

# Mecánica Estadística: Taller Procesos Estocásticos y Estadísticas Cuánticas

## 1. El teorema de fluctuación madre

Existe un teorema de fluctuación propuesto por Galvin E. Crooks del cual se pueden deducir todos los demás. Aquí veremos una deducción alternativa de ese teorema (ver [https://www.youtube.com/watch?v=hK0\\_wvgRMN8](https://www.youtube.com/watch?v=hK0_wvgRMN8) y <https://www.youtube.com/watch?v=fJ0CTjJ8UKg> )

La propuesta básica de Udo Seifert es que el cambio de entropía total al recorrer un camino hacia adelante  $\{x_i\}$  es

$$\Delta S_{\text{total}}^{\text{for}}(\{x_i\}) = k_B \ln \frac{P_{\text{for}}(\{x_i\})}{P_{\text{rev}}(\{x_i\})} ,$$

Y por lo tanto  $\Delta S_{\text{total}}^{\text{rev}}(\{x_i\}) = -\Delta S_{\text{total}}^{\text{for}}(\{x_i\})$ .

Considere un funcional de la trayectoria  $\Omega_{\text{for}}(\{x_i\})$  (es decir, un operador que a cada trayectoria le asigna un número real) que sea invariante bajo la reversión temporal, es decir que  $\Omega_{\text{rev}}(\{x_i\}) = \Omega_{\text{for}}(\{x_i\})$ .

- a) Demuestre que, al promediar sobre todas las trayectorias  $\{x_i\}$ ,

$$\langle \Omega \rangle_{\text{rev}} = \langle e^{-\Delta S_{\text{total}}} \Omega \rangle_{\text{for}} .$$

Este es el teorema madre.

En clase vimos que si el proceso inicia en equilibrio, se desarrolla fuera de equilibrio y termina en equilibrio, todo a temperatura  $T$ , entonces  $\Delta S_{\text{total}}^{\text{for}}(\{x_i\}) = \Delta W_{\text{entra}}^{\text{for}}(\{x_i\}) - \Delta F$ .

- b) Tome  $\Omega_{\text{for}}(\{x_i\}) = 1$  y demuestre a partir del teorema madre que

$$\langle e^{-\beta \Delta W_{\text{entra}}^{\text{for}}} \rangle = e^{-\beta \Delta F} , \text{ la igualdad de Jarzynski.}$$

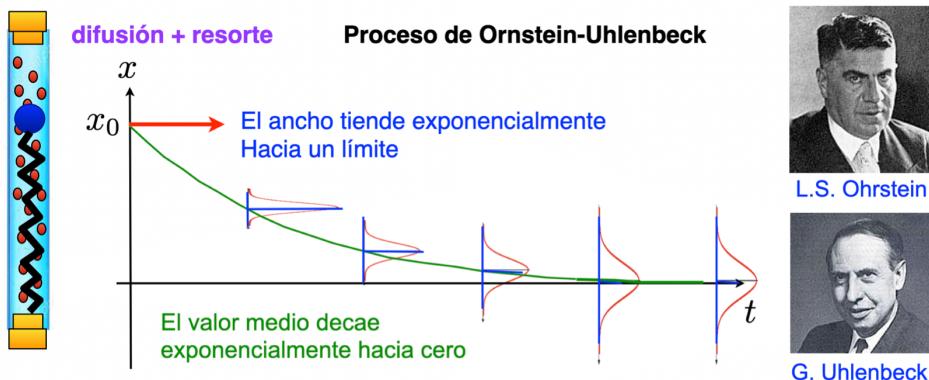
- c) Tome  $\Omega_{\text{for}}(\{x_i\}) = \delta(\Delta W_{\text{entra}}^{\text{for}}(\{x_i\}) - \Delta W')$  y demuestre a partir del teorema madre que

$$P_{\text{for}}(\Delta W') = \exp\left(\frac{\Delta W' - \Delta F}{k_B T}\right) P_{\text{rev}}(-\Delta W') , \text{ la relación de Crooks.}$$

- d) Tome  $\Omega_{\text{for}}(\{x_i\}) = \delta(\Delta S_{\text{total}}^{\text{for}}(\{x_i\}) - \Delta S')$  y demuestre a partir del teorema madre que

$$P_{\text{for}}(\Delta S') = \exp\left(\frac{\Delta S'}{k_B}\right) P_{\text{rev}}(-\Delta S') , \text{ la relación de Crooks.}$$

