

Segundo Parcial 2018

Problema 1. Sea un sistema de bosones con $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$ y $s = 1$, demuestre que:

$$\langle E \rangle = \frac{3}{2} g_s k T V \left(\frac{2\pi m k T}{h^2} \right)^{3/2} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\exp(l\mu/kT)}{l^{5/2}}$$

- A. Utilice este resultado para obtener la expresión de la presión $p(z)$ a temperatura ambiente.
- B. Obtenga la expresión de la fugacidad z a temperatura ambiente y utilice dicho resultado para expresar $p(T)$.
- C. Realice los mismos cálculos para un sistema de fermiones con $s = 1/2$. Compare con los bosones.
- D. Obtenga la dependencia con la temperatura de la presión y la entropía para los sistemas de bosones y fermiones considerados, en el límite $T \ll$, describa las características de ambos sistemas cuando $T \rightarrow 0$.

Solución

En un sistema de bosones se tiene que la distribución de ocupación de estados es

$$\langle n_\varepsilon \rangle_{BE} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1} \quad (1)$$

La degeneración en energía se obtiene a partir del volumen de una hipersfera en d -dimensiones, de la siguiente forma:

$$g(\varepsilon) = \frac{L^d \varepsilon^{\frac{d}{s}-1} g_s}{2^{d-1} s \hbar^d \pi^{d/2} \alpha^{d/s} \Gamma(\frac{d}{2})}, \quad (2)$$

donde L es el lado del cubo d -dimensional, d el número de dimensiones, s la potencia del momento canónico en la energía, g_s la degeneración en espín, y α el coeficiente que acompaña al momento en el hamiltoniano. En nuestro caso a considerar:

$$\begin{aligned} d &= 3 \\ s &= 2 \\ \alpha &= \frac{1}{2m} \\ g_s &= 3. \end{aligned} \quad (3)$$

Finalmente la degeneración es:

$$\begin{aligned} g(\varepsilon) &= \frac{g_s V (2m)^{3/2} \varepsilon^{1/2}}{4 \hbar^3 \pi^{3/2} \pi^{1/2}} \\ &= \frac{2 g_s V (2m)^{3/2} \pi \varepsilon^{1/2}}{h^3}. \end{aligned} \quad (4)$$

Para calcular el valor de la energía media realizo lo siguiente:

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty \varepsilon g(\varepsilon) \langle n_\varepsilon \rangle_{BE} d\varepsilon \quad (5)$$

Reemplazando las ecuaciones (1) y (4) en la anterior, obtengo

$$\langle E \rangle = \frac{2g_s V (2m)^{3/2} \pi}{h^3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1} d\varepsilon.$$

Realizando un cambio de variables $\beta\varepsilon = x$, se obtiene que

$$\langle E \rangle = \frac{2g_s V (2mkT)^{3/2} \pi}{h^3} kT \int_0^\infty \frac{x^{3/2}}{z^{-1}e^x - 1} dx \quad (6)$$

Ahora trabajamos con la integral:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{x^{n-1}}{z^{-1}e^x - 1} dx &= \int_0^\infty x^{n-1} \frac{dx}{z^{-1}e^x(1 - ze^{-x})} \\ &= \int_0^\infty x^{n-1} \frac{ze^{-x} dx}{1 - ze^{-x}} \\ &= \int_0^\infty x^{n-1} ze^{-x} \sum_{l=0}^\infty (ze^{-x})^l dx \\ &= \int_0^\infty x^{n-1} \sum_{l=1}^\infty (ze^{-x})^l dx \\ &= \sum_{l=1}^\infty z^l \int_0^\infty x^{n-1} e^{-lx} dx \\ &= \sum_{l=1}^\infty z^l \int_0^\infty \frac{y^{n-1}}{l^{n-1}} e^{-y} \frac{dy}{l} \\ &= \sum_{l=1}^\infty \frac{z^l}{l^n} \int_0^\infty y^{n-1} e^{-y} dy, \end{aligned}$$

donde se ha realizado el cambio de variables $lx = y$. La integral es igual a la función Gamma con coeficiente n . Luego, la ecuación (6), queda, con $n = 5/2$:

$$\boxed{\langle E \rangle = \frac{3}{2} \frac{g_s V}{\lambda^3} kT \sum_{l=1}^\infty \frac{z^l}{l^{5/2}}}, \quad (7)$$

que es la forma funcional de la energía que se busca.

