

Estadísticas de gases ideales cuánticos: Fermi-Dirac, Bose-Einstein, Planck

Mecánica Estadística (2022)

Práctico 6

1. Distribución de Fermi-Dirac:

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T} + 1}}.$$

a) Grafique la distribución de Fermi-Dirac en función de la relación ε/μ , siendo ε la energía del nivel en consideración y μ el potencial químico en el caso en que $\mu > k_B T > 0$. En particular:

- 1) Calcule su valor en $\varepsilon = \mu$ y en $\varepsilon = 0$. ¿Qué sucede si $\mu \gg k_B T$?
- 2) Estudie el límite $\varepsilon \gg \mu$.
- 3) ¿Cuál es la región de valores de ε en que $f(\varepsilon)$ toma valores entre 90 % y 10 % de su valor máximo?
- 4) ¿Cómo cambia la gráfica anterior si $\mu < 0$?

b) Simetría de los niveles ocupados y vacíos: Demostrar que $f(\mu + \delta) = 1 - f(\mu - \delta)$. Interprete este resultado como que la probabilidad de que un nivel δ por encima del “nivel de Fermi” esté ocupado es igual a la probabilidad de que un nivel δ por debajo del “nivel de Fermi” esté vacío.

c) Calcule la función $g(\varepsilon) = -\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}$ y demuestre que:

- 1) Tiene un valor máximo en el “nivel de Fermi” $\varepsilon = \mu$ que es $(4k_B T)^{-1}$. Interprete este resultado como que cuanto menor sea la temperatura más inclinada es la pendiente de la función de Fermi-Dirac.
- 2) Calcule los valores de energía ε_+ y ε_- en que la función $g(\varepsilon)$ cae a la mitad de su valor máximo. Con estos valores estime el ancho completo a media altura $\Delta\varepsilon_{FWHM} = \varepsilon_+ - \varepsilon_-$ y demuestre que es proporcional a $k_B T$.
- 3) Demuestre entonces que en el límite en que la temperatura T tiende a $0K$, la función $g(\varepsilon)$ tiende a la función delta de Dirac centrada en el “nivel de Fermi”.

2. Distribución de Bose-Einstein:

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T} - 1}}.$$

a) Grafique la distribución de Bose-Einstein en función de la energía ε del nivel en consideración.

b) Demuestre que su derivada es estrictamente negativa.

c) Estudie el límite $\varepsilon \gg \mu$ y compárelo con el mismo límite de la distribución de Fermi-Dirac.

d) ¿Qué sucede si $\varepsilon \rightarrow \mu$?

e) ¿Para qué rangos de energía la función toma valores mayores que 1?

3. Un gas ideal de fermiones, con masa m y energía de Fermi ϵ_F , está a temperatura cero. Encuentre expresiones para los valores esperados de $\langle v_x \rangle$ y $\langle v_x^2 \rangle$, donde \vec{v} es la velocidad de un fermión.
4. Considere un gas de electrones libres, en un espacio d -dimensional, encerrados en un hipercubo de lado L . Grafique esquemáticamente la densidad de estados $D(E)$ versus la energía E , para las dimensiones $d = 1$ y $d = 2$. ¿Cuál es la expresión de la energía de Fermi en términos de la densidad de partículas para $d = 1$ y $d = 2$?
5. Considere un gas de electrones libres en una región de volumen V , en el régimen ultrarelativista. La energía por partícula está dada por: $\epsilon \simeq pc$, donde \vec{p} es el momento lineal. Asumiendo que la densidad de estados es la misma que en el caso no relativista:
 - a) Calcule la energía de Fermi de este sistema.
 - b) ¿Cuál es la energía total en el estado base? (asuma condiciones de borde periódicas)
 - c) Obtenga una expresión asintótica para el calor específico a volumen constante en el límite $T \ll T_f$.
6. Considere un gas de bosones ideal con grados de libertad internos. Suponga que, además del estado base con energía nula ($\epsilon_0 = 0$), se debe tener en cuenta el primer estado excitado, con energía interna $\epsilon_1 > 0$. En otras palabras, asuma que el espectro de energía está dado por:

$$\epsilon_j = \epsilon_{\vec{k},\sigma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \epsilon_1 \sigma,$$

donde σ puede tomar los valores 0 y 1. Obtenga una expresión para la temperatura de condensación de Bose-Einstein en función del parámetro ϵ_1 .

7. Ecuación TdS del gas de fotones:

Aplique la ecuación $TdS = d\langle E \rangle + PdV$ a un gas de fotones, escribiendo $\langle E \rangle = V\langle u \rangle$, siendo u la densidad media de energía del campo de radiación, que es independiente del volumen V , y $P = u/3$ es la presión de radiación.

- a) Considerando a S como función de T y V , determine las derivadas parciales de S respecto a una y otra variable.
 - b) Igualando las derivadas segundas cruzadas obtenga una ecuación diferencial para u .
 - c) Integre dicha ecuación para obtener la ecuación de Stefan-Boltzmann.
8. a) Determine la relación entre la presión P y el volumen de un gas ideal de Fermi para $T = 0K$.
 - b) Utilice este resultado para calcular en forma aproximada la presión en atmósferas que ejercen los electrones de conducción en el cobre sobre la red sólida que los confina dentro del volumen del metal.
 - c) Calcule el coeficiente de compresibilidad isoterma: $\alpha_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T$.

