

MECÁNICA ESTADÍSTICA. FIZ2220

AYUDANTÍA 11

César Augusto Hidalgo Ramaciotti
Licenciado en Física Facultad de Física.
Pontificia Universidad Católica de Chile.

Ejercicio 1 Considere un gas ideal monoatómico cuántico en su régimen clásico, en el podemos definir la concentración cuántica como el número de estados disponibles por unidad de volumen, esto es una medida de la capacidad que tiene el ambiente de albergar partículas. Gracias a los resultados anteriores podemos decir que:

$$Z_1 = \frac{V}{(2\pi\hbar^2/M\tau)^{3/2}} = n_q V = n_q/n$$

Con lo que la concentración cuántica queda definida por:

$$n_q = (M\tau/2\pi\hbar^2)^{3/2}$$

Utilizando esto encuentre:

a.-) Una expresión para el potencial químico.

b.-) A partir de él encuentre la energía libre de Helmholtz, la presión y la energía térmica del gas.

Solución: a.-) En el régimen clásico la distribución de Fermi-Dirac se transforma en la distribución de Maxwell Boltzmann.

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\exp(\varepsilon - \mu)\beta + 1} \simeq \exp[(\mu - \varepsilon)\beta] = \lambda \exp(-\varepsilon/\tau)$$

Donde hemos definido $\lambda = \exp(\mu\beta)$. El gas debe mantener un número de partículas constante cuando se encuentra en equilibrio difusivo, esto puede escribirse como:

$$N = \lambda \sum_s \exp(-\beta\varepsilon_s) = \lambda Z_1$$

Usando el resultado del enunciado podemos escribir:

$$N = \lambda n_q V \rightarrow \lambda = \exp(\mu/\tau) = n/n_q$$

Despejando esta última relación podemos concluir que:

$$\mu = \tau \ln(n/n_q)$$

Si reemplazamos la expresión para la concentración cuántica podemos reescribir la última ecuación como:

$$\mu = \tau[\ln N - \ln V - \frac{3}{2} \ln \tau + \frac{3}{2} \ln(2\pi\hbar^2/M)]$$

b.-) La energía libre de Helmholtz la podemos encontrar utilizando.

$$\mu = (\partial F/\partial N)|_{\tau, V}$$

$$F = \int \mu dN$$

$$F = \tau \int [\ln N - \ln V - \frac{3}{2} \ln \tau + \frac{3}{2} \ln (2\pi\hbar^2/M)]$$

En esta última expresión la única integral algo complicada es la del logaritmo, las otras contribuyen solo con un factor N .

$$F = N\tau[\ln N - 1 - \ln V - \frac{3}{2} \ln \tau + \frac{3}{2} \ln (2\pi\hbar^2/M)]$$

$$F = N\tau[\ln(n/n_q) - 1]$$

Cabe notar que en estricto rigor deberíamos haber sumado en vez de haber integrado, esto se debe al hecho que N es una variable discreta. En el caso que hubiésemos ejecutado la suma tendríamos:

$$F = \sum_N \mu N$$

debido a que el único término que depende de N es el logaritmo de él, tenemos que la corrección debido esto es:

$$\sum_{N=1}^N \ln N = \ln(1 \cdot 2 \cdot 3 \cdots N) = \ln N!$$

En el límite de N grande sabemos que $\ln N! \simeq N \ln N - N$, que es lo obtenido por la integral, por lo que la corrección no es necesaria en este límite.

La presión la obtenemos utilizando:

$$P = -(\partial F / \partial V)|_{\tau, N}$$

Utilizando la energía libre encontrada tenemos:

$$P = N\tau/V$$

O sea, la ley de los gases (nuevamente :-))

Finalmente encontramos la energía térmica:

$$U = F + \tau\sigma = F - \tau(\partial F / \partial \tau)|_{V, N} = -\tau^2 \left(\frac{\partial F}{\partial \tau} \frac{1}{\tau} \right)$$

Utilizando la expresión encontrada para F podemos concluir que:

$$U = \frac{3}{2} N\tau$$

Ejercicio 2 Para un gas de electrones tridimensionales encerrado en una caja cúbica de largo L encuentre:

- El nivel de Fermi y la energía de Fermi como función del número de partículas presentes en el sistema y su volumen.
- La energía del estado fundamental del gas. Grafíquela y discuta su contribución a las fuerzas internas de la materia.
- Encuentre el calor específico electrónico en este régimen.

