Física Teórica 3 — primer cuatrimestre de 2025

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
   $$I(\theta) = \int_{-\infty}^{\infty} dn\, e^{-\theta n^2}. \tag{2}$$
   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 O_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. 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
   $$Z_2(\beta) = {\sum_{i,j}}' e^{-\beta[\epsilon(i)+\epsilon(j)]}. \tag{3}$$
   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) Demostrar que

$$Z_2(\beta) = \tfrac{1}{2}Z_1(\beta)^2 \pm \tfrac{1}{2}Z_1(2\beta), \tag{4}$$

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

$$\sum_{i,j}{}' = \alpha_1 \sum_{i,j} + \alpha_2 \sum_{i=j}. \tag{5}$$

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 (4).

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?

3. El método del problema anterior rápidamente se vuelve intratable. La manera más sencilla de encontrar la función de partición canónica de N partículas idénticas no interactuantes es a partir de la función de partición gran canónica.

   a) Demostrar que el logaritmo de la función de partición está dado por

   $$\log \mathcal{Z}(\beta, z) = \mp \sum_i \log\left(1 \mp z e^{-\beta \epsilon_i}\right), \tag{6}$$

   donde el signo superior corresponde a la estadística de Bose-Einstein y el inferior a la estadística de Fermi-Dirac. La suma es sobre los estados de una partícula.

   b) Expandiendo el logaritmo, mostrar que

   $$\log \mathcal{Z}(\beta, z) = \sum_{\ell=1}^{\infty} (\pm 1)^{\ell+1} \frac{z^\ell}{\ell} Z_1(\ell\beta). \tag{7}$$

   c) Exponenciando los dos miembros de la igualdad y aislando el término proporcional a z^N, encuentre la función de partición canónica de N partículas.

4. En el régimen clásico, los números medios de ocupación,

$$n_\epsilon = \frac{1}{z^{-1} e^{\beta\epsilon} \mp 1}, \tag{8}$$

deben ser mucho menores que uno para todo ϵ admisible. Asumiendo que $\epsilon \geqslant 0$, eso implica $z \ll 1$. A partir de la Ec. (7), encuentre las primeras correcciones cuánticas a la ecuación de estado del gas ideal. El resultado debe quedar expresado como una serie de potencias en el parámetro λ^3/v, donde v es el volumen por partícula. ¿Cuánto vale este parámetro para 1 mol de O_2, a 300 K y 1 atm de presión, considerado como un gas ideal? ¿Cuánto vale la fugacidad para un gas ideal en estas condiciones? ¿Cuánto vale $\beta\mu$? Notar que hay una gran diferencia entre las condiciones $z \ll 1$ y $-\beta\mu \gg 1$.

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

6. Para fermiones no interactuantes, considerar un estado de una partícula de energía ϵ. En términos del número medio de ocupación $n(\epsilon, z)$, escribir la probabilidad de que el estado esté ocupado y la varianza del número de ocupación.

7. Asumiendo que la suma sobre los estados puede reemplazarse por una integral,* 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 contenido 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. Verificar estos resultados a partir de la expresión general obtenida en el problema 3.

8. Para un gas ideal de N fermiones de espín s en una caja de volumen V, calcular ϵ_F. Expresar la energía por partícula y la presión a $T = 0$ en términos de ϵ_F.

9. Considerar un gas ideal de N fermiones de espín s en una trampa armónica tridimensional de frecuencia ω bajo la aproximación semiclásica. Calcular ϵ_F. Expresar la energía por partícula a $T = 0$ en términos de ϵ_F.

10. **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 que, sin embargo, no puede tratarse como un gas no relativista.

    b) Asumiendo que la estrella es homogénea, su energía potencial es $W = -3GM^2/5R$, donde M y R son, respectivamente, la masa y el radio de la estrella. Calcular su energía térmica κ 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,

$$\epsilon = \sqrt{m^2c^4 + (pc)^2} \simeq pc + \frac{m^2c^3}{2p}. \tag{9}$$

*En general, asumir que esto es válido en el resto de los problemas.

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.

11. Un modelo simplificado de una estrella de neutrones asume que la estrella consiste en un gas ideal relativista de fermiones de masa m y espín $\frac{1}{2}$. El gas está a temperatura cero. Considerar una pequeña región de volumen V en equilibrio local que, en promedio, contiene N partículas. Si $\epsilon_0 = mc^2$, la energía de una partícula con momento $\mathbf{p}$ es

$$\epsilon(\mathbf{p}) = \sqrt{\epsilon_0^2 + (pc)^2}. \tag{10}$$

a) Mostrar que Vp_F^3 es constante, donde p_F es el impulso de Fermi.

b) Mostrar que la energía puede expresarse como

$$U = 3N\epsilon_0 \int_0^1 dx\, x^2 \sqrt{1 + x^2 \left(\frac{p_F}{mc}\right)^2}. \tag{11}$$

c) Mostrar que la presión está dada por

$$P = \frac{N}{V} \frac{p_F^2}{m} \int_0^1 dx\, \frac{x^4}{\sqrt{1 + x^2 \left(\frac{p_F}{mc}\right)^2}}. \tag{12}$$

d) Determinar la primera corrección de masa finita para el caso ultrarrelativista y la primera corrección en potencias inversas de c para el caso no relativista.

e) Verificar estos resultados calculando explícitamente la integral del ítem c).

