

Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería Licenciatura en Física y Tecnología Avanzada Academia de Matemáticas y Física

Física Estadística

Presenta: Palomares Maldonado Héctor Miguel

Enero - Mayo $2020\,$

Índice

Índice				
1.	Prin	ner Parcial	3	
	1.1.	Principio de Clausius	3	
	1.2.	Efecto Shottky	4	
	1.3.	Sistema en un baño térmico(Distribución de Boltzman)	5	
	1.4.	Ensamble Canónico	6	
	1.5.	Paradoja de Gibbs	7	
	1.6.	Segunda ley de la termodinámica	8	
	1.7.	Solido Paramagnetico	9	
	1.8.	Problemas	0	
2.	Seg	undo Parcial	2	
			22	
	2.2.		6	
	2.3.		27	
	2.4.	Equipartición de la energía	1	
	2.5.	Problemas	2	
	2.6.	Gas Perfecto Cuántico	4	
	2.7.	Función de Partición	5	
	2.8.	Cuerpo Negro	5	
		2.8.1. Concepto de cuerpo negro	7	
	2.9.	ejemplos	7	
	2.10	Estadistica de Fermi	0	
	2.11	Problemas	0	
3.	Tercer parcial 44			
		Sistema de partículas variables	4	
	3.2.		4	
	3.3.		6	
	3.4.	· ·	9	
	3.5.		0	
	3.6.		1	
	3.7.	Gas de Fermi-Dirac y Energía de Fermi		
			1	

1. Primer Parcial

1.1. Principio de Clausius

1. Ejercicio 1

Tenemos $\Omega(E, V, N, a) = \Omega(E_1, V_1, N_1, E_2, V_2, N_2) = \Omega(E_1, V_1, N_1)\Omega(E_2, V_2, N_2)$

$$\begin{array}{rcl} S(E_1,V_1,N_1,E_2,V_2,N_2,) & = & k \ln \Omega_1 \Omega_2 \\ & = & k \ln \Omega_1 + k \ln \Omega_2 \\ & = & S(E_1,V_1,N_1) + S(E_2,V_2,N_2) \end{array}$$

Si concideramos la partición adiabatica $V_1,\,V_2,\,N_1,\,N_2$ son fijas

$$\left(\frac{\partial S}{\partial E_1}\right)_{E,V,N,V_1,N_1} = \left(\frac{\partial S_1}{\partial E_1}\right)_{V_1,N_1} + \left(\frac{\partial S_2}{\partial E_2}\right)_{V_2,N_2} \frac{dE_2}{dE_1} = 0$$
(1)

esto significa

$$\left(\frac{\partial S_1}{\partial E_1}\right)_{V_1,N_1} = -\left(\frac{\partial S_2}{\partial E_2}\right)_{V_2,N_2} \frac{dE_2}{dE_1}$$

Sabemos que $E = E_1 + E_2$, $E_2 = E - E_1$, la condición de equilibrio establece que la temperatura es constante, esto es:

$$\left(\frac{\partial S_1}{\partial E_1}\right)_{V_1,N_1} = \left(\frac{\partial S_2}{\partial E_2}\right)_{V_2,N_2}$$

y sabemos que la temperatura es

$$\left(\frac{\partial S_i}{\partial E_i}\right)_{V_i, N_i} = \frac{1}{T}$$

para la temperatura absoluta, $T_1 = T_2$

de la ec(4)

$$dS = \left(\frac{\partial S_1}{\partial E_1}\right) dE_1 - \left(\frac{\partial S_2}{\partial E_2}\right) dE_1 = \left[\left(\frac{\partial S_1}{\partial E_1}\right) - \left(\frac{\partial S_2}{\partial E_2}\right)\right] dE_1$$
$$\frac{dS}{dt} = \left[\left(\frac{\partial S_1}{\partial E_1}\right) - \left(\frac{\partial S_2}{\partial E_2}\right)\right] \frac{dE_1}{dt} = \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right) \frac{dE}{dt} > 0$$

Donde $T_2 > T_1$,

2. Ejercicio 2

Tenemos $\Omega(E, V, N, a)\Omega(E_1, V_1, N_1, E_2, V_2, N_2) = \Omega(E_1, V_1, N_1)\Omega(E_2, V_2, N_2)$

$$S(E_1, V_1, N_1, E_2, V_2, N_2,) = k \ln \Omega_1 \Omega_2$$

= $k \ln \Omega_1 + k \ln \Omega_2$
= $S(E_1, V_1, N_1) + S(E_2, V_2, N_2)$

Si concideramos la partición adiabatica E_1, V_1, V_2, N_2 son variables isocoricas

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V_1}\right)_{E_1,V_1} = \left(\frac{\partial S_1}{\partial V_1}\right)_{E_1,V_1} + \left(\frac{\partial S_2}{\partial V_1}\right)_{E_1,V_1} = \left(\frac{\partial S_1}{\partial V_1}\right)_{E_1,V_1} + \left(\frac{\partial S_2}{\partial V_2}\right)_{E_1,V_2} \frac{dV_2}{dV_1}$$

ahora sabemos $V = V_1 + V_2$, $V_2 = V - V_1$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V_1}\right)_{E_1,V_1} = \left(\frac{\partial S_1}{\partial V_1}\right)_{E_1,v_1} + \left(\frac{\partial S_2}{\partial V_2}\right)_{E_1,V_2} \frac{d(V-V_1)}{dV_1} = \left(\frac{\partial S_1}{\partial V_1}\right)_{E_1,V_1} - \left(\frac{\partial S_2}{\partial V_2}\right)_{E_1,V_2} = 0$$

esto implica

$$\left(\frac{\partial S_1}{\partial V_1}\right)_{E_1,V_1} = \left(\frac{\partial S_2}{\partial V_2}\right)_{E_1,V_2}$$

Por definición sabemos

$$\left(\frac{\partial S_i}{\partial V_i}\right) = \frac{P_i}{T_1}$$

entonces

$$\frac{P_1}{T_1} = \frac{P_2}{T_2}$$

1.2. Efecto Shottky

3. Ejercicio 3. Efecto Shottky

Si tenemos una red cristalina con $T \to 0$, los átomos se ordenan de forma regular, conforme la temperatura aumenta, los átomos pasan a ser libres. es decir emigran a la superficie, cada átomo tiene una energía, sea N el numero de átomos

La superficie tiene energía $E=n\epsilon$, de Boltzman tenemos

$$S = k \ln \Omega(n) = k \ln \left(\frac{N!}{n!(N-n)!} \right)$$

Donde $\Omega(n)$ es el numero de microestados para tener E = cte.

$$S = k \ln \left(\frac{N!}{n!(N-n)!} \right)$$

$$= k \left[\ln N! - \ln n! - \ln(N-n)! \right]$$

$$= k \left[N \ln N - N - n \ln n + n - (N-n) \ln(N-n) + (N-n) \right]$$

$$= k \left[N \ln N - n \ln n - (N-n) \ln(N-n) \right]$$

$$\frac{\partial S}{\partial n} = k \left[-\ln n + \ln(N-n) \right]$$

$$= k \ln \frac{N-n}{n}$$

Por otra parte sabemos

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{\partial S}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial E}$$

pero $E = n\epsilon$, $\frac{1}{\epsilon} = \frac{\partial n}{\partial E}$ por lo tanto

$$\frac{1}{T} = \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial S}{\partial n} \tag{2}$$

sustituyendo $\partial S/\partial n$ en 2 tenemos

$$\frac{\epsilon}{T} = k \ln \frac{N-n}{n}$$

$$e^{\epsilon/kT} = \frac{N-n}{n} = \frac{N}{n} - 1$$

$$e^{\epsilon/kT} + 1 = \frac{N}{n}$$

$$\frac{1}{e^{\epsilon/kT} + 1} = \frac{n}{N}$$

sabemos que n << N de aqui n/N << 1

$$\frac{1}{e^{\epsilon/kT} + 1} << 1$$

$$1 << e^{\epsilon/kT} + 1$$

vemos que $e^{\epsilon/kT} > 0$

$$\frac{n}{N} \approx \frac{1}{e^{\epsilon/kT}} = e^{-\epsilon/kT}$$

finalmente

$$n = Ne^{-\epsilon/kT}$$

1.3. Sistema en un baño térmico(Distribución de Boltzman)

4. Ejercicio 4. Sistema en un baño térmico

Encerramos al sistema que queremos estudiar en un baño calorífico, a una temperatura constante. dentro del baño sabemos que existe un cambio de energía (mínimo) entre el baño y el sistema. Los microestados del sistema son contados $1,2,3,\ldots,r$ y tienen energías $E_1 \leq E_2 \leq \ldots E_r \leq \ldots$, elegimos un intervalo $E_0 = E_0 + E_r$, el baño térmico puede tomar energías entre $E_0 - E_r$, $E_0 - E_r \pm \delta E$, La probabilidad P_r que el sistema que se encuentre en el estado E_r

$$P_r = c\Omega_2(E_0 - E_r)$$

Donde c es constante, Entonces la Entropía para el Baño Calorifico es

$$S_2 = k \ln \Omega_2 (E_0 - E_r) = k \ln \frac{P_r}{c}$$

$$P_r = c \cdot exp\left(\frac{S_2}{k}\right)$$
(3)

sabemos $E_1 \ll E_0$ realizamos una expansión en serie

$$\frac{1}{k}S_2(E_0 - E_r) = \frac{1}{k}S_2(E_0) - \frac{E_r}{k}\frac{dS_2}{dE_0} + \frac{1}{2}\frac{E_r^2}{k}\frac{d^2S_2(E_0)}{d(E_0)^2} + \dots$$
$$\frac{1}{k}S_2(E_0 - E_r) \approx \frac{1}{k}S_2(E_0) - \frac{1}{kT}E_r$$

Donde definimos $\beta = 1/kT$

$$\frac{1}{k}S_2(E_0 - E_r) \approx \frac{1}{k}S_2(E_0) - \beta E_r$$

sustituyendo en ec3

$$P_r = c \cdot exp\left(\frac{1}{k}S_2(E_0) - \beta E_r\right) = \underbrace{c \cdot exp\left(\frac{1}{k}S_2(E_0)\right)}_{1/z} exp\left(-\beta E_r\right) = 1$$

Sabemos que la suma de la probabilidad es uno, asi obtenemos la distribución de Boltzman, o función de partición

$$P_r = \frac{1}{z}e^{-\beta E}$$

En general

$$z = \sum_{r} g(E_r)e^{-\beta E_r} \qquad P(E_r) = \frac{g(E_r)e^{-\beta E_r}}{z}$$

1.4. Ensamble Canónico

5. Ejercicio 5 - Ensamble Canónico

En un baño termico, consideramos sistemas idénticos uno en contacto de otros, Cada sistema o ensamble teniendo la misma temperatura, Podemos decir que tiene la misma probabilidad de distribución de energía

El numero de ensambles canónicos, en el estado ν

$$\nu_r = P_r \nu$$

$$S\nu = k \ln \Omega_{\nu} = k \ln \frac{\nu!}{\nu_{1}!\nu_{2}!\nu_{3}!\dots\nu_{\nu}!}$$

$$= k[\ln \nu! - \ln \nu_{1}! - \ln \nu_{2}! - \ln \nu_{3}! - \dots \ln \nu_{r}!]$$

$$= k[\nu \ln \nu - \nu - \nu_{1} \ln \nu_{1} + \nu_{1} - \nu_{2} \ln \nu_{2} + \nu_{2} - \nu_{3} \ln \nu_{3} + \nu_{3} - \dots \nu_{r} \ln \nu_{r} + \nu_{r}]$$

$$= k[\nu \ln \nu - \sum \nu_{r} \ln \nu_{r} + \sum \nu_{r}]$$

$$= k\nu \ln \nu - \sum \nu_{r} \ln \nu_{r}$$

sustituyendo ν_r

$$S\nu = k\nu \ln \nu - \sum P_r \nu \ln(P_r \nu)$$

$$S\nu = k\nu \ln \nu - \sum [P_r \nu \ln P_r + P_r \nu \ln \nu]$$

sabemos $\sum P_r = 1$ (normalización)

$$S = -k \sum_{r} P_r \ln P_r$$

La probabilidad de encontrar al sistema en un estado de energia es $1/\Omega(E,\nu,N)$ El ensamble microcanonico su probabilidad es $P_r = 1/\Omega(E,\nu,N)$

$$S = -k \sum_{r} \frac{e^{-\beta E_r}}{z} \ln \frac{e^{-\beta E_r}}{z}$$

$$= -k \sum_{r} \underbrace{\frac{e^{-\beta E_r}}{z}}_{P_r} \left[\ln e^{-\beta E_r} - \ln z \right]$$

$$= k \sum_{r} \frac{e^{-\beta E_r} \beta E_r}{z} + k \left(\frac{\sum_{r} e^{-\beta E_r}}{z} \right) \ln z$$

pero
$$z = \sum e^{-\beta E_r}$$
 y $P_r = \frac{e^{-\beta E_r}}{z}$

$$S = \underbrace{k\beta}_{1/T} \underbrace{\sum_{r} P_{r} E_{r}}_{\bar{E}} + k \ln z$$
$$= T^{-1} \bar{E} + k \ln z$$
$$E - ST = -Tk \ln z$$

Donde H = E - ST es la energía de Helmholtz

$$H = -Tk \ln z$$

En ensamble microcanonico está completamente aislado. en el macrocanonico exite una transferencia de energía

1.5. Paradoja de Gibbs

6. Ejercicio 6 - Paradoja de Gibbs

Sabemos que la ecuación del gas ideal es

$$S(T, V, N) = kN \left[\frac{3}{2} - \ln(V(2\pi mkT)^{3/2}) \right]$$

en t=0 el sistema es

$$S_T^{(0)} = S_A^{(0)}(T, V_A, N_B) + S_B^{(0)}(T, V_B, N_B)$$

y el sistema cuando se quita la barrera es

$$S_T^{(1)} = S_A^{(1)}(T, V_A + V_B, N_B) + S_B^{(1)}(T, V_A + V_B, N_B)$$

$$S = kN_A \left[\frac{3}{2} + \ln[(V_A + V_B)(2\pi mkT)^{3/2}] \right] + kN_B \left[\frac{3}{2} + \ln[(V_A + V_B)(2\pi mkT)^{3/2}] \right]$$

$$- kN_A \left[\frac{3}{2} + \ln[V_A(2\pi mkT)^{3/2}] \right] - kN_B \left[\frac{3}{2} + \ln[(V_B(2\pi mkT)^{3/2})] \right]$$

$$= kN_A \left[\ln[(V_A + V_B)(2\pi mkT)^{3/2}] - \ln[V_A(2\pi mkT)^{3/2}] \right] + kN_B \left[\ln[(V_A + V_B)(2\pi mkT)^{3/2}] - \ln[V_B(2\pi mkT)^{3/2}] \right]$$

$$= kN_A \left[\ln\left(\frac{(V_A + V_B)}{V_A}(2\pi mkT)^{3/2}\right) \right] + kN_B \left[\ln\left(\frac{(V_A + V_B)}{V_B}(2\pi mkT)^{3/2}\right) \right] \neq 0$$

si S > 0 existe un proceso ireversible

7. Ejercicio 7 - Paradoja de Gibbs (Partículas indistinguibles)

$$S = k(N_B + N_A) \left[\frac{3}{2} + \ln \left\{ (V_A + V_B)(2(m_A + m_B)\pi kT)^{3/2} \right\} \right]$$

$$- kN_A \left[\frac{3}{2} + \ln \left\{ (V_A)(2(m_A + m_B)\pi kT)^{3/2} \right\} \right] - kN_B \left[\frac{3}{2} + \ln \left\{ (V_B)(2m_B\pi kT)^{3/2} \right\} \right]$$

$$= k(N_B + N_A) \left[\ln \left\{ (V_A + V_B)(2(m_A + m_B)\pi kT)^{3/2} \right\} \right]$$

$$- kN_A \left[\ln \left\{ (V_A)(2(m_A + m_B)\pi kT)^{3/2} \right\} \right] - kN_B \left[\ln \left\{ (V_B)(2m_B\pi kT)^{3/2} \right\} \right]$$

$$= kN_A \left[\ln \left\{ (V_A + V_B)(2(m_A + m_B)\pi kT)^{3/2} \right\} - \ln \left\{ (V_A)(2(m_A + m_B)\pi kT)^{3/2} \right\} \right]$$

$$= kN_B \left[\ln \left\{ (V_A + V_B)(2(m_A + m_B)\pi kT)^{3/2} \right\} - \ln \left\{ (V_B)(2m_B\pi kT)^{3/2} \right\} \right]$$

$$\neq 0$$

Para no contar doble, tenemos $\Omega' = \frac{\Omega}{N!}$ entonces la entropia es

$$S = k \ln \frac{\Omega}{N!}$$

$$S = k \ln \Omega - kN \ln N - N$$

$$S = kN \left[\frac{3}{2} - \ln(V(2\pi mkT)^{3/2}) \right] - kN \ln N + N$$
$$S = kN \left[\frac{5}{2} - \ln\left(\frac{V}{N}(2\pi mkT)^{3/2}\right) \right]$$

Calculando ΔS , Sabemos que las densidad es la misma, $\rho = m/V$, entonces $m_1 = m_2 = m$

$$\Delta S = k(N_A + N_B) \left[\frac{5}{2} + \ln \left(\frac{V_A + V_B}{N_A + N_B} (2\pi m k T)^{3/2} \right) \right]$$

$$- kN_A \left[\frac{5}{2} + \ln \left(\frac{V_A}{N_A} (2\pi m k T)^{3/2} \right) \right] - kN_B \left[\frac{5}{2} + \ln \left(\frac{V_B}{N_B} (2\pi m k T)^{3/2} \right) \right]$$

$$= k(N_A + N_B) \left[\ln \left(\frac{V_A + V_B}{N_A + N_B} (2\pi m k T)^{3/2} \right) \right]$$

$$- kN_A \left[\ln \left(\frac{V_A}{N_A} (2\pi m k T)^{3/2} \right) \right] - kN_B \left[\ln \left(\frac{V_B}{N_B} (2\pi m k T)^{3/2} \right) \right]$$

De la ecuación del gas ideal PV = nkT, tenemos que en t = 0, la presión y la temperatura no cambia, es decir

$$\frac{P_A}{T_A} = \frac{P_B}{T_B}$$

esto implica que

$$\frac{nk}{V_A} = \frac{nk}{V_B}$$

y tiempo después

$$\frac{P_{A+B}}{T_{A+B}} = \frac{n_{A+B}k}{V_{A+B}}$$

$$S = k(N_A + N_B) \left[\ln \left(\frac{V_A + V_B}{N_A + N_B} (2\pi m k T)^{3/2} \right) \right]$$

$$- k(N_A + N_B) \left[\ln \left(\frac{V_A + V_B}{N_A + N_B} (2\pi m k T)^{3/2} \right) \right]$$

$$= 0$$

Observemos que se soluciona la paradoja de Gibbs

1.6. Segunda ley de la termodinámica

8. Ejercicio 8 - Segunda Ley

Consideremos un sistema en un baño térmico y el sistema puede tener dos estados

$$E = \sum_{r} P_r E_r$$

$$dE = d\sum_{r} P_r E_r$$

$$= \sum_{r} d(P_r E_r)$$

$$= \sum_{r} E_r dP_r + P_r dE_r$$

sabemos que $P_r = \frac{e^{-\beta E}}{z}$ de aquí obtenemos

$$\ln z + \ln P_r = -\beta E_r$$

sustituyendo E_r de la expresión anterior

$$\sum_{r} E_{r} dP_{r} = \sum_{r} \frac{-1}{\beta} (\ln z + \ln P_{r}) dP_{r}$$

$$= \frac{-1}{\beta} \ln z \sum_{r} dP_{r} - \frac{1}{\beta} \sum_{r} \ln P_{r} dP_{r}$$

$$= -\frac{1}{\beta} \sum_{r} \ln P_{r} dP_{r}$$

por definición sabemos

$$S = -k \sum_{r} P_r \ln P_r$$

$$dS = -k \sum_{r} dP_r \ln P_r - k \sum_{r} P_r d(\ln P_r)$$

$$= -k \sum_{r} dP_r \ln P_r - k \sum_{r} P_r \frac{1}{P_r} dP_r$$

$$= -k \sum_{r} dP_r \ln P_r - k \sum_{r} dP_r$$

$$Tds = -kT \sum_{r} dP_r \ln P_r Tds$$

$$\sum_{r} EdP_r$$

Sabemos por termodinámica $\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right) = -p_r$

Ahora el otro termino: $\sum_{r} P_r dE_r$, sustituimos dE_r

$$\sum_{r} P_{r} dE_{r} = \sum_{r} P_{r} (-p_{r} dV)$$
$$= -\sum_{r} P_{r} p_{r} dV$$

definimos $P = \sum_{r} P_r p_r$ sustituyendo estos dos resultados en

$$E = \sum_{r} E_r dP_r + P_r dE_r$$
$$E = TdS - PdV$$

obtenemos la segunda ley de la termodinámica

1.7. Solido Paramagnetico

9. Ejercicio 9 - Solido Paramagnetico Consideremos un sistema de dipolos magnéticos en un campo magnético con energía de interacción $-\mu B$, tomemos un solo dipolo en un baño térmico, puede tener energía $E_1 = -\mu B$, $E_2 = \mu B$

$$z_1(T, B) = \sum_r e^{-\beta E_r} = e^{-\beta \mu B_m} + e^{\beta \mu B_m} 2 \frac{e^{-\beta \mu B_m} + e^{\beta \mu B_m}}{2} = 2 \cosh(\beta \mu B_m)$$

La probabilidad es

$$P_{-} = \frac{e^{-\beta\mu B_{m}}}{z_{1}} = \frac{1}{2}$$
 $P_{+} = \frac{e^{\beta\mu B_{m}}}{z_{1}} = \frac{1}{2}$

si $\beta \mu B_m << 1$ esto significa que $B_m \to 0, T \to \infty$, de otra forma $\beta \mu B_m >> 1, B_m \to \infty, T \to 0$ de aqui podemos ver

$$P_{-} = \frac{e^{-\beta \mu B_{m}}}{z_{1}} \neq 0$$
 $P_{+} = \frac{e^{\beta \mu B_{m}}}{z_{1}} = 0$

El promedio del momento $\bar{\mu}$

$$\bar{\mu} = P_{+}\mu + P_{-}(-\mu)$$

$$= \mu \frac{e^{\beta\mu B_{m}}}{z_{1}} + \frac{e^{-\beta\mu B_{m}}}{z_{1}}(-\mu)$$

$$= \mu B_{m} \frac{e^{\beta\mu B_{m}} - e^{-\beta\mu B_{m}}}{e^{\beta\mu B_{m}} + e^{-\beta\mu B_{m}}}$$

$$= \mu \tanh \beta\mu B_{m}$$

$$\begin{split} \langle E \rangle &= -\mu B_m P_+ + \mu B_m P_- \\ &= -\mu B_m \frac{e^{\beta \mu B_m}}{z_1} + \mu B_m \frac{e^{-\beta \mu B_m}}{z_1} \\ &= -\mu B_m \frac{e^{\beta \mu B_m} - e^{-\beta \mu B_m}}{e^{\beta \mu B_m} + e^{-\beta \mu B_m}} \\ &= -\mu B_m \tanh \beta \mu B_m \end{split}$$

La magnetización esta dada por

$$M_m = \frac{\mu}{V} = \frac{N}{V}\mu \tanh \beta \mu B_m$$

para $T \to \infty$, esto significa que $\beta \mu B_m \ll 1$, si aproximamos $\tanh x \approx x$

$$M_m = \frac{N}{V}\mu^2\beta B_m$$

La suceptibilidad magnética es

$$\chi = \frac{M_m}{H}$$

donde $H = B_m/\mu$

$$\chi \approx \frac{N}{V} \mu^2 \beta B_m \frac{B_m}{\mu} = \frac{N \mu B_m^2}{V} \frac{1}{T}$$
$$\chi \propto \frac{1}{T}$$

es llamada La ley de Curie

1.8. Problemas

1. Un sistema estadístico está compuesto de N partículas distinguibles independientes. Cada una de estas partículas tiene solo dos niveles de energía, E_1 y E_2 , de modo que $E_2 - E_1 = \varepsilon > 0$. Elija un estado fundamental adecuado para la energía y escriba la energía total en función de la temperatura T. Finalmente, discuta los límites $T \to 0$ y $T \to +\infty$.

