Antonio Castaño Tierno
Víctor Pablo Galván Chacón
Abril 2010

Ejercicio 1

Imaginemos un gas cuántico ideal de partículas idénticas y supongamos que el número máximo de partículas
que pueden estar en el mismo estado cuántico de partícula es m. (En el mundo real, sólo son posibles los valores
m = 1 o m = ∞).
(a) Obtén la expresión que da la gran función de partición en función de la temperatura y el potencial químico.
(b) Obtén los números medios de ocupación de cada nivel energético.
(c) Toma el límite clásico en las expresiones anteriores. ¿A qué condiciones físicas correponde dicho límite?
(d) Muestra que en los límites m = 1 y m = ∞ el resultado de (b) se reduce a las distribuciones de Fermi-Dirac y Bose-Einstein, respectivamente.

a) Conocemos la siguiente expresión,

$$\ln Q = \sum_r \ln\left[\sum_{n=0}^{m} e^{-n(\alpha+\beta\varepsilon_r)}\right]$$

Para tener una expresión que nos relacione Q con α y β (siendo $\beta = \dfrac{1}{k_B T}$ y $\alpha = -\beta\mu$) tenemos que hallar el valor de la serie geométrica $\sum_{n=0}^{m} e^{-n(\alpha+\beta\varepsilon_r)}$. Para ello utilizaremos la siguiente expresión:

$$\sum_{n=0}^{n\max} r^n = \frac{a_1(1-r^n)}{1-r} = \frac{(1-r^n)}{1-r}$$

Esto nos da el valor de una serie geométrica de m términos, como se demuestra en el Anexo I. Por simplicidad, utilizaremos $r = e^{-(\alpha+\beta\varepsilon_r)}$, y sustituiremos al final:

$$\sum_{n=0}^{n\max} ar^n = \frac{a(1-r^{n\max+1})}{1-r} = \frac{1-r^{n\max+1}}{1-r} = \frac{1-e^{-(m+1)(\alpha+\beta\varepsilon_r)}}{1-e^{-(\alpha+\beta\varepsilon_r)}}$$

Hallamos pues que

$$\ln Q = \sum_r \ln\left(\frac{1-e^{-(m+1)(\alpha+\beta\varepsilon_r)}}{1-e^{-(\alpha+\beta\varepsilon_r)}}\right),$$

que nos da la gran función de partición en función de α y β. También podemos expresarla como

$$Q=\prod_r\left(\frac{1-e^{-(m+1)(\alpha+\beta\varepsilon_r)}}{1-e^{-(\alpha+\beta\varepsilon_r)}}\right)$$

b) Para obtener los números medios de ocupación de los distintos niveles energéticos podemos utilizar la expresión, vista en teoría:

$$\langle n_r\rangle=-\frac{1}{\beta}\frac{d\ln Q}{d\varepsilon_r}$$

En nuestro caso, haciendo la derivada y simplificando la expresión obtenida:

$$\langle n_r\rangle=-\frac{1}{\beta}\frac{d\ln Q}{d\varepsilon_r}=-\frac{1}{\beta}\frac{d\ln\left(\frac{1-e^{-(m+1)(\alpha+\beta\varepsilon_r)}}{1-e^{-(\alpha+\beta\varepsilon_r)}}\right)}{d\varepsilon_r}=\frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_r}-1}-\frac{1+m}{e^{(\alpha+\beta\varepsilon_r)(1+m)}-1}$$

Para cada ε_r obtenemos el valor medio de ocupación de un nivel energético.

c) Se nos pide ahora tomar el límite clásico en la expresión del valor medio de ocupación de los niveles energéticos.

$$\langle n_r\rangle=\frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_r}-1}-\frac{1+m}{e^{(\alpha+\beta\varepsilon_r)(1+m)}-1}$$

El límite clásico se obtiene haciendo dos consideraciones:

-Para densidades bajas (número de estados de partícula por unidad de volumen mucho mayor que el de partículas por unidad de volumen), manteniendo la temperatura constante.

Consideraremos que

$$\sum_r\langle n_r\rangle=\sum_r\left[\frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_r}-1}-\frac{1+m}{e^{(\alpha+\beta\varepsilon_r)(1+m)}-1}\right]=\bar{N}$$

Luego:

$$\langle n_r\rangle=\frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_r}-1}-\frac{1+m}{e^{(\alpha+\beta\varepsilon_r)(1+m)}-1}<<1$$

Ya que el número de términos que hay que sumar es mucho mayor que el valor medio de N.

Luego:

$$e^{\alpha+\beta\varepsilon_r}>>1$$

Ya que es el término que domina en ambas fracciones. Si despreciamos la unidad frente a la exponencial, y tenemos en cuenta, dado que el exponente 1+m hará que la exponencial aumente mucho más rápidamente que el denominador. Si además consideramos el límite de densidades bajas,

$$\frac{1+m}{e^{(\alpha+\beta\varepsilon_r)(1+m)}} << \frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_r}}$$

Llegamos a una expresión que no depende de m:

$$\langle n_r \rangle = \frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_r}}$$

-Para temperaturas altas, manteniendo constante la densidad del gas.

