

Mecánica Estadística

Práctica 5 - Gases Cuánticos

Problema 1. Gas de Fermiones

Consideremos un gas de fermiones no interactuantes dentro de un recipiente de volumen V . Dada la naturaleza de los fermiones, debemos tratar al gas bajo una estadística de Fermi-Dirac, a partir de la cual podemos determinar el número medio de ocupación de cada nivel:

$$n(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1}$$

y la gran función de partición:

$$\mathcal{Q}_{FD} = \prod_j \left[e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)} + 1 \right],$$

donde μ es el potencial químico del gas.

En el límite de $T = 0$ todos los estados de energía entre 0 y μ están ocupados, mientras que los niveles superiores se encuentran disponibles. En esta situación se considera que el gas está *completamente degenerado*. Dado este estado particular que presentan los gases de fermiones, se define a la energía de Fermi ϵ_F como:

$$\epsilon_F = \mu(T = 0).$$

- (a) Determine el valor medio de número de partículas en el gas (N) en el caso de un gas de Fermi completamente degenerado. Obtenga una expresión de la energía de Fermi en función de N y V , y demuestre que la densidad de estados del gas puede escribirse como:

$$g(\epsilon) = \frac{3}{2} \frac{N}{\epsilon_F} \left(\frac{\epsilon}{\epsilon_F} \right)^{\frac{1}{2}}$$

- (b) Determine el valor medio de la energía interna (E) para el mismo gas completamente degenerado.
- (c) Obtenga una expresión de la presión del gas de Fermi completamente degenerado en función de la energía de Fermi. Demuestre que, al igual que en el caso del gas ideal clásico, se cumple la siguiente relación entre la presión y la energía interna:

$$pV = \frac{2}{3} \langle E \rangle.$$

Resaltar el hecho de que incluso a $T = 0$, el gas de Fermi presenta presiones no nulas.

- (d) **Calor específico.**

Para determinar el calor específico del gas de Fermi, al menos en el rango de muy bajas temperaturas, es necesario salirnos del límite de $T = 0$ para así poder obtener una expresión de la energía media en función de T . La forma correcta de hacerlo sería resolver la integral que involucra la energía interna considerando la expresión analítica del número medio de ocupación

$n(\epsilon)$, método que se conoce como el desarrollo de Sommerfeld (1928). Sin embargo esto requiere mucho trabajo y se escapa de los objetivos del ejercicio.

Nosotros intentaremos una forma alternativa¹, la cual nos permitirá obtener al menos el primer término del desarrollo de Sommerfeld.

Si definimos $\Delta E = E(T) - E(T = 0)$, el calor específico puede calcularse como:

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

ya que restarle la energía del estado fundamental es equivalente a un corrimiento rígido de la energía.

Suponiendo que la cantidad de partículas en el gas no varía significativamente para temperaturas cercanas al cero absoluto, la diferencia entre $N(T)$ y $N(T = 0)$ es aproximadamente nula, y por ende puede ser introducida en la expresión de ΔE (siendo previamente multiplicada por ϵ_F). Esta nueva expresión de ΔE es posible derivarla con respecto a la temperatura para obtener una expresión del calor específico.

Demostrar entonces, que a través de este método obtenemos el primer término del desarrollo de Sommerfeld:

$$C_V \simeq Nk \frac{\pi^2}{2} \frac{kT}{\epsilon_F}.$$

- (e) La capacidad de conducir electricidad que poseen los metales se puede explicar gracias a la presencia de electrones libres en la red cristalina, los cuales puede trasladarse dentro del metal casi sin restricciones. Un método válido para modelizar estos electrones es considerarlos como electrones libres dentro de un pozo de potencial infinito, es decir, como un gas de fermiones no interactuantes. Dado que la masa de un electrón es de $9,109 \cdot 10^{-38} \text{kg}$ y dentro de un metal poseen una densidad de 1 nm^{-3} , calcule la temperatura de Fermi ($T_F = \epsilon_F/k_B$) del gas y determine si el gas se encuentra completamente degenerado a temperatura ambiente.
- (f) Si consideramos que cada átomo de la red cristalina del metal contribuye con un solo electrón libre, obtener la relación que hay entre el calor específico del gas de electrones y el calor específico asociado a los grados de libertad vibracionales del sólido a temperatura ambiente (es válido suponer que el metal responde a la ley de Dulong y Petit a esta temperatura).

¹Este método alternativo se puede encontrar en el libro *Introduction to Solid State Physics*, Kittel, p.151.

Problema 2. Gas de Bosones

Consideremos un gas de bosones no interactuantes dentro de un recipiente de volumen V . Dada la naturaleza de los bosones, debemos tratar al gas bajo una estadística de Bose-Einstein, a partir de la cual podemos determinar el número medio de ocupación de cada nivel:

$$n(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1}$$

donde μ es el potencial químico del gas, el cual satisface la siguiente relación:

$$\mu < \epsilon$$

para todas las energías ϵ accesibles por el sistema.