Solución:

Configuramos el estado fundamental para que tenga energía cero, $E_1=0$. Como consecuencia, encontramos que $E_2=\varepsilon$. Un estado general se especifica por completo una vez que asignamos el conjunto $\{nj\}, j=1,\ldots,N$ donde $n_j=0$ o 1 indica si la j-ésima partícula está en el estado fundamental o en la excitada, respectivamente. Usando esta convención, la expresión para la energía total es

$$EE = \sum_{j=1}^{N} n_j \varepsilon = m\epsilon$$

donde m es el número de ocupación para el segundo nivel de energía, es decir, el número de partículas que tienen energía ϵ . Para calcular la energía en función de la temperatura, necesitamos usar la relación

$$\left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_N = \frac{1}{T}$$

donde la entropía $S=kln\Omega$ requiere el conocimiento del número de microestados Ω accesibles al sistema. Esto se puede calcular simplemente considerando todas las formas posibles de elegir m objetos de N

$$\Omega(m,N) = \frac{N!}{m!(N-m)!}$$

Usando la aproximación de Stirling, encontramos

$$S = k[N \ln N - N - m \ln m + m - (N - m) \ln(N - m) + (N - m)]$$

$$S = k[N \ln N - m \ln m - (N - m) \ln(N - m)]$$

$$\begin{split} \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_N &= \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial s}{\partial m}\right)_N = \frac{k}{\epsilon} \left(-\ln m - m \frac{1}{m} + \ln(N-m) + (N-m) \frac{1}{N-m}\right) = \frac{k}{\epsilon} \ln \left(\frac{N-m}{m}\right) \\ &\frac{\epsilon}{kT} = \ln \left(\frac{N}{m} - 1\right) \\ &e^{\frac{\epsilon}{kT}} = \frac{N}{m} - 1 \\ &e^{\frac{\epsilon}{kT}} + 1 = \frac{N}{m} \end{split}$$

sustituyendo m en $E = m\varepsilon$

$$E = \frac{N\varepsilon}{e^{\frac{\epsilon}{kT}} + 1}$$

En el límite $T \to 0$, encontramos $E \to 0$, lo que significa que solo el estado fundamental está ocupado por las partículas. En el límite $T \to +\infty$, obtenemos $E \to N\varepsilon/2$ que indica que ambos niveles de energía están igualmente poblados.

2. Consideramos una cadena unidimensional compuesta de sitios localizados N >> 1. Cada sitio está ocupado por un polímero con dos estados de energía: puede ser recto (con energía $h_{bend} = 0$) o puede doblarse (a la derecha o a la izquierda) con energía $h_{bend} = \varepsilon > 0$, independientemente de la dirección de flexión (ver Fig. 6.1). Calcule la entropía del sistema, S(E, N), para una energía de flexión total fija $E = m\epsilon$ (m es un número entero tal que m >> 1). Además, determine la energía interna en función de la temperatura y la capacidad de calor resultante, $C_N = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_N$ bajo el supuesto de que (N-m) >> 1. Finalmente, determine el comportamiento de la energía interna en el límite de temperaturas bajas y altas.

El numero de microestados esta dado por

$$\Omega(E, N) = \frac{N!}{m!(N-m)!} 2^m$$

entonces la entropia es

$$\begin{split} S &= k\Omega(E,N) \\ &= k\frac{N!}{m!(N-m)!}2^m \\ &= kN\left[\frac{m}{N}\ln 2 - \frac{m}{N}\ln\frac{m}{N} - \left(1 - \frac{m}{N}\right)\ln\left(1 - \frac{m}{N}\right)\right] \\ &= kN\left[\frac{E}{N\varepsilon}\ln 2 - \frac{E}{N\varepsilon}\ln\frac{E}{N\varepsilon} - \left(1 - \frac{E}{N\varepsilon}\right)\ln\left(1 - \frac{E}{N\varepsilon}\right)\right] \end{split}$$

De los potenciales de Maxwell

e los potenciales de Maxwell
$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)$$

$$kN\frac{\partial}{\partial E} \left[\frac{E}{N\varepsilon} \ln 2 - \frac{E}{N\varepsilon} \ln \frac{E}{N\varepsilon} - \left(1 - \frac{E}{N\varepsilon}\right) \ln \left(1 - \frac{E}{N\varepsilon}\right)\right] = \frac{1}{T}$$

$$kN \left[\frac{1}{N\varepsilon} \ln 2 - \frac{1}{N\varepsilon} \ln \frac{E}{N\epsilon} - \frac{k}{N\varepsilon} \frac{N\varepsilon}{E} \frac{1}{N\epsilon} - \left(1 - \frac{E}{N\varepsilon}\right) \frac{1}{\left(1 - \frac{E}{N\varepsilon}\right)} \frac{-1}{N\varepsilon} + \frac{1}{N\varepsilon} \ln \left(1 - \frac{E}{N\varepsilon}\right)\right] = \frac{1}{T}$$

$$kN \left[\frac{1}{N\varepsilon} \ln 2 - \frac{1}{N\varepsilon} \ln \frac{E}{N\epsilon} - \frac{1}{N\varepsilon} + \frac{1}{N\varepsilon} \ln \left(1 - \frac{E}{N\epsilon}\right)\right] = \frac{1}{T}$$

$$\frac{k}{\varepsilon} \left[\ln 2 - \ln \frac{E}{N\epsilon} + \ln \left(1 - \frac{E}{N\epsilon}\right)\right] = \frac{1}{T}$$

$$\beta \varepsilon = \ln 2 - \ln \frac{E}{N\varepsilon} + \ln \left(1 - \frac{E}{N\varepsilon}\right)$$

$$\beta \varepsilon - \ln 2 = \ln \frac{\frac{N\varepsilon - E}{N\varepsilon}}{\frac{E}{N\varepsilon}}$$

$$\beta \varepsilon - \ln 2 = \ln \left(\frac{N\varepsilon}{E} - 1\right)$$

$$2e^{\beta \varepsilon} + 1 = \frac{N\varepsilon}{E}$$

$$E = \frac{N\varepsilon}{2\varepsilon^{\beta \varepsilon} + 1}$$

3. Considere dos sistemas A y B, Cada uno de ellos contiene dos partículas, considere que la energía total del sistema es $E_{TOT} = E_A + E_B = 5$. A Y B están en equilibrio termodinámico y están separadas por una pared rígida que no permite el intercambio de energía, ni de partículas. Calcule la entropia cuando $E_A = 3$ y $E_2 = 2$

Solución:

Los microestados posibles de A son (3,0), (0,3), (2,1) y (1,2). Para B los microestados son (2,0), (0,2)

El numero de microestados es $\Omega_A = 4$, y $\Omega_B = 3$ El numero total de microestados es

$$\Omega_T = \Omega_A \Omega_B = 12$$

Por lo tanto la entropía es

$$s = k \ln 12$$

En el segundo caso, tenemos un intercambio de energía

$$E_{Tot} = E_A + E_B = 5$$

se satisface para $(E_A = 5, B = 0), (E_A = 0, E_B = 5), (E_A = 4, E_B = 1), (E_A = 1, E_B = 4), (E_A = 3, E_B = 2), (E_A = 2, E_B = 3)$

4. El numero de pasos hacia delante debe estar relacionado con el numero de pasos hacia atrás

$$x = a(N_+ - N_-)$$
 $N = N_+ + N_-$

El numero de moleculas esta dado N+1 y los enlaces son N de las dos expresiones anteriores tenemos

$$\frac{x}{a} = N_{+} - N_{-}$$

$$N_{+} = N - N_{-}$$
(4)

$$\frac{x}{a} = (N - N_{-}) - N_{-}$$

$$N_{-} = \frac{1}{2} \left(N - \frac{x}{a} \right)$$

por otra parte

$$N_{-} = N - N_{+}$$

sustituyendo en 4

$$\frac{x}{a} = N_{+} - (N - N_{+})$$

$$N_{+} = \frac{1}{2} \left(N + \frac{x}{a} \right)$$

La entropía depende del número de configuraciones totales, es decir, todas las formas posibles de extraer N_+ pasos hacia adelante y N_- hacia atrás de N, con la restricción de que $N=N_++N_?$. Por lo tanto, podemos escribir

$$S(x,N) = k \ln \frac{N!}{(N-N_+)!N_+!} = k \ln \frac{N!}{N_-!N_+!} = \frac{N!}{\left[\frac{1}{2}\left(N - \frac{x}{a}\right)\right]! \left[\frac{1}{2}\left(N + \frac{x}{a}\right)\right]!}$$

$$\frac{s}{k} = \ln N! - \ln \frac{1}{2}\left(N - \frac{x}{a}\right)! - \ln \frac{1}{2}\left(N + \frac{x}{a}\right)!$$

Dado la aproximación de Stirling

$$\frac{s}{k} = N \ln N - \mathcal{X} - \frac{1}{2} \left(N - \frac{x}{a} \right) \ln \frac{1}{2} \left(N - \frac{x}{a} \right) + \frac{1}{2} \left(\mathcal{X} - \frac{x}{a} \right) - \frac{1}{2} \left(N + \frac{x}{a} \right) \ln \frac{1}{2} \left(N + \frac{x}{a} \right) + \frac{1}{2} \left(\mathcal{X} + \frac{x}{a} \right) + \frac{1}{2} \left(\mathcal{X}$$

$$\frac{s}{k} = N \ln N - \frac{1}{2} \left(N - \frac{x}{a}\right) \ln \frac{1}{2} \left(N - \frac{x}{a}\right) - \frac{1}{2} \left(N + \frac{x}{a}\right) \ln \frac{1}{2} \left(N + \frac{x}{a}\right)$$

Sabemos de la primera ley de la termodinámica

$$dE = dQ + dw$$

$$ds = \frac{dQ}{T}$$

$$TdS = dE - dW$$

donde dW = -gdx, Dice el problema que solo depende de N, entonces dE = 0

$$TdS = qdx$$

$$g = T\left(\frac{dS}{dx}\right)_{N} = kT\frac{d}{dx}\left[N\ln N - \frac{1}{2}\left(N - \frac{x}{a}\right)\ln\frac{1}{2}\left(N - \frac{x}{a}\right) - \frac{1}{2}\left(N + \frac{x}{a}\right)\ln\frac{1}{2}\left(N + \frac{x}{a}\right)\right]$$
$$g = kT\frac{d}{dx}\left[\frac{1}{2}\left(N - \frac{x}{a}\right)\ln\frac{1}{2}\left(N - \frac{x}{a}\right) - \left(N + \frac{x}{a}\right)\ln\frac{1}{2}\left(N + \frac{x}{a}\right)\right]$$

$$g = kT \left[\frac{1}{2a} \ln \frac{1}{2} \left(N - \frac{x}{a} \right) + \frac{1}{2} \left(N - \frac{x}{a} \right) \left(\frac{1}{\frac{1}{2} \left(N - \frac{x}{a} \right)} \right) \left(\frac{-1}{2a} \right) - \frac{1}{2} \left(N + \frac{x}{a} \right) \ln \frac{1}{2} \left(N + \frac{x}{a} \right) \right] - kT \left[\frac{1}{2} \left(N + \frac{x}{a} \right) \left(\frac{1}{\left(N + \frac{x}{a} \right)} \right) \left(\frac{1}{2a} \right) \right]$$

$$g = -\frac{kT}{2a} \ln \left(\frac{N + \frac{x}{a}}{N - \frac{x}{a}} \right)$$

5. Un sistema estadístico está compuesto de N partículas con espín 1/2, inmerso en un campo magnético H. Las partículas se fijan en sus posiciones y poseen un momento magnético μ . El hamiltoniano de tal sistema es

$$\mathcal{H} = -\mu H \sum_{i=1}^{N} \sigma_i$$

Donde $\sigma_i = \pm 1$ Determine la entropía, la energía, el calor específico y la magnetización. Finalmente, definiendo la susceptibilidad como

$$\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{T,N}$$

probar la ley de Curie, es decir, que χ es inversamente proporcional a la temperatura cuando $H \to 0$ Solución:

Establezcamos $\varepsilon = \mu H$ y N_{\pm} sea el número de partículas con $\sigma_i = \pm 1$. El hamiltoniano se puede escribir como

$$\mathcal{H} = -\varepsilon N_{+} + \varepsilon N_{-}$$

pero

$$N = N_{+} + N_{-}$$
 $E = (N_{+} - N_{-})\epsilon$

observemos que de estas dos expresiones podemos obtener N_{+}

$$E = (N_{+} - [N - N_{+}])\epsilon$$

sustituimos $N_{-} = N - N_{+}$

$$\frac{E}{\epsilon} = 2N_{+} - N$$

$$\frac{1}{2}\left(\frac{E}{\epsilon} + N\right) = N_{+}$$

y para N_{-} sustituimos N_{+}

$$E = [(N - E_{-}) - E_{-}]\epsilon$$

$$N - \frac{E}{\epsilon} = 2E_{-}$$

$$\frac{1}{2} \left(N - \frac{E}{\epsilon} \right) = N_{-}$$

$$\mathcal{H} = \varepsilon N - 2\varepsilon (N - N_{\perp})$$

Por lo tanto, para una E y una N dados, el número de estados viene dado por todas las formas posibles de extraer N_+ o $N_?$ objetos de N, con la restricción de que $N=N_++N_-$. Este numero es

$$\Omega(E,N) = \frac{N!}{N_{+}!(N-N_{+})!} = \frac{N!}{N_{+}!N_{-}!} = \frac{N!}{\left[\frac{1}{2}\left(\frac{E}{\epsilon} + N\right)\right]!\left[\frac{1}{2}\left(N - \frac{E}{\epsilon}\right)\right]!}$$

Sabemos que la entropia esta dada por $S=k\ln{(\Omega)}$, sustituyendo a haciendo la aproximación de Stirling

$$\begin{split} \frac{S}{k} &= N \ln N - \mathcal{X} - \left[\frac{1}{2} \left(\frac{E}{\mu H} + N \right) \right] \ln \left[\frac{1}{2} \left(\frac{E}{\mu H} + N \right) \right] + \left[\frac{1}{2} \left(\frac{E}{\mu H} + \mathcal{X} \right) \right] \\ &- \left[\frac{1}{2} \left(N - \frac{E}{\mu H} \right) \right] \ln \left[\frac{1}{2} \left(N - \frac{E}{\mu H} \right) \right] + \left[\frac{1}{2} \left(\mathcal{X} - \frac{E}{\mu H} \right) \right] \\ &= N \ln N - \left[\frac{1}{2} \left(\frac{E}{\mu H} + N \right) \right] \ln \left[\frac{1}{2} \left(\frac{E}{\mu H} + N \right) \right] - \left[\frac{1}{2} \left(N - \frac{E}{\mu H} \right) \right] \ln \left[\frac{1}{2} \left(N - \frac{E}{\mu H} \right) \right] \end{split}$$

Sabemos de los potenciales de Maxwell

por definición el calor especifico es

$$C = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{H.N} = \frac{\partial}{\partial T}(-N\mu H \tanh\frac{\mu H}{kT}) = \frac{N\mu^2 H^2}{kT^2} \left(1 - \tanh^2\frac{\mu H}{kT^2}\right)$$

La magnetización es

$$M = -\frac{E}{H} = N\mu \tanh \frac{\mu H}{kT}$$

La susceptibilidad esta dado por

$$\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{TN} = \frac{N\mu^2}{kT} \left(1 - \tanh^2 \frac{\mu H}{kT^2}\right)$$

6. Un sistema estadístico está compuesto por R cuantos indistinguibles distribuidos en N niveles de energía de tal manera que no encontramos niveles vacíos (R > N >> 1). Indicando con R_i el número de cuantos en el nivel i-ésimo, la energía total del sistema es $R = R_1 + R_2 + \ldots + R_N$. Demuestre que el número total de microestados es

$$\begin{pmatrix} R-1 \\ N-1 \end{pmatrix}$$

Cuando N=3 y R=6, escriba explícitamente todas las configuraciones. Finalmente, en el caso general con R>N>>1, calcule la entropía del sistema y determine la temperatura de equilibrio. Trate de establecer una analogía entre este sistema físico y el problema combinatorio de organizar objetos R indistinguibles en N cajas.

solución

Podemos pensar que los N niveles son cuadros delimitados por N+1 líneas de partición. Si mantenemos fijas la primera y la última línea de partición y creamos todas las disposiciones posibles de los elementos R+N?1 (cuantos o líneas de partición), el número de microestados se evalúa como

$$\left(\begin{array}{c} N+R-1 \\ N-1 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c} N+R-1 \\ R \end{array}\right) = \frac{(N+R-1)!}{R!(N+R-1-R)!} = \frac{(N+R-1)!}{R!(N-1)!}$$

Esto significa que durante un arreglo de R quanta, solo tenemos R?1 para colocar las líneas de partición. Por lo tanto, el número correcto de microestados viene dado por todas las formas posibles de seleccionar N?1 de R?1

$$\begin{pmatrix} R-1 \\ N-1 \end{pmatrix} = \frac{(N+R-1)!}{R!(N+R-1-R)!} = \frac{(N+R-1)!}{R!(N-1)!}$$

El caso con N=3 y R=6 donde el número de microestados es

$$\binom{N+R-1}{R} = \frac{(3+6-1)}{6!(3-1)!} = 28$$

y donde también encontramos niveles vacíos. La condición de que no haya un nivel de vacío reduce el número de microestados para

$$\left(\begin{array}{c} R-1\\ N-1 \end{array}\right) = 10$$

En el caso de R > N << 1, la forma general de la entropía es

$$S = k \ln \left[\frac{(R-1)!}{(R-N)!(N-1)!} \right]$$

usando la aproximación de Stirling

$$S = k \left[(R-1) \ln(R-1) - (R-1) \ln(R-N) + (R-N) - (N-1) \ln(N-1) + (N$$

$$S = k \left[(R-1) \ln(R-1) - (R-N) \ln(R-N) - (N-1) \ln(N-1) \right]$$

7. La matriz de Hamilton para un sistema cuántico se puede escribir como

$$\hat{H} = -g \frac{B}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad g > 0 \tag{5}$$

Discuta un posible significado físico del hamiltoniano y calcule la función de partición canónica y la energía promedio en función de la temperatura.

Solución:

sabemos que

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

para encontrar los eigeinvalores de la energía hacemos

$$|H - \lambda I| = \left| -g \frac{B}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\lambda & 1 & 0 \\ 1 & -\lambda & 1 \\ 0 & 1 & -\lambda \end{pmatrix} \right| = -g \frac{B}{\sqrt{2}} [-\lambda (\lambda^2 - 1) - \lambda] = -g \frac{B}{\sqrt{2}} [-\lambda^3 + \lambda - \lambda] = g \frac{B}{\sqrt{2}} \lambda^3$$

$$E_1 = -gB \qquad E_2 = 0 \qquad E_3 = gB$$

la función de partición es

$$z(\beta) = \sum_{i=1}^{3} e^{-\beta E_i} = e^{\beta gB} + e^{-\beta gB} + 1$$

Para calcular la energía sabemos

$$U = -\frac{\partial \ln z}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(e^{\beta gB} + e^{-\beta gB} + 1) = \frac{gBe^{\beta gB} - gBe^{-\beta gB}}{e^{\beta gB} + e^{-\beta gB} + 1}$$

8. Un sistema físico está compuesto por N giros distinguibles asumiendo dos valores posibles ± 1 . Estos dos valores corresponden a los niveles de energía $\pm \varepsilon$, respectivamente. Calcule la energía total E usando la fórmula de Boltzmann y el conjunto microcanónico. Finalmente, compare los resultados con los del conjunto canónico.