## 2. Trabajo, calor y teoremas de fluctuación en un proceso estocástico: un cambio instantáneo en un oscilador armónico



En clase vimos que uno de los modelos más sencillos que permiten estudiar la diferencia entre trabajo y calor de manera analítica es el de un oscilador armónico de masa  $m$  y resorte con constante  $k$  sujeto a movimiento browniano, descrito por la ecuación de movimiento

$$\dot{v} = -\gamma \dot{x} - \frac{k}{m}x + b\xi(t)$$

, con  $\xi(t)$  una variable aleatoria descorrelacionada, que en el límite sobreamortiguado  $\nu \rightarrow 0$  se convierte en

$$\dot{x} = -\frac{\kappa x}{m\gamma} + \left( \frac{2k_B T}{m\gamma} \right)^{1/2} \xi(t),$$

, donde  $k_B T = mb^2/\gamma$ . Esta ecuación de movimiento corresponde a un proceso estocástico de Ornstein-Uhlenbeck. Si a  $t = 0$  tenemos completa certeza de que la masa se encuentra en  $x_0$ , la probabilidad de transición  $W(x, t|x_0, 0)$  de que luego de un tiempo  $t$  se encuentre en  $x$  es

$$W_k(x, t|x_0, 0) = \frac{1}{\sigma(t)\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu(t)}{\sigma(t)}\right)^2}$$

con

$$\mu(t) = ax_0 , \quad \sigma(t) = \sqrt{\frac{k_B T}{\kappa}[1 - a^2]} , \quad a = e^{-\frac{kt}{m\gamma}} .$$

Además, en este límite sobreamortiguado la energía es completamente potencial,

$$E(x) = \frac{1}{2}kx^2 .$$

Considere que el oscilador se encuentra desde  $t = -\infty$  con una constante de resorte  $k = k_1$ . Luego, a  $t = 0$  el sistema ha alcanzado una distribución de equilibrio

$$P_{\text{start}}(x_0) = \frac{1}{\sigma_0\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x_0}{\sigma_0}\right)^2} , \quad \text{con} \quad \sigma_0 = \sqrt{\frac{k_B T}{k_0}}$$

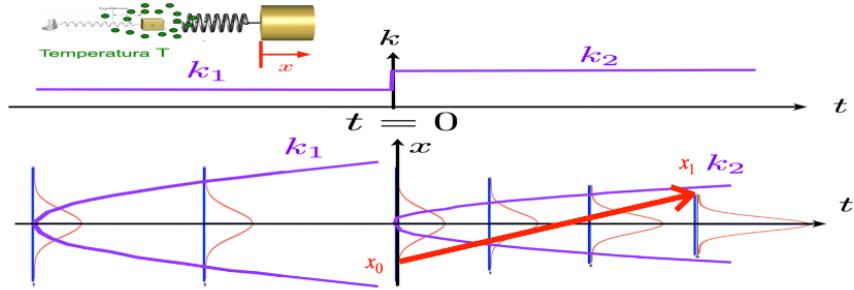
b) Confirme mediante integración por partes que

$$\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\sigma}\right)^2\right] dx = \sigma^2$$

Y utilice este resultado para deducir que la energía promedio a  $t = 0$  es

$$\langle E \rangle_0 = \int_{-\infty}^{\infty} E(x_0) P_{\text{start}}(x_0) dx_0 = \frac{1}{2}k_0\sigma_0^2$$

Ahora consideremos que la constante de resorte cambia súbitamente su valor de  $k = k_0$  a  $k = k_1$  justo cuando  $t = 0$ , como muestra la figura.



c) Utilizando la expresión general,

$$P_{end}(x_1, t) = \int_{-\infty}^{\infty} W_{k_1}(x_1, t | x_0, 0) P_{start}(x_0) dx_0 ,$$

deduzca que

$$P_{end}(x_1, t) = \frac{1}{\tilde{\sigma}(t)\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}(\frac{x_1}{\tilde{\sigma}(t)})^2},$$

$$, \text{ con } \tilde{\sigma}(t) = \sqrt{\frac{k_B T}{\tilde{k}(t)}} \text{ y } \tilde{k}(t) = \frac{k_0 k_1}{k_0 + (k_1 - k_0)e^{-2k_B T/(m\gamma)}}$$

, y que, por lo tanto, la energía promedio a tiempo  $t$  es

$$\langle E \rangle_t = \int_{-\infty}^{\infty} E(x_1) P_{end}(x_1) dx_0 = \frac{1}{2} \tilde{k}(t) \sigma(t)^2$$

Ayuda:

(1) Escriba

$$P_{end}(x_1, t) = \frac{1}{2\pi\sigma_0\sigma_x(t)} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-Q(t)] dx_0 , \text{ con } Q(t) = \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{x_1 - \mu(t)}{\sigma_x(t)} \right)^2 + \left( \frac{x_0}{\sigma_0} \right)^2 \right]$$