- (a) Justifique por qué es necesario incluir explícitamente el número de ocupación del nivel fundamental (N_0) a la hora de calcular el número de partículas en el sistema de la siguiente manera:

$$N = N_0 + \int_0^{\infty} g(\epsilon)n(\epsilon)d\epsilon.$$

Obtenga una expresión de N_0 , determine la relación entre él y el potencial químico μ en el caso de que el nivel fundamental posea alta ocupación. Demuestre que en dicha situación, el potencial químico es muy próximo a cero.

- (b) Dado que hemos incluido la cantidad de partículas (N_0) ocupando el nivel fundamental a la hora de calcular la cantidad total N de partículas en el gas, podemos escribir esta última como:

$$N = N_0 + N_e,$$

donde N_e es la cantidad de partículas ocupando los niveles excitados. Obtenga una expresión de N_e en función de la temperatura en el límite de bajas temperaturas.

- (c) Es esperable que a medida que aumentamos la temperatura, la cantidad de bosones en el nivel fundamental vaya mermando. Podemos definir entonces una temperatura característica T_c a partir de la cual ningún bosón ocupa el nivel fundamental, por ende la cantidad total de partículas se encuentran en los estados excitados:

$$N_e(T_c) = N.$$

Obtenga una expresión de T_c en función de la densidad del gas y demuestre que:

$$N_0 = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}} \right]$$

Grafique N_0/N en función de T . Inteprete qué sucede para temperaturas menores a T_c .

- (d) Determine el calor específico del gas de bosones a bajas temperaturas en función de T , N y T_c . Teniendo en cuenta que a altas temperaturas el calor específico del gas coincide con el del gas ideal, realice una gráfica esquemática del calor específico en todo el rango de temperaturas.

Problema 3. Paramagnetismo de Pauli

En prácticas anteriores hemos estudiado el origen del paramagnetismo que presentan ciertos materiales debido a la excitación de los momentos magnéticos intrínsecos de los átomos de la red cristalina. Sin embargo existe otro tipo de paramagnetismo que presentan algunos metales alcalinos y nobles, el cual no posee su origen en los momentos magnéticos de los átomos localizados, sino en la interacción del campo magnético externo con los momentos magnéticos intrínsecos de los electrones de conducción del metal.

Consideremos un metal compuesto por N átomos del mismo tipo, donde cada uno de ellos contribuye con un solo electrón libre al gas de electrones de conducción. Una hipótesis válida es considerar que los electrones de conducción constituyen un gas ideal que no interactúa con los átomos de la red ni entre ellos. Supongamos además que este metal se encuentra a temperatura ambiente y es sometido a un campo magnético externo débil H . Dado que cada electrón interactúa únicamente con este campo magnético externo, los niveles energéticos monoparticulares pueden escribirse como:

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e V^{2/3}} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \pm \mu_B H, \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$

donde V es el volumen que ocupa el metal y el signo del término asociado a la energía de interacción con el campo viene dado por la orientación del spin del electrón: up o down.

- (a) Si suponemos que dentro del metal hay un electrón por cada 10^{-30}m^3 , utilice la expresión de la energía de Fermi obtenida en el problema 1 para determinar el valor de ϵ_F de los electrones de conducción. Obtenga la temperatura de Fermi del gas. ¿Podemos considerarlo completamente degenerado?
- (b) Llamemos N_+ y N_- a la cantidad de electrones con spin orientado en contra y a favor del campo magnético (down y up) respectivamente. Si definimos $g_+(\epsilon)$ y $g_-(\epsilon)$ a las densidades de estado correspondientes a cada grupo de electrones, podemos expresar a N_{\pm} como:

$$N_{\pm} = \frac{1}{2} \int_{\pm \mu_B H}^{\infty} g_{\pm}(\epsilon) n(\epsilon) d\epsilon.$$

Demuestre que las densidades de estado $g_{\pm}(\epsilon)$ pueden expresarse en función de la densidad de estados del gas sin campo magnético de la siguiente manera:

$$g_{\pm}(\epsilon) = g(\epsilon \mp \mu_B H).$$

- (c) La magnetización del metal debido a los electrones de conducción puede expresarse como:

$$M = \mu_B (N_- - N_+).$$

Teniendo en cuenta que el campo magnético es débil, obtenga una expresión para dicha magnetización en función del campo H . Interprete este resultado en función del modelo microscópico (intente hacerlo a través de las gráficas de $g(\epsilon \mp \mu_B H)$).

Ayuda: Dado que el campo magnético es débil, es válido realizar un desarrollo en series de Taylor de la densidad de estados $g(\epsilon \mp \mu_B H)$ en primer orden alrededor de ϵ a la hora de resolver las integrales de N_{\pm} .

- (d) Teniendo en cuenta el orden de magnitud de la temperatura de Fermi obtenida en el primer ítem, ¿cómo espera que la magnetización M dependa de la temperatura (considere valores de T entre 0K y la temperatura de fusión del metal $\sim 10^3\text{K}$)?

