Gas ideal cuántico

Repasemos algunos conceptos de <u>partículas idénticas</u>

Consideremos N partículas no interactuantes, cada una en algún nivel de energía n_i

$$|\psi\rangle = |n_1\rangle |n_2\rangle \dots |n_i\rangle \dots |n_j\rangle \dots |n_N\rangle$$

Definimos el op. permutación

part. j-ésima con nivel de energía n_i

$$\hat{P}_{ij} |\psi\rangle = |n_1\rangle \dots |n_j\rangle \dots |n_i\rangle \dots |n_N\rangle =$$

$$= \alpha |n_1\rangle \dots |n_i\rangle \dots |n_j\rangle \dots |n_N\rangle$$

pues las part. son indistinguibles.

Pero $\hat{P}_{ij}^2 = 1 \quad \Longrightarrow \quad \hat{P}_{ij} |\psi\rangle = \pm |\psi\rangle$

$\Rightarrow$ Tenemos dos casos: un sistema con N part. idénticas puede tener:

$\begin{cases} |\psi\rangle_S & \text{simétrica frente a intercambio de dos part. (\underline{bosones})} \\ |\psi\rangle_A & \text{antisimétrica frente a intercambio de dos part. (\underline{fermiones})} \end{cases}$

sobre todas las permutaciones

$$\Rightarrow |\psi\rangle_S = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P |u_1\rangle \dots |u_N\rangle \triangleq |u_1 \dots u_N\rangle_+$$

$$|\psi\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \delta_P |u_1\rangle \dots |u_N\rangle \triangleq |u_1 \dots u_N\rangle_-$$

$$\delta_P = \begin{cases} 1 & \text{si la permutación es par} \\ -1 & \text{si la perm. es impar} \end{cases}$$

+ Bosones $\longrightarrow$ spin entero
+ Fermiones $\longrightarrow$ spin semientero

Pero como los fermiones tienen función de onda antisimétrica, si dos part. están en el mismo estado $|\psi\rangle_A = 0$.

$\Rightarrow$ los fermiones satisfacen el ppio. de exclusión de Pauli.

Ejemplo: Dos partículas, en un sist. con dos estados $|+\rangle, |-\rangle$.

+ Si son fermiones hay un único posibilidad:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle\right)$$

+ Si son bosones, hay tres:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle|-\rangle + |-\rangle|+\rangle\right), \quad |+\rangle|+\rangle, \quad |-\rangle|-\rangle$$

+ Para partículas clásicas ("Boltzmann") hay cuatro

$$|+\rangle|-\rangle, \quad |-\rangle|+\rangle, \quad |+\rangle|+\rangle, \quad |-\rangle|-\rangle$$

Consideremos nuevamente un sistema con niveles de energía ε_i : $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \dots$

y con número de ocupación n_i :

$$n_0, n_1, n_2, n_3, \dots$$

n_0	n_1	n_2			...
ε_0	ε_1	ε_2			

$$\sum_i n_i = N$$

$$\sum_i n_i \varepsilon_i = E$$

Donde

$$n_i = \begin{cases} 0 \text{ ó } 1 & \text{si tenemos estadística de Fermi-Dirac} \xrightarrow{} \text{FD} \\ 0, 1, 2, \dots & \text{si tenemos estadística de Bose-Einstein} \xrightarrow{} \text{BE} \end{cases}$$

Podemos volver a calcular cuantas formas tenemos de armar microestados (como hicimos con el gas de Boltzmann), pero es más fácil usar el gran canónico:

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Q_N = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\substack{\{n_i\} \\ \sum n_i = N}} z^N e^{-\beta \sum_i \epsilon_i n_i} =$$

$$= \underbrace{\sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\substack{\{n_i\} \\ \sum n_i = N}}}_{\parallel} \prod_i \left(z e^{-\beta \epsilon_i}\right)^{n_i}$$

sumar sobre todos los valores posibles de $\{n_i\}$

$$= \sum_{n_0} \sum_{n_1} \sum_{n_2} \cdots \left(z e^{-\beta \epsilon_0}\right)^{n_0} \left(z e^{-\beta \epsilon_1}\right)^{n_1} \cdots$$

$$= \sum_{n_0} \left(z e^{-\beta \epsilon_0}\right)^{n_0} \sum_{n_1} \left(z e^{-\beta \epsilon_1}\right)^{n_1} \cdots$$

$$= \prod_i \sum_{n_i} \left(z e^{-\beta \epsilon_i}\right)^{n_i} \qquad \text{con} \quad n_i = \begin{cases} 0, 1 & \text{para FD} \\ 0, 1, 2, \dots & \text{para BE} \end{cases}$$