Podemos también calcular el número de partículas en el sistema sumando sobre toda

la población en todos los estados de energía:

$$\begin{aligned}
 \langle N \rangle &= \int_0^\infty g(\varepsilon) \langle n_\varepsilon \rangle_{BE} d\varepsilon \\
 &= \int_0^\infty \frac{2g_s V (2m)^{3/2} \pi \varepsilon^{1/2}}{h^3} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} d\varepsilon \\
 &= \frac{2g_s V (2m)^{3/2} \pi}{h^3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} d\varepsilon \\
 &= \frac{2g_s V (2m)^{3/2} \pi}{h^3} \frac{1}{\beta^{3/2}} \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{z^{-1} e^x - 1} dx \\
 &= \frac{g_s V (2m \pi k T)^{3/2}}{2h^3} \sum_{l=1}^\infty \frac{z^l}{l^{3/2}}
 \end{aligned}$$

$$\boxed{\langle N \rangle = \frac{g_s V}{\lambda^3} \sum_{l=1}^\infty \frac{z^l}{l^{3/2}}}$$

A. La gran función partición del sistema es:

$$\mathcal{Z} = \prod_{\varepsilon} \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}} \quad (8)$$

Tomando logaritmo natural se tiene la función termodinámica asociada

$$-\frac{1}{kT} \Phi(T, V, \mu) = \ln \mathcal{Z} = - \sum_{\varepsilon} \ln (1 - e^{-\beta(\varepsilon-\mu)})$$

Haciendo uso de la ecuación de Euler, se obtiene que

$$\frac{PV}{kT} = \ln \mathcal{Z} = - \sum_{\varepsilon} \ln (1 - e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}) \quad (9)$$

Si cambiamos la suma por la integral en energía y multiplicando por la degeneración (4):

$$\begin{aligned}
 \frac{PV}{kT} &= - \frac{2g_s V (2m)^{3/2} \pi}{h^3} \int_0^\infty \varepsilon^{1/2} \ln (1 - e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}) d\varepsilon \\
 &= - \frac{2g_s V (2m)^{3/2} \pi}{h^3} \left[\frac{2}{3} \varepsilon^{3/2} \ln (1 - e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}) \Big|_0^\infty - \frac{2\beta}{3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} d\varepsilon \right] \\
 &= \frac{4g_s V (2m)^{3/2} \pi}{3h^3} \frac{1}{kT} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} d\varepsilon \\
 \frac{PV}{kT} &= \frac{g_s V}{\lambda^3} \sum_{l=1}^\infty \frac{z^l}{l^{5/2}} \quad (10)
 \end{aligned}$$

$$\boxed{P = \frac{2}{3} \frac{\langle E \rangle}{V}} \quad (11)$$

$$PV = NkT \frac{\sum_{l=1}^\infty \frac{z^l}{l^{5/2}}}{\sum_{l=1}^\infty \frac{z^l}{l^{3/2}}}$$

Luego la presión a temperatura ambiente resulta, de la ecuación (10):

$$\boxed{P = z \frac{kT}{\lambda^3}} \quad (12)$$

- B. Ahora, puedo calcular el potencial químico μ del sistema utilizando el ensamble canónico, sabiendo que la función partición del sistema es $Z(T, V, N) = \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{\lambda^3}\right)^N$:

$$-\frac{\mu}{kT} = \frac{\partial \ln Z(T, V, N)}{\partial N}$$

de la cual resulta que el potencial químico es:

$$\boxed{\mu = \frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{N \lambda^3}{V} \right)} \quad (13)$$

Sabiendo que la fugacidad es $z = \exp(\beta\mu)$, entonces la presión en función de la temperatura, a temperatura ambiente, es:

$$\begin{aligned} P &= z \frac{kT}{\lambda^3} \\ &= \frac{kT}{\lambda^3} \frac{N \lambda^3}{V} \\ \boxed{P &= \frac{NkT}{V}}, \end{aligned} \quad (14)$$

que resulta ser la ecuación de estado para un gas ideal. Esto es válido ya que a temperatura ambiente, un gas de bosones no presenta características cuánticas, por lo tanto se lo puede considerar un gas ideal. También puede ser calculada la presión en función de la temperatura a partir de la ecuación (11) con las series tomando solo el primer término de las series, ya que ambos se cancelan.

- C. En el caso de que se tenga un gas de fermiones hay que tener en cuenta que la distribución de ocupación de estados es:

$$\langle n_\varepsilon \rangle_{FD} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1}, \quad (15)$$

y la degeneración en los estados es la misma que la encontrada en la ecuación (4), a diferencia que $g_s = 2$. Entonces, el valor medio de la energía es:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \int_0^\infty \varepsilon g(\varepsilon) \langle n_\varepsilon \rangle_{FD} d\varepsilon \\ &= \frac{2g_s V (2mkT)^{3/2} \pi}{h^3} kT \int_0^\infty \frac{x^{3/2}}{z^{-1}e^x + 1} dx. \end{aligned}$$

Nuevamente analizamos la integral:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{x^{n-1}}{z^{-1}e^x + 1} dx &= \int_0^\infty x^{n-1} \frac{dx}{z^{-1}e^x (1 + ze^{-x})} \\ &= \int_0^\infty x^{n-1} \frac{ze^{-x} dx}{1 - (-ze^{-x})} \\ &= \sum_{l=1}^\infty (-1)^{l+1} \frac{z^l}{l^n} \int_0^\infty y^{n-1} e^{-y} dy \\ \int_0^\infty \frac{x^{n-1}}{z^{-1}e^x + 1} dx &= \Gamma(n) \sum_{l=1}^\infty (-1)^{l+1} \frac{z^l}{l^n} \end{aligned} \quad (16)$$

Para el caso de que $n = 5/2$, la energía total resulta en

$$\langle E \rangle = \frac{3}{2} \frac{g_s V}{\lambda^3} kT \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l+1} \frac{z^l}{l^{5/2}} \quad (17)$$

La única diferencia que presenta con el caso de bosones es que la energía tiene un signo alternante en la serie.