Solución

a.-) El nivel de Fermi se define como el último estado ocupado cuando el sistema se encuentra en su estado fundamental, o sea a $\tau = 0$. En un gas de electrones tridimensionales podemos calcularle exigiendo que el número de partículas en el sistema se mantenga fijo:

El nivel de Fermi se define como:

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi n_F}{L} \right)^2$$

y exigir un número constante de partículas es equivalente a:

$$N = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} n_F^3 = \frac{\pi}{3} n_F^3$$

$$n_F = (3N/\pi)^{1/3}$$

Reemplazando la última expresión en la primera, tenemos la energía de Fermi:

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3} = \tau_F$$

b.-) La energía del estado fundamental es la adición de las energías de todos los niveles disponibles hasta el de Fermi.

$$U_0 = 2 \sum_{n \leq n_F} \varepsilon_n \simeq 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot 4\pi \int_0^{n_F} dn n^2 \varepsilon_n$$

Reemplazando la expresión encontrada para la energía de los niveles tenemos:

$$U_0 = \frac{\pi^3}{2m} \left(\frac{\hbar}{L} \right)^2 \int_0^{n_F} dn n^4$$

$$U_0 = \frac{3}{5} N \varepsilon_F$$

Comentario: Usualmente podemos promediar usando la densidad de estados, el promedio de cualquier variable física de un gas de electrones podemos obtenerlo utilizando:

$$\langle X \rangle = \int d\varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon, \tau, \mu) X(\varepsilon)$$

En 3 dimensiones la densidad de estado está dada por:

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

Un ejercicio práctico puede ser recuperar el resultado anterior usando esta expresión.

Continuación podemos graficar la energía fundamental en función del volumen.

c.-) Para encontrar la capacidad calórica del gas de electrones debemos ver la variación de la energía con respecto a la temperatura. La variación de energía es:

$$\Delta U = \int_0^{\infty} d\varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon)\varepsilon - \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon D(\varepsilon) \varepsilon$$

Usando el hecho que el número de partículas es constante podemos reescribir esta expresión como:

$$\Delta U = \int_{\varepsilon_F}^{\infty} d\varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon)(\varepsilon - \varepsilon_F) - \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon D(\varepsilon) (\varepsilon_F - \varepsilon)(1 - f(\varepsilon))$$

Ahora la derivamos con respecto a la temperatura. Como el único término dependiente de esta es $f(\varepsilon)$ obtenemos:

$$C_{el} = \int_0^{\infty} d\varepsilon (\varepsilon - \varepsilon_F) \frac{df(\varepsilon)}{d\tau} D(\varepsilon)$$

Considerando que la distribución de Fermi-Dirac varía fuertemente sólo cerca de la energía de Fermi podemos sacar la densidad de estados fuera de la integral evaluándola en la energía de Fermi.

$$C_{el} \simeq D(\varepsilon_F) \int_0^{\infty} d\varepsilon (\varepsilon - \varepsilon_F) \frac{df(\varepsilon)}{d\tau}$$

Podemos derivar la distribución de Fermi-Dirac y utilizar el hecho que para bajas temperaturas este es aproximadamente igual a la energía de Fermi. Con esto podemos encontrar que:

$$\frac{df}{d\tau} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{\tau^2} \cdot \frac{\exp(\varepsilon - \varepsilon_F)/\tau}{\exp(\varepsilon - \varepsilon_F)/\tau + 1)^2}$$

Reemplazando en la expresión anterior y haciendo el cambio $x = (\varepsilon - \varepsilon_F)/\tau$ podemos concluir que:

$$C_{el} = \tau D(\varepsilon_F) \int_{-\varepsilon_F/\tau}^{\infty} dx x^2 \frac{e^x}{(e^x + 1)^2}$$

Esta integral puede ser aproximada para $\varepsilon_F \gg \tau$, cambiando el integrando por $-\infty$. La integral resulta ser un número el cual vale $\pi^2/3$, con esto podemos concluir que:

$$C_{el} = \frac{\pi^2}{3} D(\varepsilon_F) \tau$$

Como la densidad de estado evaluada en ε_F es:

$$D(\varepsilon_F) = \frac{3N}{2\varepsilon_F}$$

tenemos que:

$$C_{el} = N \frac{\pi^2}{2} \frac{\tau}{\varepsilon_F}$$

Ejercicio 3 Considere un gas de electrones con una densidad de estados constante.

a.-) Encuentre su nivel de Fermi.

$$D\mu_0 = N$$

entonces

$$\mu_0 = N/D$$