(2) Demuestre que

$$= \frac{1}{2k_B T A(t)} \left[ B(t) \left( x_0^2 - \frac{2k_1 q(t)}{B(t)} x_1 x_0 \right) + k_1 x_1^2 \right] ,$$

$$\text{con } A(t) = 1 - q^2(t) , \quad B(t) = k_0 + (k_1 - k_0)q^2(t) \quad \text{y} \quad q(t) = e^{-\frac{k_B T}{m\gamma}} .$$

(3) Complete cuadrados en la expresión  $\left( x_0^2 - \frac{2k_1 q(t)}{B(t)} x_1 x_0 \right)$  y demuestre que

$$Q(t) = \frac{1}{2k_B T A(t)} \left[ B(t) \left( x_0 - \frac{k_1 q(t)}{B(t)} x_1 \right)^2 + \left( 1 - \frac{k_1 q^2(t)}{B(t)} \right) k_1 x_1^2 \right] .$$

(4) Demuestre que

$$\left( 1 - \frac{k_1 q^2(t)}{B(t)} \right) = \frac{A(t)}{B(t)} k_0 ,$$

y que por lo tanto

$$Q(t) = \frac{1}{2k_B T} \left[ \frac{B(t)}{A(t)} \left( x_0 - \frac{k_1 q(t)}{B(t)} x_1 \right)^2 + \frac{k_0 k_1}{B(t)} x_1^2 \right]$$

(5) Con este resultado, y recordando que  $\frac{k_0 k_1}{B(t)} = \tilde{k}(t)$  y  $\sigma_x^2(t) = \frac{k_B T}{k_1} A(t)$ , concluya que

$$Q(t) = \frac{1}{2} \left[ \frac{\tilde{\sigma}^2(t)}{\sigma_0^2 \sigma_x^2(t)} \left( x_0 - \frac{k_1 q(t)}{B(t)} x_1 \right)^2 + \frac{x_1^2}{\tilde{\sigma}^2(t)} \right]$$

- (6) Finalmente, reemplace en (1) e integre, utilizando las propiedades de la integral gaussiana, para concluir que

$$P_{\text{end}}(x_1, t) = \frac{1}{\tilde{\sigma}(t)\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x_1}{\tilde{\sigma}(t)}\right)^2}.$$

- d) La probabilidad de que el oscilador vaya desde  $x_0$  a  $t = 0$  hasta  $x_1$  a tiempo  $t$  (es decir, que recorra el camino  $\{x_0, x_1\}$ ) es

$$P_{\text{for}}(\{x_0, x_1\}) = P_{\text{start}}(x_0)W(x, t|x_0, 0)$$

El cambio de energía al recorrer ese camino es

$$\Delta E(\{x_0, x_1\}) = \frac{1}{2}k_1 x_1^2 - \frac{1}{2}k_0 x_0^2$$

Deduzca, por lo tanto, que el cambio promedio de energía al pasar de  $t = 0$  a  $t = t$  es

$$\begin{aligned} \langle \Delta E \rangle_{0 \rightarrow t} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta E(\{x_0, x_1\}) P_{\text{for}}(\{x_0, x_1\}) dx_0 dx_1 \\ &= \frac{1}{2}k_1 \sigma(t)^2 - \frac{1}{2}k_0 \sigma_0^2 = \langle E \rangle_t - \langle E \rangle_0 , \end{aligned}$$

- e) El trabajo es el cambio promedio de energía debido solamente a cambios en la constante del resorte  $k$ .

$$\Delta W(\{x_0, x_1\}) = - \left[ \frac{1}{2}k_1 x_0^2 - \frac{1}{2}k_0 x_0^2 \right]$$

Deduzca, por lo tanto, que el trabajo realizado por el resorte al pasar de  $t = 0$  a  $t = t$  es

$$\begin{aligned} \delta W &= \langle \Delta W \rangle_{0 \rightarrow t} = - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta W(\{x_0, x_1\}) P_{\text{for}}(\{x_0, x_1\}) dx_0 dx_1 \\ &= -\frac{1}{2} (k_1 - k_0) \sigma_0^2 . \end{aligned}$$

- f) Por su parte, el calor se halla restando del cambio promedio de energía el trabajo realizado sobre el sistema. Con los resultados anteriores, deduzca que

$$\langle \Delta Q \rangle_{0 \rightarrow t} = \langle \Delta E \rangle_{0 \rightarrow t} + \langle \Delta W \rangle_{0 \rightarrow t} = \frac{1}{2}k_1(\sigma(t)^2 - \sigma_0^2)$$

### 3. Simulación por computador de la difusión.

Considere un grano de polen moviéndose con difusión libre dentro de un tubo unidimensional lleno de agua a temperatura  $T$ . Como hemos visto en clase, el efecto de las moléculas de agua sobre el grano de polen que causa el movimiento browniano se puede resumir como el efecto combinado de dos fuerzas: una fuerza aleatoria y una fuerza viscosa,

$$\ddot{x} = -\gamma v + b\hat{\xi}$$

, con  $\hat{\xi}$  una variable aleatoria  $v = \dot{x}$ , la velocidad.

