Física Teórica 3 — primer cuatrimestre de 2024

Guía 5: *estadística cuántica 1*

1. En este problema se estudia el paso de sumas a integrales cuando se calcula la función de partición canónica de un gas ideal. Para eso, primero se considera el caso de una partícula en una caja cúbica de lado L y volumen V. El hamiltoniano es $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$.

   a) Encontrar los autoestados y las autoenergías con condiciones de contorno periódicas.

   b) Mostrar que el cálculo de la función de partición canónica, Z_1, se reduce a evaluar sumas de la forma
   $$f(\theta) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\theta n^2}. \tag{1}$$
   Escribir θ en función de L y de la longitud de onda térmica λ.

   c) Graficar la función escalonada $e^{-\theta n^2}$, para valores positivos de θ: i) cercanos a 1; ii) mucho menores que 1; iii) mucho mayores que 1. En qué circunstancias se debería poder aproximar la suma (1) por la integral
   $$I(\theta) = \int_{-\infty}^{\infty} dn\, e^{-\theta n^2}.$$
   En tal caso, demostrar que $Z_1 \simeq V/\lambda^3$.

   d) Evaluar numéricamente $f(\theta)$ e $I(\theta)$. Determinar las cotas de θ para las cuales el error relativo al aproximar la suma por la integral es menor que: 1% , 0,01% y 10^{-6}%.

   e) Con estos resultados a la vista, ¿cuál es el criterio para poder aproximar la suma por la integral?

   f) ¿Cuál es el valor de θ para H_2 a 300 K contenido en un recipiente de 1 cm^3. ¿A qué temperatura falla el criterio del ítem anterior?

   g) Analizar de nuevo el problema pero con condiciones de contorno homogéneas.

2. Considerar un sistema formado por 2 partículas no interactuantes que pueden estar en tres estados, con energías 0, ε y 2ε, con $\epsilon > 0$. El sistema está a temperatura T.

   a) Escribir la función de partición canónica si:

      i) las partículas son distinguibles y la función de partición se corrige con un factor $\frac{1}{2!}$;

      ii) las partículas son bosones idénticos;

      iii) las partículas son fermiones idénticos.

   b) Graficar la energía media en cada caso. Analizar los tres casos cuando $kT \gg \epsilon$. Para los sistemas cuánticos, escribir la primera corrección con respecto al comportamiento clásico.

3. Este problema justifica el factor $1/N!$ del conteo "correcto" de Boltzmann, pero muestra que la cuestión es sutil. Considere un sistema formado por dos partículas idénticas no interactuantes. Los autoestados de energía de una partícula están etiquetados por un índice discreto i. La energía del autoestado i es $\epsilon(i)$. La función de partición es

$$Z_2(\beta) = \sum_{i,j}{}' e^{-\beta[\epsilon(i)+\epsilon(j)]}.$$

La definición de la suma $\sum'$ depende de si las partículas son bosones o fermiones. Para fermiones, deben excluirse los términos en los que $i = j$ y, en cualquiera de los dos casos, cada conjunto $\{a, b\}$ de valores de los índices debe aparecer una sola vez.

a) Organizando la suma según haya o no valores repetidos de los índices, demostrar que

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

donde el signo más corresponde a bosones y el signo menos, a fermiones.

b) Notar que la suma correcta sobre estados de dos partículas puede escribirse como

$$\sum_{i,j}{}' \;=\; \alpha_1 \sum_{i,j} \;+\; \alpha_2 \sum_{i=j}.$$

Usando esto como punto de partida, encuentre α_1 y α_2 para bosones y fermiones, imponiendo la condición de que cada conjunto de valores de los índices aparezca en la suma final el número correcto de veces: en cualquier caso, no más de una vez y, en el caso de los fermiones, cero veces si el conjunto tiene elementos repetidos. Recupere (2).

c) Extienda el procedimiento anterior a los casos de tres y cuatro partículas.

d) ¿Qué estructura puede conjeturar para la función de partición de N partículas en términos de la función de partición de una sola partícula?

e) Para un sistema de partículas en una caja, si las sumas se aproximan por integrales, cada factor Z_1 aporta un factor V. Siguiendo el método aplicado a los casos de pocas partículas, encontrar la primera corrección cuántica (medida en potencias inversas de V) a la función de partición del gas clásico, distinguiendo entre fermiones y bosones:

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

f) Considerar 1 mol de partículas con una masa igual a la del O_2, a 300 K y 1 atm. ¿En qué factor difieren la función de partición clásica de la calculada teniendo en cuenta la primera corrección en potencias de V^{-1}? ¿Es correcto aproximar Z_N por $Z_1^N/N!$?

g) Encontrar la primera corrección cuántica a la energía libre de Helmholtz,

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

h) Para el gas del ítem f): ¿tiene sentido truncar el desarrollo de F/N en potencias de V^{-1} a orden cero? ¿Cuál es el error relativo asociado a la primera corrección cuántica?

i) En términos de la fugacidad, ¿qué condición asegura que el régimen es clásico? ¿Y en términos del producto $\beta\mu$? (La respuesta no es tan trivial como parece).

j) Encontrar la primera corrección cuántica a la ecuación de estado $P = P(T, V, N)$.