La gran función partición de un sistema de fermiones, a diferencia de los bosones, es:

$$\mathcal{Z} = \prod_{\varepsilon} (1 + e^{-\beta(\varepsilon - \mu)}) \quad (18)$$

Y podemos calcular nuevamente la función termodinámica asociada

$$\begin{aligned} \frac{PV}{kT} &= \ln \mathcal{Z} = \sum_{\varepsilon} \ln (1 + e^{-\beta(\varepsilon - \mu)}) \\ &= \frac{2g_s V (2m)^{3/2} \pi}{h^3} \int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} \ln (1 + e^{-\beta(\varepsilon - \mu)}) d\varepsilon \\ &= \frac{2g_s V (2m)^{3/2} \pi}{h^3} \left[\frac{2}{3} \varepsilon^{3/2} \ln (1 + e^{-\beta(\varepsilon - \mu)}) \Big|_0^{\infty} - \frac{2\beta}{3} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1} d\varepsilon \right] \\ &= \frac{4g_s V (2m)^{3/2} \pi}{3h^3} \beta \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1} d\varepsilon \end{aligned}$$

que, utilizando la identidad (16) para $n = 5/2$, obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{PV}{kT} &= \frac{g_s V}{\lambda^3} \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l+1} \frac{z^l}{l^{5/2}} \\ P &= \frac{g_s}{\lambda^3} kT \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l+1} \frac{z^l}{l^{5/2}} \end{aligned}$$

De aquí se puede ver que se obtiene la misma expresión de presión en fermiones y bosones si usamos la ecuación (17)

$$P = \frac{2}{3} \frac{\langle E \rangle}{V} \quad (19)$$

Si se reemplaza el factor $\frac{g_s V}{\lambda^3}$ en la ecuación de $\frac{PV}{kT}$ por el que se obtuvo para el número de partículas la presión para un gas de fermiones en función de la temperatura resulta

$$PV = NkT \frac{\sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l+1} \frac{z^l}{l^{5/2}}}{\sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l+1} \frac{z^l}{l^{3/2}}},$$

que a **temperatura ambiente resulta** la misma ecuación que para un gas ideal

$$P = \frac{NkT}{V} \quad (20)$$

Las únicas diferencias que existen entre los gases de fermiones y bosones a temperaturas altas es que la serie en la ecuación (16) presenta términos alternantes en

el signo, indicando que cuánto menor es la temperatura, i.e fugacidad tendiendo a 1, las correcciones cuánticas nos indican que la presión aumenta de la expresión clásica, a primer orden. Esto es debido al principio de exclusión de Pauli, porque no ocurren condensaciones en fermiones y por lo tanto las partículas comienzan a ejercer presión sobre las vecinas.

- D. Ambos sistemas de partículas exhiben comportamientos particulares a temperaturas muy bajas. Por un lado, los bosones presentan una temperatura determinada, llamada temperatura crítica, que es cuando el potencial químico presenta su máximo valor, el cual es 0. Tener potencial químico nulo implica que al agregar partículas al sistema, la energía del mismo no cambia. A esta temperatura, los bosones comienzan a condensar al nivel mínimo de energía, llamado estado fundamental. Es entonces cuando el número de ocupación de los niveles excitados comienza a disminuir. Debido a que los bosones tienen spin entero, para ellos no aplica el Principio de Exclusión de Pauli, por lo tanto muchas partículas pueden tener la misma ecuación de onda. La presión a estas temperaturas no debe depender entonces del número de partículas en el estado fundamental. Debido a que el potencial químico es nulo, $\mu = 0$, entonces la presión resulta:

$$\frac{PV}{kT} = \frac{g_s V}{\lambda^3} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{5/2}} = \frac{g_s V}{\lambda^3} \zeta(5/2)$$

siendo λ la longitud de onda térmica de De Broglie y $\zeta(5/2)$ la función Zeta de Riemann para $n = 5/2$. Finalmente, la presión para los bosones para $T < T_C$ es

$$P = \frac{g_s kT}{\lambda^3} \zeta(5/2)$$

De aquí es posible observar que si la temperatura del sistema es nula, la presión también lo es.

Para calcular la entropía vamos a hacer uso de la ecuación de Euler, y como el potencial químico es nulo en este rango:

$$\begin{aligned} S &= \frac{E}{T} + \frac{PV}{T} \\ S &= \frac{3}{2} \frac{g_s V k}{\lambda^3} \zeta(5/2) + \frac{g_s V k}{\lambda^3} \zeta(5/2) \\ S &= \frac{5}{2} \frac{g_s V k}{\lambda^3} \zeta(5/2) \end{aligned}$$

De acuerdo a la ecuación anterior, la entropía es proporcional a la temperatura a través de la longitud de onda de De Broglie. Cuando la temperatura es nula, se anula la entropía, indicando que solo hay un microestado posible en el sistema.