9. Termodinámica del Sólido de Debye.

- a) Utilice la aproximación de Debye para obtener las siguientes funciones termodinámicas en función de la temperatura absoluta T expresándolas en términos de la función:

$$D(y) = \frac{3}{y^3} \int_0^y \frac{x^3}{e^x - 1} dx,$$

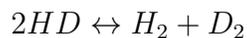
y de la temperatura de Debye $\theta_D = \frac{\hbar\omega_{max}}{k_B}$.

- 1) $F = -k_B T \ln(\mathcal{Z})$, donde \mathcal{Z} es la función de partición.
 - 2) Energía media $\langle E \rangle$.
 - 3) Entropía S .
- b) Calcule la función $D(y)$ en los límites $y \gg 1$ e $y \ll 1$.
- c) Emplee los resultados de la parte 9b para expresar las funciones termodinámicas calculadas en la parte en los casos límite cuando $T \ll \theta_D$ y cuando $T \gg \theta_D$.

10. Una molécula diatómica tiene, además de los grados de libertad de traslación (de su centro de masas), grados internos de rotación y grados internos de vibración (que se pueden modelar por un oscilador armónico unidimensional).

- a) Si a temperatura ambiente T_0 , prácticamente para todas las moléculas diatómicas la separación entre los niveles energéticos de rotación es pequeña comparada con $k_B T_0$, mientras que entre los niveles energéticos de vibración es grande comparada con $k_B T_0$, ¿cuál es el calor específico al número de partículas a volumen constante de un gas diatómico a la temperatura T_0 ?
- b) Suponga N moléculas del gas raro HD (H por átomo de hidrógeno de masa m y D por átomo de deuterio de masa M) se introducen en una botella y se mantienen a una temperatura T hasta que se establece un completo equilibrio. La botella contendrá entonces moléculas de H_2 y D_2 además de cierto número n de moléculas de HD. Calcule la relación n/N en función de T , m , M y ω_0 , que es la frecuencia angular de vibración de la molécula de HD, suponiendo que T es aproximadamente la temperatura ambiente de forma que los grados de libertad de rotación de las moléculas pueden considerarse como clásicos, mientras que $\hbar\omega_0 \gg k_B T$, de forma que todas las moléculas están esencialmente en su estado de vibración más bajo.

SUGERENCIA: El equilibrio difusivo en la reacción química:



se establece igualando los potenciales químicos ponderados por los coeficientes estequiométricos respectivos: $2\mu_{HD} = \mu_{H_2} + \mu_{D_2}$.

11. Condensación de Bose-Einstein:

Considere un gas de N bosones de masa m y espín cero, que no interactúan, encerrados en un volumen V a temperatura T . Teniendo en cuenta la distribución de Bose-Einstein

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{z^{-1}e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}} - 1},$$

la condensación de Bose-Einstein se da cuando el potencial químico del sistema μ tiende al estado fundamental ($\varepsilon = 0$), por lo que la actividad absoluta (fugacidad) $z \rightarrow 1$. En ese caso el número de bosones en el estado fundamental $N_0(T) = n(0) \gg 1$. El número total de bosones en este caso puede escribirse como

$$N = \sum_r n_r = N_0(T) + N_e(T),$$

donde n_r es el número de ocupación del estado cuántico r de una partícula y

$$N_e(T) = \int \rho(\varepsilon)n(\varepsilon)d\varepsilon$$

es el número de bosones en todos los estados excitados, siendo

$$\rho(\varepsilon) = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{1/2}$$

la densidad de estados (gas de partículas independientes tridimensional).

Nota: observe que la densidad de estados $\rho(0) = 0$ por lo que el estado fundamental está excluido en la integral anterior.

- a) Demuestre que la dependencia de $N_e(T)$ con la temperatura en el límite $z \rightarrow 1$ es proporcional a $T^{3/2}$ calculando el factor de proporcionalidad.

Sugerencia: Deje expresada la integral correspondiente (que no se calculará) con $z = 1$ en una variable adimensionalada.

- b) Calcule la temperatura crítica T_c definida como la temperatura en que $N_e(T_c) = N$.

Nota: la integral

$$\int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}}{e^x - 1} dx = \Gamma(\nu)\chi(\nu)$$

converge para $\nu > 1$, siendo $\Gamma(\nu)$ la función Gamma de Euler y $\chi(\nu)$ la función Zeta de Riemann.

- c) Grafique $N_e(T)$ y $N_0(T)$ para $T < T_c$.

Nota: Para $T > T_c$ resultará $N_e(T) \approx N$, lo que permite calcular $z < 1$ y el potencial químico en función de la temperatura T y la concentración de partículas N/V .

- d) En la región $T < T_c$ halle expresiones, en función de la temperatura, de la energía y la capacidad calorífica del gas.

Nota: deje la integral definida en forma adimensional; no necesita ser calculada.