

### Física Teórica 3 – 1er cuatrimestre de 2017

#### Guía 5: 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  $2\epsilon$ . 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  $\epsilon_i$ . 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  $\beta$ .
- (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  $V$ :
- Calcular la energía de Fermi.
  - Calcular la energía total  $E$  a  $T = 0$ .
  - 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  $\alpha$  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  $\mu$ ,  $E$  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/m<sup>3</sup>. 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.