

Problema 1.— Se tiene un sistema de N osciladores armónicos unidimensionales, clásicos y distintos, todos con frecuencia ω , que queremos describir mediante el “colectivo microcanónico”. El hamiltoniano del sistema lo representaremos por $H(p_\nu, q_\nu)$ (con $\nu = 1, 2, \dots, N$) y se supone que el sistema está a una temperatura T .

(a) Sabiendo que si la energía máxima del sistema es E , el volumen del espacio de fases viene definido por la expresión

$$\mathcal{V}(E, V, N) = \int_{H \leq E} d^N q d^N p$$

Demostrar que

$$\mathcal{V}(E, V, N) = \frac{h^N}{N \Gamma(N)} \left(\frac{E}{\hbar \omega} \right)^N$$

donde $\Gamma(N) = (N-1)!$ es la función gamma. (Sugerencia: hacer en el hamiltoniano el cambio de variables $x_\nu = m\omega q_\nu$ y recordar que el volumen de una esfera de dimensión $2N$ y radio R es $\frac{\pi^N}{N \Gamma(N)} R^{2N}$)

(b) Sabiendo que el área de la hipersuperficie de energía E se obtiene a partir del volumen del espacio de fases mediante la expresión $\partial \mathcal{V} / \partial E$, demostrar que, si $N \gg 1$, la entropía del sistema viene dada por la expresión

$$S \approx Nk \left[1 + \ln \left(\frac{kT}{\hbar \omega} \right) \right]$$

(c) Demostrar que, para este sistema, la presión P es nula.

Solución:

(a) El volumen del espacio de fases viene dado por $\mathcal{V}(E, V, N) = \int_{H \leq E} d^N q d^N p$, con el hamiltoniano

$$H(p_\nu, q_\nu) = \sum_{\nu=1}^N \left[\frac{p_\nu^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q_\nu^2 \right] \quad (1)$$

Haciendo el cambio de variable $x_\nu = m\omega q_\nu$, el hamiltoniano nos queda $H = \frac{1}{2m} \sum_{\nu=1}^N (p_\nu^2 + x_\nu^2)$, entonces

$$\mathcal{V}(E, V, N) = \left(\frac{1}{m\omega} \right)^N \int_{\sum_{\nu=1}^N (p_\nu^2 + x_\nu^2) \leq 2mE} d^N x d^N p \quad (2)$$

Pero la integral es ahora el volumen de una esfera de $2N$ dimensiones y radio $R = \sqrt{2mE}$, es decir $\frac{\pi^N}{N \Gamma(N)} R^{2N}$, por lo que

$$\mathcal{V}(E, V, N) = \left(\frac{1}{m\omega} \right)^N \frac{\pi^N (2mE)^N}{N \Gamma(N)} = \frac{h^N}{N \Gamma(N)} \left(\frac{E}{\hbar \omega} \right)^N \quad (3)$$

(b) El área de la hipersfera de energía E se obtiene a partir de la expresión (3)

$$\Omega(E, V, N) = \frac{\partial \mathcal{V}}{\partial E} = \frac{h^N}{\Gamma(N)} \left(\frac{1}{\hbar \omega} \right)^N E^{N-1} \approx \frac{h^N}{\Gamma(N)} \left(\frac{E}{\hbar \omega} \right)^N \quad (4)$$

donde hemos tomado $N-1 \approx N$ ya que $N \gg 1$.

La entropía se calcula como

$$S = k \ln \left(\frac{\Omega(E, V, N)}{h^N} \right) = k \ln \left[\frac{1}{\Gamma(N)} \left(\frac{E}{\hbar \omega} \right)^N \right] = k \left[N \ln \left(\frac{E}{\hbar \omega} \right) - \ln \Gamma(N) \right] \quad (5)$$

que, usando la aproximación de Stirling $\ln \Gamma(N) \approx \ln N! \approx N \ln N - N$, se reduce a

$$S \approx Nk \left[1 + \ln \left(\frac{E}{N \hbar \omega} \right) \right] \quad (6)$$

Por otra parte, la temperatura viene dada por

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_{V,N} = \frac{Nk}{E} \Rightarrow E = NkT \quad (7)$$

por lo que

$$S \approx Nk \left[1 + \ln \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right) \right] \quad (8)$$

(c) Para calcular la presión, usamos la relación

$$P = T \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_T - \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_T = 0 \quad (9)$$

ya que ni S ni E dependen del volumen del sistema.

Problema 2.– Se considera un gas de Fermi a la temperatura $T = 0$ y en el que la energía de las partículas se relaciona con su momento por una expresión general $\varepsilon(p)$.