Solución:

Llamemos a N_{\pm} el número de partículas con orientación de giro ± 1 . Luego, tenemos que considerar las ecuaciones que determinan el número total de partículas y la energía total

$$N = N_{+} + N_{-}$$
 $E = (N_{+} - N_{-})\epsilon$

observemos que de estas dos expresiones podemos obtener N_{+}

$$E = (N_+ - [N - N_+])\epsilon$$

sustituimos $N_{-} = N - N_{+}$

$$\frac{E}{\epsilon} = 2N_{+} - N$$

$$\frac{1}{2} \left(\frac{E}{\epsilon} + N \right) = N_{+}$$

y para N_{-} sustituimos N_{+}

$$E = [(N - E_{-}) - E_{-}]\epsilon$$

$$N - \frac{E}{\epsilon} = 2E_{-}$$

$$\frac{1}{2}\left(N - \frac{E}{\epsilon}\right) = N_{-}$$

Por lo tanto, para una E y una N dados, el número de estados viene dado por todas las formas posibles de extraer N_+ o $N_?$ objetos de N, con la restricción de que $N = N_+ + N_?$. Este numero es

$$\Omega(E,N) = \frac{N!}{N_{+}!(N-N_{+})!} = \frac{N!}{N_{+}!N_{-}!} = \frac{N!}{\left[\frac{1}{2}\left(\frac{E}{\epsilon} + N\right)\right]!\left[\frac{1}{2}\left(N - \frac{E}{\epsilon}\right)\right]!}$$

Sabemos que la entropia esta dada por $S = k \ln(\Omega)$, sustituyendo a haciendo la aproximación de Stirling

$$\begin{split} \frac{S}{k} &= N \ln N - \mathcal{N} - \left[\frac{1}{2} \left(\frac{E}{\epsilon} + N \right) \right] \ln \left[\frac{1}{2} \left(\frac{E}{\epsilon} + N \right) \right] + \left[\frac{1}{2} \left(\frac{E}{\epsilon} + \mathcal{N} \right) \right] \\ &- \left[\frac{1}{2} \left(N - \frac{E}{\epsilon} \right) \right] \ln \left[\frac{1}{2} \left(N - \frac{E}{\epsilon} \right) \right] + \left[\frac{1}{2} \left(\mathcal{N} - \frac{E}{\epsilon} \right) \right] \\ &= N \ln N - \left[\frac{1}{2} \left(\frac{E}{\epsilon} + N \right) \right] \ln \left[\frac{1}{2} \left(\frac{E}{\epsilon} + N \right) \right] - \left[\frac{1}{2} \left(N - \frac{E}{\epsilon} \right) \right] \ln \left[\frac{1}{2} \left(N - \frac{E}{\epsilon} \right) \right] \end{split}$$

Sabemos de los potenciales de Maxwell

$$\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_N = \frac{1}{T}$$

$$\frac{\partial}{\partial E} \left(N \ln N - \left[\frac{1}{2} \left(\frac{E}{\epsilon} + N\right)\right] \ln \left[\frac{1}{2} \left(\frac{E}{\epsilon} + N\right)\right] - \left[\frac{1}{2} \left(N - \frac{E}{\epsilon}\right)\right] \ln \left[\frac{1}{2} \left(N - \frac{E}{\epsilon}\right)\right] \right)$$

$$\frac{1}{T} = \frac{-k}{2\epsilon} \ln \left[\frac{1}{2} \left(\frac{E}{\epsilon} + N\right)\right] - \frac{k}{2\epsilon} \ln \left[\frac{1}{2} \left(N - \frac{E}{\epsilon}\right)\right]$$

$$\frac{2\epsilon}{kT} = \ln \left[\frac{1}{4} \left(\frac{E}{\epsilon} + N\right) \left(N - \frac{E}{\epsilon}\right)\right]$$

$$2\epsilon\beta = \ln \left[\frac{1}{4} \left(N + \frac{E}{\epsilon}\right) \left(N - \frac{E}{\epsilon}\right)\right]$$

$$2\epsilon\beta = \ln \left(\frac{1}{4} \left(N^2 - \frac{E^2}{\epsilon^2}\right)\right)$$

Repitamos el mismo cálculo en el conjunto canónico. La función de partición para el espín simple se obtiene sumando $e^{?\beta H}$ sobre los dos estados de energía posibles. $H = \pm \epsilon$

$$Z_1(T) = \sum e^{-m\beta\epsilon} = 2\frac{e^{\beta\epsilon} + e^{-\beta\epsilon}}{2} = 2\cos\beta\epsilon$$

sabemos que para N partículas es $Z=(Z_1)^N$ Así determinamos la energía libre, la entropía y la energía interna promedio como

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z = kT \ln(2\cosh\beta\epsilon)^N = NkT \ln(2\cos\beta\epsilon)$$

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right) = \frac{\partial}{\partial T} NkT \ln(2\cosh\beta\epsilon) = Nk \ln(2\cosh\beta\epsilon) + NkT \frac{1}{2\cosh\beta\epsilon} (2\sin h\beta\epsilon) \frac{\epsilon}{T}$$

$$S = NK [\ln(2\cosh\beta\epsilon) + \beta\epsilon\tan\beta\epsilon]$$

$$U = F + TS = NkT\beta\epsilon \tan \beta\epsilon = Nk\epsilon \tan \beta\epsilon$$

9. La función de partición canónica para un fluido, cuyas moléculas poseen dos frecuencias características Ω y Ω , viene dada por

$$Q(\Omega) = \frac{1}{(1 - e^{-\beta h\omega})(1 - e^{-\beta h\Omega})}$$

Encuentre la energía interna promedio U, la entropía S y el calor específico C. Finalmente, determine el límite de baja temperatura de la entropía

Solución:

La energía interna, la entropía y el calor específico se pueden escribir como derivados adecuados de la función de división canónica $S(\beta)$. La energía interna es

$$\begin{split} U &= -\frac{\partial \ln Q(\beta)}{\partial \beta} \\ &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \frac{1}{1 - e^{-\beta h \omega}} + \ln \frac{1}{(1 - e^{-\beta h \Omega})} \\ &= \frac{h \omega}{1 - e^{-\beta h \omega}} + \frac{h \Omega}{(1 - e^{-\beta h \Omega})} \end{split}$$

Por definición sabemos

$$\begin{split} S &= \frac{U}{T} + k \ln Q \\ &= \frac{1}{T} \left(\frac{h\omega}{1 - e^{-\beta h\omega}} + \frac{h\Omega}{(1 - e^{-\beta h\Omega})} \right) + k \left(\ln \frac{1}{(1 - e^{-\beta h\omega})} + \ln \frac{1}{(1 - e^{-\beta h\Omega})} \right) \\ &= \frac{1}{T} \left(\frac{h\omega}{1 - e^{-\beta h\omega}} + \frac{h\Omega}{(1 - e^{-\beta h\Omega})} \right) k \left(\ln(1 - e^{-\beta h\omega}) + \ln(1 - e^{-\beta h\Omega}) \right) \end{split}$$

En el límite de bajas temperaturas (β grande) las funciones exponenciales son <<1 y la entropía va a cero exponencialmente. Además, usando la identidad $\frac{d}{dT}=-k\beta^2\frac{d}{d\beta}$ Y definimos el calor especifico como

$$\begin{split} C &= \frac{dU}{dT} \\ &= k\beta^2 \frac{d}{d\beta} \left(\frac{h\omega}{1 - e^{-\beta h\omega}} + \frac{h\Omega}{(1 - e^{-\beta h\Omega})} \right) \\ &= k\beta^2 \left(\frac{h^2 \omega^2 e^{\beta h\omega}}{(1 - e^{\beta h\omega})^2} + \frac{h^2 \Omega^2 e^{\beta h\Omega}}{(1 - e^{\beta h\Omega})^2} \right) \end{split}$$

10. Consideremos un sistema estadístico con N estados, con energías $\epsilon_n = n\epsilon$, $n = 0, \dots N-1$. El sistema está en contacto con un depósito a temperatura T. Determine la probabilidad de que el sistema esté en el estado con energía ϵ_n y verifique el resultado final.

Solución:

La función de partición es

$$Z = \sum_{n=0}^{N-1} e^{-n\beta E}$$

hacemos $e^{-\beta E} = x$

$$Z = \sum_{n=0}^{N-1} x^n = \sum_{n=0}^{\infty} x^n - \sum_{n=0}^{\infty} x^n$$

Observación, tenemos que la serie geométrica es de la forma

$$\underset{n\to\infty}{\lim}\sum_{k=0}^{n}ax^{k}=\underset{n\to\infty}{\lim}\frac{a-ar^{n+1}}{1-r}=\frac{a}{1-r}$$

Entonces la primera suma la podemos escribir como

$$Z = \frac{1}{1-x} - \sum_{n=0}^{\infty} x^n$$

para la segunda suma hacemos n = n' + N, para convertirla en serie geométrica

$$Z = \frac{1}{1-x} - \sum_{n'=0}^{\infty} x^{n'+N} = \frac{1}{1-x} - \sum_{n'=0}^{\infty} x^{n'} x^N = \frac{1}{1-x} - \frac{x^N}{1-x} = \frac{1-x^N}{1-x}$$

regresando a nuestra variable

$$Z = \frac{1 - e^{-N\beta E}}{1 - e^{-\beta E}}$$

La probabilidad asociada con un nivel de energía es

$$P(E_n) = \frac{e^{-\beta E_n}}{\sum_{0}^{N-1} e^{-n\beta E}} = \frac{e^{-\beta E_n}}{\frac{1 - e^{-N\beta E}}{1 - e^{-\beta E}}} = \frac{e^{-\beta E_n} (1 - e^{-\beta E})}{1 - e^{-N\beta E}}$$

Solución:

Tenemos que la función de partición es

$$z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta nE} - \sum_{n=N+1}^{\infty} e^{\beta nE}$$

Realizando el cambio de variable $x = e^{-\beta E}$

$$\sum_{n=0}^{\infty} x^n - \sum_{n=N+1}^{\infty} x^n$$

Para la segunda suma m = 0, n = N + 1 + m, m = n - N - 1, esto se hace para obtener una serie geométrica Observación, tenemos que la serie geométrica es de la forma

$$\underset{n \to \infty}{\lim} \sum_{k=0}^n ax^k = \underset{n \to \infty}{\lim} \frac{a - ar^{n+1}}{1 - r} = \frac{a}{1 - r}$$

Entonces la primera suma la podemos escribir como

$$Z = \frac{1}{1-x} - \sum_{m=0}^{\infty} x^{N+1+m}$$

$$Z = \frac{1}{1-x} - x^{N+1} \sum_{m=0}^{\infty} x^m$$

$$Z = \frac{1}{1-x} - x^{N+1} \frac{1}{1-x} = \frac{1-x^{N+1}}{1-x}$$

$$\langle n \rangle = \sum_{r=0}^{\infty} P_r n = \frac{e^{-\beta n E} n}{\sum e^{-\beta n E}}$$

Nuevamente hacemos $x = e^{-\beta E}$

$$\langle n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n n}{\sum x^n} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{n-1} n}{\sum x^n} = x \frac{d}{dx} \ln \left(\sum x^n \right) = x \ln z$$

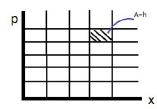
sustituyendo z

$$\langle n \rangle = \frac{(N+1)x}{1-x^N} - \frac{1}{1-x}$$

11. Un modelo simple para un sólido unidimensional consiste en M osciladores independientes, cada uno con energía

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

donde ω es la frecuencia angular



Todos los cuadros tienen la misma área A=h, o bien $\epsilon=\sqrt{h},$ entonces $x_m=m\epsilon=m\sqrt{h}$ y $p_j=j\epsilon=j\epsilon=j\sqrt{h}$?

El estado de una partícula clásica se especifica mediante k = (x, p) y la suma se convierte en integral (consideremos el espacio de faces)

$$Z_{1} = \sum_{i} \sum_{j} e^{-\beta \left[-\frac{p_{j}^{2}}{2m} + \frac{m\omega^{2}}{2} x_{i}^{2} \right]} \approx \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \frac{p_{j}^{2}}{2m}} dp \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \frac{m\omega^{2}}{2} x^{2}} dp$$

usando la integral Gausiana

$$\int e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \qquad a > 0$$

entonces

$$z_1 = \frac{1}{h} \sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta m\omega^2}} = \frac{2\pi}{h\beta\omega}$$

Calculando la energía de un oscilador

$$U = \frac{\partial \ln z_1}{\partial \beta} = \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\ln \frac{2\pi}{h\omega} - \ln \beta \right) = \frac{1}{\beta} = kT$$

Para n-osciladores tenemos

$$z = z_1^N = \left(\frac{2\pi}{h\beta\omega}\right)^N$$

entones la energía es

$$U_{N} = \frac{\partial \ln z}{\partial \beta}$$

$$= \frac{\partial \ln z_{1}^{N}}{\partial \beta}$$

$$= \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{2\pi}{h\beta\omega}\right)^{N}$$

$$= \frac{\partial}{\partial \beta} \left(N \ln \frac{2\pi}{h\omega} - N \ln \beta\right)$$

$$= \frac{N}{\beta} = NkT$$

2. Segundo Parcial

2.1. Gas Clásico

Un gas conociste de moléculas moviéndose libremente y que pueden o no interactuar en un Espacio V El gas ideal (perfecto): es la idealización de un gas donde la energía potencial de interacción entre moléculas es despreciable en comparación a la energía cinética de movimiento Cada molécula del gas puede tener energía E_r

$$E_1 \le E_2 \le E_3 \le \dots \tag{6}$$

Que son estados discretos según la mecánica cuántica

Se puede tener un volumén V que contenga a N moléculas a una T=cte

$$\sum n_r = N \tag{7}$$

son el numero total de moléculas y

$$E(n_1, n_2, n_3 \dots) = \sum_r n_r E_r$$
 (8)

energía total del sistema, para una sola partícula la función de partición es

$$z_1(T,V) = \sum_r e^{-\beta E_r} \tag{9}$$

y para otra partícula

$$z_2(T, V) = \sum_s e^{-\beta E_s} \tag{10}$$

Cuando sean indistinguibles se tiene que quitar la suma doble Para ${\cal N}=2$

$$z_1 z_2 = \sum_r e^{-\beta E_r} \sum_s e^{-\beta E_s} \tag{11}$$

$$= \sum_{r} e^{-2\beta E_r} + \frac{1}{2!} \sum_{r} \sum_{s} e^{-\beta (E_r + E_s)}$$
 (12)

Para N particulas

$$\sum_{r} e^{-N\beta E_r} + \ldots + \frac{1}{N!} \sum_{r_1} \sum_{r_2} \ldots \sum_{r_N} e^{-\beta (E_{r1} + E_{r2} + E_{r3} + \ldots + E_{rN})}$$
(13)

Para un gas ideal se toma que el estado más probable es el que se distribuye la información

$$\frac{1}{N!} \sum_{r_1} \sum_{r_2} \dots \sum_{r_N} e^{-\beta E_{r_1}} e^{-\beta E_{r_1}} \dots e^{-\beta E_{r_N}} = \frac{1}{N!} \left(\sum_r e^{-\beta E_r} \right)^N = \frac{1}{N!} z^N$$
 (14)

El Movimiento de una partícula. La energía Potencial se desprecia, solo se toma la energía cinética, de traslación e interna (rotación, vibración, etc)

$$E_r = E_s^{tr} + E_\alpha^{int} \tag{15}$$

$$z_1 = \sum_r e^{-\beta E_r} = \sum_{\alpha} \sum_s e^{-\beta (E_s^{tr} + E_{\alpha}^{int})} = \sum_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}^{int}} \sum_s e^{-\beta E_s^{tr}} = z_1^{tr} z_1^{int}$$
 (16)

donde z_1^{tr} es la suma sobre todos los estados de traslación y z_1^{int} todos los estados de vibración, rotación etc

$$E^{tr} = \frac{1}{2m}p^2 \qquad P = P_x\hat{i} + P_y\hat{j} + P_z\hat{k}$$

Asi que

$$z_1^{tr} = \sum_s e^{-\beta(P_s^2/2m)}$$

$$z = \int_0^\infty f(p)dp e^{-\beta E_s^{tr}}$$

donde f(p)dp es llamada la densidad de momentos

Sea una onda estacionaria tridimensional

$$\nabla \psi(x,y,z) + k^2 \psi(x,y,z) = 0$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \psi(x,y,z) + k^2 \psi(x,y,z) = 0$$

Proponemos $\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) X(x)Y(y)Z(z) + k^2 X(x)Y(y)Z(z) = 0$$

dividiendo por X(x)Y(y)Z(z) obtenemos

$$\begin{split} \frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2} + k_x^2 X(x) &= 0 \\ \frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2} + k_y^2 X(y) &= 0 \\ \frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2} + k_z^2 X(z) &= 0 \end{split}$$

donde las soluciones son de la forma

$$\psi(w) = A\cos kw + B\sin kw = 0 \qquad \qquad w = x, y, z$$

$$\psi(w=0) = A\underbrace{\cos kw}_{=1} + B \operatorname{sen} kw = 0$$

por lo que A=0

$$\psi(w) = B \operatorname{sen} k w$$

$$\psi(w = L) = A \cos k L + B \operatorname{sen} k L = 0$$

Teniamos que A=0, descartamos B=0 por lo que $kL=n\pi$

$$k_x = \frac{n_x \pi}{L}$$
 $k_y = \frac{n_y \pi}{L}$ $k_z = \frac{n_z \pi}{L}$ $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{\pi^2}{L^2} (n_x^2 n_y^2 + n_z^2)$

la solución es la combinación lineal, resultando

$$\psi(x,y,z) = C \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{L}y\right) \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{L}z\right)$$

Sabemos que \vec{k} se relaciona con \vec{p} , cuantos vectores k existen entre k y k+dk son los mismos de p entre p y p+dp, para obtener esta información se toma una parte esférica entre k y k+dk

$$\int_{k}^{k+dk} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} k^{2} \operatorname{sen} \theta dk d\theta d\phi = 4\pi \int_{k}^{k+dk} k^{2} dk \tag{17}$$

tomamos $dv = 4^2 dk$ volumen entre k y k + dk

$$dv' = \frac{dv}{8} = \frac{4\pi}{8}k^2dk$$

$$f(k)dk = \frac{\frac{1}{8}(4\pi k^2)dk}{\left(\frac{\pi}{L}\right)^3} = \frac{L^3k^2dx}{2\pi^2} = \frac{Vk^2dx}{2\pi^2}$$
(18)

definamos $p = \frac{h}{2\pi}k$

$$f(p)dp = \frac{V}{\hbar^3} 4\pi p^2 dp \tag{19}$$

regresando al problema original

$$z_1^{tr} = \int_0^\infty \frac{4\pi V}{h^3} p^2 dp e^{-\beta p^2/2m}$$

Usando

$$I_n = \int_0^\infty dx x^n e^{-ax^2} \tag{20}$$

con n = 0

$$I_0 = \int_0^\infty dx e^{ax^2} = \int_0^\infty \frac{du}{\sqrt{a}} e^{-u^2} = \frac{1}{2\sqrt{a}} \int_0^\infty du e^{u^2} =$$

Tomamos

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} du e^{u^2}\right)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x^2 + y^2)} dx dy$$

en coordenadas polares

$$\int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{1} e^{-r^{2}} r dr d\theta = 2\pi \int_{0}^{2\pi} e^{-r^{2}} r dr = \pi$$

por lo tanto

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du = \sqrt{\pi}$$

de aqui

$$I_0 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

sabemos

$$\frac{dI_n(a)}{da} = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^n e^{-ax^2} (-x^2)$$

se necesita a

$$I_2(a) = -\frac{dI_0(a)}{da} = \frac{1}{4a}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$z_1^{tr} = \frac{4\pi V}{\hbar^2} \int_0^\infty p^2 e^{-\beta p^2/2m} dp = \frac{4\pi V}{\hbar^3} \frac{1}{4(B/2m)} \sqrt{\frac{\pi}{B/2m}} = V \left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2}$$

(21)

$$z(T, V, N) = \frac{1}{N!} V^N \left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3N/2} [z_{int}(T)]^N$$

Se toma la energía libre de Helmhotz $F=-kT\ln z$ sabemos que $\ln N!=N\ln N-N=N\ln (N/e)=\ln (N/e)^N$

$$F = -kNT \ln \left[V \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} z_{int}(T) \frac{e}{N} \right]$$
$$F = -kNT \ln \left[\frac{Ve}{N} \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} \right] - kTN \ln z_{int}(T)$$

esto es $F = F_{tr} + F_{int}$ sabemos que

$$P = \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_{T,N}$$

$$P = kNT \frac{\frac{e}{N} \left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2}}{\frac{Ve}{N} \left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2}}$$

$$P \approx \frac{kNT}{V} \qquad PV = NKT \leftarrow F = F_{tr} + F_{int}$$

llegamos a la ecuación del gas ideal, Sabemos que la energía esta dada

$$E = -\left(\frac{\partial \ln z}{\partial \beta}\right)_{V,N}$$

pero $E = E_{tr} + E_{int}$

$$E = -\frac{\partial(\ln z_{tr}z_{int})}{\partial\beta} = -\frac{\partial\ln z_{tr}}{\partial\beta} - \frac{\partial z_{int}}{\partial\beta}$$

Por el teorema de la equipartición, por cada grado de libertad, tenemos $\frac{1}{2}kT$, para una molécula tenemos $E_{int} = \frac{3}{2}kT$

$$E = -\frac{\partial \ln z}{\partial \beta} = \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left(\underbrace{\frac{Ve}{N} \left(\frac{2\pi mk}{kh^2} \right)^{3/2}}_{\alpha} \frac{1}{(\beta)^{3/2}} \right)$$
$$E = \frac{3}{2} \frac{\alpha \beta^{-5/2}}{\alpha \beta^{3/2}} = \frac{3}{2} \beta^{-1} = \frac{3}{2} kT$$

La capacidad calorífica es

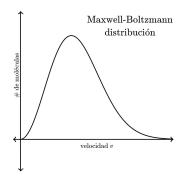
$$C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_v = \frac{3}{2}kN$$

Encontrando la entropia, F = E - TS

$$S = \frac{E - F}{T} = \frac{3}{2}k + kN \ln \left(\frac{Ve}{N} \left(\frac{2\pi mkT}{2}h^2\right)^{3/2}\right) + kN \ln(Z_{int}(T))$$

2.2. velocidades (distribuciones de Maxwell)

La distribución de Maxwell-Boltzmann se representa a menudo con la siguiente gráfica



El eje vertical de la gráfica de Maxwell-Boltzmann puede pensarse como el número de moléculas por unidad de velocidad. Así que, si la gráfica es alta en una región dada, significa que hay más moléculas del gas moviéndose a esas velocidades.

Ahora derivaremos la distribución de velocidad de Maxwell para un gas clásico perfecto, así como algunas distribuciones y consecuencias relacionadas

La probabilidad P_{α} de que una partícula se encuentre en un momento interno α con energía E_{α}

$$P_{\alpha} = \frac{1}{z_{int}} e^{-\beta E_{\alpha}^{int}} \tag{22}$$

Para una traslación podemos tomar a la probabilidad de que una partícula tenga momento P_s

$$P_s = \frac{1}{z_{tr}} e^{-\beta E_s^{tr}} = \frac{1}{z_{tr}} e^{-\beta P_s^2/2m}$$

El numero de moléculas con momento $P_s(E_s)$

$$\bar{n}_s = NP_s \tag{23}$$

$$\bar{n}(p) = \frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi m kT}\right)^{3/2} e^{-p^2/2mkT} \tag{24}$$

La probabilidad de que un gas, una molécula tenga magnitud entre p y p + dp

$$P(p)dp = \frac{f(p)dp\bar{n}_s(p)}{N}$$
 (25)

$$P(p)dp = \frac{4\pi p^2}{2\pi mkT} e^{-p^2/2mkT}$$
 (26)

la probabilidad está normalizada

$$\int_{0}^{\infty} P(p)dp = 1$$

sea p = mv se puede obtener la probabilidad de una molécula que tenga velocidad v y v + dv

$$P(v)dv = \underbrace{4\pi v^2 \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-m\dot{v}^2/2kT}}_{F(v)dv} dv$$

$$\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \left[2ve^{-m\dot{v}^2/2kT} + v^2 \left(\frac{-m2v}{2kT}\right) e^{\frac{-mv^2}{2kT}}\right] = 0$$
(27)

$$\frac{\partial F}{\partial v} = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \left[2ve^{-m\dot{v}^2/2kT} + v^2 \left(\frac{-m2v}{2kT}\right)e^{\frac{-mv^2}{2kT}}\right] = 0$$
$$2v - \frac{v^3m}{kT} = 0 \qquad v_{max} = \sqrt{\frac{2kT}{m}}$$

ahora calculamos

$$\bar{v} = \int vP(v)dv$$

$$\bar{v} = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \int_0^\infty v^3 e^{-mv^2/2kT} dv$$

usando (15) obtenemos

$$I_0 = \frac{1}{2} \left(\frac{a}{2}\right)^{1/2} \qquad I_1 = \frac{1}{2a} \qquad I_2 = \frac{1}{4a} \left(\frac{a}{2}\right)^{1/2} \qquad I_3 = \frac{1}{2a^2} \qquad I_4 = \frac{3}{8a^2} \left(\frac{a}{2}\right)^{1/2}$$

$$I = \frac{1}{2\left(\frac{m}{2kT}\right)^2} = \frac{4k^2T^2}{2m^2} = \frac{2k^2T^2}{m^2}$$

$$v = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \left(\frac{2k^2T^2}{m^2}\right)$$

$$\hat{v} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2kT}\right)^{-1/2} \qquad \hat{v} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} v_{max}$$

La probabilidad de que la partícula tenga energía E y E+dE

$$\begin{split} \bar{E} &= \int_0^\infty EP(E)dE \\ &= \int_0^\infty \frac{2E^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{(kT)^{3/2}} e^{-E/kT} dE \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}(kT)^{3/2}} \int_0^\infty E^{3/2} e^{-E/kT} dE \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}(kT)^{3/2}} \left[-E^{3/2} kT e^{-E/kT} + \int_0^\infty kT e^{-E/kT} \frac{3}{2} E^{1/2} dE \right] \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}(kT)^{3/2}} \left[E^{3/2} kT + \frac{3}{2} kT \int_0^\infty E^{1/2} e^{-E/kT} dE \right] \end{split}$$

sabemos $\Gamma(v+1/2)=\frac{(2x)!}{2^{2v}x!}\sqrt{\pi}$ entonces $E=\frac{2}{\sqrt{\pi}(kT)^{3/2}}$ La energía promedio del sistema es $\bar{E}=\frac{3}{2}NkT$

2.3. Van de Walls

En un gas ideal las moléculas se consideran masas puntuales que interaccionan entre sí mediante colisiones elásticas.

van der Waals introdujo correcciones que tenían en cuenta el volumen finito de las moléculas y las fuerzas atractivas que una molécula ejercía sobre otra a distancias muy cercanas entre ellas.