Los fermiones, en cambio, sí siguen el Principio de Exclusión de Pauli al tener spin semientero. Estos no van a poder condensar todos a un mismo nivel de energía. El comportamiento que van a seguir es de que el nivel de ocupación de todos los estados energéticos hasta una energía en particular, llamada energía de Fermi, van a estar ocupados por una sola partícula, y para energías más grandes, los estados van a estar desocupados. Esto puede ser expresado en el número de ocupación como sigue:

$$\langle n_\epsilon \rangle_{FD} = \begin{cases} 1, & \text{si } \epsilon < \mu \\ 0, & \text{si } \epsilon > \mu. \end{cases}$$

A temperaturas muy bajas, i.e, $z \ll 1$, las funciones de Fermi-Dirac:

$$\sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l+1} \frac{z^l}{l^n} \approx \frac{(\ln z)^n}{n!}$$

Luego, la presión para un gas de fermiones para temperaturas muy bajas es

$$\begin{aligned} P &= \frac{NkT}{V} \frac{\frac{(\ln z)^{5/2}}{\Gamma(\frac{5}{2})}}{\frac{(\ln z)^{3/2}}{\Gamma(\frac{5}{2})}} \\ &= \frac{NkT}{V} \frac{\Gamma(\frac{5}{2}) (\ln z)^{5/2}}{\Gamma(\frac{7}{2}) (\ln z)^{3/2}} \\ \boxed{P} &= \frac{2}{5} \frac{NkT}{V} \ln(z) \end{aligned}$$

Aquí dejo expresado al potencial químico en función de la temperatura porque para obtenerlo hay que hacer una inversión de series de la siguiente expresión, para así poder obtener la fugacidad en función de la temperatura:

$$\langle N \rangle = \frac{g_s V}{\lambda^3} \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l+1} \frac{z^l}{l^{3/2}}$$

La entropía se calcula de la misma forma que se calculó para el caso de bosones, pero ahora $\mu \neq 0$, entonces

$$\begin{aligned} S &= \frac{E}{T} + \frac{PV}{T} - \frac{\mu(T)N}{T} \\ S &= \frac{3}{2} \frac{g_s V k}{\lambda^3} \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l+1} \frac{z^l}{l^{5/2}} + \frac{g_s V k}{\lambda^3} \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l+1} \frac{z^l}{l^{5/2}} - \frac{\mu(T)N}{T} \\ \boxed{S} &= \frac{5}{2} \frac{g_s V k \pi^2}{\lambda^3} (\beta \mu(T))^{5/2} - \frac{\mu(T)N}{T} \end{aligned}$$

Para el sistema de fermiones también se obtiene que la entropía es nula cuando la temperatura alcanza el cero absoluto, otra vez, porque hay un solo microestado posible.

Problema 2. Determine la dependencia con la temperatura de la energía emitida por un cuerpo negro en un espacio de dimensión d .

- A. Suponga una expansión adiabática del universo desde el estado de recombinación ($T = 3000K$) al estado actual ($T = 3K$), calcule la diferencia de tamaño del universo en el período de tiempo considerado, considere $d = 3$. Ayuda: primeramente calcule la entropía y su dependencia con T y V .

Solución



El modelo de Planck para un cuerpo negro es considerar a que dicho cuerpo está compuesto de fotones oscilando con frecuencia ω . Luego, es posible considerar a un sistema de cuerpo negro como un conjunto de N osciladores armónicos.

Los fotones tienen spín 1 por lo tanto son considerados bosones. Otra propiedad que se cumple para los fotones es que el potencial químico es nulo. Esto es porque los fotones se crean y destruyen continuamente. La distribución de población de estados entonces está dada por la siguiente forma:

$$\langle n_\omega \rangle_\gamma = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \quad (21)$$

Podemos entonces calcular el valor medio de la energía para estos bosones utilizando la ecuación (5). La energía de cada fotón está dada por:

$$\varepsilon = c|p| = \hbar \omega, \quad (22)$$

por lo tanto en nuestro caso $\alpha = c$ y $s = 1$. La degeneración resulta

$$g(\varepsilon) = \frac{V \varepsilon^{d-1} g_s}{2^{d-1} \hbar^d \pi^{d/2} c^d \Gamma(\frac{d}{2})} \quad (23)$$

Debido a que la degeneración es la derivada del volumen de espacio de fases con respecto a la energía es posible obtener la siguiente relación para la frecuencia:

$$g(\varepsilon) = \frac{\partial \Sigma}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \Sigma}{\partial \omega} = \frac{1}{\hbar} g(\omega)$$

Entonces, la degeneración en función de la frecuencia angular es:

$$g(\omega) = \frac{V (\hbar \omega)^{d-1} g_s}{2^{d-1} \hbar^{d-1} \pi^{d/2} c^d \Gamma(\frac{d}{2})} \quad (24)$$