12. **Paramagnetismo de Pauli I**. Un gas ideal de N electrones está contenido en una caja de volumen V. Los electrones interactúan con un campo magnético externo $\mathbf{H} = H\hat{z}$. La energía de interacción es $\epsilon_s = s\mu_e H$, donde s es el signo de la proyección del espín en la dirección $\hat{z}$ y μ_e es el valor absoluto del momento magnético de los electrones. El sistema está a temperatura cero.

a) Escribir la ecuación que determina ϵ_F en función de N, V y H. Representar gráficamente.

b) Calcular la magnetización por partícula M en función de H y de la densidad de partículas.

c) Calcular la susceptibilidad, es decir, la derivada de M respecto de H cuando H tiende a cero. El resultado debe quedar escrito únicamente en términos de ϵ_F.

13. **Paramagnetismo de Pauli II**. Considere un gas ideal de N electrones en una trampa armónica tridimensional de frecuencia ω en el límite termodinámico. La temperatura es cero. Los electrones interactúan con un campo magnético externo $\mathbf{H} = H\hat{z}$. Es válido aplicar la aproximación semiclásica.

   a) Escribir la ecuación que determina ϵ_F como función de N, ω y H.

   b) Escribir la magnetización por partícula en función de ϵ_F, N, ω y H.

   c) Calcular la susceptibilidad. El resultado debe quedar escrito sólo en términos de ϵ_F.

14. Para un gas ideal de N fermiones de espín s confinado en una superficie de área A:

   a) Escribir las ecuaciones paramétricas que determinan P y U como funciones de T, A y N.

   b) Encontrar ϵ_F en términos de la densidad de partículas.

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

$$\mu(T) = \epsilon_F \left[1 + \frac{1}{\beta\epsilon_F} \log\left(1 - e^{-\beta\epsilon_F}\right)\right]. \tag{13}$$

   d) Escribir las primeras correcciones de temperatura finita para $\mu(T)$ y mostrar que el lema de Sommerfeld no es aplicable en esta situación.

   e) Calcular el calor específico cuando el gas está altamente degenerado.

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

   b) Calcular estas cantidades para $T = 0$ y obtener sus primeras correcciones para $T > 0$.

   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.

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

17. Considere un gas ideal de N fermiones de espín s en una trampa armónica tridimensional de frecuencia ω en el límite termodinámico y bajo la aproximación semiclásica.

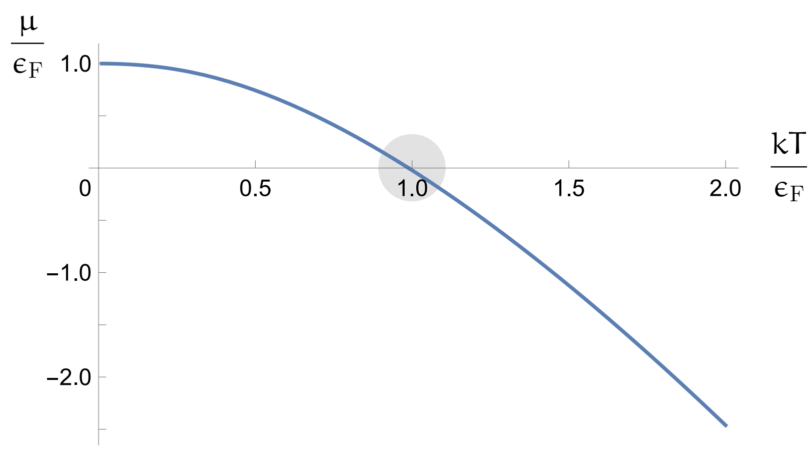
   a) Escribir las ecuaciones paramétricas que determinan S, U y c_ω en función de T, ω y N.

   b) Calcular estas cantidades para $T = 0$ y obtener sus primeras correcciones para $T > 0$.

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

18. (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 $\frac{1}{2}$, y en el otro N fermiones de espín $\frac{3}{2}$. Las dos clases de partículas tienen la misma masa. El sistema está a temperatura T. Encontrar la relación V_1/V_2 entre los volúmenes que ocupa cada gas. Hacer el cálculo primero para $T = 0$, luego encontrar la primera corrección para $T > 0$ y verificar que cuando $T \to 0$ se obtiene el resultado esperado.

19. Para terminar, un problema fácil. Un gas de N fermiones de espín s y masa m está contenido en un recipiente de volumen V en tres dimensiones. La figura muestra el potencial químico en función de la temperatura.



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

   b) Ahora tómese el tiempo que necesite: en términos de ϵ_F, ¿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.

   d) En general, para un gas en d dimensiones, encontrar y graficar la temperatura a la que se anula el potencial químico. ¿Para qué valor de d el potencial químico se anula cuando $kT = \epsilon_F$?