La ecuación de estado para gases y líquidos, la cual está basada en una modificación de la ley de los gases ideales para que se aproxime de manera más precisa al comportamiento de los gases reales al tener en cuenta su tamaño no nulo y la atracción entre sus partículas.

$$P(v)d^{3}v = d^{3}v \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} exp\left(\frac{-mv^{2}}{2kT}\right)$$

$$= dV_{x}dV_{y}dV_{z} \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} exp\left(\frac{-mv_{x}^{2}}{2kT}\right) exp\left(\frac{-mv_{y}^{2}}{2kT}\right) exp\left(\frac{-mv_{z}^{2}}{2kT}\right)$$

$$= P(V_{x})P(V_{y})P(V_{z})dV_{x}dV_{y}dV_{z}$$

$$(28)$$

tenemos que $V^2 = V_x^2 + V_y^2 + V_z^2$ y $dV = dV_x dV_y dV_z$

$$P(V_x)dV_x = dV_x \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{1/2} exp\left(\frac{-mv_x^2}{2kT}\right)$$

 $v_x^2=v_y^2=v_z^2=\frac{1}{3}v^2$ la función de partición de un gas ideal

$$z_p = \frac{1}{N!} \left(\int_0^\infty \frac{V4^2 dp}{\hbar^3} exp\left(\frac{-\beta p^2}{2m}\right) \right)^N [z_{int}(T)]^N$$

sea $4\pi p^2 dp \rightarrow d^3 p \ v \rightarrow d^3 r$

$$z_p = \frac{1}{N!} \left(\iiint \frac{d^3r d^3p}{\hbar} exp\left(\frac{-\beta|p|^2}{2m}\right) \right)^N [z_{int}(T)]^N$$

Para N partículas tenemos (r_N, P_N)

$$z_{P} = \frac{1}{N!} \int \frac{d^{3}r_{1}d^{3}r_{2} \dots d^{3}r_{n}d^{3}p_{1}d^{3}p_{2} \dots d^{3}p_{n}}{\hbar^{3N}} exp\left(\frac{-\beta}{2m} \left(p_{1}^{2} + p_{2}^{2} + \dots p_{n}^{2}\right)\right) \left[z_{int}(T)\right]^{N}$$

- $\frac{1}{h^{3N}} dr_1^3 dr_2^3 \dots dr_N^3 d^3 p_1 d^3 p_2 \dots d^3 p_n = \frac{d^3 r_1 d^3 p_1}{\hbar} \frac{d^3 r_2 d^3 p_2}{\hbar} \dots \text{ Numero de estados de cada partícula en un volumen con un cierto momento de volumen}$
- $\frac{1}{N!}$ No son localizadas las partículas
- $exp(\beta k)$ es el factor de Boltzman asociado a la traslación

 $k=k(p_1,p_2\dots p_N)$ para un sistema donde se tomen en cuenta información entre partículas en general $k'=k'(p_1,p_2\dots p_N,r_1,r_2\dots r_N)$ en particular $H=k(p_1,p_2\dots p_N)+U(r_1,r_2\dots r_N)$

$$z_{P} = \frac{1}{N!} \int \frac{d^{3}r_{1}d^{3}r_{2} \dots d^{3}r_{N}d^{3}p_{1}d^{3}p_{2} \dots d^{3}p_{N}}{\hbar^{3N}} exp(-\beta H) [z_{int}(T)]^{N}$$

$$z_{P} = \left[\frac{1}{N!} \int \frac{V^{N}d^{3}p_{1}d^{3}p_{2} \dots d^{3}p_{n}}{\hbar^{3N}} exp(-\beta H) [z_{int}(T)]^{N} \right] \left[\int \frac{d^{3}r_{1}d^{3}r_{2} \dots d^{3}r_{3}}{V^{N}} exp(-\beta U) \right]$$

$$z_{p} = z_{p-ideal} \left[\frac{1}{V_{N}} \int d^{3}r_{1}, d^{3}r_{2}, \dots d^{3}r_{N} exp(-\beta U) \right]$$

Asumiendo que una energía U, es el potencial intermolecular entre pares, $r_{ij} = |r_i - r_j|$, $U_{ij} = U(r_{ij})$, sea la multiplicación definida como

$$\prod_{k=1}^{N} a_k = a_1 a_2 a_3 \dots a_N$$

entonces

$$exp[-\sum U_{ij}\beta] = exp[\sum_{k=1}^{N} a_k] = exp[a_1 + \dots a_N] = exp(a_1)exp(a_2)\dots exp(a_N) = \prod_{k=1}^{N} exp(a_k)$$

$$Q_N = \frac{1}{V^N} \int d^3r_1 \dots d^3r_N \prod exp(-\beta U_{ij})$$

se observa que el producto tendrá $n = \frac{1}{2}N(N-1)$ términos sea propuesto lo siguiente $\lambda_{ij} = exp(-\beta U_{ij}) - 1 \Rightarrow exp(-\beta U_{ij}) = (1 + \lambda_{ij})$

$$\prod (1 + \lambda_{ij}) = (1 + \lambda_{12})(1 + \lambda_{13}) \dots (1 + \lambda_{N-1,N}) = 1 + \lambda_{12} + \lambda_{13}$$

$$Q_N = \frac{1}{V^N} \int d^3 r_1 \dots d^3 r_N \left[1 + \sum_{i < j, k < l} \lambda_{ij} \lambda_{kl} + \sum_{i < j, k < l} \lambda_{ij} \lambda_{kl} + \sum_{i < j, k < l} \lambda_{ij} \lambda_{kl} \lambda_{op} \right]$$

a baja densidad tenemos términos de λ_{ij}

$$Q_N \approx \frac{1}{V^N} \int d^3 r_1 \dots d^3 r_N = \frac{V^N}{V^N} = 1$$

para el termino de $\sum_{i < j}$ tenemos términos indistinguibles por lo que podemos tomar a (1,2)

$$\begin{split} \frac{N(N-1)}{2V^N} \int \! d^3r_1 \dots d^3r_N(\lambda_{12}) &= \frac{N(N-1)}{2V^N} \int \! d^3r_3 d^3r_4 \dots d^3r_N \int \int d^3r_1 d^3r_2 [\lambda_{12}] \\ &= \frac{N(N-1)}{2V^N} V^{n-2} \int \! d^3r_1 d^3r_2 \left[\exp\left(-\beta U_{12}\right) - 1 \right] \\ &\approx \frac{N^2}{2V^2} \int \! d^3r_1 d^3r_2 \left[\exp\left(-\beta U_{12}\right) - 1 \right] \end{split}$$

supongamos que $U = U(|r_1 - r_2|)$, sea $r = r_1 - r_2 = (r_1 - r_2)i + (r_1 - r_2)j + (r_1 - r_2)k$, $R = \frac{1}{2}(r_1 + r_2) = r_x i + R_y j + R_z k$, se tiene

$$r_1 = \frac{r_2 + 2R}{R}$$
 $r_2 = \frac{-r_1 + 2R}{R}$

$$\int d^3r_1 d^3r_2 = \int J d^3 d^3R = \int dr_{1x} dr_{1y} dr_{2x} dr_{2y} dr_{2z}$$

donde J

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial r_1}{\partial r} & \frac{\partial r_1}{\partial R} \\ \frac{\partial r_2}{\partial r} & \frac{\partial r_2}{\partial R} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1/2 & 1 \\ -1/2 & 1 \end{vmatrix} = 1$$

$$\frac{N^2}{2V^2} \int d^3r \left[exp \left(-\beta U_{12} \right) - 1 \right] = \frac{N^2}{2V} I_2$$

$$Q_N \approx \left[1 + \frac{N^2}{2V} I_2\right]$$

sabemos $Z_T = Z_{p-Ideal}Q_N$ y $P = -\frac{\partial F}{\partial V}$ se tiene $F = -kT\ln z$

$$P = kT \frac{\partial \ln z}{\partial V}$$

$$\ln z = \ln(z_{p-ideal}) + \ln Q_N$$

de la expansión $(a+x)^N = a^n + na^{n-1} + \frac{n(n-1)a^{n-1}}{2!} + \dots$, si a = 1 y $x = \frac{NI_2}{2V}$

$$\left(1 + \frac{NI_2}{2V}\right) \approx 1 + N\left(\frac{NI_2}{2V}\right) + \frac{N(N-1)}{2!}\left(\frac{NI_2}{2V}\right)^2 + \dots$$

$$\ln z \approx \ln z_{p-ideal} + \ln \left(1 + \frac{NI_2}{2V} \right)^N$$

$$F \approx F_{p-ideal} - kTN \ln \left(1 + \frac{NI_2}{2V} \right)$$

suponiendo que $\frac{NI_2}{2V} << 1$ tenemos que $\ln(1+x) \approx x$ para x << 1

$$F \approx F_{p-ideal} - kTN\left(\frac{NI_2}{2V}\right)$$

ya que $\frac{\partial F}{\partial V} = -P$ entonces

$$P = \frac{NkT}{V} \left(1 - \frac{N}{2V} I_2 \right)$$

se tiene que

$$I_2 = \int d^3r \left[\left(exp \left(-\beta U \right) - 1 \right] \propto v_0$$

$$\frac{NI_2}{2V} \approx \frac{N}{2} \frac{V_0}{V} <<<1$$
 Se tiene que la expansión del virial es

$$P = \frac{NkT}{V} \left(1 + \frac{N}{V}B(T) + \left(\frac{N}{V}\right)^2 C(T) + \dots \right)$$

para este problema en particular

$$P \approx \frac{NkT}{V} \left(1 - \frac{N}{2V} I_2 \right)$$

Por comparación

$$B(T) = -\frac{1}{2}I_2 = \frac{1}{2}\int d^3r [1 - exp(-\beta U(r))]$$

$$= \frac{1}{2}\int_0^{2r_0} d^3r + \frac{1}{2}\int_{2r_0}^{\infty} d^3r e^{-\beta U(r)}$$

$$= \frac{4\pi}{2}\int_0^{2r_0} r^2 dr + \frac{4\pi}{2}\int_{2r_0}^{\infty} r^2 dr e^{-\beta U(r)}$$

$$= \frac{2\pi}{3}(2r_0)^3 + 2\pi\int_{2r_0}^{\infty} r^2 dr \left[1 - \left[1 - \beta U(r) + \frac{\beta^2 U^2(r)}{2!}\right]\right]$$

conforme aumentar r, U disminuye

$$-\frac{2\pi}{3}(2r_{-}0)^3 = 4V_0$$

$$B(T) = 4V_0 + \frac{2\pi}{kT} \int_{2r_0}^{\infty} dr U(r)$$

sea $b = 4V_0$ y $a = -2\pi \int_{2r_0}^{\infty} r^2 U(r) dr$ En el teorema Virial a primer orden

$$B = b - \frac{a}{kT}$$

$$P = \frac{NkT}{V} \left(1 + \frac{N}{V} \left(b - \frac{a}{kT} \right) \right)$$

$$P + \frac{N^2}{V^2} a = \frac{NkT}{V} \left(1 + \frac{N}{V} b \right)$$

Notemos que si b << 1, entonces $\left(1 + \frac{N}{V}b\right) \to \left(1 - \frac{N}{V}b\right)^{-1}$ a primer Orden

$$\left(P + \frac{N^2}{V^2}a\right)\left(1 - \frac{N}{V}b\right) = \frac{NkT}{V}$$

esta es la ecuación de Vander Waals

2.4. Equipartición de la energía

En el equilibrio térmico, la energía se reparte en partes iguales, es decir la equipartición da los valores promedio de los componentes individuales de la energía, tal como la energía cinética de una partícula específica o la energía potencial de un resorte aislado. el teorema predice que cuando se aplican a cada molécula en un gas ideal la teoria cinética y la mecánica estadística, ambas conducen que en equilibrio térmico, la energía por partícula asociada a cada grado de libertad es (3/2)kT

La Probabilidad de que un sistema en equilibrio térmico a temperatura T se encuentre en un intervalo $q_i, q_i + dq_i$ y $p_i, p_i + dp_i$ con $i = 1, 2 \dots \nu$

$$p(q,p) = \frac{exp(-\beta H)}{\int exp(\beta H) dq_1 \dots dq_{\nu}}$$

$$P(q,p) = dq_1 \dots dq_{\nu} dp_1 \dots dp_{\nu} = \frac{exp(-\beta H)dq_1 \dots dq_{\nu} dp_1 \dots dp_{\nu}}{\int exp(-\beta H)dq_1 \dots dq_{\nu} dp_1 \dots dp_{\nu}}$$

Definimos al hamiltoneano como $H = A\xi^2 + H'$ donde ξ es una coordenada del sistema ya sea de posición o de momentos, y H' es una función que no depende de ξ

$$\frac{exp\left[-\beta\left(A\xi^{2}+H'\right)\right]dq_{1}\dots dq_{\nu}dp_{1}\dots dp_{\nu}}{\int exp\left[-\beta\left(A\xi^{2}+H'\right)\right]dq_{1}\dots dq_{\nu}dp_{1}\dots dp_{\nu}}$$

$$Pd\xi pdqdp_{\nu} = Pd\xi dq_{1}\dots dp_{\nu} = \frac{exp\left(-A\xi^{2}\beta\right)exp(-\beta H)dq_{1}\dots dp_{\nu}}{\int exp\left(-A\xi^{2}\beta\right)d\xi\int exp(-\beta H)dq_{1}\dots dp_{\nu}}$$

$$P(\xi)d\xi = \frac{exp\left(-A\xi^{2}\beta\right)}{\int exp(-A\xi^{2}\beta)d\xi}$$

queremos saber $\overline{\xi^2}$

$$\overline{A\xi^2} = \int A\xi^2 P(\xi) d\xi$$

$$= \frac{\int A\xi^2 exp(-\beta A\xi^2) d\xi}{\int exp(-\beta A\xi^2) d\xi}$$

$$= \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \int exp(-\beta A\xi^2) d\xi$$

Proponemos $t = \xi \sqrt{\beta}$ entonces $dt = \sqrt{\beta} d\xi$

$$\overline{A\xi^2} = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln \left[\beta^{-1/2} \int exp(-At^2) dt \right]$$

$$= -\frac{\partial}{\partial\beta} \left[\ln \beta^{-1/2} + \ln \int exp(-At^2) dt \right]$$

$$= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial\beta} \ln \beta$$

$$= \frac{1}{2\beta} = \frac{1}{2} kT$$

Para cada coordenada o momento cuadratico se tiene $\frac{1}{2}kT,\!$ esto se suma al sistema

2.5. Problemas

• n independientes y distinguibles partículas se mueven en una dimensión, entre un segmento entre q=0 y q=L determine la ecuación de estado si el gas se encuentra a un potencial $U=-\alpha \ln \left(\frac{q}{L_0}\right), \, \alpha>0$ y $L_0=cte$

Solución:

$$z_1 = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta H} dq dp$$

$$H = \frac{1}{2} m v^2 + V = \frac{p^2}{2m} - \alpha \ln\left(\frac{q}{L}\right)$$

$$z_1 = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta(p^2/2m)} dp \int_{0}^{L} e^{\alpha\beta \ln(q/L_0)} dq$$

Sabemos que

$$I_0 = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} = 2 \int_{0}^{\infty} dx e^{-ax^2}$$

$$z_{1} = \frac{1}{h} 2 \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{1/2} \int_{0}^{L} exp\left(\ln\left(\frac{q}{L_{0}}\right)^{\alpha\beta}\right) dq$$

$$= \frac{1}{h} 2 \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{1/2} \int_{0}^{L} \left(\frac{q}{L_{0}}\right)^{\alpha/\beta} dq$$

$$= \frac{1}{h} 2 \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{1/2} \left[\left(\frac{q}{L_{0}}\right)^{\alpha\beta+1} \frac{1}{\alpha\beta+1}\right]_{0}^{L}$$

$$z_{1} = \frac{2}{h} \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{1/2} \left(\frac{L}{L_{0}}\right)^{\alpha\beta+1} \frac{1}{\alpha\beta+1}$$

pero $z = z_1^N$

$$F = -kT \ln z_N = -kT \ln z_1$$

sabemos que

$$P = -\frac{\partial F}{\partial L} = kTN \frac{\partial \ln z_1}{\partial L} = kTN \frac{\partial}{\partial L} \left[\ln \left(\frac{L}{L_0} \right)^{\alpha\beta + 1} + \ln \left(\frac{1}{h} 2 \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{1/2} \frac{1}{\alpha\beta + 1} \right) \right]$$
$$P = kTN(\alpha\beta + 1) \frac{1}{L_0} \frac{L_0}{L} = kTN \frac{1}{L} \left(1 + \frac{\alpha}{kT} \right)$$

si $\alpha \to 0$

$$P = \frac{NkT}{L}$$

Sea un gas confinado en una región bidimensional de N partículas no interactuando entre ellas en un baño térmico a una temperatura T. las partículas se encuentran bajo la acción de un potencial $U = \frac{1}{2}m\omega^2[a(x^2+y^2)+2bxy],\ m,\omega,b,\ a$ son constantes y $a>0,\ a^2>b^2$. Obtener la capacidad calorífica y sus consecuencias

Solución:

Tenemos un gas ideal con partículas distinguibles y el hamiltoneano es

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}m\omega[a(x^2 + y^2) + 2bxy]$$

al ser ideal podemos sacar un z_1 y después z_1^N se cumple la misma condición para todas las partículas

$$z_1 = \frac{1}{h} \int e^{-\beta H} dx dy dp_x dp_y$$

$$z_1 = \frac{1}{h} \iint_{-\infty}^{\infty} exp \left[-\beta \left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} \right) \right] dx dy dp_x dp_y$$

El problema no dice que haya limitantes por eso va de $(-\infty, \infty)$

$$z_1 = \frac{1}{h} \iint_{-\infty}^{\infty} exp \left[-\beta \left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} \right) \right] dp_x dp_y \iint_{-\infty}^{\infty} exp \left[\frac{-\beta}{2} m\omega^2 (a(x^2 + xy) + 2bxy) \right] dxdy$$

De la primera integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} exp\left(\frac{-\beta}{2m}p_x^2\right) dp_x \int_{-\infty}^{\infty} exp\left(\frac{-\beta}{2m}p_y^2\right) dp_y = \frac{2\pi m}{\beta}$$

De la segunda integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{-\beta am\omega y^2}{2}\right] dy \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{-\beta (ax^2+2bxy)}{2}\right] dx$$

$$z_{1} = \frac{2m\pi}{\beta h^{2}} \left(\frac{2\pi}{\beta m\omega^{2}a}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} exp\left[\frac{-\beta am\omega^{2}y^{2}}{2} + \frac{b^{2}y^{2}\beta m\omega^{2}}{2}\right]$$

$$= \frac{2m\pi}{\beta h^{2}} \left(\frac{2\pi}{\beta m\omega^{2}a}\right)^{2} \int_{-\infty}^{\infty} exp\left(\frac{-y^{2}}{2}\frac{\beta m\omega^{2}}{a}[-a^{2} + b^{2}]\right) dy$$

$$= \frac{2m\pi}{\beta h^{2}} \left(\frac{2\pi}{\beta m\omega^{2}a}\right)^{1/2} \left(\frac{2\pi a}{\beta m\omega^{2}(b^{2} - a^{2})}\right)^{1/2}$$

$$z_N = \left(\frac{4\pi^2}{\beta^2 \hbar^2 \omega^2 (b^2 - a^2)^{1/2}}\right)$$

Sabemos que
$$U=-rac{\partial \ln(Z_1^N)}{\partial \beta}=-Nrac{\partial \ln Z_1}{\partial \beta}$$

$$U = 2N\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\beta = \frac{2N}{\beta} = 2NkT$$

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = 2Nk$$

 \blacksquare Considerar un gas Ultrarelativista en un volumen V de partículas indistinguibles de masa despreciable, Obtener la entropia, y la ecuación de estado

Solución:

Tenemos que el hamitoneano Relativista es

$$H = \sqrt{c^2 p^2 + c^4 m^2}$$

y el ultrarelativista es H = cp

$$z_T = \frac{z_1^N}{N!} = \frac{1}{h^3} \int_{-\infty}^{\infty} d^3q \int_{-\infty}^{\infty} exp(-\beta cp) d^3p$$

$$z_T = \frac{1}{h^3} \iiint_{-\infty}^{\infty} dx dy dz \iiint_{\infty} dp_x dp_y dp_z exp(-\beta cp)$$

en coordenadas esféricas tenemos

$$z_1 = \frac{V}{h^3} \iiint p^2 \sin \theta d\theta d\phi dp exp(-\beta cp)$$
$$z_1 = \frac{4\pi V}{h^3} \int_0^\infty exp(-\beta cp) p^2 dp = \frac{4\pi V}{h^3} \frac{\Gamma(3)}{(\beta c)^3}$$

nota
$$\int_0^\infty e^{-at} t^{x-1} dt = \frac{\Gamma(x)}{a^x}$$
 donde $x > 0$ quedando

$$z_1 = \frac{1}{N!} \left(\frac{4\pi V}{h^3} \right)^N \frac{\Gamma(3)}{(c\beta)^3}$$

