Departamento de Física
Facultad de Ciencias
Universidad de Chile

Mecánica Estadística
Profesor: Gonzalo Gutiérrez
Ayudante: Maricarmen Castro

Guía 7 Gases ideales cuánticos: relaciones generales

ma. 30 oct. 2018

Tarea: 2, 3 y 7 para ma. 6 nov.

---

1. Considere un sistema de dos átomos. Cada uno ellos tiene sólo 3 estados cuánticos accesibles, de energías 0, ϵ y 2ϵ. El sistema está en equilibrio térmico a temperatura T. Encuentre la función de partición Z y la energía media E en los siguiente casos, y comente:

   a) las partículas obedecen a la estadística clásica y son distinguibles

   b) las partículas obedecen a la estadística clásica y son indistinguibles

   c) las partículas obedecen a la estadística de Fermi

   d) las partículas obedecen a la estadística de Bose

   Sugerencia: trabaje en el ensemble canónico y enumere en cada caso de forma exhaustiva todas las configuraciones accesibles.

2. **Densidad de Estados partícula libre**. Para sistemas grandes, los niveles de energía están muy juntos, formando prácticamente un continuo. Demuestre que

   a) en el caso de una partícula libre, encerrada en una caja cúbica de lado L, para pasar de una suma a integral se debe proceder así:

   $$\sum_{\boldsymbol{k}}(\ldots) \longrightarrow \frac{V}{(2\pi)^3}\int_0^\infty d^3k\ (\ldots)$$

   ¿Cómo queda en el caso de que la suma sea sobre los momenta, $\sum_{\boldsymbol{p}}(\ldots)$ y la pasamos a una integral sobre los momenta $\boldsymbol{p}$?

   b) si la suma en vez de hacerla con respecto al vector número de onda $\boldsymbol{k}$ se efectúa con respecto a la energía ϵ, y se tiene la relación de dispersión $\epsilon_{\boldsymbol{k}} = \hbar^2\boldsymbol{k}^2/(2m)$, se procede así:

   $$\sum_{\epsilon}(\ldots) \longrightarrow \int_0^\infty d\epsilon\ \mathcal{D}(\epsilon)(\ldots),$$

   donde $\mathcal{D}(\epsilon) = \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\epsilon^{1/2}$ es la densidad de estados de una partícula libre. Es decir

   $$\frac{V}{(2\pi)^3}d^3k \longleftrightarrow \frac{V}{h^3}d^3p \longleftrightarrow \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\epsilon^{1/2}d\epsilon.$$

   Si se considera que además la partícula tiene espín S, entonces lo anterior debe multiplicarse por el factor $2S+1$.

   Note que en los casos anteriores, como es la costumbre en mecánica estadística, se considera siempre que la partícula está en una caja cúbica. Para el caso general, ver *Can an Ideal Gas Feel the Shape of its Container?*, G. Gutiérrez and J. Yáñez, American Journal of Physics, Vol 65, No.8, p.739-744 (1997).

3. **Ecuación de estado de gas ideal cuántico normal y ultrarelativista.**

   a) Demuestre que para tanto para gas ideal de Fermi-Dirac como de Bose-Einstein, la expresión

   $$pV = \frac{2}{3}E$$

   permanece inalterada con respecto al caso clásico.

b) Considere ahora una partícula ultrarelativista, donde $\epsilon_p = \sqrt{(pc)^2 + m_0^2c^4} \longrightarrow pc$ para $p \longrightarrow \infty$. Muestre que el número de estados entre ϵ y $\epsilon + d\epsilon$ es

$$\mathcal{D}(\epsilon)d\epsilon = \frac{4\pi V}{c^3h^3}\epsilon^2 d\epsilon$$

c) Muestre que un gas de fermiones ultrarelativistas de espín $1/2$ satisface la ecuación de estado

$$pV = \frac{E}{3}.$$

Compruebe que esta ecuación también la satisface un gas de bosones ultrarelativista. Comente con respecto al caso normal (caso a)).