Luego, la energía media queda:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \int_0^\infty \varepsilon g(\varepsilon) \langle n_\varepsilon \rangle_{BE} d\varepsilon \\ &= \int_0^\infty \frac{V g_s}{2^{d-1} \hbar^{d-1} \pi^{d/2} c^d \Gamma(\frac{d}{2})} (\hbar \omega)^{d-1} \hbar \omega \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \hbar d\omega \\ &= \frac{V g_s}{2^{d-1} \hbar^{d-2} \pi^{d/2} c^d \Gamma(\frac{d}{2})} \int_0^\infty \frac{(\hbar \omega)^d}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} d\omega \\ &= \frac{V g_s}{2^{d-1} \hbar^{d-2} \pi^{d/2} c^d \Gamma(\frac{d}{2})} \frac{1}{\beta^d} \int_0^\infty \frac{(\beta \hbar \omega)^d}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} d\omega \\ &= \frac{V g_s}{2^{d-1} \hbar^{d-1} \pi^{d/2} c^d \Gamma(\frac{d}{2})} \frac{1}{\beta^{d+1}} \int_0^\infty \frac{x^d}{e^x - 1} dx \end{aligned}$$

Finalmente, sabiendo la solución de las funciones de Bose-Einstein, podemos determinar que la dependencia de la energía con la temperatura para un cuerpo negro es:

$$\langle E \rangle = \frac{V g_s}{2^{d-1} \hbar^{d-1} \pi^{d/2} c^d \Gamma(\frac{d}{2})} \Gamma(d+1) \zeta(d+1) (kT)^{d+1} \propto T^{d+1} \quad (25)$$

- A. Para poder resolver este ejercicio vamos a hacer uso de la ecuación de Euler que fue vista en la clase de Termodinámica. Esta relaciona las variables intensivas con extensivas de un sistema. En este caso, al tener que $\mu = 0$, la ecuación de Euler se reduce a

$$E = TS - PV,$$

que puede ser despejada para obtener la entropía S :

$$S = \frac{E}{T} + \frac{V}{T} P \quad (26)$$

Para finalmente tener una expresión para la entropía es necesario calcular, en primer lugar la presión, ya que la energía está dada por la ecuación (25). La presión puede ser calculada para un sistema de bosones como se muestra en la ecuación (9):

$$\begin{aligned} \frac{PV}{kT} &= - \sum_{\varepsilon} \ln(1 - e^{-\beta\varepsilon}) \\ &= \frac{V g_s}{2^{d-1} \hbar^{d-2} \pi^{d/2} c^d \Gamma(\frac{d}{2})} \int_0^{\infty} \varepsilon^{d-1} \ln(1 - e^{-\beta\varepsilon}) d\varepsilon \\ &= \frac{V g_s}{2^{d-1} \hbar^{d-2} \pi^{d/2} c^d \Gamma(\frac{d}{2})} \left[\frac{\varepsilon^d}{d} \ln(1 - e^{-\beta\varepsilon}) \Big|_0^{\infty} - \frac{\beta}{d} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^d}{e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon \right] \\ &= \frac{\beta}{d} \frac{V g_s}{2^{d-1} \hbar^{d-2} \pi^{d/2} c^d \Gamma(\frac{d}{2})} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^d}{e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon \\ &= \frac{\beta}{d} \frac{V g_s}{2^{d-1} \hbar^{d-2} \pi^{d/2} c^d \Gamma(\frac{d}{2})} \frac{1}{\beta^{d+1}} \int_0^{\infty} \frac{x^d}{e^x - 1} dx \\ &= \frac{\beta}{d} \frac{V g_s}{2^{d-1} \hbar^{d-2} \pi^{d/2} c^d \Gamma(\frac{d}{2})} \Gamma(d+1) \zeta(d+1) (kT)^{d+1} \end{aligned}$$

Luego, se tiene que:

$$\frac{PV}{T} = \frac{1}{d} \frac{V g_s}{2^{d-1} \hbar^{d-2} \pi^{d/2} c^d \Gamma(\frac{d}{2})} \Gamma(d+1) \zeta(d+1) k^{d+1} T^d$$

La ecuación (26) resulta

$$S = \frac{V g_s}{2^{d-1} \hbar^{d-1} \pi^{d/2} c^d \Gamma(\frac{d}{2})} \Gamma(d+1) \zeta(d+1) k^{d+1} T^d \left(1 + \frac{1}{d} \right)$$

Luego, si tengo un proceso adiabático reversible, la entropía permanece constante, entonces

$$S_f = S_i$$

$$V_f T_f^d = V_i T_i^d \Rightarrow V_f = \left(\frac{T_i}{T_f} \right)^d V_i$$

En el caso que las dimensiones sean 3 ($d = 3$), podemos utilizar la fórmula del volumen de una esfera

$$\frac{4}{3}\pi R_f^3 = \left(\frac{T_i}{T_f}\right)^3 \frac{4}{3}\pi R_i^3$$
$$R_f = \frac{T_i}{T_f} R_i$$

De lo cual finalmente obtenemos

$$R_f = 1000 R_i$$

Problema 3. Describa el modelo de Debye para un sólido cristalino de dimensión d .

- A. Utilice el resultado anterior para describir el calor específico de un metal tridimensional.
- B. Describa la contribución al calor específico de los electrones de conducción.

Solución

El modelo del sólido cristalino de Einstein propone que todos los átomos de una red cristalina de una molécula oscilan con la misma frecuencia ω . Si bien este modelo era correcto para temperaturas altas, no ajustaba correctamente a temperaturas bajas. Se encuentra que la relación funcional de éste es exponencial para temperaturas bajas, pero los resultados experimentales no coincidían con el modelo.

