FI-004 Física Estatística I
Lista de Exercícios # 5

Guillermo Cabrera
cabrera@ifi.unicamp.br

Novembro de 2016

1. **Fermi e Bose**

   Sejam dados dois estados de uma partícula com funções de onda ϕ_1 e ϕ_2. Quais são as funções de onda possíveis para estados de três bósons envolvendo ϕ_1 e ϕ_2? E para três férmions? Considere agora que temos duas funções orbitais ϕ_1 e ϕ_2 e que os férmions têm spin 1/2. Quais os possíveis estados e funções de onda de três férmions? □

2. **Férmions num potencial externo**

   (a) N partículas idênticas de spin 1/2 estão sujeitas à ação de um potencial unidimensional de oscilador harmônico simples de freqüência ω. Qual é a energia do estado fundamental? Qual é a energia de Fermi do sistema? Distinga os casos de N par e ímpar.

   (b) Considere agora o caso de N muito grande e responda as mesmas perguntas do ponto anterior. □

3. **Soma de momentum angular.**

   Considere duas partículas de spin 1 sem momentum angular orbital (orbitais tipo s para as duas partículas). Se elas forem distinguíveis, da regra de soma do momentum angular aplicada ao spin, teremos estados de spin total $j = 0, 1, 2$. Suponha agora que as partículas são idênticas. Quais são os estados possíveis? □

4. **Distribuições quânticas de partículas idênticas no Ensemble Canônico**

   Neste problema você poderá perceber a conveniência de usar o Ensemble Grande Canônico na derivação das estatísticas quânticas. Para o Ensemble Canônico, o número total de partículas está fixo:

   $$N = \sum_i n_i \ , \tag{1}$$

   onde os $(n_1, n_2, ..., n_i, ...)$ são os números de ocupação. A relação (1) cria um vínculo que dificulta o cálculo das propriedades estatísticas. Para obter as distribuições quânticas, usamos a relação:

   $$\bar{n}_i = \frac{\sum\limits_{n_1,n_2,...,n_i,...}^{N} n_i \ e^{-\beta(n_1\varepsilon_1 + n_2\varepsilon_2 + ... + n_i\varepsilon_i + ...)}}{\sum\limits_{n_1,n_2,...,n_i,...}^{N} e^{-\beta(n_1\varepsilon_1 + n_2\varepsilon_2 + ... + n_i\varepsilon_i + ...)}} \ , \tag{2}$$

   onde a soma $\sum^{N}$ indica a restrição imposta pela relação (1). O cálculo procede separando a contribuição do estado de energia ε_i da soma no numerador e denominador de (2). (Veja como sugestão o cálculo da distribuição de Fermi-Dirac apresentado em: http://en.wikipedia.org/wiki/Fermi-Dirac_statistics).

A chave do cálculo é passar da função partição $\mathcal{Z}(N)$ para $\mathcal{Z}(N-1)$, tirando uma partícula, usando a relação válida no limite termodinâmico

$$\ln \mathcal{Z}(N-1) \approx \ln \mathcal{Z}(N) - \frac{\partial}{\partial N} \ln \mathcal{Z}(N)$$

e identificando $\mathcal{Z}(N-1)/\mathcal{Z}(N)$ com $x = \exp \beta\mu$, onde μ é o potencial químico. Generalize o procedimento para obter a distribuição de Bose-Einstein. □

5. **Entropia dos gases quânticos**

   A grandeza S/k_B é um número. Esperamos que possa ser expressado apenas em termos dos valores médios dos números de ocupação para um sistema de partículas idênticas (porque?). Mostre que temos as expressões dadas no problema 14 da Lista # 4. Discuta o limite clássico e encontre a entropia de um sistema de partículas que obedecem a estatística de Maxwell-Boltzmann. O limite clássico não dependerá da estatística quântica, se as partículas são férmions ou bósons. □

6. **Gás de Bose**

   Mostre que a energia interna de um gás ideal de Bose, no regime de fraca degeneração, é dada por

$$E = \frac{3}{2} k_B T V \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{\exp^{\nu}(\beta\mu)}{\nu^{5/2}} \ .$$

   Na fórmula acima, μ é o potencial químico. Encontre expansões similares para a equação de estado, a entropia e a energia livre de Helmholtz. □

7. **Densidade de estados em semicondutores**

   Encontre a densidade de estados $\mathcal{D}(E)$ de elétrons cuja relação de dispersão é

$$E_{\pm}(\vec{\mathbf{k}}) = E_{\pm}^{0} \pm \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_x^{\pm}} + \frac{k_y^2}{m_y^{\pm}} + \frac{k_z^2}{m_z^{\pm}} \right) \ .$$

