h^3c^3}{8\pi g_s} = \frac{1}{\beta^3} f_3(z) \simeq \frac{1}{\cancel{\beta^3}}\ \frac{\cancel{\beta^3}\mu^3}{\Gamma(4)}\left(1 + \frac{\pi^2}{6}\frac{3(3-1)}{(\beta\mu)^2} + \mathcal{O}((\beta\mu)^{-4})\right) \tag{12}$$

En particular, si evaluamos en $T = 0 \iff 1/\beta = 0$, entonces:

$$\frac{N}{V}\frac{h^3c^3}{8\pi g_s} = \frac{\mu(T = 0, N, V)^3}{\Gamma(4)} \implies \epsilon_F(N, V) = \mu(T = 0, N, V) = \left(\frac{3h^3c^3}{4\pi g_s}\ \frac{N}{V}\right)^{1/3} \tag{13}$$

considerando que $\Gamma(4) = 3! = 6$ $\epsilon_F = \epsilon_F(N, V) \equiv \mu(T = 0, N, V)$.

Entonces, si quisiera escribir DE VERDAD la relación entre U y N a $T = 0$, ahora sí sé quien es ϵ_F:

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{4}\ \epsilon_F = \frac{3}{4}\ \left(\frac{3h^3c^3}{4\pi g_s}\ \frac{N}{V}\right)^{1/3} \tag{14}$$

Para obtener una corrección no trivial en temperaturas bajas de $\mu(T, N, V)$ y luego de U/N, volvemos a la ecuación 12:

$$\frac{N}{V}\frac{h^3c^3}{8\pi g_s} \simeq \frac{\mu(T, N, V)^3}{\Gamma(4)}\left(1 + \frac{\pi^2}{6}\frac{3(3-1)}{(\beta\mu(T, N, V))^2} + \mathcal{O}((\beta\mu(T, N, V))^{-4})\right) \tag{15}$$

Considerando que $\mu(T, N, V) = \epsilon_F + \mathcal{O}(T)$.Puesto que despreciaremos correcciones de orden mayor o igual a 3, y entonces: $\frac{1}{(\beta\mu(T, N, V))^2} = \frac{1}{(\beta(\epsilon_F + \mathcal{O}(T)))^2} = k_B^2T^2\ \left(\frac{1}{\epsilon_F^2} + \mathcal{O}(T)\right) = k_B^2T^2\ \frac{1}{\epsilon_F^2} + \mathcal{O}(T^3) \simeq \frac{1}{(\beta^2\epsilon_F^2)}$ pues desprecio correcciones de orden T^3.

Eso me permite escribir:

$$\frac{N}{V}\frac{h^3c^3}{8\pi g_s} \simeq \frac{\mu(T, N, V)^3}{\Gamma(4)}\left(1 + \frac{\pi^2}{6}\frac{3(3-1)}{(\beta\epsilon_F)^2} + \mathcal{O}((\beta\epsilon_F)^{-3})\right) \tag{16}$$

Despejo $\mu(T,N,V)$:

$$\begin{aligned}
\mu(T,N,V) &= \left(6\ \frac{N}{V}\frac{h^3c^3}{8\pi g_s}\ \left(1-\frac{\pi^2}{6}\frac{3(3-1)}{(\beta\epsilon_F)^2}+\mathcal{O}((\beta\epsilon_F)^{-3})\right)\right)^{1/3} \\
&= \left(6\ \frac{N}{V}\frac{h^3c^3}{8\pi g_s}\right)^{1/3}\ \left(1-\frac{\pi^2}{6}\frac{3(3-1)}{(\beta\epsilon_F)^2}+\mathcal{O}((\beta\epsilon_F)^{-3})\right)^{1/3} \\
&= \underbrace{\left(6\ \frac{N}{V}\frac{h^3c^3}{8\pi g_s}\right)^{1/3}}_{=\epsilon_F}\ \left(1-\frac{1}{3}\ \frac{\pi^2}{6}\frac{3(3-1)}{(\beta\epsilon_F)^2}+\mathcal{O}((\beta\epsilon_F)^{-3})\right) \\
&= \epsilon_F\ \left(1-\frac{\pi^2}{3}\frac{1}{(\beta\epsilon_F)^2}+\mathcal{O}((\beta\epsilon_F)^{-3})\right) \\
&= \epsilon_F\ \left(1-\frac{\pi^2}{3}\frac{1}{(\beta\epsilon_F)^2}+\mathcal{O}((\beta\epsilon_F)^{-3})\right) \\
&= \epsilon_F\ \left(1-\frac{\pi^2}{3}\left(\frac{T}{T_F}\right)^2+\mathcal{O}(\left(\frac{T}{T_F}\right)^3)\right)
\end{aligned} \tag{17}$$

Donde en el tercer renglón se usó $(1+\delta)^a \simeq 1+a\delta+\mathcal{O}(\delta^2)$. Y definiendo $T_F \equiv \epsilon_F/k_B$, puedo expresar $1/(\beta\epsilon_F) = k_BT/\epsilon_F = T/T_F$.

Luego si yo quería obtener U/N DE VERDAD (explícitamente) a temperaturas bajas con la primera corrección no trivial, volvemos a la ecuación 9 y reemplazamos la expresión obtenida de $\mu(T,N,V)$:

$$\begin{aligned}
\frac{U}{N} &= \frac{3}{4}\ \mu(T,N,V)\ \left(1+\pi^2\frac{1}{(\beta\mu(T,N,V))^2}+\mathcal{O}((\beta\mu)^{-4})\right) \\
&= \frac{3}{4}\ \mu(T,N,V)\ -\left(1+\pi^2\frac{1}{(\beta\epsilon_F)^2}+\mathcal{O}((\beta\epsilon_F)^{-3})\right) \\
&= \frac{3}{4}\ \epsilon_F\ \ \left(1-\frac{\pi^2}{3}\left(\frac{T}{T_F}\right)^2+\mathcal{O}(\left(\frac{T}{T_F}\right)^3)\right)\ \left(1+\pi^2\left(\frac{T}{T_F}\right)^2+\mathcal{O}(\left(\frac{T}{T_F}\right)^3)\right) \\
&= \frac{3}{4}\ \epsilon_F\ \ \left(1-\frac{\pi^2}{3}\left(\frac{T}{T_F}\right)^2+\pi^2\left(\frac{T}{T_F}\right)^2+\mathcal{O}(\left(\frac{T}{T_F}\right)^3)\right) \\
&= \frac{3}{4}\ \epsilon_F\ \ \left(1+\frac{2\pi^2}{3}\left(\frac{T}{T_F}\right)^2+\mathcal{O}(\left(\frac{T}{T_F}\right)^3)\right) = \frac{3pV}{N}
\end{aligned} \tag{18}$$

Luego la presión de Fermi es $p_F = p(T=0,N,V) = \frac{1}{4}\epsilon_F\frac{N}{V}$