El siguiente algoritmo, propuesto por Van Gunsteren y Berendsen [], simula el movimiento de una partícula cualquiera bajo el efecto del movimiento browniano y de una fuerza externa  $F_{\text{ext}}$  cualquiera. Para este ejercicio, vamos a hacer  $F_{\text{ext}} = 0$ . El algoritmo tiene un arranque (que se hace una sola vez, antes de iniciar) y un paso de tiempo de tamaño  $\Delta t$ , que se repite hasta completar el tiempo máximo de simulación  $t_{\max}$  deseado.

- Inicie con  $x_{t=0} = x_0 = 0$  y  $v_{t=0} = v_0 = 10$ .
- El arranque consiste en calcular la velocidad  $\frac{1}{2}$  paso de tiempo antes,

$$v_{-\Delta t/2} = v_0 - \frac{\Delta t}{2} \frac{F_{\text{ext}}}{m}$$

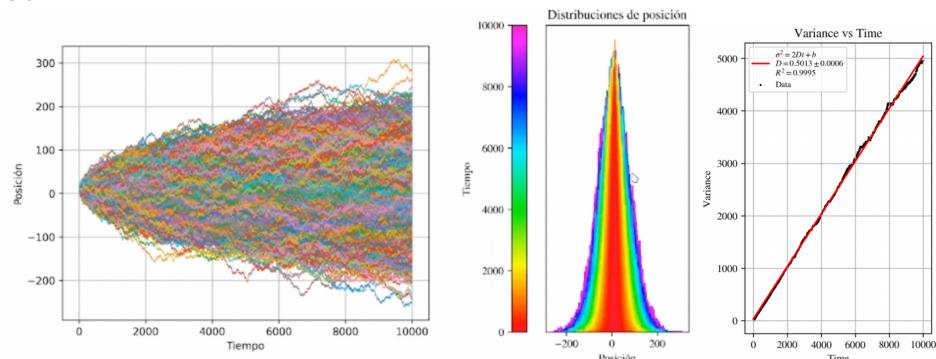
- A cada paso de tiempo, realice la siguiente secuencia de pasos:
  - $v' = v_{t-\Delta t/2} + \Delta t \frac{F_{\text{ext}}}{m}$
  - $\Delta v = -\alpha v' + \sqrt{\alpha(2-\alpha)k_B T/m} \xi$ , donde  $\xi$  es un número aleatorio obtenido de un generador aleatorio gaussiano con media  $\mu = 0$  y desviación estándar  $\sigma = 1$ .
  - $x_{t+\Delta t} = x_t + (v' + \frac{1}{2}\Delta v)\Delta t$ ,
  - $v_{t+\Delta t/2} = v' + \Delta v$

, donde  $\alpha$  y  $\gamma$  cumplen la relación

$$\alpha = 1 - e^{-\gamma \Delta t}$$

El ejercicio consiste en implementar la simulación 1000 veces, acumular los resultados a cada paso de tiempo y mostrar

- que la posición se distribuye aproximadamente como una gausiana con media cero y con una varianza  $\sigma_x^2$  que crece linealmente con el tiempo. Para esta simulación, usen  $m = 1$ ,  $\Delta t = 0.01$ ,  $\gamma = 1$ ,  $T = 4$  y  $t_{\max} = 10000$ .

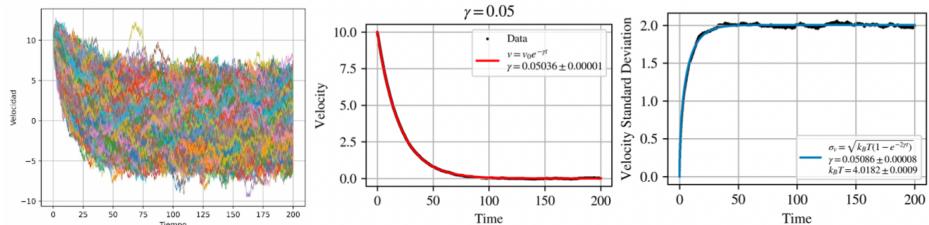


- que las velocidades siguen un proceso de Ohrstein-Uhlenbeck, es decir que evolucionan como una gaussiana cuya media tiende a cero y cuya desviación estándar crece hasta alcanzar la distribución de Maxwell-Boltzmann,

$$P(v, t) = \frac{1}{\sigma_v(t)\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{v-\mu(t)}{\sigma_v(t)}\right)^2} \quad \mu(t) = v_0 e^{-\gamma(t-t_0)}$$

$$\sigma(t) = \sqrt{\frac{k_B T}{m}[1 - e^{-2\gamma(t-t_0)}]}$$

Para esta simulación  $m = 1$ ,  $\Delta t = 0.01$ ,  $\gamma = 0.05$ ,  $T = 4$  y  $t_{\max} = 250$ .

