

Trabajo práctico N° 7

Estadísticas Cuánticas, y límite clásico - 07/06/19

Indistinguibilidad. El problema de la indistinguibilidad cuántica refiere a la inconveniencia de poner nombres a entidades idénticas; o, en caso de ponerlos, a la necesidad de que exista simetría frente al intercambio de los mismos. Es un inconveniente que viene surgiendo desde el comienzo de esta materia, cada vez que tratamos con entidades idénticas. En esta guía estudiaremos sistemas cuánticos de *bosones* (partículas con spin entero; no debe haber cambio de fase en el vector de ondas al permutar los nombres de dos partículas) y de *fermiones* (sistemas de partículas de spin semientero, cuyo vector de ondas cambia su fase en π al permutarse el nombre de dos partículas). Compararemos las estadísticas asociadas a estos sistemas con la estadística de Maxwell–Boltzmann (MB) que veníamos empleando hasta ahora.

Lo que sabemos sobre el operador densidad seguirá siendo válido en sistemas de partículas indistinguibles: simplemente, ahora habrá que ser muy cuidadoso en el proceso de *contar* microestados (es decir, al tomar las trazas). Los objetivos de esta práctica son aprender una nueva forma de rotular y contar microestados, y ganar confianza con las estadísticas cuánticas.

Problema 1. Considere un sistema formado por dos partículas, cada una de las cuales puede estar en cualquiera de tres estados cuánticos de energías 0 , ε y 3ε . El sistema está en contacto con un foco térmico a la temperatura T . Escriba la función de partición canónica si las partículas obedecen:

- La estadística de MB (esto es, procedemos como en el límite clásico: contamos a *todos los estados* como si las partículas fueran distinguibles; pero luego dividimos ese número por $N!$, como fue sugerido por Gibbs). Observar el factor (que correspondería a la degeneración) frente a los exponenciales que se asocian a la doble ocupación. ¿Son éstos razonables? Explique por qué funcionaba el factor puesto por Gibbs en el caso del gas ideal.
- La estadística de Bose–Einstein (BE).
- La estadística de Fermi–Dirac (FD).

Conclusiones del Ejercicio Notar que, como comenta J. Sethna en su libro “(...) *la distribución de MB trata a la ocupación múltiple de estados como un compromiso (que físicamente no tiene justificación, salvo en el límite clásico) entre bosones democráticos y fermiones exclusivos.*”

Problema 2. Considere un gas ideal cuántico en un volumen V , en equilibrio térmico a temperatura T y en contacto con un reservorio de partículas. Suponga que los estados de una partícula son discretos, con energías $\epsilon_0 \leq \epsilon_1 \leq \dots \leq \epsilon_r \leq \dots$. Por simplicidad suponga que la energía más baja es $\epsilon_0 = 0$.

a) Calcule $\mathcal{Z}_G(T, V, \mu)$ suponiendo que las partículas del gas obedecen la estadística de FD o la de BE.

Ayuda: Como en el último ejercicio de la práctica del ensamble Gran Canónico, y como fue hecho en la teoría, escriba la energía total en función de la ocupación n_s de cada nivel de energía de partícula individual e_s , donde s es un índice que agrupa los números cuánticos que definen un autoestado de partícula individual. Considere realizar la suma sobre microestados a través de una suma sobre los n_s .

b) Utilizando lo anterior, calcule $\langle \hat{N} \rangle$ y $\langle \hat{H} \rangle$ para bosones y fermiones libres. Dado que $\langle \hat{N} \rangle = \sum_q \langle \hat{n}_q \rangle$, compare los valores encontrados para el *valor de ocupación medio* $\langle \hat{n}_q \rangle$ (f_q , en la notación de R. Balian) en ambos casos con el esperado en el caso de MB. En este momento será útil volver a pensar cuál es la diferencia entre $\langle \hat{n}_q \rangle$ y $\langle \hat{n}(\epsilon_q) \rangle$.

c) Para un gas ideal, sabemos en qué condiciones se restablece el límite clásico, y también conocemos el valor del potencial químico μ en esas condiciones. Verifique para ese caso y en ese límite que ambas estadísticas cuánticas confluyen hacia la de MB. Explique por qué era necesario que μ fuera grande y negativo para que MB tuviera sentido.

ch) ¿Cómo se comporta μ con T ? Supongamos que para una T dada, $\mu(T) < 0$ (y recordemos que hemos definido a las ϵ de manera que $\epsilon_0 = 0$). Explique por qué (más allá de la necesidad de recobrar el límite clásico) cuando T crece, $\mu \rightarrow -\infty$ (*Ayuda: piense en la expresión para el número medio de partículas en función de μ y T*). Con el mismo criterio, explique cualitativamente cuáles deben ser los valores límite de μ para ambas estadísticas cuando T decrece.

*d) ¿Qué problemas es posible atacar utilizando los números de ocupación f_q encontrados? Considere las siguientes posibilidades (no excluyentes): i) sólo gases ideales; ii) partículas libres en presencia de un campo externo; iii) electrones en un átomo; iv) electrones en un metal; v) Átomos vibrando en un cristal; vi) ${}^4\text{He}$ líquido; vii) fotones; viii) ${}^3\text{He}$ líquido; ix) gases de átomos fríos.