Calculando la presión

$$P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)$$

$$= -\left(\frac{\partial (-kT \ln z_1)}{\partial V}\right)$$

$$= -kT\frac{\partial}{\partial V} \ln \left[\frac{1}{N!} \left(\frac{4\pi V}{h^3}\right)^N \frac{\Gamma(3)}{(c\beta)^3}\right]$$

$$= -kT\frac{\partial}{\partial V} \ln V^N - kT\frac{\partial}{\partial V} \ln \left[\frac{1}{N!} \left(\frac{4\pi}{h^3}\right)^N \frac{\Gamma(3)}{(c\beta)^3}\right]$$

$$= -kNT\frac{\partial}{\partial V} \ln V$$

$$= \frac{kNT}{V}$$

2.6. Gas Perfecto Cuántico

Consideremos un gas de no-interacción entre partículas idénticas, con estados discretos para una partícula $1, 2, 3, \ldots r, \ldots$ y energía $\epsilon_1 < \epsilon_2 < \ldots < \epsilon_r < \ldots$

Tendremos un conjunto de números de ocupación $n_1, n_2, \dots n_r$

 n_r es el numero de partículas en el estado r

Para mecánica cuántica existen dos posibilidades o situaciones para ocupar los n_r dado que sus partículas se dividen en dos clases, según su spín

El primer tipo no es restrictivo con respecto al numero de ocupación n_r es decir

$$n_r = 1, 2, 3, \dots \quad \forall r$$

Bosones: Partículas con spín entero (fotones, mesones, etc). esto engloba la estadística de Bose-Einstein El otro es el conjunto de Partículas en el que el numero de ocupación es restrictivo por el principio de Pauli (estadística de Fermi-Dirac), los fermiones tienen spín semientero 0 y 1

2.7. Función de Partición

Para un sistema de N partículas que no interactuan con los n_r números de ocupación. La energía es

$$E = \sum_{r} n_r E_r = E_{n_1} + E_{n_2} + \dots$$

sabemos

$$n_r = 0, 1$$
 para Fermi-Dirac
$$n_r = 1, 2, \dots$$
 para bose-Einstein

$$\sum_{r} n_r = N$$

La suma sobre todos los estados

$$Z(T, V, N) = \sum_{n_r} exp\left(-\beta \sum_r n_r E_r\right)$$
$$= \sum_{n_1, n_2, \dots} exp\left[-\beta \left(n_1 E_1 + n_2 E_2 + \dots\right)\right]$$

$$\bar{n}_{entran} = \bar{n}_{salen}$$

o se generan $N_{fotones} = cte$

2.8. Cuerpo Negro

Consideremos fotones no interactuando uno con otro, por lo que tenemos un gas ideal de fotones

El proceso por el cual se produce equilibrio térmico entre la relación de una cavidad y el entorno, es la energía emitida de forma continua y su absorción de fotones por los átomos de las paredes Por ser fotones $n_r = 1, 2, 3...$

$$Z_{pn}(T,V) = \sum_{n_1}^{\infty} \sum_{n_2}^{\infty} \sum_{n_3}^{\infty} \dots exp \left[-\beta \left(n_1 E_1 + n_2 E_2 + \dots \right) \right]$$
$$= \sum_{n_1}^{\infty} exp \left(-\beta n_1 E_1 \right) \sum_{n_2}^{\infty} exp \left(-\beta n_1 E_1 \right) \dots$$

sabemos que $\sum_{n=0}^{\infty} exp(-\beta n_1 \varepsilon_1) = \sum_{n=0}^{\infty} exp(an_1)$ cuando a < 0, exp(ar) > 0, Se tiene la serie geométrica

$$\sum_{n_1=0}^{\infty} exp(a_1n_1) = \frac{1}{1 - exp(a_1)} = \sum_{n_1=0}^{\infty} x^{n_1} = \frac{1}{1 - x}$$

$$\sum_{n_1=0}^{\infty} exp(-\beta n_1 E_1) = \frac{1}{1 - exp(-\beta E_1)}$$

$$-\beta E_1 < 0 \Rightarrow \beta E_1 > 0 \Rightarrow \frac{E_1}{kT} > 0$$

en escala kelvin $T \leq 0$ lo mismo pasa para cualquier n_r por lo tanto las energías deben ser positivas

$$z_{pn} = \frac{1}{1 - exp(-\beta E_1)} \cdot \frac{1}{1 - exp(-\beta E_2)} \cdot \frac{1}{1 - exp(-\beta E_3)} \dots$$
$$z_{pn} = \prod_{r=1}^{\infty} \frac{1}{1 - exp(-\beta E_r)}$$

nos interesa saber \bar{n}

$$\ln z_{pn}(T,V) = \ln \left(\prod_{n=1}^{\infty} \frac{1}{1 - exp(-\beta E_r)} \right) = -\sum_{r=1}^{\infty} \ln \left[1 - exp(-\beta E_r) \right]$$
sabemos $\bar{n}_l = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial E_1} \ln z_{pn}$

$$\bar{n}_l = \frac{1}{exp(-\beta E_r) - 1}$$

donde \bar{n}_l es el numero de fotones en el nivel de energía E_i , Sabemos que el fotón tiene una frecuencia ν y energía $E = \hbar \nu$ y momento $p = \hbar \omega/c$

El numero de estados para un fotón en un volumen V con momento (p, p + dp)

Los fotones pueden estar en dos diferentes estados de polarización

$$f(p)dp = \frac{4\pi V}{h^3}p^2dp$$

$$f(\omega) = \frac{4\pi V (\hbar \omega/c)^2 \hbar^2 d\omega}{\hbar^3 c}$$

Los fotones pueden existir en dos estados diferentes

$$f(\omega)d\omega = \frac{V\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^2}$$

$$dN_{\omega} = \frac{V}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^2 d\omega}{\exp(-\beta \hbar \omega) - 1}$$

Numero de fotones con frecuencia entre $\omega, \omega + d\omega$

$$dE_{\omega} = \frac{\hbar V}{\pi c^3} \frac{\omega^3 d\omega}{exp(-\beta\hbar\omega) - 1} \qquad E, E + dE$$

Entonces el numero de fotones por unidad de volumen es

$$U(\omega, T) = \frac{\hbar \omega^3 d\omega}{\pi^2 c^3 [exp(-\beta \hbar \omega) - 1]}$$

Ley de radiación de Max Plank, donde U es la densidad de energía por unidad de volumen

Sabemos que $\ln z_{pn}(T, V) = -i = 1^n \ln (1 - exp(-\beta E_i))$ se tiene que

$$f(\omega)d\omega = \frac{V\omega^2}{\pi^2c^3}d\omega$$

El numero de fotones es muy grande

$$\ln z_{pn} = -\int \frac{V\omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega (1 - exp(-\beta\hbar\omega))$$

se tiene $F_{pn} = -kT \ln z_{pn}$

$$F = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{VkT\omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega (1 - exp(-\beta\hbar\omega))$$

sea $x = \beta \hbar \omega$ y $dx = \beta \hbar d\omega$

$$F = \frac{VkT}{\pi^2 c^2} \int_0^\infty \frac{x^2}{\hbar^2 \beta^2} \frac{dx}{\hbar \beta} \ln[1 - exp(-x)]$$

$$= \frac{Vk^4 T^4}{\pi^2 c^2 \hbar^3} \int_0^\infty x^2 dx \ln[1 - exp(-x)]$$

$$= \underbrace{\frac{k^4}{\pi^2 c^2 \hbar^3} \int_0^\infty x^2 dx \ln[1 - exp(-x)]}_{=2} \underbrace{\frac{VT^4}{3}}_{=2}$$

$$F = -\frac{a}{3}VT^4$$

La entropia es

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V = \frac{4}{3}aVT^3$$

La presión es

$$P = \left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = \frac{1}{3}aT^4$$

La energía es

$$E = F + TS = -\frac{aVT^4}{3} + \frac{4aVT^4}{3} = aVT^4 = U(\omega)$$

entonces la presión en terminos de $u(\omega)$

$$P = \frac{1}{3}u(T)$$

2.8.1. Concepto de cuerpo negro

Se ha descrito un cuerpo negro como una cavidad que admite la entrada de luz por un único orificio de entrada, pero no deja salir nada de esta luz original,

Max Planck explicó que cualquier onda solo podía emitirse en cantidades discretas y que cada cuanto poseía una energía que dependía de su frecuencia, y como la frecuencia no puede ser infinita, su energía tendría que estar limitada y la radiación sería emitida de manera finita, por lo cual, el cuerpo emisor perdería energía.

2.9. ejemplos

Considérese un sistema de dos partículas idénticas, cada una de las cuales puede ocupar uno de tres posibles niveles, cuyas energías son $0,\varepsilon$ y 2ε . El nivel más bajo de energía tiene una degeneración doble. El sistema se encuentra en equilibrio térmico a la temperatura T. Con ayuda de un diagrama, enumera las distintas posibles configuraciones y calcula la función de partición y la energía media si las partículas obedecen la estadística de (a) Maxwell-Boltzmann, (b) Fermi-Dirac, (c) Bose-Einstein.

Hay 2 partículas (N=2) y por tanto 4 estados de partículas, (2 de ellos están degenerados: $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$):

$$\begin{cases} \varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0 \\ \varepsilon_3 = \varepsilon \\ \varepsilon_4 = 2\varepsilon \end{cases}$$

Solución:

(a) En este caso de descripción clásica, las partículas, aunque iguales, se consideran identificables. Las representaremos por ello como A y B. Tendremos entonces los siguientes posibles estados del sistema: (r es el estado cuántico de una partícula, R el estado cuántico del sistema completo y ε_r

es la energía de la partícula en el estado r)

R\r	1	2	3	4
	0	0	ε	2ε
1	Α	В	0	0
2	Α	0	В	0
3	Α	0	0	В
4	0	Α	В	0
5	0	Α	0	В
6	0	0	А	В
В	В	Α	0	0
8	В	0	Α	0
9	В	0	0	Α
10	0	В	Α	0
11	0	В	0	Α
12	0	0	В	Α
13	AB	0	0	0
14	0	AB	0	0
15	0	0	AB	0
16	0	0	0	AB

Así pues, vemos que el número total de configuraciones posibles es $4^2 = 16$, (hay 16 estados). **Función de partición:** En el colectivo canónico, para la estadística de Maxwell-Boltzmann, la función de partición de un gas ideal viene dada por la expresión:

$$Z_N = \frac{\xi^N}{N!} \tag{29}$$

donde ξ es la función de partición de una partícula:

$$\xi = \sum_{r} e^{-\beta \varepsilon_r} \tag{30}$$

Luego:

$$Z_{N} = \frac{1}{2} \left(\sum_{r} e^{-\beta \varepsilon_{r}} \right)^{2}$$

$$= \frac{1}{2} (e^{-\beta \varepsilon_{1}} + e^{-\beta \varepsilon_{2}} + e^{-\beta \varepsilon_{3}} + e^{-\beta \varepsilon_{4}})^{2}$$

$$= \frac{1}{2} (e^{-\beta 0} + e^{-\beta 0} + e^{-\beta \varepsilon} + e^{-\beta 2\varepsilon})^{2}$$

$$= \frac{1}{2} (2 + e^{-\beta \varepsilon} + e^{-\beta 2\varepsilon})^{2}$$

$$= \frac{1}{2} [4 + (e^{-\beta \varepsilon} + e^{-2\beta \varepsilon})^{2} + 4(e^{-\beta \varepsilon} + e^{-2\beta \varepsilon})]$$

$$= \frac{1}{2} [4 + e^{-2\beta \varepsilon} + e^{-4\beta \varepsilon} + 2e^{-\beta \varepsilon} e^{-2\beta \varepsilon} + 4e^{-\beta \varepsilon} + e^{-4\beta \varepsilon}]$$

$$= \frac{1}{2} [4 + 4e^{-\beta \varepsilon} + 5e^{-2\beta \varepsilon} + 2e^{-3\beta \varepsilon} + e^{-4\beta \varepsilon}]$$

En la expresión anterior queda patente que tendremos: 4 estados con energía 0, 4 estados con energía ε , 5 estados con energía 2ε , 2 estados con energía 3ε y un estado con energía 4ε , por lo tanto 16 estados posibles.

Energía Media

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta}$$
 (31)

se sigue

$$\langle E \rangle = \frac{\varepsilon}{2Z} (4e^{-\beta\varepsilon} + 10e^{-2\beta\varepsilon} + 6e^{-3\beta\varepsilon} + 4e^{-4\beta\varepsilon})$$

$$\langle E \rangle = \frac{4e^{-\beta\varepsilon} + 10e^{-2\beta\varepsilon} + 6e^{-3\beta\varepsilon} + 4e^{-4\beta\varepsilon}}{4 + 4e^{-\beta\varepsilon} + 5e^{-2\beta\varepsilon} + 2e^{-3\beta\varepsilon} + e^{-4\beta\varepsilon}}$$

b) Estadística de Bose-Einstein

En cuanto se considera la descripción cuántica, (las partículas son ahora bosones), las partículas dejan de ser identificables, para ser partículas idénticas, indistinguibles, A = B, por lo que representaremos a ambas partículas por A. Teniendo en cuenta que para $\varepsilon = 0$, g = 2, tendremos entonces los siguientes posibles estados del sistema:

R\r	1	2	3	4
	0	0	ε	2 ε
1	AA	0	0	0
2	0	AA	0	0
3	0	0	AA	0
4	0	0	0	AA
5	Α	Α	0	0
6	А	0	А	0
В	Α	0	0	Α
8	0	А	0	Α
9	0	0	Α	Α
10	0	А	А	0

Función de partición:

$$Z = \sum_{R} e^{-\beta \varepsilon_R} \tag{32}$$

$$\begin{array}{ll} Z & = & e^{-2\beta\cdot0} + e^{-2\beta\cdot0} + e^{-2\beta\varepsilon} + e^{-4\beta\varepsilon} + e^{-\beta(0+0)} + e^{-\beta(0+\varepsilon)} + e^{-\beta(0+2\varepsilon)} + e^{-\beta(\varepsilon+2\varepsilon)} + e^{-\beta(0+\varepsilon)} \\ & = & 3 + 2e^{-\beta\varepsilon} + 3e^{-2\beta\varepsilon} + e^{-4\beta\varepsilon} \end{array}$$

sabemos que la energía Media esta dada por (36)

$$\langle E \rangle = \frac{\varepsilon}{2} \left(2e^{-\beta\varepsilon} + 6e^{-2\beta\varepsilon} + 4e^{-4\beta\varepsilon} \right)$$

$$\langle E \rangle = \frac{\varepsilon}{2} \frac{2e^{-\beta\varepsilon} + 6e^{-2\beta\varepsilon} + 4e^{-4\beta\varepsilon}}{3 + 2e^{-\beta\varepsilon} + 3e^{-2\beta\varepsilon} + e^{-4\beta\varepsilon}}$$

c) Estadística de Fermi-Dirac:

Ahora, además de considerarse partículas indistinguibles, (las partículas son fermiones), sucede que no puede haber más de una partícula en un mismo estado (principio de exclusión de Pauli), por lo que descartaremos los casos en los que las dos partículas estén juntas. Resulta entonces que para el sistema sólo son posibles los siguientes estados:

R\r	1	2	3	4
	0	0	ε	2 ε
1	Α	Α	0	0
2	Α	0	А	0
3	Α	0	0	Α
4	0	А	Α	0
5	0	Α	0	Α
6	0	0	А	Α

$$z = \sum_{R} e^{-\beta\varepsilon_{r}}$$

$$= e^{-\beta(0+0)} + e^{-\beta(0+2\varepsilon)} + e^{-\beta(0+\varepsilon)} + e^{-\beta(\varepsilon+2\varepsilon)} + e^{-\beta(0+2\varepsilon)}$$

$$= 1 + 2e^{-\beta\varepsilon} + 2e^{-2\beta\varepsilon} + e^{-3\beta\varepsilon}$$

Energía Media

$$\begin{split} \langle E \rangle &= -\frac{1}{z} \frac{\partial z}{\partial \beta} \\ \langle E \rangle &= \frac{\varepsilon (2e^{-\beta\varepsilon} + 4e^{-2\beta\varepsilon} + 3e^{-3\varepsilon}}{1 + 2e^{-\beta\varepsilon} + 2e^{-2\beta\varepsilon} + e^{-3\beta\varepsilon}} \end{split}$$

2.10. Estadistica de Fermi

La función de partición esta determinada por

$$z_{F} = \int_{n_{1}=0}^{\infty} \int_{n_{2}=0}^{\infty} \dots exp \left[-\beta \left(n_{1}E_{1} + n_{2}E_{2} + \dots \right) \right]$$

$$= \int_{n_{1}=0}^{\infty} exp(-\beta n_{1}E_{1}) \int_{n_{2}=0}^{\infty} exp(-\beta n_{2}E_{2}) \dots$$

$$= \left[1 - exp(-\beta E_{1}) \right] \left[1 - exp(-\beta E_{2}) \right] \dots$$

$$= \prod_{i=1}^{\infty} \left[1 + ex(\beta E_{i}) \right]$$

por otra parte

$$\begin{split} \bar{n}_i &= -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial E_i} \ln z_i \\ &= -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial E_j} \sum_{i=1}^{\infty} [1 + exp(-\beta E_i)] \\ &= -\frac{1}{\beta} \frac{(-\beta) exp(-\beta E_i)}{(1 + exp(-\beta E_i))} \\ &= \frac{1}{exp(\beta E_i) + 1} \to \mathrm{FD} \\ &= \frac{1}{exp(\beta E_i) - 1} \to \mathrm{BE} \end{split}$$

2.11. Problemas

1. Un gas de N partículas indistinguibles que no interaccionan se coloca en un volumen V y está en equilibrio térmico a la temperatura T. El Hamiltoniano de la partícula individual se puede escribir como

$$H = ap^b = a(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{b/2} a, b > 0 (33)$$

donde p es el valor absoluto del momento (p_x, p_y, p_z) sus componentes. Calcule la energía interna promedio U, la presión P y el potencial químico μ . Finalmente, verifica el límite

$$a = \frac{1}{2m} \qquad b = 2$$

con m una constante con dimensiones físicas de una masa.

Solución:

Las partículas no interactúan y, por lo tanto, la función de partición total Q_N es el producto de las funciones de partición de las partículas individuales.

$$Q_N(T, V, N) = \frac{Q_1^N(T, V)}{N!}$$

donde N! tiene en cuenta la indistinguibilidad de las partículas. Para Q_1 , podemos escribir la integral en el espacio de fase, de la siguiente manera

$$\begin{array}{rcl} Q_1(T,V) & = & \displaystyle \iint \frac{d^3qd^3p}{\hbar^3}e^{-\beta H} \\ \text{Sustituyendo } H \\ & = & \displaystyle \iint \frac{d^3qd^3p}{\hbar^3}e^{-\beta ap^b} \end{array}$$

Pasando a coordenadas esféricas

$$Q_1(T,V) = \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} p^2 \operatorname{sen}^2 \phi d\theta d\phi dp e^{-\beta a p^b}$$

Para la integral en el espacio de momento, hemos utilizado coordenadas polares esféricas e integradas en todo el ángulo sólido 4π .

$$ds = r^2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} = 4\pi r^2$$

$$Q_1(T,V) = \frac{4\pi}{h^3} \int_0^\infty p^2 e^{-\beta a p^b} dp$$

Hacemos un cambio de variable $x = \beta a p^b$ entonces

$$p = \left(\frac{x}{\beta a}\right)^{1/b} \qquad \frac{dp}{dx} = \frac{1}{b} \left(\frac{x}{\beta a}\right)^{1/b-1} \frac{1}{\beta a} = \frac{1}{\beta a b} \left(\frac{x}{\beta a}\right)^{\frac{1-b}{b}}$$

$$Q_1(T, V) = \frac{4\pi}{b h^3} \left(\frac{x}{\beta a}\right)^{3/b} \int_0^\infty x^{\frac{3-x}{x}} e^{-x} dx = \frac{4\pi}{b h^3} \left(\frac{x}{\beta a}\right)^{3/b} \int_0^\infty x^{\frac{3}{x}-1} e^{-x} dx$$

Usamos la siguiente definición de la función Gamma

$$\int_{0}^{\infty} x^{\gamma - 1} e^{-x} dx = \Gamma(\gamma)$$

en este caso $\gamma = \frac{3}{x}$, por lo tanto la integral es

$$Q_1(T,V) = \frac{4\pi V}{bh^3} \left(\frac{x}{\beta a}\right)^{3/b} \Gamma\left(\frac{3}{x}\right)$$

Ahora queremos saber la energía interna

$$U = -\frac{\partial \ln Q_N}{\partial \beta}$$

pero $Q_N = NQ_1$

$$U = -N \frac{\partial \ln Q_1}{\partial \beta}$$

$$= -N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left[\frac{4\pi V}{bh^3} \left(\frac{x}{\beta a} \right)^{3/b} \Gamma \left(\frac{3}{x} \right) \right]$$

$$= -N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left(\frac{x}{\beta a} \right)^{3/b} - N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left(\frac{4\pi V}{bh^3} \Gamma \left(\frac{3}{x} \right) \right)$$

$$= -N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left(\frac{1}{\beta} \right)^{3/b} - N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left(\frac{x}{a} \right)^{3/b}$$

$$= -N \left(\frac{3}{b} \right) \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left(\frac{1}{\beta} \right)$$

$$= -N \left(\frac{3}{b} \right) \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left(\frac{1}{\beta} \right)$$

$$= N \left(\frac{3}{b} \right) \frac{1}{\beta}$$

$$= \frac{3NkT}{b}$$

Calculamos la Presión

$$P = \frac{N}{\beta} \left(\frac{\partial \ln Q_1}{\partial V} \right)_T$$

$$= \frac{N}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} \ln \left[\frac{4\pi V}{bh^3} \left(\frac{x}{\beta a} \right)^{3/b} \Gamma \left(\frac{3}{x} \right) \right]$$

$$= \frac{N}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} \ln V + \frac{N}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} \ln \left[\frac{4\pi}{bh^3} \left(\frac{x}{\beta a} \right)^{3/b} \Gamma \left(\frac{3}{x} \right) \right]$$

$$= \frac{N}{\beta V}$$

$$= \frac{NkT}{V}$$

Finalmente sabemos que el potencial químico se calcula como

$$\mu = -\frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial Q_N}{\partial N} \right)_{T,V}$$

Usado la aproximación de Stirling, obtenemos

$$\begin{split} \mu &= -\frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial N \ln Q_1 - N \ln N + N)}{\partial N} \right)_{T,V} \\ &= -\frac{1}{\beta} \left[\ln Q_1 - \ln N - \frac{N}{N} + 1 \right] \\ &= \frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{N}{Q_1} \right) \\ &= \frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{Nbh^3 (a\beta)^{/b}}{4\pi V \Gamma(3/b)} \right) \end{split}$$

Observemos que cuando a=1/2m y b=2 obtenemos, como se esperaba, los resultados para un gas

clásico ideal con Hamiltoniano

$$H = \frac{p^2}{2m}$$

2. Siendo un gas ideal de bosones de spin 0 con un espectro continuo en la energía, pruebe la relación presión-energía.

$$PV = -\frac{\alpha}{3}U\tag{34}$$

Siendo U la energía, y considerando que la energía por partícula es $\varepsilon = p^{\alpha}$ con $\alpha > 0$.