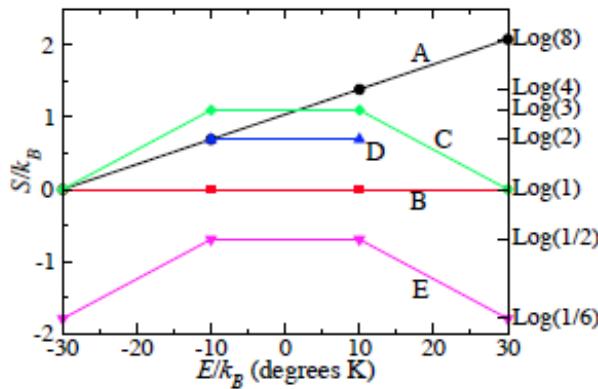


#### 4. Ensamblles y estadísticas cuánticas (Sethna, ejercicio 7.1)

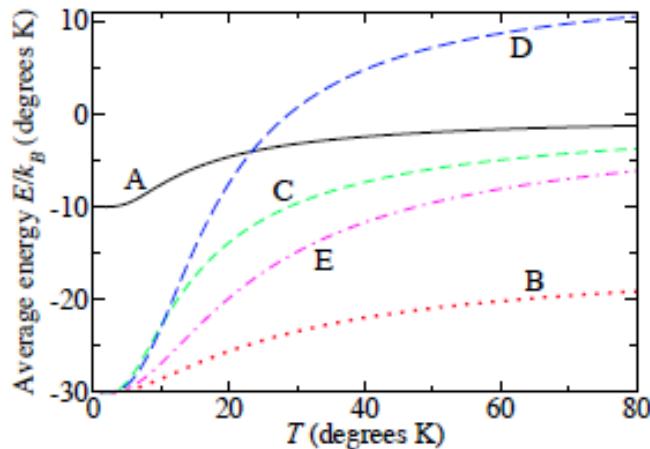
Un sistema tiene dos funciones propias de una sola partícula (es decir, lo que hemos llamado dos niveles), con energías (medidas en grados Kelvin)  $E0/k_B = -10$  y  $E1/kB=10$ . Por medio de un experimento, colocamos tres partículas no-interactantes en el sistema. Las partículas pueden ser:

- I. Bosones idénticos.
- II. Fermiones idénticos de espín 1/2.
- III. Partículas clásicas indistinguibles.

- a) Observe el diagrama de entropía microcanónica en función de la energía que se muestra en la figura. ¿Cuál curva (A,B,C,D ó E) corresponde a cada uno de los tres tipos de partículas enumerados arriba?



- b) Ahora el sistema del punto anterior se mantiene a temperatura constante. ¿Cuál curva (A,B,C,D ó E) corresponde a cada uno de los tres tipos de partículas enumerados arriba?



### 5. ¿Crece la Entropía en Sistemas Cuánticos? (Sethna, ejercicios 7.4, 7.5)

Vimos en clase que el volumen en el espacio de fase de un sistema Hamiltoniano no cambia (teorema de Liouville), y que por lo tanto la entropía de un sistema regido por las leyes de la mecánica clásica,  $S = -k_B \int \rho \ln \rho$ , tampoco cambia con la evolución temporal del sistema, incluso si éste no se encuentra en equilibrio. ¿Qué pasa con un sistema de mecánica cuántica?

- a) Considere un sistema cuántico aislado. Utilice la ecuación de evolución  $\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{H}, \rho]$  para demostrar que la entropía de von Neumann

$$S = -k_B \text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})$$

es independiente del tiempo, donde  $\hat{\rho}$  es una matriz densidad cualquiera. (Ayuda: recuerde que  $\text{Tr}(ABC) = \text{Tr}(CAB) = \text{Tr}(BCA)$ ).

- b) Escriba las matrices densidad,  $\hat{\rho}$  en la base donde  $|V\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  y  $|H\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ , para

- i. Un fotón polarizado verticalmente,  $|V\rangle$ ;
- ii. Un fotón polarizado horizontalmente,  $|H\rangle$ ;
- iii. Un fotón polarizado diagonalmente,  $\left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right)$ , y
- iv. Luz no polarizada,  $\hat{\rho} = \frac{1}{2}|V\rangle\langle V| + \frac{1}{2}|H\rangle\langle H|$

Luego, calcule

- i.  $\text{Tr}(\hat{\rho})$ ,
- ii.  $\text{Tr}(\hat{\rho}^2)$  y
- iii.  $S = -k_B \text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})$

para cada caso, e interprete los resultados.