Años más tarde Debye propone que los átomos no oscilan todos con la misma frecuencia, sino que las frecuencias de cada uno están en un rango de 0 a ω_D , siendo ω_D la frecuencia de Debye. De esta forma fue posible ajustar correctamente los datos experimentales.

Para un conjunto de osciladores que oscilan a distintas frecuencias el valor medio de la energía es

$$\langle E \rangle = \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{e^{\beta \hbar \omega_i} - 1}.$$

El calor específico se calcula como

$$\begin{aligned} C_v &= \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \\ &= \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{(e^{\beta \hbar \omega_i} - 1)^2} \frac{-\hbar \omega_i}{k T^2} e^{\beta \hbar \omega_i} \\ &= - \sum_i k \frac{(\beta \hbar \omega_i)^2 e^{\beta \hbar \omega_i}}{(e^{\beta \hbar \omega_i} - 1)^2} \end{aligned}$$

Ahora en cambio, tengo un conjunto de osciladores cuyas frecuencias generan un espectro por lo tanto es posible cambiar la suma por una integral y multiplicar por la degeneración en frecuencias:

$$C_v = - \int_0^{\omega_D} k g(\omega) \frac{(\beta \hbar \omega)^2 e^{\beta \hbar \omega}}{(e^{\beta \hbar \omega} - 1)^2} d\omega$$

Debido a que en el modelo de Debye hay un espectro de frecuencias, la densidad integrada en dicho intervalo me da como resultado el número total de modos de oscilación, el cual es $3N$. Utilizando el resultado de la ecuación (24):

$$\begin{aligned} dN &= \int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega \\ &= \int_0^{\omega_D} \frac{V (\hbar \omega)^{d-1} g_s}{2^{d-1} \hbar^{d-1} \pi^{d/2} c^d \Gamma(\frac{d}{2})} d\omega \\ &= \frac{V g_s}{2^{d-1} \hbar^{d-1} \pi^{d/2} c^d \Gamma(\frac{d}{2})} \int_0^{\omega_D} (\hbar \omega)^{d-1} d\omega \\ &= \frac{V \hbar^{d-1} g_s}{2^{d-1} \hbar^{d-1} \pi^{d/2} c^d \Gamma(\frac{d}{2})} \int_0^{\omega_D} \omega^{d-1} d\omega \\ &= \frac{V \hbar^{d-1} g_s}{2^{d-1} \hbar^{d-1} \pi^{d/2} c^d \Gamma(\frac{d}{2})} \frac{\omega_D^d}{d} \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta que la primera fracción es $g(\omega)/\omega^{d-1}$, esto resulta en

$$dN = \frac{g(\omega)}{\omega^{d-1}} \frac{\omega_D^d}{d} \Rightarrow g(\omega) = \frac{Nd^2}{\omega_D^d} \omega^{d-1}$$

Finalmente es posible calcular el calor específico de la red cristalina:

$$\begin{aligned} C_v &= \int_0^{\omega_D} k \frac{Nd^2}{\omega_D^d} \omega^{d-1} \frac{(\beta \hbar \omega)^2 e^{\beta \hbar \omega}}{(e^{\beta \hbar \omega} - 1)^2} d\omega \\ &= \frac{Nd^2 k}{\omega_D^d} \frac{1}{(\beta \hbar)^{d-1}} \int_0^{\omega_D} (\beta \hbar \omega)^{d-1} \frac{(\beta \hbar \omega)^2 e^{\beta \hbar \omega}}{(e^{\beta \hbar \omega} - 1)^2} d\omega \\ &= \frac{Nd^2 k}{(\beta \hbar \omega_D)^d} \int_0^{x_D} \frac{x^{d+1} e^x}{(e^x - 1)^2} dx \\ &= dNk \frac{d}{x_D^d} \int_0^{x_D} \frac{x^{d+1} e^x}{(e^x - 1)^2} dx \end{aligned}$$

A la integral se la llama función de Debye y se la nota como $\mathcal{D}(x_D)$. Si a dicha función la integramos por partes:

$$\mathcal{D}(x_D) = \frac{d}{x_D^d} \left[-\frac{x_D^{d+1}}{e^{x_D} - 1} + (d+1) \int_0^{x_D} \frac{x^d}{e^x - 1} dx \right]$$

Podemos ver que cuando $x_D \rightarrow \infty$, es decir, temperaturas cercanas al cero absoluto,

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(x_D) &\approx -dx_D e^{-x_D} + \frac{d(d+1)}{x_D^d} \int_0^\infty \frac{x^d}{e^x - 1} dx \\ &\approx \frac{d(d+1)}{x_D^d} \Gamma(d+1) \zeta(d+1) \\ &\approx d(d+1) \Gamma(d+1) \zeta(d+1) \left(\frac{kT}{\hbar \omega_D} \right)^d \end{aligned}$$

donde el primer término tiende a cero debido a la exponencial y la integral es la conocida función de Bose-Einstein. El calor específico, a temperaturas muy bajas, queda:

$$C_v = dNkd(d+1)\Gamma(d+1)\zeta(d+1) \left(\frac{kT}{\hbar \omega_D} \right)^d.$$

Por otro lado, para temperaturas altas $x_D \rightarrow 0$, las funciones de Debye $\mathcal{D}(x_D) \rightarrow 1$, entonces $C_v \rightarrow dNk$.