Al aumentar T disminuye β, luego es posible aumentar ε_r sin que $\beta\varepsilon_r >> 1$. Razonamos como antes y llegamos otra vez a $e^{\alpha+\beta\varepsilon_r} >> 1$.

En ambas ocasiones hemos llegado a una expresión que no depende de m. Si despreciamos la unidad frente a la exponencial, y tenemos en cuenta, dado que el exponente 1+m hará que la exponencial aumente mucho más rápidamente que el denominador, que:

$$\frac{1+m}{e^{(\alpha+\beta\varepsilon_r)(1+m)}} << \frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_r}}$$

Podemos concluir que:

$$\langle n_r \rangle = \frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_r}}$$

Esta es la distribución de Maxwell-Boltzmann, que coincide en el límite clásico, cuyas condiciones ya se han mencionado, para Bose-Einstein y Fermi-Dirac.

d) Repetimos el resultado del apartado b para los límites m=1 y m=∞ y comprobamos que los resultados obtenidos corresponden a las estadísticas de Fermi-Dirac y Bose-Einstein, respectivamente.

m=1

$$\lim_{m\to 1}\langle n_r \rangle = \lim_{m\to 1}\left[-\frac{1}{\beta}\frac{d\ln Q}{d\varepsilon_r}\right] = \lim_{m\to 1}\left[\frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_r}-1} - \frac{1+m}{e^{(\alpha+\beta\varepsilon_r)(1+m)}-1}\right] = \left[\frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_r}-1} - \frac{2}{e^{2(\alpha+\beta\varepsilon_r)}-1}\right] =$$

$$= \frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_r}-1} - \frac{2}{\left(e^{(\alpha+\beta\varepsilon_r)}-1\right)\left(e^{(\alpha+\beta\varepsilon_r)}+1\right)} = \frac{\left(e^{(\alpha+\beta\varepsilon_r)}+1\right)}{\left(e^{(\alpha+\beta\varepsilon_r)}-1\right)\left(e^{(\alpha+\beta\varepsilon_r)}+1\right)} - \frac{2}{\left(e^{(\alpha+\beta\varepsilon_r)}-1\right)\left(e^{(\alpha+\beta\varepsilon_r)}+1\right)} =$$

$$= \frac{e^{\alpha+\beta\varepsilon_r}-1}{\left(e^{(\alpha+\beta\varepsilon_r)}-1\right)\left(e^{(\alpha+\beta\varepsilon_r)}+1\right)} = \frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_r}+1}$$

Esto coincide con el número medio de ocupación para la estadística de Fermi-Dirac, así que vemos que el resultado que obtuvimos en el apartado b parece correcto.

m=∞

$$\lim_{m\to\infty}\langle n_r\rangle = \lim_{m\to\infty}\left[-\frac{1}{\beta}\frac{d\ln Q}{d\varepsilon_r}\right] = \lim_{m\to\infty}\left[\frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_r}-1} - \frac{1+m}{e^{(\alpha+\beta\varepsilon_r)(1+m)}-1}\right] = \left[\frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_r}-1} - \frac{\infty}{\infty}\right]$$

Aplicamos L'Hôpital en $\frac{1+m}{e^{(\alpha+\beta\varepsilon_r)(1+m)}-1}$ para evitar la indeterminación:

$$\frac{\frac{d(1+m)}{dm}}{\frac{d(e^{(\alpha+\beta\varepsilon_r)(1+m)}-1)}{dm}} = \frac{1}{(\alpha+\beta\varepsilon_r)e^{(1+m)(\alpha+\beta\varepsilon_r)}}$$

Para poder tomar el límite y que la suma converja, tiene que darse que $\beta\varepsilon_r + \alpha > 0$.

Esto se cumple si $\beta(\varepsilon_r - \mu) > 0$. Que tiene que ser cierto, pues de lo contrario el número de bosones no estaría acotado. Luego no hay ningún problema en tomar el límite:

$$\lim_{m\to\infty}\langle n_r\rangle == \lim_{m\to\infty}\left[\frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_r}-1} - \frac{1}{(\alpha+\beta\varepsilon_r)e^{(1+m)(\alpha+\beta\varepsilon_r)}}\right] = \frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_r}-1}$$

Ese resultado coincide con el previsto para la estadística de Bose-Einstein.

Anexo I

Demostraremos aquí el valor de la suma de una serie geométrica:

Una serie geométrica es aquella en la que cada término es igual al anterior multiplicado por una razón r:

$$S = a + ar + ar^2 + ar^3 + \ldots + ar^{n-1} + ar^n$$

S es el valor de la suma de la serie geométrica. Podemos escribir:

$$S = a_1 + a_2 + \ldots + a_{n-1} + a_n$$

Si ahora multiplicamos la serie entera por la razón:

$$rS = ra_1 + ra_2 + \ldots + ra_{n-1} + ra_n = a_2 + a_3 + \ldots + a_n + a_{n+1}$$

Haciendo S-rS:

$$S - rS = a_1 - a_{n+1} = a_1 - ra_n \rightarrow (1-r)S = a_1 - ra_n \rightarrow S = \frac{a_1 - ra_n}{1-r}$$

Y esta última expresión es la que hemos utilizado en el apartado a del problema.