- c) Considere un estado definido por el operador densidad

$$\hat{\rho} = p|V\rangle\langle V| + (1-p)\frac{1}{2} [(|V\rangle + |H\rangle)(\langle V| + \langle H|)]$$

- i. Evalúe la entropía de von Neumann  $S(p)$ .
- ii. Compare con la entropía de Shannon, dada por

$$H(p) = -p \ln p - (1-p) \ln(1-p) .$$

### 6. La realización experimental del condensado de Bose-Einstein (Sethna, ejercicio 7.14)

En clase hemos estudiado el condensado de Bose-Einstein de bosones libres (sin potencial alguno), pero en el experimento de Anderson, Ensher, Matthews, Wieman y Cornell que lo implementa con átomos de Rubidio-87 se usa un potencial armónico tridimensional con simetría cilíndrica. El objetivo de este ejercicio es estudiar las diferencias que esto genera.

- A. El Ru-87, con 37 protones, 37 electrones y 50 neutrones, ¿es un bosón o un fermión?
- B. A la densidad máxima de  $2.5 \times 10^{12}$  átomos/cm<sup>3</sup>, ¿Cuál sería la temperatura esperada para la transición? ¿Coincide éste valor con la temperatura medida de  $T_C = 170\text{nK}$ ?
- C. La trampa tuvo una energía potencial que era armónica en las tres direcciones, pero con frecuencias  $\omega_x = \omega_y \sim 265\text{Hz}$  y  $\omega_z \sim 750$ . El condensado se observó removiendo abruptamente el potencial y tomando una foto con un láser. Para su conveniencia, asuma que el estado base de una partícula en un oscilador armónico unidimensional con frecuencia  $\omega$  es  $\psi_0(x) = \sqrt[4]{m\omega/\pi\hbar} e^{-m\omega^2/2\hbar}$  en el espacio de posiciones y  $\psi_0(x) = \sqrt[4]{m\omega/\pi\hbar} e^{-p^2/2m\hbar}$  en el espacio de momentos. En tres dimensiones, asuma simplemente que la función de onda es el producto de las funciones en las tres coordenadas. Con esto en mente, ¿La distribución de momentos es más ancha o más angosta en dirección z que en direcciones x e y? ¿Qué anisotropía esperaría uno a temperaturas altas (según la mecánica estadística clásica)?
- D. En el cálculo de la temperatura de transición para el condensado de Bose-Einstein hemos supuesto que los estados son continuos, pero en el caso de un oscilador armónico son claramente discretos. Sin embargo, esto sólo debe generar un efecto apreciable si  $k_B T$  es comparable con el espaciamiento entre niveles. Por lo tanto, compare  $\hbar\omega$  con  $k_B T$  a la temperatura de transición medida en el experimento.
- E. Para bosones en un oscilador armónico a frecuencia  $\omega_0$ , es claro que la densidad de estados entre  $E$  y  $E + dE$  es  $g(E) = 1/(\hbar\omega_0)$ , pero en tres dimensiones es diferente. En efecto, muestre que la densidad de estados de una partícula en un potencial armónico tridimensional,
- $$g(E) = \int_0^\infty g_1(E_1) g_2(E_2) g_3(E_3) \times \delta(E - (E_1 + E_2 + E_3)) dE_1 dE_2 dE_3 ,$$
- es igual a  $1/dE$  veces el número de estados en el espacio tridimensional de ejes ( $E_1, E_2, E_3$ ) con valores entre  $E$  y  $E + dE$ . (Ayuda: Recuerde cuál es el volumen de un simplex tridimensional de lado  $E$ ).
- F. Al trabajar en analogía con el caso de un bosón libre en el espacio tridimensional, encuentre el número máximo de átomos que pueden ocupar el conjunto de estados del oscilador armónico tridimensional a temperatura  $T$  sin que se presente condensación de Bose-Einstein. (Ayuda: recuerde que  $\int_0^\infty \frac{z^2}{(e^z - 1)dz} = 2\zeta(3) = 2.40411$ ). Con este nuevo cálculo, ¿En cuánto estima la temperatura de transición para los átomos de Ru-87 con la densidad límite del punto B?

## 7. Un gas de Fermi y una enana blanca

Por el principio de exclusión de Pauli, un gas de Fermi a temperatura cero tiene una energía promedio y una presión diferentes de cero.