(a) Demostrar que, como una función del momento, la densidad de estados $D(p)$ es independiente de la relación que exista entre la energía y el momento y viene dada por la expresión

$$D(p) = \frac{4\pi gV}{h^3} p^2$$

(b) Calcular el momento p_f , correspondiente a la energía de Fermi ε_f , como función de la densidad de las partículas.

(c) Mostrar que la presión P del gas viene dada por la siguiente expresión

$$P = \frac{4\pi g}{3h^3} \int_0^{p_f} p^3 \left(\frac{d\varepsilon}{dp} \right) dp$$

(Sugerencias: en las expresiones generales que hay que usar en el problema, trabajar con el momento p y no con la energía ε , e integrar por partes cuando sea necesario en el último apartado).

Solución:

(a) Suponiendo que los niveles de energía están muy juntos, las sumas discretas sobre los estados de energía individuales se pueden sustituir por integrales sobre el espacio fásico. El número de estados corpusculares en un elemento de volumen del espacio fásico viene dado por

$$\frac{g}{h^3} d^3q d^3p = \frac{g}{h^3} d^3q \sin \alpha d\alpha d\beta p^2 dp \quad (1)$$

donde $g = 2s + 1$ es el factor de multiplicidad de espín.

El número medio de partículas será

$$\begin{aligned} \bar{N} &= \sum_j \bar{n}_j [\varepsilon(p)] \approx \frac{g}{h^3} \int \cdots \int n[\varepsilon(p)] d^3q d^3p = \frac{gV}{h^3} \int_0^{2\pi} d\beta \int_0^\pi \sin \alpha d\alpha \int_0^\infty n[\varepsilon(p)] p^2 dp \\ &= \frac{4\pi gV}{h^3} \int_0^\infty n[\varepsilon(p)] p^2 dp \equiv \int_0^\infty D(p) n[\varepsilon(p)] dp \end{aligned} \quad (2)$$

donde

$$D(p) = \frac{4\pi gV}{h^3} p^2 \quad (3)$$

es la densidad de estados, escrita en función del momento (nótese que, para partículas libres no relativistas que cumplen la relación $\varepsilon(p) = p^2/2m$, la expresión anterior se transforma en la ya conocida $D(\varepsilon) = D(p) \frac{dp}{d\varepsilon} = \frac{2\pi gV(2m)^{3/2}}{h^3} \sqrt{\varepsilon}$).

(b) Como $T = 0$, el número medio de partículas con energía ε , $n(\varepsilon)$, vale 1 hasta la energía de Fermi y 0 para valores mayores. Si p_f es el momento asociado a la energía de Fermi ε_f , se puede escribir (2) como

$$\bar{N} = \int_0^{p_f} D(p) dp = \frac{4\pi gV}{3h^3} p_f^3 \Rightarrow p_f = \left(\frac{3h^3}{4\pi g} \rho \right)^{1/3} \quad (4)$$

donde $\rho \equiv \bar{N}/V$ es la densidad media de partículas.

(c) La ecuación de estado viene dada por la expresión

$$PV = -\Omega = kT \int_0^\infty D(p) \ln \left(1 + e^{\beta[\mu - \varepsilon(p)]} \right) dp = \frac{4\pi gV}{h^3} kT \int_0^\infty p^2 \ln \left(1 + e^{\beta[\mu - \varepsilon(p)]} \right) dp \quad (5)$$

El logaritmo puede eliminarse en la expresión anterior integrando por partes

$$\begin{aligned} \int_0^\infty p^2 \ln \left(1 + e^{\beta[\mu - \varepsilon(p)]} \right) dp &= \left[p^3 \ln \left(1 + e^{\beta[\mu - \varepsilon(p)]} \right) \right]_0^\infty + \frac{\beta}{3} \int_0^\infty \frac{p^3 e^{\beta(\mu - \varepsilon)}}{e^{\beta(\mu - \varepsilon)} + 1} \left(\frac{d\varepsilon}{dp} \right) dp \\ &= \frac{\beta}{3} \int_0^\infty \frac{p^3 \left(\frac{d\varepsilon}{dp} \right)}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu)}} dp = \frac{\beta}{3} \int_0^\infty p^3 \left(\frac{d\varepsilon}{dp} \right) n(\varepsilon) dp \end{aligned}$$

de forma que,

$$PV = \frac{4\pi gV}{3h^3} \int_0^\infty p^3 \left(\frac{d\varepsilon}{dp} \right) n(\varepsilon) dp \quad (6)$$

que, para $T = 0$, conduce a la fórmula para la presión pedida

$$P = \frac{4\pi g}{3h^3} \int_0^{p_f} p^3 \left(\frac{d\varepsilon}{dp} \right) dp \quad (7)$$

donde, de nuevo, p_f es el momento asociado a la energía de Fermi.