Nota: Considerar que $PV = kT \ln \mathcal{L}$

Solución:

El siguiente número de ocupación describe un gas cuántico genérico.

$$\langle n_{\varepsilon} \rangle = \frac{1}{z^{-1} exp\left[\frac{\varepsilon}{kT}\right] + a} = \frac{1}{1 + azexp\left[-\frac{\varepsilon}{kT}\right]}$$
 (35)

con $a=\pm 1$ donde: a=-1 significa Bose-Einstein y a=1 significa Fermi-Dirac). De la ecuación del Gas ideal

$$\frac{PV}{kT} = \ln \mathcal{N} \tag{36}$$

$$= \frac{gV}{a} \int_0^\infty \ln\left[1 + azexp\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right)\right] \frac{4\pi p^2 dp}{h^3}$$
 (37)

$$= \frac{4\pi gV}{ah^3} \int_0^\infty \ln\left[1 + azexp\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right)\right] p^2 dp \tag{38}$$

Donde $\mathcal{N} = \mathcal{N}(T, V, z)$ es la gran función de partición canónica y g la degeneración de espín. El término límite en la expresión para PV/kT es igual a cero y encontramos

integrado por partes, sea $u=\ln\left[1+azexp\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right)\right], \qquad du=\frac{1}{1+azexp\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right)}\left[azexp\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right)\right]\frac{-1}{kT}\frac{d\varepsilon}{dp}dp$ $y\ dv=p^2dp \qquad v=\frac{p^3}{3}$

$$\frac{PV}{kT} = \frac{4\pi gV}{ah^3} \left[\frac{p^3}{3} \ln \left[1 + azexp \left(-\frac{\varepsilon}{kT} \right) \right]_0^{\infty} + \int_0^{\infty} \frac{p^3}{3} \frac{azexp \left(-\frac{\varepsilon}{kT} \right)}{1 + azexp \left(-\frac{\varepsilon}{kT} \right)} \frac{1}{kT} \frac{d\varepsilon}{dp} dp \right]$$
(39)

$$\frac{PV}{\cancel{kT}} = \frac{4\pi gV}{\cancel{q}h^3} \int_0^\infty \frac{p^3}{3} \frac{\cancel{q}zexp\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right)}{1 + azexp\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right)} \frac{1}{\cancel{kT}} \frac{d\varepsilon}{dp} dp \tag{40}$$

multiplicamos por $\frac{z^{-1}exp\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right)}{z^{-1}exp\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right)}=1$

$$PV = \frac{4\pi gV}{h^3} \int_0^\infty \frac{p^3}{3} \frac{1}{z^{-1} exp\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right) + a} \frac{d\varepsilon}{dp} dp$$
 (41)

$$P \mathscr{Y} = \frac{4\pi g \mathscr{Y}}{3h^3} \int_0^\infty \frac{1}{z^{-1} exp\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right) + a} \left(p \frac{d\varepsilon}{dp}\right) p^2 dp \tag{42}$$

Usando que $\varepsilon=p^{\alpha}$ entonces $\frac{d\varepsilon}{dp}=\alpha p^{\alpha-1}$

$$P = \frac{4\pi g}{3h^3} \int_0^\infty \frac{1}{z^{-1} exp\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right) + a} \left(p\alpha p^{\alpha - 1}\right) p^2 dp \tag{43}$$

$$= \frac{4\pi g\alpha}{3h^3} \int_0^\infty \frac{1}{z^{-1} exp\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right) + a} p^{\alpha} p^2 dp \tag{44}$$

Por otra parte tenemos que U es

$$U = \sum \langle n_{\varepsilon} \rangle E_{\varepsilon} = \frac{4\pi g V}{h^3} \int_0^{\infty} \frac{1}{z^{-1} exp\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right) + a} \varepsilon p^2 dp$$
 (45)

regresamos a la ecuación (11) Multiplicamos V/V=1

$$P = \frac{\alpha}{3V} \underbrace{\frac{4\pi gV}{h^3} \int_0^\infty \frac{1}{z^{-1} exp\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right) + a} p^{\alpha} p^2 dp}_{=U}$$

$$(46)$$

$$P = \frac{\alpha U}{3V} \tag{47}$$

$$PV = \frac{\alpha}{3}U \tag{48}$$

3. Tercer parcial

3.1. Sistema de partículas variables

3.2. Distribución de Gibbs

En un sistema microcanonico (aislado), se toma un sistema aislado con (E, V, N) constantes. La descripción del sistema se encuentra en términos del peso estadístico $\Omega(E, V, N)$, con potencial termodinámico

$$S = k \ln \Omega \tag{49}$$

Para un sistema cononico (baño térmico) a temperatura constante la estadística y la descripción termodinámica se obtiene de Z(T, V, N) con el potencial termodinámico

$$F = -kT \ln Z \tag{50}$$

Ahora se considera un sistema **Gran canónico** en un volumen constante en un baño calorífico con temperatura constante, con la diferencia que el numero de partículas puede variar $(N \neq cte)$ Para medir la variación se introduce el potencial químico μ

Se va a tomar una función de partición $Z(T,V,\mu)$ y se propone el gran potencial termodinámico

$$\Omega - kTZ(T, V, \mu) \tag{51}$$

donde Z es llamada probabilidad de distribución ó distribución de Gibbs , Para su estudio se considera un sistema en un baño térmico aislado, el baño más el sistema, contienen N_0 partículas en un volumen V_0 con energía E_0

$$E_0 = E_s + E_{ba\tilde{n}o}$$

$$N_0 = N_s + N_{ba\tilde{n}o}$$

$$V_0 = V_s + V_{ba\tilde{n}o}$$

Fijamos el volumén del sistema con un numero de partículas N=1,2,3... (Variables). en un cierto estado r puede estar N partículas, al hablar de estados, nos referimos a los estados que puede tomar el sistema. Los estados los podemos acomodar de la siguiente forma

$$E_{N_1} \le E_{N_2} \le E_{N_2} \le \dots \le E_{N_n} \le \dots \tag{52}$$

Donde E_{N_r} es la energía del estado r de N partículas del sistema Si el sistema se encuentra en el estado N_r entonces el baño tiene energía $E_0 - E_{N_r}$ y tiene $N_0 - N$ partículas así como $V - V_0$ volumen

El paso estadístico de dicho macroestado del baño térmico es descrito por

$$\Omega_2(E_0 - E_{N_r}, V_0 - V, N_0 - N) \tag{53}$$

La probabilidad P_{N_r} de encontrar el sistema en el estado N_r

$$P_{N_r} = cte \,\Omega_2 \tag{54}$$

de 49

$$P_{N_r} = cte \, exp \left[\frac{S(E_0 - E_{N_r}, V_0 - V, N_0 - N)}{k} \right]$$
 (55)

Como el sistema es pequeño en comparación al baño térmico, se puede realizar una expansión en un punto fijo

$$S_2 \approx \left\{ s_2 - \frac{\partial s_2}{\partial V_0} V \right\} - \frac{\partial s_2}{\partial E_0} - \frac{\partial s_2}{\partial E_0} E_{N_r} - \frac{\partial s_2}{\partial N_0} N_r + \dots$$
 (56)

sabemos que $\frac{1}{T}=\frac{\partial s_2}{\partial E_0}$ y $\mu=-T\frac{\partial S_2}{\partial N_0}$

En el caso del gran canónico decimos que en el baño y el sistema se encuentra en equilibrio si tienen el mismo potencial químico μ en otras palabras ya no intercambian partículas

$$S_2(E_0 - E_{N_r}, V_0 - V, N_0 - N) \approx \left\{ s_2 - \frac{\partial s_2}{\partial V_0} V \right\} - \frac{E_{N_r}}{T} + \frac{\mu N}{T}$$
 (57)

$$exp\left[S_2(E_0 - E_{N_r}, V_0 - V, N_0 - N)\right] \approx exp\left[\frac{s_2 - \frac{\partial s_2}{\partial V_0}V}{k}\right] exp\left[-\frac{E_{N_r}}{T} + \frac{\mu N}{T}\right]$$
(58)

entonces

$$P_{N_T} = cte \exp[\beta(\mu N - E_{N_r})] \tag{59}$$

dado que $\exp\left[\frac{s_2-\frac{\partial s_2}{\partial V_0}V}{k}\right]=cte$ por que ya se encuentra evaluada, La probabilidad normalizada es

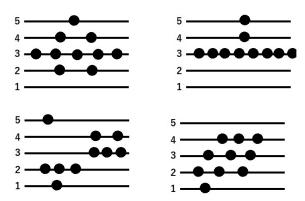
$$P_{N_T} = \frac{exp[\beta(\mu N - E_{N_r})]}{z} \tag{60}$$

como $P_{N_T} = 1$ entonces

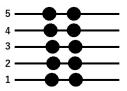
$$z = \sum_{N_r} exp[\beta(\mu N - E_{N_r})] = \sum_{r} \sum_{N} exp[\beta(\mu N - E_{N_r})]$$
 (61)

(Numero de N partículas variables en cada estado r)

Supongamos un sistema de 5 niveles de y 10 partículas, cada nivel nos permite contener las 10 partículas, enfocándonos en el nivel 3 algunas posibles combinaciones son:



Es Fácil notar que el numero de partículas para el nivel 3 es variable y en especial para todos los niveles podemos tomar el nivel 3 como el sistema y los otros niveles como el baño el caso deel equilibro térmico es



Cada nivel tiene el mismo potencial químico

Recordar que el potencial químico representa de forma simple es decir a la aglomeración de partículas

3.3. Gran Canónico y Estadísticas cuánticas

Para las estadística cuántica, el estado de un gas es especificado o descrito por el numero de ocupación $n_1, n_2, \dots n_i$ y los niveles que cada partícula puede tener es decir $\varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \dots \leq \varepsilon_3 \leq \dots \leq \varepsilon_r \leq \dots$, tenemos

$$N_i = \sum_i n_i \tag{62}$$

El numero total de partículas y

$$E_{N_r} = \sum_{i} n_i \varepsilon_i \tag{63}$$

Energía del r-estado con N partículas, Recordar que las partículas pueden variar en el sistema Tomando el gran canónico

$$Z = \sum_{n_1, n_2, \dots} exp \left[\beta \mu(n_1 + n_2 + n_3 \dots) - \beta(n_1 \varepsilon_1 + n_2 \varepsilon_2 + \dots) \right]$$

$$(64)$$

Ahora tenemos numero de ocupación para la estadística cuántica

$$n_i = 1, 2$$
 Fermiones

$$n_i = 1, 2, 3, ...$$
 Bosones

La probabilidad de encontrar n_1 partículas en el estado 1, n_2 partículas en el estado 2 etc.

$$P_{N_r} = \frac{exp\left[\beta\mu(n_1 + n_2 + n_3...) - \beta(n_1\varepsilon_1 + n_2\varepsilon_2 + ...)\right]}{\gamma}$$
(65)

podemos dividir la exponencial de la siguiente forma

$$exp(\beta\mu N - \beta E_{N_n}) = exp(\beta(\mu - \varepsilon_1)n_1)exp(\beta(\mu - \varepsilon_2)n_2)\dots$$

Entonces

$$z = \underbrace{\sum_{n_1} exp(\beta(\mu - \varepsilon_1)n_1)}_{z_1} \underbrace{\sum_{n_2} exp(\beta(\mu - \varepsilon_2)n_2)}_{z_2} \underbrace{\sum_{n_3} exp(\beta(\mu - \varepsilon_3)n_3)}_{z_1} \dots$$
(66)

a cada exponencial la nombramos como

$$z_i = \sum_i exp(\beta(\mu - \varepsilon_i)n_i)$$

entonces

$$z = \prod_{i=1}^{\infty} z_i \tag{67}$$

$$P_{N_i} = \frac{exp[\beta(\mu - \varepsilon_1)n_1]exp[\beta(\mu - \varepsilon_2)n_2]exp[\beta(\mu - \varepsilon_3)n_3]\dots}{\prod_{i=1}^{\infty} \sum exp[\beta(\mu - \varepsilon_i)n_i]}$$
(68)

$$P = \frac{exp[\beta(\mu - \varepsilon_1)n_1]}{\sum exp[\beta(\mu - \varepsilon_1)n_1]} \frac{exp[\beta(\mu - \varepsilon_2)n_2]}{\sum exp[\beta(\mu - \varepsilon_2)n_2]} \dots$$
 (69)

por las propiedades de la probabilidad

$$P(n_1, n_2, \ldots) = \prod_{n=1}^{\infty} P_i(n_i)$$
 (70)

sustituyendo en 65

$$P_{i} = \frac{exp\left(\beta(\mu - \varepsilon_{i})n_{i}\right)}{Z_{i}} \tag{71}$$

La probabilidad de encontrar n_i partículas en el estado i es independiente del numero de ocupación $n_j, i \neq j$ pues se acaba de demostrar 70. por lo que $\prod_{n=1}^{\infty} P_i(n_i) = 1$ esto implica

$$\sum_{n_1, n_2, n_3} P(n_1, n_2, n_3 \dots) = \sum_{n_1, n_2, n_3} \prod_{i=1}^{\infty} p_i(n_i) = \sum_{n_1} p_1(n_1) \sum_{n_2} p_2(n_2) \dots = 1$$
 (72)

Nota: se están considerando partículas interactuando, Ahora para Fermi-Dirac $n_i = 1, 2$

$$Z_{i} = \sum_{n_{i}} exp[\beta(\mu - \varepsilon_{i})n_{i}] = 1 + exp[\beta(\mu - \varepsilon_{i})]$$
(73)

Para Bose-Einstein $n_i = 1, 2, 3 \dots$

$$Z_i = \sum_{n_i} exp[\beta(\mu - \varepsilon_i)n_i]$$
 (74)

En este caso se considera $\mu \leq \varepsilon_i$ para tener una serie geométrica

$$z_i = \frac{1}{1 - \exp[\beta(\mu - \varepsilon_i)]} \tag{75}$$

En forma compacta

$$z_i = [1 \pm \exp[\beta(\mu - \varepsilon_i)]^{\pm} \tag{76}$$

Donde + Fermi-Dirac y - Bose-Einstein

Sabemos que el numero de ocupación se obtiene de

$$\bar{n}_i = \sum_{n_i} n_i p_i(n_i) = kTkT \left(\frac{\partial z_i}{\partial \mu} \right)$$
 (77)

$$\bar{n}_i = \frac{exp[\beta(\mu - \varepsilon_i)]}{1 \pm exp[\beta(\mu - \varepsilon_i)]} = \frac{1}{exp[\beta(\varepsilon_i - \mu)] \pm 1}$$
(78)

Tomando ahora las fluctuaciones de los números de ocupación n_i de un estado de una partícula

$$\bar{n}_i = \sum_{n_i} n_i p_i(n_i) \tag{79}$$

$$\bar{n}_i = \sum_{n_i} \frac{n_i exp[\beta(\mu - \varepsilon_i)n_i]}{z_i}$$
(80)

Tomando la derivada de \bar{n}_i con respecto a μ

$$\left(\frac{\partial \bar{n}_i}{\partial \mu}\right)_{T,V} = \sum_{n_i} \left(\frac{\partial p_i(n_i)}{\partial \mu}\right) n_i$$
(81)

reescribiendo la expresión

$$\left(\frac{\partial \bar{n}_i}{\partial \mu}\right)_{T,V} = \sum_{n_i} P_i(n_i) \left(\frac{\partial \ln p_i(n_i)}{\partial \mu}\right)_{T,V} n_i \tag{82}$$

Derivando esta ecuación obtenemos la anterior

Por otra parte

$$P_i(n_i) = \frac{exp[\beta(\mu - \varepsilon_i)n_i]}{z_i}$$
(83)

$$\ln P_i(n_i) = \beta(\mu - \varepsilon_i)n_i - \ln z_i \tag{84}$$

derivando

$$\frac{\partial P_i(n_i)}{\partial \mu} = \beta n_i - \left(\frac{\partial \ln z_i}{\partial \mu}\right)_{TV} \tag{85}$$

sustituyendo en 77

$$\frac{\partial P_i(n_i)}{\partial \mu} = \beta(n_i - \bar{n}_i) \tag{86}$$

Sustituyendo 82 en 86 Obtenemos

$$\left(\frac{\partial \bar{n}_i}{\partial \mu}\right) = \sum_{n_i} P_i(n_i) \beta(n_i - \bar{n}_i) n_i$$

$$= \beta \sum_{n_i} P_i n_i^2 - \beta \sum_{n_i} P_i \bar{n}_i$$

$$= \beta \overline{n_i^2} - \beta \bar{n}_i^2$$

Obtenemos $(\Delta n_i)^2$

$$(\Delta n_i)^2 = \overline{n_i^2} - \bar{n}_i^2$$

$$(\Delta n_i)^2 = kT \left(\frac{\partial \bar{n}_i}{\partial \mu} \right) \tag{87}$$

Para un gas de Fermi-Dirac o Bose-Einstein, la Fluctuación del numero de partículas por estado, de 78 Podemos ver

$$(\Delta n_i)^2 = \bar{n}_i (1 \pm \bar{n}_i) \tag{88}$$

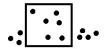
Si $n_i \ll 1$

$$(\Delta n_i)^2 = \bar{n}_i \tag{89}$$

Ahora si tomamos un grupo G de estados con energía que se encuentre entre

$$\Delta E << kT$$

 $\bar{N} = G\bar{n}$ (numero de partículas en el grupo) $(\Delta N)^2 = G(\Delta n)^2 \approx G\bar{n} \approx \bar{N}$ Supongamos que no hay intercambio de Bose



$$(\Delta n_i)^2 = \bar{n}_i$$

si tomamos un grupo de estados con energía $\Delta E << kT$ tenemos $\bar{N}=G\bar{n}$, donde \bar{n} es el numero de partículas, G (Grupo) y \bar{N} Número de partículas en el grupo

$$\begin{array}{rcl} (\Delta N)^2 & = & (\Delta N)^2 \\ & = & G\bar{n}(1\mp\bar{n}) = \bar{N}\mp\bar{N}/G) \\ & \approx & \bar{N} \end{array}$$

nota $(\Delta n_i)^2 = \bar{n}_i (1 \mp \bar{n}_i) = \bar{n}_i^2$. $\tilde{n} = e^{\beta(\mu - \varepsilon_i)}$

3.4. Ecuación De Estado

Para obtener una ecuación de estado para el gran canónico tomamos de partida la siguiente ecuación

$$S = k \sum_{N_r} P_{N_r} \ln P_{N_r} \tag{90}$$

y Como

$$P_{N_r} = \frac{exp[\beta(\mu N - E_{N_r})]}{z} \tag{91}$$

Sustituyendo en 90

$$S = -k \sum_{i} P_{N_r} \beta(\mu N - E_{N_r}) + k \sum_{i} P_{N_r} \ln Z$$
 (92)

$$= -k\beta\mu\sum_{i}P_{N_r}N - k\beta\sum_{i}P_{N_r}E_{N_r} + k\ln Z\sum_{i}P_{N_r}$$
(93)

(94)

$$\bar{N} = \sum_{i} P_{N_r} N$$
 $\bar{E} = \sum_{i} P_{N_r} E_{N_r}$ $\sum_{i} P_{N_r} = 1$

$$S = -k\beta\mu\bar{N} + k\beta\bar{E} + k\ln Z \tag{95}$$

$$S = \frac{\bar{E}\,\mu\bar{N}}{T} + k\ln Z\tag{96}$$

Por otra parte $\Omega(T,V,\mu) = -kT \ln Z$ Por lo que tomando 96 obtenemos

$$\Omega = \bar{E} - TS - \mu \bar{N} \tag{97}$$

recordando $F = \bar{E} - TS$

$$\Omega = F - \mu \bar{N} \tag{98}$$

de Termodinamica sabemos que

$$dE = Tds - pdV + \mu dN \tag{99}$$

$$dF = -SdT - pdV + \mu dN \tag{100}$$

$$dG = -SdT + Vdp + \mu dN \tag{101}$$

y se puede definir al potencial químico como

$$\mu = -T \left(\frac{\partial S}{\partial N} \right)_{E,V} = \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V} = \left(\frac{\partial G}{\partial N} \right)_{T,V}$$
 (102)

G es la energía libre de Gibbs, se puede tomar

$$G(T, P, N) = \mu N \tag{103}$$

La energía libre de Gibbs es extensiva y cumple

$$\lambda G(T, P, N) = G(T, P, N)$$

Diferenciando respecto a λ

$$\begin{split} \frac{\partial}{\partial \lambda} \lambda G(T,P,N) &= \frac{\partial}{\partial \lambda} G(T,P,N) \\ G(T,P,N) &= \frac{\partial}{\partial \lambda N} G(T,P,N) \frac{\partial \lambda N}{\partial \lambda} \\ G(T,P,N) &= N \frac{\partial}{\partial \lambda N} G(T,P,N) \end{split}$$

Tomando ahora $\lambda = 1$

$$G(T, P, N) = N \frac{\partial}{\partial N} G(T, P, N)$$

sustituyendo en 102

$$\mu = \frac{G}{N} \tag{104}$$

Sustituyendo en 98

$$\Omega = E - TS - G \tag{105}$$

Y si G = E + pV - TS

$$\Omega = E - TS - E - pV + TS = -pV \tag{106}$$

diferenciando

$$\Omega = dE - TdS - SdT - \mu dN - Nd\mu$$

Sustituyendo $dE = Tds - pdV + \mu dN$

$$\Omega = -SdT - pdV - Nd\mu$$

Obteniendo las siguientes relaciones

$$S = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right)_{\mu T} \qquad P = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial V}\right)_{\mu T} \qquad N = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_{TV}$$

Dado que $\Omega(T, V, \mu)$

3.5. Gas Perfecto

Para obtener la ecuación de estado del gas perfecto, tomemos la función de partición del gran canonico $\mathcal Z$ de la siguiente forma

$$\mathscr{Z}(T, V, \mu) = \sum_{N} e^{\beta \mu N} Z(T, V, N)$$
(107)

donde $Z=\sum_r e^{-\beta E_r}$ que es la función canónica, Recordando que la función de partición es para una sola partícula $Z_1(T,V,N)$

$$Z(T, V, N) = \frac{[Z_1(T, V, N)]^N}{N!}$$
(108)

Sustituyendo en 107

$$\mathscr{Z}(T, V, \mu) = \sum_{N} e^{\beta \mu N} \frac{[Z_1(T, V, N)]^N}{N!}$$
(109)

$$\mathscr{Z}(T, V, \mu) = \sum_{N} [e^{\beta \mu} Z_1(T, V, N)]^N \frac{1}{N!}$$
 (110)

Recordando $\sum \frac{x^n}{n!} = e^x$

$$\mathscr{Z}(T,V,N) = \exp[e^{\beta\mu}Z_1(T,V,N)] \tag{111}$$

recordamos que $\Omega = -pV = -kT \ln \mathscr{Z}$

$$\Omega = kT \ln \exp[e^{\beta\mu} Z_1(T, V, N)]
= -kT e^{\beta\mu} Z_1(T, V, N)
-PV = -kT e^{\beta\mu} Z_1(T, V, N)
\frac{PV}{kT} = kT e^{\beta\mu} Z_1(T, V, N)$$

De las relaciones de Ω utilizamos

$$N = \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{T,V} = e^{\beta \mu} Z_1(t,V)$$