- a) Considere una caja de volumen  $V$  con condiciones de frontera periódicas con  $N$  electrones libres no interactuantes y no relativistas, con  $\epsilon = \frac{p^2}{2m}$ . Discuta por qué el valor de la Energía de Fermi  $E_F$  se puede hallar (a temperatura cero) a partir de

$$N = \int_{\epsilon=0}^{E_F} g(\epsilon) d\epsilon , \text{ con } g(\epsilon) = \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\epsilon}$$

Y deduzca que su valor es

$$E_F = \frac{h^2}{8m} \left( \frac{3N}{\pi V} \right)^{2/3}$$

- b) A partir de allí deduzca que a temperatura cero la energía promedio del gas es

$$\langle E \rangle_0 = \int_{\epsilon=0}^{E_F} \epsilon g(\epsilon) d\epsilon = \frac{V}{5\pi^2} \frac{(2m)^{3/2}}{\hbar^3} E_F^{5/2} = \frac{3}{10} \frac{N\hbar^2}{m} \left( 3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3}$$

- c) Como a  $T = 0$  no hay diferencia entre la energía libre y la energía interna, demuestre que la presión de este gas de Fermi resulta ser

$$P = - \frac{\partial \langle E \rangle_0}{\partial V} = \frac{1}{20} \frac{h^2}{m} \left( \frac{3}{\pi} \right)^{2/3} \left( \frac{N}{V} \right)^{5/3}.$$

Los resultados anteriores aplican solamente para el caso no relativista, donde  $\epsilon = \frac{p^2}{2m}$ .

En el límite contrario (ultrarrelativista),  $\epsilon = pc = \hbar ck$ , con  $c$  la velocidad de la luz.

- d) Combinando los procedimientos vistos en clase para fonones y el proceso del punto a), deduzca que para el caso ultrarrelativista la densidad de estados, la energía de Fermi y la energía promedio a temperatura cero son

$$g(\epsilon) = \frac{V}{(\hbar c)^3 \pi^2} \epsilon^2 , \quad E_F = \hbar c \sqrt[3]{3\pi^2 \frac{N}{V}} , \quad \langle E \rangle_0 = \frac{V}{4\pi^2 \hbar^3 c^3} E_F^4 = \frac{3}{8} \left( \frac{3}{\pi} \right)^{1/3} Nhc \left( \frac{N}{V} \right)^{1/3}$$

- e) Deduzca, a partir de allí, que la presión de un gas de fermiones no interactuantes ultrarrelativistas es

$$P = - \frac{\partial \langle E \rangle_0}{\partial V} = \frac{1}{8} \left( \frac{3}{\pi} \right)^{1/3} hc \left( \frac{N}{V} \right)^{4/3}.$$

Imagine una enana blanca como una esfera de densidad uniforme de núcleos de  $\text{He}^4$  superpuesta con una esfera de densidad uniforme de electrones. Asuma que la energía gravitacional es newtoniana, y es aportada solamente por los núcleos de  $\text{He}^4$ , mientras que la energía química es aportada solamente por el gas de Fermi de electrones, que se asumen no interactuantes y ultrarrelativistas.

- f) Calcule de manera aproximada la energía potencial gravitacional de una esfera con densidad uniforme de masa total  $M$  y radio  $R$ . Para ello, asuma que cada cascarón esférico a distancia  $r$  y de espesor  $dr$  está a un potencial

$$dU_g = -G \frac{M(r)m(r)}{r} ,$$

con  $M(r) = \frac{4}{3}\pi r^3 \rho$ ,  $m(r) = 4\pi r^2 \rho dr$  y  $\rho = M / \left( \frac{4}{3}\pi R^3 \right)$ , e integre para hallar la energía potencial gravitacional

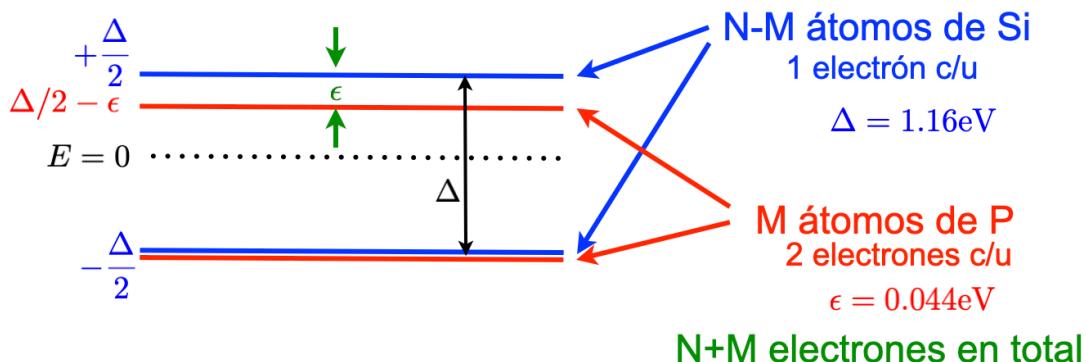
$$U_g = \int_{r=0}^R dU_g .$$

Calcule la energía potencial gravitacional de la esfera de núcleos de Helio.

