

Física Teórica 3 – 2do cuatrimestre de 2020

Guía 6: estadística cuántica I

- Una partícula está confinada en una caja cúbica de volumen V . Su hamiltoniano es $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$.
 - 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.
 - Escriba la función de partición canónica como una suma sobre los autoestados del hamiltoniano para cada una de las alternativas del ítem anterior.
 - 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.
 - En base a lo anterior, ¿cuál es la condición que permite aproximar la suma por una integral?
 - Escriba la forma integral de la función de partición para las dos condiciones de contorno planteadas más arriba y demuestre que coinciden entre sí.
- Considere un sistema formado por 2 partículas no interactuantes que pueden estar en cualesquiera de 3 estados, con energías $0, \epsilon$ y 2ϵ . El sistema está en contacto con un foco térmico a temperatura T .
 - Escriba una expresión para la función de partición Z si:
 - las partículas son distinguibles pero la función de partición se corrige con un factor $1/N!$.
 - las partículas obedecen a la estadística de Bose–Einstein.
 - las partículas obedecen a la estadística de Fermi–Dirac.
 - Grafique la energía media en cada caso y compare.
 - Analice los tres casos cuando $kT \gg \epsilon$, identificando en los sistemas cuánticos la primera corrección respecto del comportamiento clásico.
- 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).

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

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

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 en términos de productos y sumas de Z_1 evaluada en múltiplos enteros de β .
- (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:

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

- (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,

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

- (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

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

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

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

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/m³. 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) 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:

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

- (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.