Física Teórica 3 — 1er. cuatrimestre de 2019

Guía 5: *Estadística cuántica I*

1. Una partícula está en una caja de lado L y volumen V. Su hamiltoniano es $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$.

   a) Encontrar los autoestados y las autoenergías de $\hat{H}$.

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

   c) Graficar cualitativamente la función escalonada $e^{-\theta n^2}$, con n entero, para valores positivos de θ: cercanos a 1, mucho menores que 1, y mucho mayores que 1. En qué límite debería poderse aproximar la suma (1) por la integral
   $$F(\theta) = \int_0^{\infty} dn\, e^{-\theta n^2}.$$
   En tal caso, demostrar que $Z_1 \approx V/\lambda^3$.

   d) Evaluar numéricamente $f(\theta)$ y $F(\theta)$. Determinar los valores de θ para los cuales la integral difiere de la suma en menos de: 1 % , 0,1 %, y en menos de 0,01 %. Si no tiene a mano un programa de cálculo, puede usar online el sitio de Wolfram Alpha. Ingrese por ejemplo la siguiente instrucción

   ```
   x=0.05;a=sum[exp[-x n^2.],{n,1,infinity}]; b=0.5(pi/x)^0.5; c=abs[100*(1-b/a)]; a,b,c
   ```

   e) ¿Cuál es la condición para poder reemplazar la suma por la integral?

   f) ¿Cuál es el valor de θ para un mol de O_2 a 1 atm de presión y una temperatura de 300 K? Calcular Z_1 a partir de las sumas y a partir de las integrales.

2. Considerar 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 a temperatura T.

   a) Escribir la función de partición Z si:

      i) las partículas son distinguibles y la función de partición se corrige con un factor 1/2!.

      ii) las partículas obedecen a la estadística de Bose—Einstein.

      iii) las partículas obedecen a la estadística de Fermi—Dirac.

   b) Graficar la energía media en cada caso.

   c) Analizar los tres casos cuando $kT \gg \epsilon$, calculando 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

$$Z_2(\beta) = \sum_{i,j}{}' e^{-\beta(\epsilon_i+\epsilon_j)}.$$

$\sum'$ depende de si las partículas son bosones o fermiones. En el caso clásico la suma es irrestricta pero se incluye un factor $1/2!$ (a esto se lo llama estadística de Boltzmann).

a) Organizando la suma según haya o no valores repetidos de los índices, 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 signo menos a fermiones. Notar que el primer término es el resultado correspondiente a la estadística de Boltzmann.

b) Encontrar el resultado análogo para el problema de 3 partículas.

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 Z_1 aporta un factor V. Teniendo esto en cuenta y siguiendo el método aplicado a los casos de 2 y 3 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:

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

e) Tomando como caso de referencia 1 mol de O_2 a 300K y 1 atm (omitiendo los grados de libertad internos), ¿en qué factor difieren el Z clásico del Z calculado teniendo en cuenta la primer corrección en potencias de $1/V$? ¿Tiene sentido aproximar el Z cuántico por el Z clásico?

f) A partir del desarrollo para Z, encontrar la primera corrección en potencias de $1/V$ a la energía libre de Helmholtz,

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

En términos de la fugacidad, ¿qué condición asegura que el régimen es clásico?

g) Para 1 mol de O_2 a 300 K y 1 atm: ¿tiene sentido truncar el desarrollo de F/N en potencias de $1/V$ a orden cero? ¿Cuál es el error relativo asociado a la primera corrección en potencias de $1/V$? ¿Cuál es el valor de la fugacidad en este caso?

h) A partir de lo anterior, encontrar la primera corrección cuántica a la ecuación de estado $p(V, N, T)$ del gas ideal clásico de N partículas.

Estadística de Fermi–Dirac

4) Para un gas ideal de N electrones en un volumen V. Calcular la energía de Fermi y la energía total E a $T = 0$.

5) A partir del gran potencial para partículas de FD de espín S,

$$\log \mathcal{Z} = \frac{V}{h^3} \sum_{s=-S}^{S} \int d^3p \; \log\Big[1 + z e^{-\beta \epsilon_s(p)}\Big], \quad \text{con } \epsilon_s(p) = p^2/2m.$$

a) Mostrar que, cuando $z \ll 1$, salvo por la degeneración de espín, se obtienen los resultados del gas ideal clásico. *Ayuda*: hacer primero una integración por partes y ver qué forma tiene la función que aparece en el integrando.

b) Mostrar que para cualquier temperatura se cumple $E = 3PV/2$. Usando esta relación y el resultado del problema anterior encontrar la presión a $T = 0$.

c) Mostrar que a bajas temperaturas

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

donde α es una constante que depende del espín y de la masa de las partículas. *Ayuda*: hacer primero una integración por partes y luego usar el lema de Sommerfeld.

i) Calcular N, E y P y verificar la relación $PV = 2E/3$.

ii) Definiendo $x = N/(\alpha V)$, encontrar el potencial químico $\mu(x, T)$ hasta orden $(kT)^2$. A partir de este resultado calcular $E(x, T)$ hasta el mismo orden. En particular, escribir las expresiones que resultan para μ, E y P a $T = 0$.

6) Considerar 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) Obtener la relación entre E y N para $T = 0$.

b) Obtener $\mu(T)$ al menor orden no nulo en la temperatura.

c) ¿Cuál es la condición que debe cumplirse para que el gas esté en este tipo de régimen?

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

a) Hallar PA/kT en función de la temperatura y el 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:

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

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

8) 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. En estas condiciones los átomos de helio están completamente ionizados. Cada núcleo de helio tiene una masa de aproximadamente $2m_p$, donde $m_p \simeq 1{,}67 \times 10^{-27}$ kg es la masa del protón.

a) Mostrar que el gas de electrones puede considerarse a $T = 0$. *Datos*: $k \simeq 1{,}4 \times 10^{-23}$ J/K, $h \simeq 6{,}6 \times 10^{-34}$ J s, masa del electrón $m \simeq 9{,}1 \times 10^{-31}$ kg.

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

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

Expresar E_e en función de M y R.

c) En equilibrio, el radio toma el valor que minimiza la energía. 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, $M_\odot \simeq 2 \times 10^{30}$ kg. Usar que la masa de Planck es $M_P = \sqrt{\hbar c/G} \simeq 2{,}2 \times 10^{-8}$ kg.

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

9) 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. Su interacción mutua y el efecto del campo magnético sobre el movimiento orbital de los electrones puede despreciarse.

a) 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?

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

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. 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 $T > 0$.

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. Encontrar T asumiendo válida la aproximación de muy baja temperatura.