- g) Sume  $U_g$  con la energía media  $\langle E \rangle_0$  del gas de fermiones no interactuantes ultrarrelativistas y halle, en masas solares, la masa  $M_{CH}$  para la cual la energía total es igual a cero. Para ello, asuma que el número de electrones es igual al número de protones en la estrella, que suponemos hecha exclusivamente de  $\text{He}^4$ , por lo que  $N = 2M/m_{\text{He}4}$ , donde  $m_{\text{He}4}$  es la masa de un átomo de  $\text{He}^4$  (en SI,  $m_p=1.6726\times10^{-27}\text{kg}$ ,  $m_n=1.6749\times10^{-27}\text{kg}$ ,  $m_e=9.1095\times10^{-31}\text{kg}$ ,  $h=6.626\times10^{-34}\text{J}\cdot\text{s}$ ,  $G=6.672\times10^{-11}\text{N}\cdot\text{m}^2/\text{kg}^2$ ).

$^{11}\text{m}^3/(\text{kg}\cdot\text{s}^2)$ ,  $c=3\times 10^8 \text{ m/s}$ ,  $M_\odot = 1.98847 \times 10^{30} \text{ kg}$ ). Compare, sin calcularlo, con el valor más exacto de  $M_{CH} = 1.4M_\odot$  (que se obtiene asumiendo una densidad variable con una ecuación de estado politrópica para el He<sup>4</sup>).

## 8. Un modelo de juguete de un semiconductor dopado (Sethna, Ejercicio 7.12)



Considere un modelo de juguete de un cristal semiconductor de silicio dopado con fósforo, con  $N-M$  átomos de silicio y  $M$  átomos de fósforo, y (por simplicidad) asumamos que los electrones siguen siendo fermiones, pero no tienen sino un estado de espín. Cada átomo de silicio contribuye con un electrón al sistema, y tiene energías  $\pm\Delta/2$ , donde  $\Delta= 1.16\text{eV}$  es el gap de energía para el Silicio. Cada átomo de fósforo contribuye con dos electrones y dos estados, uno a  $-\Delta/2$  y el otro a  $\Delta/2 - \epsilon$ , con  $\epsilon = 0.044 \text{ eV}$  mucho menor que el gap. Resumiendo, el sistema tiene  $N+M$  electrones sin espín,  $N$  estados de valencia con energía  $-\Delta/2$ ,  $M$  estados de impureza de energía  $\Delta/2 - \epsilon$  y  $N-M$  estados en la banda de conducción con energía  $\Delta/2$ .

- Derive una fórmula para el número de electrones en función de la temperatura  $T$  y en potencial químico  $\mu$  para cada uno de los niveles de este sistema.
- ¿Cuál es la probabilidad de ocupación de cada uno de estos niveles en el límite de  $T \rightarrow \infty$ , donde la entropía se maximiza y todos los estados son igualmente probables? (Nota: Considere que en ese límite  $\beta\Delta$  y  $\beta\epsilon$  son despreciables, pero  $\beta\mu$  no lo es).
- Usando el resultado anterior, y recordando que hay  $N+M$  electrones en total, encuentre una fórmula para  $\mu(T)$  válida para  $T$  alta que sea independiente de  $\Delta$  o  $\epsilon$ .
- Dibuje un diagrama de niveles de energía que muestre los niveles llenos y vacíos a  $T=0$ . Con este diagrama en mente, encuentre una fórmula para  $\mu(T)$  en el límite de bajas temperaturas,  $T \rightarrow 0$ . (**Ayuda:** balancee el número de huecos en la banda de impureza con el número de electrones en la banda de conducción. ¿Por qué puede ignorar la banda de valencia?) Además, diga a qué valor independiente de  $T$  tiende el potencial químico cuando  $T \rightarrow 0$ .
- En un centímetro cúbico de silicio hay alrededor de  $M = 10^{16}$  átomos de fósforo y  $N = 5 \times 10^{22}$  átomos de silicio. Utilizando la fórmula del punto anterior que incluye a  $T$ , estime el valor del potencial químico  $\mu$  a temperatura ambiente,  $k_B T = (1/40)\text{eV}$ . Luego, utilizando algún método numérico para hallar los ceros de una función (Ej: bisección, Newton-Rampson o secante) estime el valor de  $\mu$  a temperatura ambiente al igualar exactamente los huecos en la banda de impureza con los electrones en la banda de conducción. Compare este valor con los dos obtenidos en el punto anterior.