   Esta relação é freqüente em semicondutores tratados dentro da aproximação de massa efetiva. O ramo E_+ é chamado tipo *elétron* e o ramo E_- tipo *buraco*. São boas aproximações no fundo de uma banda de condução e no topo de uma banda de valência, respectivamente. A temperatura nula, toda a banda de valência está ocupada e a banda de condução desocupada. O potencial químico (energia de Fermi) situa-se no meio do *gap* de tamanho

$$\Delta = E_{+}^{0} - E_{-}^{0} \ .$$

   A temperatura finita, elétrons são excitados da banda de valência para a banda de condução, deixando buracos na banda de valência (de maneira que os buracos representam ausência de elétrons). Os gaps em semicondutores são da ordem de eV, de maneira que sempre podemos supor que es válida a condição

$$|\epsilon - \mu| \gg k_B T \ ,$$

   o que permite substituir a distribuição de Fermi-Dirac pela distribuição de Maxwell-Boltzmann tanto para elétrons como para buracos (cauda da distribuição de Fermi-Dirac). Com estes supostos, calcule as concentrações de elétrons (n) e buracos (p) a temperatura finita num semi-condutor intrínseco (sem impurezas). Mostre que o produto np independe do potencial químico μ e segue uma lei de 'ação de massas'.

   Dica. Ver livro do Kittel (*Introduction to Solid State Physics*). □

8. **Gás de elétrons**

Seja um gás de $\bar{N}$ elétrons cuja densidade de estados é constante

$$\mathcal{D}(E) = \begin{cases} D \ , \ \text{para } E > 0 \ , \\ 0 \ , \ \text{para } E < 0 \ . \end{cases}$$

Esta densidade modela de forma satisfatória um metal cuja banda de condução é larga.

(a) Calcule a energia de Fermi a $T = 0°K$;

(b) Derive uma condição de não degeneração em termos de D, T e $\bar{N}$ e interprete;

(c) Mostre que a capacidade calórica é proporcional a T quando o sistema é altamente degenerado. □

9. **Entropia de um gás de Fermi no regime de alta degeneração**

Calcule a entropia de um gás ideal de Fermi a temperatura baixa, mas não nula. Mostre que é satisfeita a terceira lei da termodinâmica. □

10. **Gás de Bose com graus de liberdade internos**

Considere um gás ideal de Bose compostos por partículas com graus internos de liberdade. Suponha que uma boa aproximação só considera os dois primeiro níveis internos, $\epsilon_0 = 0$ e $\epsilon_1 = \Delta > 0$. Determine a temperatura de condensação de Bose-Einstein em função de Δ. □

11. **Condensação de Bose-Einstein em $d-$dimensões**

(a) Preliminarmente, obtenha a densidade de estados de partícula livre em $d-$dimensões.

(b) Tente repetir o cálculo feito em aula para um gás de BE. Em três dimensões, o argumento usado é que o gás de BE é forçado a entrar no estado condensado quando a densidade é suficientemente alta. Determine a *dimensão crítica inferior* d_c (a dimensão espacial para a qual, e baixo a qual, não há transição de fase a temperatura finita). Encontre a temperatura da condensação de Bose-Einstein para $d > d_c$. □

12. **Paramagnetismo de Pauli**

Na presença de um campo magnético $\vec{\mathbf{B}}$, um elétron tem energia $\pm\mu_B B$, dependendo de se seu momento magnético é antiparalelo ou paralelo ao campo. O Hamiltoniano de elétron livre tem a forma

$$\mathcal{H} = \frac{\vec{\mathbf{p}}^2}{2m} - \vec{\boldsymbol{\mu}} \cdot \vec{\mathbf{B}} = \frac{\vec{\mathbf{p}}^2}{2m} + \mu_B B \, \boldsymbol{\sigma}_Z \ ,$$

onde o spin do elétron está quantizado na direção do campo (direção z), μ_B é o magneton de Bohr

$$\mu_B \equiv \frac{|e| \, \hbar}{2mc}$$

e $\boldsymbol{\sigma}_Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ é a matriz de Pauli. Calcule a magnetização M e a susceptibilidade magnética por unidade de volume $\frac{1}{V}\chi$ devida ao spin (*Paramagnetismo de Pauli*), no limite de campo pequeno ($\mu_B B \ll \epsilon_F$), para um gás de elétrons livres a temperatura nula (degeneração completa). Note que agora o Hamiltoniano (e também a energia) depende do spin, mas em equilíbrio o nível de Fermi ϵ_F é único. A Magnetização M é definida como:

$$M \equiv -\mu_B \left(N_+ - N_-\right) \quad ,$$

onde N_σ ($\sigma = \pm$) é o número de elétrons com spin σ. Expresse seu resultado em termos da densidade n em ausência de campo magnético.