Estadística de Fermi–Dirac

4) En tres dimensiones, para partículas idénticas, no interactuantes, no relativistas, de masa m en una caja de volumen V, mostrar que $\log \mathcal{Z}(\beta, V, z)$ sólo depende de β y V a través de la combinación $\beta V^{-2/3}$, independientemente de que las partículas sean bosones o fermiones y de que se pueda o no aproximar la suma sobre estados por una integral. ¿Qué relación hay entre la densidad de energía y la presión?

5) Escribir, en términos de las funciones de Fermi–Dirac, la función de partición en el ensamble gran canónico para un gas ideal de fermiones de espín s contenidos en una caja de volumen V. A partir de este resultado, encontrar la función de partición en el ensamble canónico para 1, 2, 3, 4 y 5 fermiones.

6) Para un gas ideal de N fermiones de espín s en una caja de volumen V, calcular ϵ_F y la presión y la energía a $T = 0$.

7) **Masa de Chandrasekhar**. 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/m^3. A esta temperatura, los átomos de helio están completamente ionizados. Cada núcleo de helio tiene una masa de aproximadamente $4m_p$, donde m_p es la masa del protón.

a) Mostrar que puede considerarse que el gas de electrones está a temperatura cero, pero es relativista.

b) Asumiendo que la estrella es homogénea, su energía potencial es $E_g = -3GM^2/5R$, donde M y R son, respectivamente, la masa y el radio de la estrella. Calcular su energía cinética E_e en función de M y de R, despreciando la contribución de los núcleos y aproximando la relación de dispersión de los electrones a primer orden en m^2,

$$\epsilon = \sqrt{(pc)^2 + m^2c^4} \simeq pc + \frac{m^2c^3}{2p}.$$

c) En equilibrio, el radio toma el valor que minimiza la energía (¿por qué?). Mostrar que existe una masa límite M_C tal que, para $M > M_C$, no hay ningún radio de equilibrio. Esa masa se conoce como el límite de Chandrasekhar. Calcular M_C en unidades de la masa solar, $M_\odot \approx 2 \times 10^{30}$ kg.

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

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. Considerar un gas de electrones a temperatura cero.

   a) Escribir la ecuación que determina la energía de Fermi en función de N, V y H.

   b) Hallar 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?

   c) Suponer ahora como dato una energía de Fermi mayor que $\mu_B H$. Hallar la magnetización y a partir de ella la susceptibilidad.

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

   a) Hallar PA/kT en función de la temperatura y del potencial químico.

   b) Hallar la energía de Fermi en términos del número medio de partículas a $T = 0$.

   c) Mostrar que el potencial químico, como función de la temperatura, es:

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

   d) Calcular el calor específico si el gas está altamente degenerado y mostrar que es proporcional a T.

10) a) Para un gas ideal de fermiones de espín s, escribir las ecuaciones paramétricas que determinan S, P, U y c_V como funciones T, V y N.

   b) Calcular estas cantidades en $T = 0$ y obtener sus primeras correcciones a temperatura finita.

   c) Mostrar que para $z \ll 1$ se recupera el límite clásico. Encontrar las primeras correcciones cuánticas para la energía, el calor específico y la ecuación de estado.

   d) Graficar PV/N y c_V en función de T y verificar que se obtienen los comportamientos esperados para temperaturas muy bajas y temperaturas muy altas.

11) Ídem al problema anterior, pero ahora considerar que el gas es ultrarrelativista.

12) (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. El sistema está a temperatura T. Encontrar las condiciones de equilibrio termodinámico. En particular, encontrar la relación V_1/V_2 entre los volúmenes que ocupa cada gas. Hacer el cálculo primero para $T = 0$ y luego encontrar la primera corrección para $T > 0$.

13) (Dalvit *et al.*, Problema 4.20b). 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. Encontrar T asumiendo válida la aproximación de muy baja temperatura.

14) Un problema fácil para terminar. Un gas de N fermiones de espín s y masa m está contenido en un recipiente de volumen V. La figura muestra el potencial químico en función de la temperatura.

a) Mire la figura. Tiene cinco segundos para responder: en términos de la energía de Fermi, ¿para qué valor de kT es μ igual a cero?

b) Ahora tómese el tiempo que necesite: en términos de la energía de Fermi, ¿para qué valor de kT es μ igual a cero?

c) A partir de la primera corrección de temperatura finita para el potencial químico, estime el valor de kT para el cual μ es igual a cero y compare con el resultado exacto.