Física Teórica 3 − 1er cuatrimestre de 2021

Guía 5: *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.

   (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) 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 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) 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:

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

(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,

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

(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. Considere un gas de fermiones libres no relativistas de spin s y masa m. El gas está en equilibrio a temperatura T , volumen V y fugacidad z.

   (a) Calcule el logaritmo de la función de partición grancanónica del gas.

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

   (c) Calcule E y P en función de T, V, N en los límites de temperaturas altas y bajas. Grafique sus resultados.

   (d) Calcule el calor específico del gas en los límites de temperaturas altas y bajas. Grafique.

5. Para un gas ideal de N electrones en un volumen V,

   (a) Calcular la energía de Fermi.

(b) Calcular 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 $\epsilon(p) = cp$.

    (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?

8. **Paramagnetismo de Pauli.** 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. **Diamagnetismo de Landau.** Considere un gas de electrones confinado a moverse en un plano de área A. Se aplica un campo magnético de módulo B en la dirección normal al plano. En estas condiciones, ignorando la interacción entre el spin de los electrones y el campo magnético, se obtiene que los niveles de energía monoparticulares son los de un oscilador armónico,

    $$\epsilon = \hbar\omega(n + 1/2) \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

    donde $\omega = eB/(mc)$ (e y m son respectivamente la carga y la masa del electrón y c es la velocidad de la luz). Cada nivel de energía tiene degeneración $g = 2AeB/(hc)$. El sistema se encuentra en equilibrio a temperatura T y fugacidad z.

(a) Usando la fórmula de Euler-Maclaurin, $\sum_{n=0}^{\infty} f(n+1/2) = \int_0^{\infty} dx f(x) + f'(0)/24$, pruebe que la función de partición grancanónica del gas está dada por

$$\ln Z_{\mathrm{GC}} \simeq g \left[\frac{kT}{\hbar\omega} f_2(z) - \frac{1}{24} \frac{\hbar\omega}{kT} \frac{z}{1+z} \right].$$

Discuta el caso $B = 0$.

(b) Calcule la magnetización $M = kT(\partial_B \ln Z_{\mathrm{GC}})_{T,A,z}$ del gas en función de T, A, B y el número de partículas N a primer orden en B, y obtenga de ahí la susceptibilidad magnética del gas. Discuta sus resultados.

10. **Enanas blancas y límite de Chandrasekhar.** Las enanas blancas son estrellas compuestas principalmente de helio (en su isótopo más estable, con dos neutrones) a una temperatura del orden de 10^7 K y a una densidad de unos 10^{10} kg/m^3.

    (a) Muestre que los átomos de helio deben encontrarse totalmente ionizados, y que el gas de electrones resultante puede considerarse como un gas relativista a temperatura nula. Datos: $k \simeq 1.4 \times 10^{-23}$ J/K, $h \simeq 6.6 \times 10^{-34}$ Js, masa del protón $m_p \simeq 1.7 \times 10^{-27}$ kg, masa del electrón $m_e \simeq 9.1 \times 10^{-31}$ kg, energía de ionización completa del helio $E_{\mathrm{ion}} \sim 100$ eV $\sim 10^{-17}$ J.

    (b) Asumiendo que la estrella es homogénea, se obtiene que su energía potencial gravitatoria es $E_p = -3GM^2/(5R)$, donde M y R denotan respectivamente la masa y el radio de la estrella. Calcule su energía cinética E_c, despreciando la contribución de los núcleos y aproximando la relación de dispersión de los electrones a primer orden en m_e^2, $\epsilon = \sqrt{p^2c^2 + m_e^2c^4} \simeq pc + m_e^2c^3/2p$. Exprese E_c en función de M y R.

    (c) En equilibrio, el radio de la estrella toma el valor que minimiza su energía. Muestre que existe una masa límite M_C tal que, para $M > M_C$, no hay ningún radio de equilibrio. Esa masa límite se conoce como el *límite de Chandrasekhar*. Calcule M_C y exprésela en unidades de la masa del sol $M_\odot \simeq 2.0 \times 10^{30}$ kg, sabiendo el valor de la masa de Planck, $M_{Pl} = \sqrt{\hbar c/G} \simeq 2.2 \times 10^{-8}$ kg. ¿Qué le ocurre a la estrella cuando $M > M_C$?

    (d) Muestre que no existiría una masa límite si el gas de electrones fuera no relativista.

11. (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.

12. (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.