Problema 3. Muestre que para un gas ideal en d dimensiones que obedece FD ($a = +1$), BE ($a = -1$) o MB ($a = 0$), y cuyo espectro de partícula independiente es de la forma $\epsilon(\mathbf{p}) \propto p^s$ se verifica que

$$PV = \frac{s}{d} E$$

Ayuda: Comience con el gran potencial. Tome el límite continuo $V \rightarrow \infty$ —límite que no debe ser confundido con el límite clásico— reemplazando las sumas sobre estados por integrales en el espacio de impulsos con la densidad de niveles. A partir de esa expresión calcule P y $E (= \langle \hat{H} \rangle)$.¹

Problema 4. Muestre que la entropía de un gas ideal en equilibrio térmico está dada por

$$S = k \sum_s [\pm(1 \pm \langle n_s \rangle) \ln(1 \pm \langle n_s \rangle) - \langle n_s \rangle \ln \langle n_s \rangle]$$

donde $+$ vale para bosones y $-$ para fermiones.

***Problema 5.** [*Límite clásico y significado de la longitud de onda térmica $\lambda(T)$*]. Vamos ahora estudiar de otra manera el origen microscópico del término $N!$ introducido por Gibbs como corrección a la entropía, y de la irrupción de la longitud de onda térmica en las ecuaciones de un gas ideal clásico. Ambas cosas se relacionan con la naturaleza cuántica de la materia, que subsiste aún cuando intentemos describir a un sistema en forma clásica. A la vez, veremos que el mecanismo cuántico de sumar sobre los microestados tomando una traza en el espacio de Hilbert del sistema se corresponde directamente con el de integrar sobre las coordenadas e impulsos generalizados.

Hemos visto que los valores medios de los observables surgen de calcular trazas adecuadamente pesadas, del estilo $Tr\{exp(-\beta\hat{H})\}$. Si se trata de entidades indistinguibles la traza debe ser tomada sobre un espacio de Hilbert restringido a aquellos estados simétricos respecto del intercambio del nombre de las partículas. Es posible tomar la traza sobre estados que no tengan esta propiedad, a condición de introducir un proyector dentro de la misma: $Tr_{sim}\{exp(-\beta\hat{H})\} = Tr\{\hat{P}exp(-\beta\hat{H})\hat{P}\}$. La segunda traza corresponde a la usual, tomada sobre estados sin simetrizar. \hat{P} es un proyector que simetriza estos estados, y normaliza la cuenta de modo que todos los estados que difieren solamente en permutaciones de nombres valgan por uno solo.

¹Esta ecuación sugiere que la presión de un gas, sin importar qué estadística obedece, se origina en el movimiento de las partículas. Las partículas con impulso nulo, es decir con $\epsilon = 0$, no contribuyen a la presión. Esto tendrá especial importancia en la condensación de Bose, cuando un número macroscópico de partículas ocupan este estado.

Nos limitaremos ahora al caso especial de dos partículas libres indistinguibles, en el espacio unidimensional, con $\hat{H} = \hat{p}_1^2/2m + \hat{p}_2^2/2m$.

a) Sea P_{12} un operador que, aplicado sobre un ket asociado a dos partículas, conmuta el nombre de las mismas (por ejemplo, $P_{12}|p_1, p_2\rangle = |p_2, p_1\rangle$). Mostrar que el operador $\hat{P} = \frac{1}{2!}(\hat{I} \pm \hat{P}_{12})$ es hermitico, y que $\hat{P}^2 = \hat{P}$. Es por lo tanto, un operador adecuado para introducir en la traza definida en el párrafo anterior.

b) Calcularemos la función de partición Z_2 . Para ello, escriba explícitamente la traza en la base no simetrizada de impulsos $|p_1, p_2\rangle$. Muestre (introduciendo al operador identidad escrito en términos de la base de coordenadas $\{|r\rangle\}$, y recordando que $\langle r|p\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp(i\frac{p \cdot r}{\hbar})$ que puede escribirse:

$$Tr_{sim}\{exp(-\beta\hat{H})\} = \frac{1}{2!} \left\{ \int exp\left(-\frac{\beta}{2m}(p_1^2 + p_2^2)\right) \frac{dp_1 dp_2 dr_1 dr_2}{h^2} \pm \int exp\left(-\frac{\beta}{2m}(p_1^2 + p_2^2)\right) * exp\left(\frac{ip_1(r_2 - r_1)}{\hbar}\right) * exp\left(\frac{-ip_2(r_2 - r_1)}{\hbar}\right) \frac{dp_1 dp_2 dr_1 dr_2}{h^2} \right\}.$$

El primer término de la expresión anterior es el único que subsiste cuando estudiamos gases clásicos (notar que en este término persiste un $2!$ en el denominador —correspondiente al $N!$ de Gibbs— y un divisor en la medida del espacio de las fases acompañando a los diferenciales, h^2).

c) Intentaremos primero entender por qué el segundo término no contribuye en el límite clásico, sin hacer todavía la cuenta. Para ello, considere: ¿Qué sucede con la segunda integral cuando los impulsos y las distancias sean tales que producto $p * \Delta r$ es grande comparado con la magnitud de \hbar ? (Notar que los impulsos son una variable de integración, con lo que las integrales barren todos los valores posibles de p . ¿Qué es lo que controla el valor relativo de esta integral con respecto a la integral que corresponde al caso clásico?)

d) Haciendo la cuenta, debemos llegar a la misma conclusión que en el apartado anterior (esto es, que en el límite clásico alcanza con considerar solamente el primer término). Completando cuadrados en la segunda integral para cada uno de los impulsos, muestre que el integrando del segundo término es similar al “término clásico”, pero incluye como factor a una función $f^2(r_1 - r_2)$, con $f(r) = exp\{-\pi\frac{r^2}{\lambda^2}\}$.