4. Un oscilador armónico unidimensional tiene el hamiltoniano

$$H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2q^2$$

donde q es la coordenada y p es el momentum.

a) Calcule la función partición clásica, tomando como elemento del espacio de fase un $dqdp/\tau$, donde τ es una unidad arbitraria.

b) Cuánticamente el Hamiltoniano clásico pasa a ser un operador $\check{\boldsymbol{H}}(\check{\boldsymbol{q}}, \check{\boldsymbol{p}})$. Muestre que en este caso la función partición es

$$Z = \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}$$

c) Compare Z en el limite de altas temperaturas con la función partición clásica, y muestre que la unidad para el espacio de fase clásico es $\tau = h$, la constante de Planck.

5. Para un gas ideal cuántico, muestre que

$$\langle n_{\boldsymbol{k}} n_{\boldsymbol{p}} \rangle - \langle n_{\boldsymbol{k}} \rangle \langle n_{\boldsymbol{p}} \rangle = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial \epsilon_{\boldsymbol{k}}}\langle n_{\boldsymbol{p}} \rangle \qquad (\boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{p})$$

Como $\langle n_{\boldsymbol{p}} \rangle$ no depende de $\epsilon_{\boldsymbol{k}}$, esto da

$$\langle n_{\boldsymbol{k}} n_{\boldsymbol{p}} \rangle = \langle n_{\boldsymbol{k}} \rangle \langle n_{\boldsymbol{p}} \rangle \qquad (\boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{p}) \tag{1}$$

(Indicación: tome derivadas del gran canónico respecto a $\epsilon_{\boldsymbol{p}}$ y luego a $\epsilon_{\boldsymbol{k}}$.)

6. Muestre que $pV \geq \langle N \rangle k_B T$ para fermiones, y $pV \leq \langle N \rangle k_B T$ para bosones.

7. **Fluctuaciones en el número de ocupación**.

a) Demuestre que las fluctuaciones del número de ocupación de un sólo estado $\boldsymbol{k}$ es

$$\langle n_{\boldsymbol{k}}^2 \rangle - \langle n_{\boldsymbol{k}} \rangle^2 = \langle n_{\boldsymbol{k}} \rangle \mp \langle n_{\boldsymbol{k}} \rangle^2,$$

donde $(-)$ es para fermiones y $(+)$ para bosones.

b) Para un sistema macroscópico, los niveles de energía se acercan a un continuo en el límite de volumen infinito, por lo que es relevante conocer la fluctuación en los niveles de ocupación de un grupo de estados. Sea σ el número de ocupación de un grupo G de estados:

$$\sigma = \sum_{\boldsymbol{k} \in G} n_{\boldsymbol{k}} \tag{2}$$

Muestre la siguiente relación:

$$\langle \sigma^2 \rangle - \langle \sigma \rangle^2 = \langle \sigma \rangle \mp \sum_{\boldsymbol{k} \in G} \langle n_{\boldsymbol{k}} \rangle^2 \qquad (3)$$

donde el signo y $(-)$ corresponde a fermiones y $(+)$ a bosones. Cuando ningún estado es ocupado macroscópicamente, el lado izquierdo es del orden de V^2, mientras que el lado derecho es del orden de V, y esto representa una fluctuación normal. La excepción ocurre en un condensado de Bose-Einstein, como se verá mas adelante.

8. Muestre que la entropía de un gas ideal cuántico puede escribirse en la forma

$$\langle S \rangle = -k_B \sum_{l=0}^{\infty} \left[\langle n_l \rangle \ln \langle n_l \rangle \mp (1 \pm \langle n_l \rangle) \ln(1 \pm \langle n_l \rangle) \right],$$

donde el signo superior se refiere a estadística de Bose–Einstein y el inferior a estadística de Fermi–Dirac.

9. **Gases bidimensionales**. Encuentre la capacidad calórica c_V para sendos gases ideales de Bose–Einstein y de Fermi–Dirac en dos dimensiones.