Luego

$$\mathcal{Z} = \begin{cases} \prod_i \left(1 + z e^{-\beta\epsilon_i}\right) & (FD) \\ \prod_i \dfrac{1}{1 - z e^{-\beta\epsilon_i}} & (BE) \end{cases}$$

Usando $q = \frac{PV}{kT} = \ln \mathcal{Z}$

$$\Rightarrow \frac{PV}{kT} = \begin{cases} \sum_i \ln\left(1 + z e^{-\beta\epsilon_i}\right) & (FD) \\ -\sum_i \ln\left(1 - z e^{-\beta\epsilon_i}\right) & (BE) \end{cases}$$

$$\boxed{\frac{PV}{kT} = a \sum_i \ln\left(1 + a z e^{-\beta\epsilon_i}\right)} \qquad a = \begin{cases} 1 & \text{para FD} \\ -1 & \text{para BE} \end{cases}$$

y $\bar{N} = z \frac{\partial q}{\partial z} = \sum_i \frac{z e^{-\beta\epsilon_i}}{1 + a z e^{-\beta\epsilon_i}} = \sum_i \frac{1}{e^{\beta\epsilon_i}/z + a}$

$$U = -\frac{\partial q}{\partial \beta} = \sum_i \frac{\epsilon_i}{e^{\beta\epsilon_i}/z + a}$$

finalmente

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_i\}} z^N e^{-\beta \sum_i \epsilon_i n_i} n_i = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \epsilon_i} \overbrace{\ln \mathcal{Z}}^{q}$$

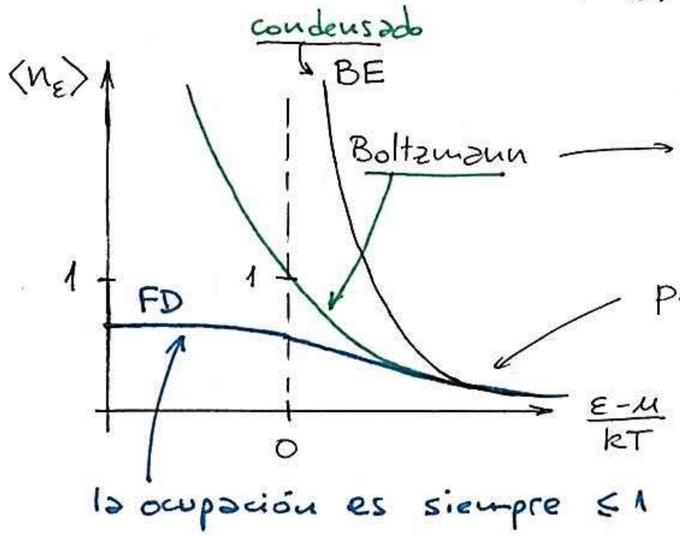
$$\Rightarrow \langle n_i \rangle = \frac{z e^{-\beta\epsilon_i}}{1 + a z e^{-\beta\epsilon_i}} = \frac{1}{\frac{e^{\beta\epsilon_i}}{z} + a}$$

y esto cumple $\sum_i \langle n_i \rangle = N$

Para estadística de BE, $\langle n_0 \rangle$ diverge para $\epsilon \to 0$ y $z \to 1$ (condensado de Bose-Einstein).

o en otras palabras, para $\mu = \epsilon_0$)

Podemos escribir $\langle n_\varepsilon \rangle = \dfrac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/kT} + a}$



$\langle n_\varepsilon \rangle = e^{-(\varepsilon-\mu)/kT}$

para $e^{\frac{(\varepsilon-\mu)}{kT}} \gg 1$ la estadística es clásica.

$\Rightarrow \dfrac{\varepsilon-\mu}{kT} \gg 1$

Pero para que esto pueda pasar, $\mu < 0$ y grande

$\Rightarrow$ en general $z = e^{\mu/kT} \ll 1$.