- A. Para el caso en tres dimensiones tengo que $d = 3$, entonces los resultados anteriores del calor específico se convierten en:

$$C_v = \begin{cases} \frac{3}{5} Nk\pi^4 \left(\frac{kT}{\hbar \omega_D} \right)^3 & \text{cuando } T \rightarrow 0 \\ 3Nk & \text{cuando } T \rightarrow \infty \end{cases}$$

- B. Como se puede ver para los resultados obtenidos anteriormente, el calor específico de una red cristalina decrece como T^3 para temperaturas muy bajas. Sin embargo, dichos valores frente a los del calor específico de un gas de electrones son muy bajos,

ya que el C_v de un gas de electrones es lineal con la temperatura a primer orden. Luego, la contribución de la red cristalina al calor específico se hace insignificante y solo prevalece la de los electrones. Si se realiza un gráfico C_v/T vs. T^2 , se observa que los datos experimentales siguen el comportamiento de una recta, la cual presenta una ordenada al origen que junto con la pendiente, ayudan a determinar ciertos parámetros del sistema.

Problema 4. Un electrón en un campo magnético H tiene una energía $\pm\mu_B H$ si el momento magnético de espín es paralelo o antiparalelo al campo. Calcule la susceptibilidad de un sistema de electrones completamente degenerado.

Solución

Sabemos que la energía de cada electrón está dada por:

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} \pm \mu_B H$$

donde el signo positivo indica que el espín del electrón está antiparalelo al campo magnético, y el signo negativo, paralelo. Podemos contar el número de electrones que están con el estado de espín paralelo y con espín antiparalelo. Para ello diferenciamos dos casos diferentes:

$$\begin{cases} \varepsilon_+ = \frac{p_+^2}{2m} - \mu_B H, & \text{si } \boldsymbol{\mu}_B \cdot \mathbf{H} = +1 \\ \varepsilon_- = \frac{p_-^2}{2m} + \mu_B H, & \text{si } \boldsymbol{\mu}_B \cdot \mathbf{H} = -1. \end{cases} \quad (27)$$

Como el sistema está completamente degenerado, esto implica que la temperatura del sistema es nula. Aquí ocurren dos casos también, (para $T \rightarrow 0$):

$$\langle n_\varepsilon \rangle = \begin{cases} 1, & \text{si } \varepsilon < \mu \\ 0, & \text{si } \varepsilon > \mu. \end{cases}$$

Es posible calcular el número de ocupación para el primer caso de (27). Para ello podemos notar que la energía cinética del sistema se encuentra en el rango $[0, \varepsilon_F + \mu_B H]$, siendo ε_F la energía de Fermi. Luego, se puede calcular el número de electrones en el primer estado como el volumen del espacio de fases, teniendo en cuenta los límites para p_+ :

$$\begin{aligned} \langle N_+ \rangle &= \int_0^\infty g(\varepsilon_+) d\varepsilon_+ = \frac{1}{h^3} \int_{-\infty}^\infty d^3\mathbf{r} \int_{0 < \frac{p_+^2}{2m} < \varepsilon_F + \mu_B H} d^3\mathbf{p}_+ \\ &= \frac{4\pi V}{h^3} \int_0^{\sqrt{2m(\varepsilon_F + \mu_B H)}} p^2 dp \\ \boxed{\langle N_+ \rangle &= \frac{4\pi V (2m)^{3/2}}{3h^3} (\varepsilon_F + \mu_B H)^{3/2}} \end{aligned}$$

Lo mismo puedo hacer para el segundo caso de (27):

$$\begin{aligned} \langle N_- \rangle &= \int_0^\infty g(\varepsilon_-) d\varepsilon_- = \frac{1}{h^3} \int_{-\infty}^\infty d^3\mathbf{r} \int_{0 < \frac{p_-^2}{2m} < \varepsilon_F - \mu_B H} d^3\mathbf{p}_- \\ &= \frac{4\pi V}{h^3} \int_0^{\sqrt{2m(\varepsilon_F - \mu_B H)}} p^2 dp \\ \boxed{\langle N_- \rangle &= \frac{4\pi V (2m)^{3/2}}{3h^3} (\varepsilon_F - \mu_B H)^{3/2}} \end{aligned}$$

Luego, el momento magnético (M) será la diferencia de electrones con espín paralelo a los cuales tienen espín antiparalelo, multiplicado por el momento magnético intrínseco (μ_B):

$$\begin{aligned} M &= \mu_B (\langle N_+ \rangle - \langle N_- \rangle) \\ &= \frac{4\pi V \mu_B (2m)^{3/2}}{3h^3} [(\varepsilon_F + \mu_B H)^{3/2} - (\varepsilon_F - \mu_B H)^{3/2}] \end{aligned}$$