Sustituyendo N

$$PV = nkT (112)$$

Nos determina que en el caso de un gas ideal que intercambia partículas, la ecuación de estado se sigue cumpliendo

3.6. Condensado de Bose-Einstein

Para está estadística tenemos que la función de partición es

$$Z = \prod_{k} = \frac{1}{1 - ze^{-\beta\varepsilon_k}} \qquad z = e^{\beta\mu} \tag{113}$$

Y el potencial canónico se toma como

$$\Omega = -kT \ln Z = kT \sum_{k} \ln(1 - ze^{-\beta \varepsilon_k})$$
(114)

y el número de partículas es

$$N = \sum_{k} \bar{n}_k = \sum_{k} \frac{1}{z^{-1} e^{-\beta \varepsilon_k} - 1}$$

• Es posible analizar el nivel mínimo ($\varepsilon_k = 0$)

$$N_{\varepsilon_k=0}=\frac{1}{e^{-\beta\mu}-1} \quad T\to 0 \quad e^{-\beta\mu}\to \exp(\mu/kT\to 0$$

$$N_{\varepsilon_k=0}=-1$$

$$\quad \blacksquare \ \mu \leq 0, \, 0 \leq z \leq 0$$

$$N = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1} = cte = \frac{1}{z^{-1} - 1} = \frac{1}{\frac{1}{z} - 1} = cte$$

Para un caso continuo sabemos que se toma

$$\sum_{k} \to \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int \epsilon^{1/2} d\varepsilon \cdot g(s)$$

Donde g = 2s + 1 por ser bosones tomamos s = 0 por simplicidad

Si definimos a $f(\varepsilon) = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \epsilon^{1/2}$

$$\sum_{k} \to \int f(\varepsilon) d\varepsilon$$

El valor de N se considera como

$$\bar{N} = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int \frac{\varepsilon^{1/2}}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon$$
 (115)

Ahora en un limite $\varepsilon=0$ ó bien tomar $\varepsilon_k=0$ el nivel mínimo $f(\varepsilon)\to 0,\, N=0$ de la ecuación 115

Lo anterior no muestra la física de un estado base con ε_0 , dado que el estado base puede tener desde 1 hasta N partículas

Para poder realizar el conteo dividimos la información es decir tomamos a

$$\Omega_0 = kT \ln(1-z) \qquad N_0 = \frac{z}{1-z}$$

Representan el numero de partículas y el potencial en el estado base

$$\Omega_{\varepsilon} = kT \int f(\varepsilon) \ln(1 - ze^{-\beta \varepsilon}) d\varepsilon = \frac{4\pi V}{3h} (2m)^{3/2} \int_{0}^{\infty} \frac{\varepsilon^{3/2}}{z^{-1}e^{\beta \varepsilon}} d\varepsilon$$
$$N_{\varepsilon} = \int_{0}^{\infty} f(\varepsilon) \frac{1}{z^{-1}e^{\beta \varepsilon}} d\varepsilon$$

 Ω_ε y N_ε miden el número de partículas en los estados excitados, Combinando obtenemos

$$N = N_{\varepsilon} + N_0$$
 $\Omega = \Omega_{\varepsilon} + \Omega_0$

Podemos tomar el siguiente cambio de variable

$$x = \beta \varepsilon \qquad dx = \beta d\varepsilon$$

$$\lambda = \left(\frac{h^2}{2\pi mkT}\right)^{1/2} \tag{116}$$

Realizando cálculos llegamos

$$\Omega = -\frac{4V}{3\beta\sqrt{\pi}\lambda^3} \int \frac{x^{3/2}}{z^{-1}e^x - 1} dx + \frac{1}{\beta} \ln(1 - z)$$
(117)

у

$$N = \frac{2V}{\sqrt{\pi}\lambda^3} \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{z^{-1}e^x - 1} dx + \frac{z}{1 - z}$$
 (118)

Observando lo anterior, es posible definir la función de Bose-Einstein

$$g_r(z) = \frac{1}{\Gamma(r)} \int_0^\infty \frac{x^{r-1}}{z^{-1}e^x - 1} dx \qquad \forall 0 \le z \le 1r \in R$$
 (119)

Antes de continuar vamos a considerar que en el nivel más bajo con energía $\varepsilon_k = 0$ tendremos

$$\mu \leq 0 \qquad \quad 0 \leq z \leq 1$$

con el fin de que N = cte.

Nota. Los efectos cuánticos en la estadística son observados cuando no se cumple con la condición

$$\frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi mkT} \right)^{3/2} << 1$$

Lo que involucra lo siguiente

- 1. Bajas densidades $N/V \ll 1$
- 2. Altas temperaturas $1/kT \ll 1$

Retomando la función de Bose-Einstein r = 5/2

$$g_{5/2}(z) = \frac{1}{\Gamma(5/2)} \int_0^\infty \frac{x^{3/2}}{z^{-1}e^x - 1} dx$$

donde
$$\Gamma(5/2) = \frac{3}{4}\sqrt{\pi}$$

 $r = 3/2$

$$g_{5/2}(z) = \frac{1}{\Gamma(3/2)} \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{z^{-1}e^x - 1} dx$$

donde $\Gamma(5/2) = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}$

Las expresiones 118 y 119 se pueden escribir como

$$\Omega = \frac{V}{\beta \lambda^3} g_{5/2}(z) + \frac{1}{\beta} \ln(1-z)$$

$$N=\frac{V}{\lambda^3}g_{3/2}(z)+\frac{1}{1-z}=N_\varepsilon+N_0$$

Donde N_{ε} es el numero de partículas en el estado excitado N_{ε} es el numero de partículas en el estado base

Observamos que para una temperatura y un volumén dados se tendrá un numero máximo de partículas en estados excitados

$$N_{\varepsilon}^{max} = \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(1)$$
 $\forall \lambda = \left(\frac{h^2}{2\pi mkT}\right)^{1/2}$

Tomamos z = 1 por qué

 g_r es monóticamente creciente en z g_r es monóticamente creciente en r

Es decir toma su valor máximo en z=1

 N_{ε}^{max} indica que no pueden haber más partículas que el valor que tome N_{ε}^{max} para estados excitados

Ahora si tomamos $N \to \infty$ y $V \to \infty$ para todo N/V constante

$$N = N_{\varepsilon} + N_0 \Rightarrow 1 = \frac{N_{\varepsilon}}{N} + \frac{N_0}{N}$$

Puede tener los siguientes casos

■
$$z<1$$
 $(\mu<0)$ $N_0=\frac{z}{1-z}\ll N\Rightarrow \frac{N_0}{N}\to 0$
Por lo tanto
$$N\approx N_\varepsilon< N_\varepsilon^{max}$$

El estado excitado no puede contener a todas las partículas por lo que es favorable para el sistema llenar al estado base ($\varepsilon=0$) con el exceso de partículas esto es nombrado **Fenómeno de condensado** En resumen

$$\lim_{N\to\infty V\to\infty} = \left\{ \begin{array}{ll} N_\varepsilon/N = 1 & N_0/N \to 0 & \forall z < 1 \\ \frac{N_\varepsilon}{N} + \frac{N_0}{N} = 1 & \forall z = 1 \end{array} \right.$$

Al considerar fijas las variables N, T, V podemos afirmar

Condensado

Sin condensado

$$N < N_{arepsilon}^{max}$$

 $N < N_{\varepsilon}^{max}$

por lo tanto

por lo tanto

$$\frac{N\lambda^3}{V}zg_{3/2}(1)$$

$$\frac{N}{N_0} \to 0$$

$$N_0 = N - \frac{V}{\lambda^2}g_{3/2}(1)$$

Por lo tanto, tenemos que la transición de tener o no, un condensado ocurre cuando

$$\frac{N\lambda^3}{V} = g_{3/2}(z=1) \tag{120}$$

- Para Bajas densidades (N/V pequeño) y altas temperaturas $(\lambda$ pequeño) se tiene suficiente energía térmica para excitar a todas las partículas a $\varepsilon > 0$ y no hay condensado
- Para altas densidades (N/V grande) y bajas temperaturas $(\lambda \text{ grande})$ se tiene un sistema cuántico en donde la correlación positiva de los bosones hace posible un condensado

Podemos definir una temperatura critica T_c por debajo de la cual el condensado existe y es

$$N = N_{\varepsilon}^{max}(T_c) = \frac{V}{\lambda^3 T_c} g_{3/2}(1)$$

Recordando ecuación 116, tenemos

$$kT_c = \left(\frac{V}{N}\right)^{2/3} \frac{h^2}{2\pi m [g_{3/2}(1)]^{2/3}}$$
(121)

Entonces es posible analizar el siguiente caso

 $T < T_c \Rightarrow N_{\varepsilon} = N_{\varepsilon}^{max} = \frac{V}{\lambda_T^3} g_{3/2}(1)$

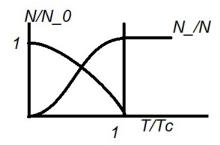
$$\frac{N_{\varepsilon T}}{N} = \frac{\lambda^3 T_c}{\lambda^3 T} = \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \hspace{0.5cm} \forall \lambda$$

■ Ahora si $T>T_c$ $\frac{N_\varepsilon}{N}=1$ $\frac{N_0}{N}=0$ No existe condensado y todas las N partículas se encuentran en estados excitados. En Resumén

$$\frac{N_{\varepsilon}}{N} = \begin{cases} 1 & T \leq T_c \\ (T/T_c)^{3/2} & T > T_c \end{cases}$$

$$\frac{N_0}{N} = \left\{ \begin{array}{cc} 0 & T \geq T_c \\ 1 - (T/T_c)^{3/2} & T < T_c \end{array} \right.$$

Gráficamente se comporta como



Propiedades termodinámicas Tomando el gran potencial

$$\Omega = -\frac{4\pi V}{3h^3} (2m)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon} - 1} d\varepsilon + \frac{1}{\beta} \ln(1 - z)$$
(122)

$$= -kT \left[\frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \ln(1-z) \right]$$
 (123)

$$= PV (124)$$

por lo tanto

$$P = \frac{kT}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \frac{kT}{V} \ln(1-z)$$

Sí $V \to \infty$ (muy grande)

$$P \approx \frac{kT}{\lambda^3} g_{5/2}(z)$$

Para el caso del condensado en $T < T_c$

$$P = \frac{kT}{\lambda^3} g_{5/2}(1) = \frac{kT}{\lambda^3} (1,341)$$

Es independiente de V y T, es función únicamente de la temperatura

Así como hemos definido una T_c para una densidad determinada, también se puede obtener una densidad o volumen critico

Sabemos de 120 $\frac{N\lambda^3}{V} = g_{3/2}(1)$ (punto de transición)

$$\left(\frac{N}{V}\right)_{C} = \frac{g_{3/2}}{\lambda^3}$$

de aquí

$$V_c = \frac{N_c \lambda^3}{q_{3/2}(1)}$$

Por lo tanto se tendrá un condensado cuando

• $N/V > (N/V)_c$ altas densidades

• $V < V_c$ bajos volúmenes

Por ultimo calculando el valor promedio de la energía

$$\bar{E} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \Omega \tag{125}$$

$$= \frac{\partial}{\partial \beta} \left[\frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \ln(1-z) \right]$$
 (126)

$$= \frac{3}{2}kT\frac{V}{\lambda^3}g_{5/2}(z) \tag{127}$$

Relacionado con la presión obtenemos

$$P = \frac{2E}{3V} \tag{128}$$

Obteniendo C_v

$$C_v = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{3}{2} k T \frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z) \right) = \frac{3}{2} \frac{kV}{\lambda^3} g_{5/2}(z)$$
 (129)

3.7. Gas de Fermi-Dirac y Energía de Fermi

Recordando para el caso de la estadística de Fermí-Dirac se obtiene que

$$Z_1 = \prod_{k=1} \left[1 + z e^{-\beta \varepsilon_k} \right] \qquad \forall z = e^{\beta \mu}$$

Y el gran potencial vine dado por

$$\Omega = -kT \ln Z_1 = -kT \sum_{k=1} \ln \left[1 + ze^{-\beta \varepsilon_k} \right]$$

Siendo $\Omega = -PV$ donde el número de partículas (número promedio)

$$N = \sum_{k} \bar{n}_{k}$$

Por lo que se observa que no existe alguna restricción en el valor del potencial químico

$$-\infty < \mu < \infty \Rightarrow 0 \leq z \leq \infty$$

Con lo cual se relaciona a μ como la energía media necesaria para añadir otra partícula al sistema, es decir μ crece con el numero de partículas

Para un continuo

$$\sum_{k} \to \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \to \int g(\varepsilon) d\varepsilon$$

$$\sum_{k} \to g_s \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int \varepsilon^{1/2} d\varepsilon$$

Siendo $g_s = 2s + 1$ la degeneración del spín

Por lo que se puede pasar de un discreto a un continuo

$$\ln Z = \sum_{k=1} \ln \left[1 + z e^{-\beta \varepsilon_k} \right] = \int g(\varepsilon) d\varepsilon \ln \left[1 + z e^{-\beta \varepsilon_k} \right]$$

$$\ln Z = 2\pi V g_s \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int \varepsilon^{1/2} d\varepsilon \ln \left[1 + ze^{-\beta \varepsilon_k}\right]$$

Al integral por partes obtenemos

$$\ln Z = \frac{4}{3} g_s \frac{V}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2m\pi kT}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2} d\varepsilon z e^{\beta \varepsilon}}{1 + z e^{\beta \varepsilon}}$$

Tomando ahora un cambio de variable $x = \beta \varepsilon \Rightarrow dx = \beta d\varepsilon$

$$\ln Z = \frac{4}{3} \frac{g_s V}{\sqrt{\pi} \lambda^3} \int_0^\infty \frac{x^{3/2} dx}{z^{-1} e^x + 1}$$
 (130)

Definimos la función de Fermí-Dirac $f_r(z)$

$$f_r(z) = \frac{1}{\Gamma(r)} \int_0^\infty \frac{x^{r-1} dx}{z^{-1} e^x + 1}$$

entonces 130 se puede escribir como

$$\ln Z = g_s \frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z)$$

Obteniendo $\Omega=-kT\ln Z=-PV\Rightarrow \frac{PV}{kT}=g_s\frac{V}{\lambda^3}g_{5/2}(z)$ y para el número promedio de las partículas

$$N = \int \frac{g(\varepsilon)}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} + 1} = \frac{2g_s V}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2m\pi}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2}}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} + 1} d\varepsilon$$

Realizando el cambio de variable $x = \beta \varepsilon \Rightarrow dx = \beta d\varepsilon$

$$N = \frac{2g_s V}{\sqrt{\pi} \lambda^3} \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{z^{-1} e^x + 1} dx$$
$$= \frac{g_s V}{\lambda} f_{3/2}(z)$$

Algunas propiedades de $f_r(z)$ son

$$z < 1 \Rightarrow f_r(z) = \sum_k (-1)^{k-1} \frac{z^k}{k^r}$$
$$z > 1 \Rightarrow f_r(z) = \frac{y^r}{\Gamma(r+1)} \left(1 + \frac{\pi^2}{6} \frac{r(r-1)}{y^2} + \dots \right) \qquad \forall z = e^y$$

en el caso z=1

$$f_r(1) = \mathscr{Z}(r) \left(1 - \frac{1}{2^{r-1}} \right)$$

Siendo \mathcal{Z} la función Zeta de Rimann, algunos valores típicos de $f_r(1)$ son

$$f_{3/2} = 0.765$$

 $f_{5/2} = 0.866$
 $f_{7/2} = 0.9277$

También $f_r(1)$ crece de manera monótona

Ejercicio

Obtener a

$$\begin{split} \bar{E} &= -\left[\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z\right]_{V,z} = \frac{3}{2}kT\frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}} \\ C_v &= Nk\left[\frac{15}{4}\frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}} - \frac{9}{4}\frac{f_{3/2}(z)}{f_{1/2}}\right] \\ F &= -pV + \mu N = \bar{N}kT\left[\ln Z - \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}}\right] \end{split}$$

Analizando el siguiente limite

- altas densidades $N/V \ll 1$
- bajas temperaturas $\lambda^3 \ll 1$

Es posible definir para el limite de bajas temperaturas a

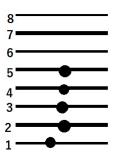
$$n_k^{FD} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1} = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad \varepsilon \le \mu \\ 0 & \text{si} \quad \varepsilon > \mu \end{cases}$$

Dado que si $\varepsilon \leq \mu, \ e^{\beta(\varepsilon-\mu)} \to 0$ en $T \to 0$ pero si $\varepsilon > \mu, \ e^{\beta(\varepsilon-\mu)} \to \infty$ en $T \to 0$

Se define a $\mu = \varepsilon_f$ en $T \to 0$ como la energía de fermí es decir la energía del ultimo estado ocupado. En otras palabras se entiende que conforme se baje la temperatura de un sistema $(T \to 0)$ las partículas del sistema (gas) tienden a una energía mínima (a mayor temperatura mayor energía), pero por ser fermiones en cada nivel solo una partícula del mismo spín

Recordar que el número de ocupación $n_k = 0, 1$

Esquematicamente



$$\varepsilon_f = \mu(0)$$
 Energía de Fermí

Lo que nos indica que existe una energía que nos permite acomodar más fermiones en los estados base, lo que proporciona un impedimento de alcanzar en cero absoluto cada sistema tendrá $\varepsilon_f = \mu(0)$ especifica

$$N = \int_0^\infty g(\varepsilon) d\varepsilon \bar{n}_k = \frac{2\pi V g_s}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^{\mu_f} \varepsilon^{1/2} d\varepsilon$$

Solo integramos de cero a la energía de fermí posterior a ε_f no tendremos ocupación en $T\to 0$

$$N = \frac{4\pi V g_s}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{2m\pi}{h^2}\right)^{3/2} \mu_f^{3/2} \tag{131}$$

 $\mu_f = \varepsilon_f \ {\bf y} \ T \to 0$ Podemos obtener \bar{E} en $T \to 0$

$$\bar{E} = \int_0^\infty g(\varepsilon) d\varepsilon \bar{n}_k \varepsilon$$

$$= \int_0^\mu g(\varepsilon) d\varepsilon \varepsilon$$

$$= \frac{2\pi V g_s}{h^2} (2m)^{3/2} \int_0^\mu \varepsilon^{3/2} d\varepsilon \varepsilon$$

$$= \frac{4V g_s}{5\sqrt{\pi}} \left(\frac{2m\pi}{h^2}\right)^{3/2} \mu_f^{5/2} \tag{132}$$

De las ecuaciones 130 y 132 es posible obtener

$$\frac{\bar{E}}{\bar{N}} = \frac{3}{5}\varepsilon_f \qquad \text{En}T \to 0$$

Con el conocimiento de la energía de Fermí es posible definir diferentes cantidades físicas relacionadas

■ Temperatura de Fermí

$$\varepsilon_f = kT_f \Rightarrow T_f = \frac{\varepsilon_f}{k}$$

■ Momento de Fermí

$$\varepsilon_f = \frac{\bar{k}_f^2}{2m} \Rightarrow k_f = \sqrt{\frac{2m\varepsilon_f}{\hbar}}$$

Consideremos ahora el caso en el que $0 \le T \le T_f$ conocido como el gas cuasi-degenerado en el cual debemos considerar

$$N = g_s \frac{V}{\lambda^3} f_{3/2}(z) = g_s \frac{V}{\lambda^3} \frac{1}{\Gamma(3/2)} \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{e^{x-y} + 1} dx$$

Para z > 1 se expande la integral como se sigue tomando que $y = \mu/kT$

$$\int_{0}^{\infty} \frac{x^{1/2}}{e^{x-y}+1} dx = \int_{0}^{y} x^{1/2} dx + 2 \left[\frac{12}{\pi} \frac{\partial x^{1/2}}{\partial x}_{y} + \frac{7\pi^{4}}{720} \frac{\partial^{3} x^{1/2}}{\partial x^{3}}_{y} \right] \dots$$

$$= \frac{2}{3} \left(\frac{\mu}{kT} \right)^{3/2} + \frac{\pi^{2}}{12} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^{1/2} + \frac{7\pi^{4}}{960} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^{5/2}$$

$$N = \frac{4\pi V g_{s}}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{2m\pi}{h^{2}} \right)^{3/2} \mu^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^{2}}{8} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^{2} + \frac{21\pi^{4}}{1920} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^{4} + \dots \right]$$

De la definición ε_f (ecuación 130)

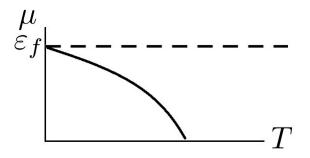
$$\mu_f^{3/2} = \varepsilon_f^{3/2} = N \left(\frac{4\pi V g_s}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{2m\pi}{h^2} \right)^{3/2} \right)^{-1}$$

$$\varepsilon^{3/2} = \mu_f^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^2 + \frac{21\pi^4}{1920} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^4 + \dots \right]$$
(133)

Por lo tanto a segundo orden

$$\mu = \varepsilon_f \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^2 + \frac{21\pi^4}{1920} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^4 + \dots \right]^{-2/3}$$

se observa que



3.8. Problemas

1. Considere un gas compuesto de N partículas que obedecen las estadísticas de Bose-Einstein. El gas se encuentra en un contenedor d dimensional con volumen V. La energía de una sola partícula es $\varepsilon = p^b$, donde p es el valor absoluto del momento y b una constante positiva. Obtener $\langle N \rangle / V$ y una relación entre p y d.