13. **Gás de Fermi relativístico**

    (a) Encontre a equação de estado para um gás de elétrons relativístico completamente degenerado. A relação de dispersão é dada por

    $$\epsilon(p) = c\sqrt{m^2c^2 + p^2} \ .$$

    (b) Encontre a capacidade calórica para o gás ultrarelativístico ($p^2 \gg m^2c^2$) degenerado. $\square$

14. **Gás de fótons**

    Um problema importante, desde o advento da Mecânica Quântica, é o chamado Radiação do Corpo Negro, onde a radiação eletromagnética se encontra em equilíbrio no interior duma cavidade, a temperatura e volume dados. O mecanismo que garante o equilíbrio consiste em emissão e absorção de radiação por parte da matéria (cavidade). Modernamente (depois de Planck, Bose e Einstein), consideramos a radiação no interior da cavidade como um gás perfeito de fótons. Os fótons não interagem entre si. Os fótons saõ partículas idênticas de massa nula e spin 1 (bósons), mas a radiação livre só tem dois estados de polarização (por exemplo, dois estados de polarização linear ou circular). A absorção e a emissão de fótons por parte da matéria dão a este problema um caráter especial, no sentido que o número de fótons não é conservado e depende da temperatura e volume da cavidade. Argumente que nesta situação, o gás de fótons deve ser considerado como um gás de bósons com potencial químico nulo:

    $$\mu = 0.$$

    Agore encontre a densidade de estados para fótons (com dispersão $\epsilon(p) = \hbar\omega = cp$) e a formula de Planck para a densidade de energia por intervalo de freqüência $u(\omega)$ definida por

    $$\frac{E}{V} = \int_0^\infty d\omega \ u(\omega) \ . \qquad \square$$

15. **Condensação de Bose-Einstein em vapores atômicos**

    A primeira observação da condensação de Bose-Einstein em vapores atômicos diluídos foi feita por M. Anderson *et al.* [Science **269**, 198 (1995)]. O estado condensado foi obtido em vapor de ^{87}Rb confinado por campos magnéticos e esfriado a temperaturas ultra-baixas. A primeira evidência da condensação apareceu a uma temperatura da ordem de 170 nK para densidades da ordem de 2.5×10^{12} átomos por cm^3. Compare a temperatura de condensação da experiência com a temperatura obtida para um gás ideal de Bose com a mesma densidade e discuta seu resultado. Porque ^{87}Rb é um bóson? $\square$

16. **Entropia de um gás livre de Bose**

    Na representação da 'fugacidade' $x = \exp(\beta\mu)$, o Grande Potencial $\Omega = \Omega(T, V, x)$ de um gás livre de Bose tem uma expressão simples, dada abaixo:

    $$\Omega = -PV = \begin{cases} -k_BT\left(\dfrac{V}{\Lambda^3}\right)G_{5/2}(x) \ , \ \text{para } T > T_C \ , \\ \\ -k_BT\left(\dfrac{V}{\Lambda^3}\right)G_{5/2}(1) \ , \ \text{para } T < T_C \ . \end{cases}$$

    (a) Encontre a entropia a apartir desta representação, isto é na forma canônica

    $$S = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right)_{\mu,V} \qquad .$$

    Dica. Mostre primeiro que é satisfeita a relação termodinâmica

    $$\left(\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right)_\mu = \left(\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right)_x + \bar{N}k_B \ \ln x$$

(b) Calcule agora o calor específico a volume constante, para toda temperatura, usando a expressão

$$c_V = \frac{T}{\bar{N} k_B} \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V$$

e mostre que varia como $T^{3/2}$ a baixas temperaturas. Mostre também que c_V é contínuo em T_C e que seu valor na temperatura crítica ultrapassa o valor clássico $3/2$.

(c) Usando a relação termodinâmica para as capacidades calóricas (que voce deve demonstrar)

$$C_P = C_V + TV\kappa_T \left[\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \right]^2 ,$$

onde κ_T é a compressibilidade isotérmica, mostre que $C_P \to \infty$ para a fase condensada do gás de Bose. Esse fato permite classificar a transição de fase como sendo de primeira ordem. $\square$