La susceptibilidad magnética se obtiene tomando la derivada de la magnetización M con respecto al campo magnético H , y con $H \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned}\chi &= \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\partial M}{\partial H} = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{4\pi V \mu_B^2 (2m)^{3/2}}{3h^3} \frac{3}{2} \mu_B [(\varepsilon_F + \mu_B H)^{1/2} + (\varepsilon_F - \mu_B H)^{1/2}] \\ &= \frac{4\pi V \mu_B (2m)^{3/2}}{3h^3} \frac{3}{2} 2\varepsilon_F^{1/2} \\ &\boxed{\chi = \frac{4\pi V \mu_B (2m)^{3/2} \varepsilon_F^{1/2}}{h^3}}\end{aligned}$$

La energía de Fermi puede ser determinada calculando el número total de electrones en el sistema, utilizando la degeneración en energía de la ecuación (4), pero con $g_s = 1$:

$$\begin{aligned}N &= \int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon) d\varepsilon \\ N &= \frac{2V(2m)^{3/2}\pi}{h^3} \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon^{1/2} d\varepsilon \\ N &= \frac{2V(2m)^{3/2}\pi}{h^3} \frac{2}{3} \varepsilon_F^{3/2} \Rightarrow \varepsilon_F = \left(\frac{3Nh^3}{4V(2m)^{3/2}\pi} \right)^{2/3}\end{aligned}$$

Finalmente

$$\begin{aligned}\chi &= \frac{4\pi V \mu_B (2m)^{3/2}}{h^3} \left(\frac{3Nh^3}{4V(2m)^{3/2}\pi} \right)^{1/3} \\ \chi &= \frac{(4\pi V)^{2/3} 2m \mu_B (3N)^{1/3}}{h^2} \\ &\boxed{\chi = \frac{2m \mu_B}{h^2} (3N(4\pi V)^2)^{1/3}}\end{aligned}$$

Problema 5. La decoherencia cuántica explica cómo un estado cuántico entrelazado puede dar lugar a un estado físico clásico (no entrelazado). En este caso, nos interesa mostrar como la interacción del sistema cuántico con el resto del universo, un observador, en este caso representado por un fotón, produce un cambio en la entropía. Para esto consideramos el estado del electrón:

$$|\Psi_e\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle,$$

con $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$ los estados de spin arriba y abajo, respectivamente, y $\alpha^2 + \beta^2 = 1$; y el estado del electrón y fotón:

$$|\Psi_{e/f}\rangle = \alpha|\uparrow\rangle \otimes |+\rangle + \beta|\downarrow\rangle \otimes |-\rangle,$$

con $|+\rangle$ y $|-\rangle$ los estados del fotón.

A. Obtenga la expresión de la matriz densidad de ambos estados.

B. Calcule la entropía antes y después de la observación y discuta el resultado.

Solución

Se sabe que la matriz densidad tiene la forma:

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{Z(T, V, N)}$$

o, los elementos del operador en una determinada base, por ejemplo en un estado Ψ :

$$\rho_{mn} = \langle\Psi_m|\hat{\rho}|\Psi_n\rangle.$$

Luego, para el estado $|\Psi_e\rangle$ tengo que:

$$\begin{aligned}\rho_{e'e} &= \langle\Psi'_e|\hat{\rho}|\Psi_e\rangle = (\langle\uparrow'|\alpha^* + \langle\downarrow'|\beta^*)(\alpha\hat{\rho}|\uparrow\rangle + \beta\hat{\rho}|\downarrow\rangle) \\ \rho_{e'e} &= \frac{e^{-\beta E_e}}{Z(T, V, N)}(\alpha^2\langle\uparrow|\uparrow\rangle + \beta^2\langle\downarrow|\downarrow\rangle + \alpha^*\beta\langle\uparrow|\downarrow\rangle + \beta^*\alpha\langle\downarrow|\uparrow\rangle) \\ \rho_{e'e} &= \frac{e^{-\beta E_e}}{Z(T, V, N)}\delta_{e'e}\end{aligned}$$

Ya que se hizo uso de la condición de $\alpha^2 + \beta^2 = 1$.

Para el otro estado, en cambio, tenemos:

$$\begin{aligned}\rho_{(e/f)'(e/f)} &= \langle\Psi'_{e/f}|\hat{\rho}|\Psi_{e/f}\rangle = (\langle\uparrow'|\otimes\langle+|\alpha^* + \langle\downarrow'|\otimes\langle-|\beta^*)(\alpha\hat{\rho}|\uparrow\rangle\otimes|+\rangle + \beta\hat{\rho}|\downarrow\rangle\otimes|-\rangle) \\ &= \frac{e^{-\beta E_{e/f}}}{Z(T, V, N)}(\alpha^2\langle\uparrow'|\uparrow\rangle\langle+|+\rangle + \beta^2\langle\downarrow'|\downarrow\rangle\langle-|-\rangle + \alpha^*\beta\langle\uparrow'|\downarrow\rangle\langle+|-\rangle + \beta^*\alpha\langle\downarrow'|\uparrow\rangle\langle-|+\rangle) \\ \rho_{(e/f)'(e/f)} &= \frac{e^{-\beta E_{e/f}}}{Z(T, V, N)}\delta_{e'e}\end{aligned}$$