Problema 4. Radiación de Cuerpo Negro

El problema sobre el origen de la radiación emitida por un cuerpo negro ha sido uno de los disparadores de la aparición de la mecánica cuántica a principios del Siglo XX. Un cuerpo negro es aquel que es capaz de absorber toda la radiación electromagnética que incide sobre él. Un modelo válido del mismo consiste en una cavidad de volumen V con un pequeño orificio a través del cual ingresa radiación electromagnética, que luego es absorbida y emitida por las paredes internas de la cavidad (ver Figura 1). La radiación electromagnética ingresada por la cavidad posee probabilidades casi nulas de salir a través de la misma, por lo tanto podemos considerar que la cavidad absorbe toda la radiación electromagnética que ingresa, manteniendo en equilibrio termodinámico las paredes y la radiación contenida.

La física clásica de finales del Siglo XIX proponía modelar el cuerpo negro como un conjunto de ondas electromagnéticas estacionarias dentro de la cavidad, a las cuales se les asignaba energías continuas, de acuerdo con la teoría electromagnética clásica conocida hasta el momento. Sin embargo, los resultados teóricos no solo no coincidían con los obtenidos experimentalmente, sino que predecían lo que se conoce como la *catástrofe ultravioleta*: las emisiones correspondientes a altas frecuencias debían aportar una enorme

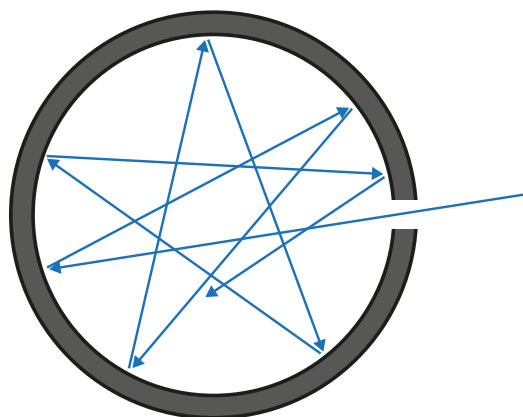


Figura 1: Modelo de Cuerpo Negro como una cavidad con un pequeño orificio a través del cual ingresa la radiación electromagnética (https://en.wikipedia.org/wiki/File:Black-body_realization.svg).

cantidad de energía, por lo que la energía total emitida por el cuerpo negro tendía a infinito. Esto violaba los postulados de la conservación de la energía, poniendo en jaque la física clásica conocida hasta el momento.

Planck (1900) se vio forzado a introducir la hipótesis del quantum de energía, es decir, asignarle a cada onda electromagnética niveles de energías discretos, resolviendo el problema de la *catástrofe ultravioleta* y concibiendo uno de los trabajos pioneros en lo que hoy conocemos como la mecánica cuántica.

En 1924, Bose modela la radiación dentro de la cavidad como un gas de fotones, y junto a los trabajos de Einstein (1924 y 1925) de reformulación y generalización de esta teoría, dan nacimiento a lo que hoy conocemos como la *estadística de Bose-Einstein*.

- (a) Consideremos un gas de fotones dentro de una caja de volumen V . La energía de cada fotón puede expresarse como:

$$\epsilon = \hbar\omega = cp,$$

mientras que los autovalores de los momentos de cada uno de ellos puede escribirse de la siguiente manera:

$$p^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{V^{2/3}} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2), \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$

Dicha expresión de la energía de los fotones se debe a su propia naturaleza, mientras que la discretización de los niveles de energía viene dada por las condiciones de contorno en las paredes de la cavidad. Obtener la siguiente expresión de la energía por unidad de volumen emitida por fotones con frecuencia entre ω y $\omega + d\omega$:

$$u(\omega, T)d\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} d\omega$$

Esta expresión se conoce como la fórmula de Planck de la distribución de frecuencias de la densidad de energía del cuerpo negro.

Ayuda: El número de fotones N dentro de la cavidad no es constante, ya que son absorbidos y emitidos por las paredes internas. Sin embargo, si consideramos al sistema (cavidad + fotones) como aislado, la entropía debe maximizarse:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial N} \right)_{E,V} = -\frac{\mu}{T} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mu = 0.$$

Por ende, podemos considerar que el gas de fotones posee potencial químico nulo.

- (b) Demostrar que la fórmula de Planck puede aproximarse por la distribución de Rayleigh-Jeans en el límite de bajas frecuencias:

$$u(\omega, T) \propto \omega^2,$$

y por la distribución de Wien en altas frecuencias:

$$u(\omega, T) \propto \omega^3 e^{-\beta\hbar\omega}.$$

Realizar una gráfica de las tres distribuciones (la de Planck, la de Rayleigh-Jeans y la de Wien) en función de la frecuencia ω . Interpretar qué distribuciones predicen la catástrofe ultravioleta y cuáles no.

- (c) Calcular la ley de Stefan-Boltzmann a partir de la distribución de Planck, es decir, demostrar que el valor medio de la energía por unidad de volumen puede calcularse como:

$$U(T) = 4 \frac{\sigma}{c} T^4,$$

determinar la *constante de Stefan-Boltzmann* (σ) y su valor.

- (d) Calcular la presión de radiación, es decir, la presión que ejerce el gas de fotones en las paredes internas de la cavidad, y expresarla en función del valor medio de la energía por unidad de volumen $U(T)$.