Solución:

La función de partición en este caso es

$$\mathscr{Z} = 1 - ze^{-\beta\varepsilon} \tag{134}$$

escribimos el logaritmo de la gran función de partición canónica para el gas cuántico que obedece a las estadísticas de Bose-Einstein en d dimensiones

$$\ln \mathcal{Z} = -\int \ln(1 - ze^{-\beta \varepsilon}) \frac{dq^d dp^d}{h^d}$$
(135)

para calculare la densidad promedio de partículas $\langle N \rangle / V$ hacemos

$$\frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{z}{V} \left(\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial z} \right) \tag{136}$$

$$= -\frac{z}{V}\frac{\partial}{\partial z}\left(\int \ln(1-ze^{-\beta\varepsilon})\frac{dq^ddp^d}{h^d}\right)$$
 (137)

$$= -\frac{z}{V} \int \frac{\partial}{\partial z} \left(\ln(1 - ze^{-\beta \varepsilon}) \right) \frac{dq^d dp^d}{h^d}$$
 (138)

$$= \frac{z}{V} \int \frac{e^{-\beta \varepsilon}}{1 - ze^{-\beta \varepsilon}} \frac{dq^d dp^d}{h^d}$$
 (139)

Ahora multipliquemos por $\frac{z^{-1}e^{\beta\varepsilon}}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon}}=1$

$$\frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{zz}{V} \int_{-1}^{1} \frac{e^{-\beta z}e^{\beta \varepsilon}}{z^{-1}e^{\beta \varepsilon} - zz^{-1}e^{\beta \varepsilon}e^{-\beta \varepsilon}} \frac{dq^ddp^d}{z^{-1}h^d}$$
(140)

$$\frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{1}{V} \int \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon} - 1} \frac{dq^d dp^d}{h^d}$$
(141)

Pasando a coordenadas esféricas, comúnmente las dimensiones son d = 3, al integrar sobre los ángulos tenemos

$$d\Omega_3 = \sin\theta d\theta d\phi \tag{142}$$

у

$$d^{3}p = p^{2}dpd\Omega_{3} = p^{2}dp(\operatorname{sen}\theta d\theta d\phi) \tag{143}$$

pero tenemos d dimensiones, Sabiendo que q resulta la integral del ángulo solido, donde se denotará como Ω_d . es decir

$$d^d p = p^{d-1} dp d\Omega_d \tag{144}$$

entonces

$$\frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{\Omega_d}{h^d} \int_0^\infty \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon} - 1} p^{d-1} dp^d \tag{145}$$

La ecuación para la temperatura crítica (T_c) se encuentra al establecer $z=1,\ \beta=\beta_c=1/kT_c$ en la ecuación para $\langle N \rangle$. realizando el cambio de variable $x=\beta\varepsilon=p^b$, la existencia de una T_c distinta de cero entonces, del cambio del variable tenemos $x=\beta p^b$ por lo tanto $dx=\beta bp^{b-1}dp$ sustituyendo en 145

$$\frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{\Omega_d}{h^d} \int_0^\infty \frac{p^{d-1}}{\beta b p^{b-1}} \frac{dx}{e^x - 1} = \frac{\Omega_d}{h^d \beta b} \int \frac{p^{d-b} dx}{e^x - 1}$$
(146)

De $x = \beta p^b$ tenemos $p = \left(\frac{x}{\beta}\right)^{1/b}$ y sustituyendo

$$\frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{\Omega_d}{h^d \beta b} \frac{1}{\beta^{(d-b)/b}} \int \frac{x^{(d-b)/b}}{e^x - 1} dx \tag{147}$$

$$\frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{\Omega_d}{h^d b} \frac{1}{\beta^{d/b-1}} \int \frac{x^{d/b-1}}{e^x - 1} dx \tag{148}$$

por definición $\beta = 1/kT$.

$$\frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{\Omega_d(kT)^{d/b}}{bh^d} \int_0^\infty \frac{x^{d/b-1} dx}{e^x - 1}$$
(149)

Para resolver la integral usamos la función de Riemman tal que:

$$\zeta(r) = \frac{1}{\Gamma(r)} \int_0^\infty \frac{\mu^{r-1}}{e^\mu - 1} d\mu \tag{150}$$

Observemos que $x = \mu$ y r = d/b entonces

$$\frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{\Omega_d (kT)^{d/b}}{bh^d} \Gamma\left(\frac{d}{b}\right) \zeta\left(\frac{d}{b}\right) \tag{151}$$

$$\frac{\langle N \rangle b h^d}{V \Omega_d \Gamma\left(\frac{d}{b}\right) \zeta\left(\frac{d}{b}\right)} = (kT)^{d/b} \tag{152}$$

$$kT = \left(\frac{\langle N \rangle b h^d}{V \Omega_d \Gamma\left(\frac{d}{b}\right) \zeta\left(\frac{d}{b}\right)}\right)^{b/d}$$
(153)

2. Un gas de fermiones con spín 1/2 y un número promedio de partículas \bar{N} es colocado en un cilindro de base A y altura H, el gas se encuentra bajo la acción de la gravedad, la máxima altura que puede tomar una partícula es igual a H, obtener la energía de fermí y el promedio de la energía $(T \to 0)$ Solución

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} + mgz \qquad \varepsilon \le \varepsilon_k$$

$$mgz \le \varepsilon_k - \frac{p^2}{2m}$$

Cada partícula tiene un z máximo cuando p=0

$$mgz_{max} \le \varepsilon_f$$

$$mgh < \varepsilon_f$$

se tendría que $H=\frac{\varepsilon_f}{mg}$

$$\bar{N} = (2s+1)\frac{1}{h^3} \iint \frac{d^3r d^3p}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1}$$

Pasando coordenadas cilíndricas

$$\bar{N} = \frac{2s+1}{h^3} \int_0^z \int_0^{2\pi} \int_0^R r dr d\theta dz + \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^p p^2 \sin\theta d\theta d\phi dp \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1}$$
$$\bar{N} = \frac{(2s+1)4\pi A}{h^3} \int_0^H dz \int_0^{\infty} \frac{p^2 dp}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1}$$

tenemos
$$p = \sqrt{2m(\varepsilon - mgz)}$$

$$\int_0^{\sqrt{2m(\varepsilon-mgz)}} p^2 dp = \frac{(2m(\varepsilon-mgz)))^{3/2}}{3}$$

$$\bar{N} = \frac{4\pi A}{3h^3} \int_0^{\varepsilon_f/mg} dz (2m(\varepsilon_f - mgz))^{3/2}$$

Cuando
$$T \to 0$$
, $\varepsilon = \varepsilon_f$, $H = \frac{\varepsilon_r}{2m} \Rightarrow \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1} = \frac{1}{2}(2s + 1) = 2$

$$\bar{N} = \frac{4\pi A}{3h^3} \int_0^{\varepsilon_f/mg} (\varepsilon_f - mgz)^{3/2} dz (2m)^{3/2}$$

 $t = \varepsilon_r - mgz$, z = 0, entonces $t = \varepsilon_f$, dt = mgdz, $z = \frac{\varepsilon_f}{mg}$

$$\bar{N} = \frac{4\pi A (2m)^{3/2}}{3h^3} \int_{\varepsilon_r}^0 \frac{t^{3/2}}{-mg} dt$$

$$\bar{N} = \frac{4\pi A (2m)^{3/2}}{3h^3 mg} \left[\frac{5}{2} t^{5/2} \right]_0^{\varepsilon_f}$$

$$\bar{N} = \frac{8\pi A (2m)^{3/2}}{15h^3 mq} (\varepsilon_r)^{5/2}$$

$$\varepsilon_r = \left[\frac{15\bar{N}h^3mg}{8\pi A(2m)^{3/2}} \right]^{2/5}$$

Ahora

$$U = \varepsilon \bar{n} = \frac{1}{h^3} \iint \frac{d^3r d^3p\varepsilon}{\exp[\beta(\varepsilon - \mu)] + 1}$$

$$U = \frac{4\pi A}{h^3} \int_0^{\varepsilon_f/2m} dz \int_0^{\sqrt{2m(\varepsilon_f - mgz)}} \left(\frac{p^2}{2m} + mgz\right) p^2 dp$$

3. Encontrar la temperatura crítica para un gas de bosones en dos dimensiones de spin distinto de cero, supongamos que se encuentra en una región de lado l

Solución

Cuando tenemos bosones de spin cero (2s+1)=1, no hay degeneración, si es diferente de cero $(2s+1)\neq 1$ hay que introducir la ecuación

$$\langle N \rangle = \frac{1}{h^n} \int \frac{d^n q d^n p}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon} - 1}$$

Donde $z=e^{\beta\mu}$ para este problema n=2

$$\langle N \rangle = \frac{1}{h^2} \int \frac{d^2q d^2p}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} - 1}$$

En este caso la energía es $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$ cambiando de coordenadas a polares

$$\begin{split} \langle N \rangle &= \frac{L^2}{h^2} \iint \frac{p dp d\theta}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon} - 1} \\ &= \frac{2\pi L^2}{h^2} \iint \frac{p dp}{z^{-1} e^{\beta \mu} - 1} \\ &= \frac{2\pi L^2 m}{h^2} \iint \frac{d\varepsilon}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon} - 1} \end{split}$$

Nota: se realizo el cambio de variable $\varepsilon=\frac{p^2}{2m},\ d\varepsilon=\frac{pdp}{m}$ Cuando $T\to T_c$ empieza a haber degeneración $N=N_\varepsilon+N_0$

$$\langle N \rangle = \frac{2\pi mL^2}{h^2} \int_0^\infty \frac{d\varepsilon(2S+1)}{\mathscr{F}^t e^{\beta\varepsilon} - 1}$$
 (154)

$$= \frac{2\pi mL^2(2S+1)}{h^2} \int_0^\infty \frac{d\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon} - 1}$$
 (155)

Hacemos el cambio de variable $x = \beta \varepsilon$ entonces $dx = \beta d\varepsilon$

$$\langle N \rangle = \frac{2\pi m L^2(2s+1)}{\beta h^2} \int_0^\infty \frac{dx}{e^x - 1}$$

Sabemos que $g_r = \frac{1}{\Gamma(r)} \int_0^\infty \frac{x^{r-1}}{z^{-1}e^x - 1} dx$

$$g_r(z=1) = \frac{1}{\Gamma(1)} \int \frac{dx}{e^x - 1}$$

Por lo tanto

$$\langle N \rangle = \frac{2\pi m L^2(2s+1)}{\beta h^2} k T_c \Gamma(1) g_1(1)$$

$$T_c = \frac{\langle N \rangle h^2}{2\pi m k g_1 \Gamma(1)(2s+1)}$$

La temperatura critica depende de $\langle N \rangle$

- 4. Un gas de fermiones con un promedio \bar{N} de partículas de spín 1/2 con masa m es colocado en dos dimensiones tiene un area A a una temperatura finita
 - (a) Obtener la energía de fermí como función de la densidad de partículas
 - (b) Obtener el potencial μ como función de la energía de Fermí

Solución:

(a) Sabemos que
$$\bar{N}=e^{\beta\mu}\sum_{i}e^{-\beta\varepsilon_{i}}=e^{\beta\mu}z$$

$$\bar{N} = e^{\beta \mu} z = \frac{e^{\beta \mu}}{h^2} \int e^{-\beta \varepsilon} d^2 q d^2 p$$

Cuando $T \to 0$ hay deformación

$$\bar{N} = g(E)e^{\beta\mu}z_1 = (2s+1)\frac{e^{\beta\mu}}{h^2}\int e^{-\beta\varepsilon}d^2qd^2p$$

donde
$$s = 1/2$$
, $\varepsilon = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow \varepsilon_f \leq \frac{p^2}{2m}$

$$\begin{array}{rcl} \bar{N} & = & \frac{2A}{h^2}e^{\beta\mu}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty}pd\theta dp e^{-\mu\varepsilon} \\ & \lim_{T\to 0}\bar{N} & = & \frac{4\pi A}{h^2}\int\!dp e^{\beta(\varepsilon-\mu)}p \\ & \frac{4\pi A}{h^2}\int\!dp e^{\beta(\varepsilon-\mu(0))}p \end{array}$$

Tenemos que $\mu(0) = \varepsilon_f$

$$\bar{N} = \frac{4\pi A}{h^2} \int dp e^{\beta(\varepsilon - \varepsilon_f)} p$$

$$\bar{N} = \frac{4\pi A}{h^2} \int_0^{p_f} p dp$$

$$\varepsilon_f > \varepsilon$$
 pero si $\varepsilon_f = \varepsilon$, $\varepsilon_f = \frac{p_f^2}{2m} \Rightarrow p_f = \sqrt{2m\varepsilon_f}$

$$\bar{N} = \frac{4\pi A}{h^2} \int_0^{\sqrt{2m\varepsilon_f}} p dp$$

$$\bar{N} = \frac{4\pi A}{h^2} \frac{2m\varepsilon_f}{2} = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \varepsilon_f$$

(b) Antes de hacer $T \to 0$ contamos \bar{N}

$$\bar{N} = \frac{4\pi A}{\hbar^2} \int_0^\infty \underbrace{\frac{pdp}{exp[\beta(\mu - \varepsilon)] + 1}}_{f(\mu)}$$

Aquí no hay degeneración

$$\bar{N} = \frac{4\pi A}{\hbar^2} f(\mu) = \frac{4\pi A}{2\hbar^2} \frac{2m\varepsilon_r}{2}$$

- 5. Un gas de Fermí con \bar{N} partículas de spín 1/2 y masa m es colocado en una área A a una temperatura T.
 - La energía de Fermí como función de la densidad
 - El potencial μ como función de T y ε_f

Solución:

Considerando a $\langle n_{\varepsilon} \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1}$ en $T \to 0$, $\varepsilon = \mu \Rightarrow \langle n_{\varepsilon} \rangle_{\mu\beta} = \frac{1}{2}$, el promedio de partículas

$$\bar{N} = \frac{2}{4\pi^2\hbar^2} \int d^2q \int d^2p$$

Sabemos que la integral de q es el área

$$\bar{N} = \frac{2A}{4\pi^2\hbar^2} intd^2 p$$

Es posible definir una densidad como

$$n = \frac{\bar{N}}{A} = \frac{1}{\pi \hbar^2} int_0^{\sqrt{2m\varepsilon_f}} pdp$$

Dado que $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$

$$n = \frac{m\varepsilon_f}{\pi h^2} \qquad \varepsilon_f = \frac{n\pi\hbar^2}{m}$$

Ahora cuando T no tiende a cero, el numero promedio de partículas es

$$\bar{N} = \frac{A}{\pi \hbar^2} \int_0^\infty \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1} p dp$$

Si
$$x = \beta \varepsilon$$

$$n = \frac{\bar{N}}{A} = \frac{m}{\beta \pi \hbar^2} \int_0^\infty \frac{1}{e^{-\mu} e^x + 1} dx$$

$$n = \frac{m}{\beta \pi \hbar^2} \ln \left[\frac{1}{e^{-\mu} e^x + 1} \right]_0^{\infty} = \frac{m}{\beta \pi \hbar^2} \ln(1 + e^{\mu \beta})$$

$$Como \ \varepsilon_f = \frac{n\pi\hbar^2}{m}$$

$$\ln(1 + e^{\mu\beta}) = \beta\varepsilon_f$$

Obteniendo finalmente

$$\mu = \frac{1}{\beta} \ln(e^{\beta \varepsilon_f} - 1)$$

6. Un gas compuesto por un numero promedio de \bar{N} fermiones que no interactuan con spin 1/2 a una temperatura T=0. El gas se coloca en un disco bidimensional de radio R y se encuentra bajo en efecto de una fuerza radial constante. La energía de cada partícula es

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} - br \qquad b > 0$$

Obtener la energía de Fermí ε_f

Solución

Para obtener la energía de Fermí tomamos a

$$\bar{n}_k = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1}$$

aquí $\varepsilon_f = \mu$ $\Rightarrow \bar{n}_k \approx \frac{1}{2}$, por lo que el numero promedio de partículas es

$$\bar{N} = \frac{1}{\hbar^2} \int d^2p d^2q$$

Recordar que g=2s+1 no tomamos la doble orientación del spin por otra parte

$$d^2q = 2\pi r dr \qquad d^2p = 2\pi p dp$$

Para la energía de Fermí, se tiene $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$

Como el gas se encuentra en $T\simeq 0$ entonces la energía de cada partícula se encuentra por debajo de la energía ε_f como

$$\frac{p^2}{2m} - br \le \varepsilon_f$$

$$\bar{N}=\frac{4\pi^2}{\hbar^2}\int_0^R r dr_0^P p dp$$

y como $\varepsilon_k = \frac{p^2}{2m}$ $d\varepsilon = \frac{pdp}{m} \Rightarrow md\varepsilon = pdp$

$$\bar{N} = \frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \int_0^R r dr_0^{\varepsilon_f + br} d\varepsilon$$

$$\bar{N} = \frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \int_0^R r dr [\varepsilon_f + br] = \frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \left[\varepsilon_f \frac{R^2}{2} + \frac{br^3}{3} \right]$$
$$\varepsilon_f = \left[\frac{\bar{N}\hbar^2}{4\pi m} - \frac{br^3}{3} \right] \frac{R^2}{2}$$

- 7. Considere un gas de bosones no interactuantes cuya energía es E=cp este gas esta confinado en un volumén V
 - a) Calcule el gran potencial $\Omega = kT \ln Z$ y la densidad n = N/V
 - b) Calcule la presión y la energía

Soluciones:

a) Para bosones $z = \prod_{i} (1 - e^{\beta(\epsilon_i - \mu)})$

$$\Omega = -kT \ln \left(\prod_{i} (1 - e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}) \right) = -kT \sum_{i} \ln \left((1 - e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}) \right)$$

Como tenemos un gran número de partículas y la distancia entre los niveles es muy pequeña podemos hacer $\sum = \int f(p)dp$

$$\Omega = -kT \int_{0}^{\infty} f(p) \ln \left((1 - e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}) \right) dp$$

Donde $f(p) = \frac{4\pi V}{h^3} p^2$

$$\Omega = -\frac{4\pi V kT}{h^3} \int_0^\infty p^2 \ln\left(\left(1 - e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}\right)\right) dp$$

realizando el cambio de variable $p = \frac{\varepsilon}{c} \to dp = \frac{1}{c}d\varepsilon$

$$\Omega = -\frac{4\pi V kT}{h^3 c^3} \int_0^\infty \varepsilon \ln \left((1 - e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}) \right) d\varepsilon$$

Realizando está integral por partes $dv = \varepsilon^2 d\varepsilon \Rightarrow v = \frac{t^3}{3}$ y $u = \ln\left((1 - e^{\beta(\epsilon_i - \mu)})\right) \Rightarrow du = \frac{-\beta e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}}{1 - e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}}$

$$\Omega = -\frac{4\pi VkT}{h^3c^3} \left[\frac{t^3}{3} \ln \left((1 - e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}) \right) \right]_0^{\infty} - \int_0^{\infty} \frac{t^3}{3} \frac{-\beta e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}}{1 - e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}} dt$$

$$\Omega = -\frac{4\pi V k T \beta}{3h^3 c^3} \int_0^\infty \frac{-t^3 e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}}{1 - e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}} dt$$

realizamos el cambio de variable $z=e^{\beta\mu}$ y $\varepsilon=\frac{x}{\beta}\Rightarrow d\varepsilon=\frac{1}{\beta}dx$, tenemos $\varepsilon^3d\varepsilon=\frac{x^3}{\beta^4}dx$

$$\Omega = -\frac{4\pi V k T \beta}{3h^3 c^3} \frac{1}{\beta^4} \frac{x^3 dx}{z^{-1} e^x - 1}$$

Sabemos que

$$\frac{1}{\beta^4} \frac{x^{r-1} dx}{z^{-1} e^x - 1} = \Gamma(r) g_r(r)$$

Aquí r = 4 y $\Gamma(4) = 6$ sustituyendo tenemoss

$$\Omega = -\frac{8\pi V k T g_4(z)}{h^3 c^3 \beta^3}$$

dado que

$$\begin{split} N &= \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = \frac{\partial \Omega}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \mu} = \frac{8\pi V k T}{h^3 c^3 \beta^3} \frac{z \partial}{\partial z} g_4(z) \\ N &= \frac{8\pi V k T g_3(z)}{h^3 c^3 \beta^3} \\ n &= \frac{N}{V} = \frac{\varepsilon \pi V k T g_3(z)}{h^3 c^3 \beta^3} \end{split}$$

La energía promedio es

$$\bar{E} = -\frac{\partial \ln z}{\partial \beta} = \frac{24\pi V k T g_3(z)}{h^3 c^3 \beta^3}$$

8. Que energía hay que proporcionar a un gas ideal de bosones en el cero absoluto para que una octava parte salga del estado base

Solución:

Sabemos que

$$\frac{N_0}{N} \left\{ \begin{array}{ll} 0 & T > T_c \\ 1 & 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \end{array} \right. \quad T \leq T_c \text{ Incluimos el cero absoluto}$$

Sí $\frac{N_0}{N}$ decrece a $T=0 \Rightarrow T=T_c$ las partículas se encuentran en el estado base

$$\frac{N_0}{N} = \frac{7}{8}$$

$$1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \Rightarrow \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} = \frac{1}{8} \Rightarrow \left(\frac{T}{T_c}\right)^{1/2} = \frac{1}{2}$$

Es la temperatura que necesita para que 1/8 de las partículas salgan del estado base Sabemos que $\Omega=kT\ln Z$ y $\langle E\rangle=-\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z$

$$\beta\Omega = \ln Z$$

sustituyendo en $\langle E \rangle$

$$\langle E \rangle = \frac{\partial}{\partial \beta} \beta \Omega$$

Aquí

$$\Omega = -kT \left[\frac{v}{\lambda^3} g_{3/2}(z) - \ln(1-z) \right]$$

$$\beta\Omega = -\left[\frac{v}{\lambda^3}g_{3/2}(z) - \ln(1-z)\right]$$

Para calcular el promedio de la energía necesitamos

$$\lambda = \left(\frac{h^2}{2\pi mkT}\right)^{3/2} = \left(\frac{h^2\beta}{2\pi m}\right)^{3/2}$$

$$\begin{split} \langle E \rangle &= \frac{\partial}{\partial \beta} \beta \Omega \\ &= -V g_{5/2}(z) \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{1}{\lambda^3} \right) \\ &= -V g_{5/2}(z) \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{2\pi m}{h^2 \beta} \right)^{3/2} \\ &= -V g_{5/2}(z) \frac{3}{2} \left(\frac{2\pi m}{h^2 \beta} \right)^{1/2} \frac{2\pi m}{h^2 \beta} \left(\frac{-h^2}{h^2 \beta} \right) \\ &= V g_{5/2}(z) \frac{3}{2} \left(\frac{2\pi m}{h^2 \beta} \right)^{3/2} \frac{1}{\beta} \\ &= \frac{3}{2} V g_{5/2}(z) \frac{kT}{\lambda^3} \end{split}$$

Usando $T = \frac{T_c}{4}$

$$\langle E \rangle = \frac{3}{8} v g_{5/2}(z) \frac{kT_c}{\lambda^3}$$

Si el volumén depende de z

$$N(z) = \frac{V_c}{\lambda_o^2} g_{3/2}(z) + \frac{z}{1-z}$$

 $si T \to T_c \Rightarrow z = 1$

$$\begin{array}{rcl} N(z) & = & N_c \\ & = & \frac{V_c}{\lambda_c^3} g_{3/2}(1) \\ \\ V_c & = & \frac{N_c \lambda_c^3}{g_{3/2}(1)} \end{array}$$

Aquí N_c es el numero de partículas fuera del estado base, La energía de las partículas fuera del estado base es

$$\begin{split} \langle E \rangle_{E \neq 0} &= \frac{3}{2} V_c g_{5/2}(1) \frac{kT}{\lambda^3} \\ &= \frac{3}{2} \left(\frac{N_c \lambda_c^3}{g_{3/2}(1)} \right) g_{5/2}(1) \frac{kT_c}{4\lambda^3} \\ &= \frac{3}{8} kT_c \frac{\lambda_c^3}{\lambda^3} \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)} N_c \end{split}$$

Por otra parte

$$\frac{\lambda_c^3}{\lambda^3} = \frac{\left(\frac{h^2}{2\pi m k T_c}\right)^{3/2}}{\left(\frac{h^2}{2\pi m k T}\right)^{3/2}} = \frac{\frac{1}{T_c}}{\frac{1}{T}}$$
$$\langle E \rangle = \frac{3}{64} k T_c \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)} N_c$$
$$\bar{E} = \frac{\langle E \rangle}{N_c} = \frac{3}{64} k T_c \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)}$$