

Tema 9: Gases ideales Cuánticos

Indistinguibilidad cuántica: Conexión Espín-Estadística. Sistema ideal de bosones y fermiones. Función de partición canónica y macrocanónica

Introducción

Hemos visto que en mecánica clásica el estado del sistema se caracteriza completamente dando un valor al conjunto de coordenadas generalizadas que representan un punto, en el espacio de las fases Γ , que caracteriza completamente el microestado del sistema. Esto no ocurre en cuántica en virtud del principio de incertidumbre de Heisenberg: lo más que uno puede hacer es determinar un punto en el espacio de configuración (q's), o bien en el espacio de momentos (p's), que en ambos casos es la mitad de Γ .

Si tenemos un sistema de N partículas con vectores de posición $\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$, en cuántica el estado del sistema viene descrito entonces por una función

$$\Psi_{\vec{\sigma}}(\vec{r}) \equiv \Psi_{\vec{\sigma}_1 \dots \vec{\sigma}_N}(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)$$

con \vec{r} y $\vec{\sigma}$ vectores $3N$ -dimensionales, y es tal que

$|\Psi_{\vec{\sigma}}(\vec{r})|^2 d\vec{r}$ es la **densidad de probabilidad** de encontrar el sistema en el espacio de configuración (r's) con una configuración comprendida en un volumen $d\vec{r}$ alrededor del punto \vec{r} . $|\Psi_{\vec{\sigma}}|^2$ es lo que tiene **significado físico**. Así Ψ nos da toda la información que podemos obtener del sistema (que es limitada).

- Las consecuencias de la cuantización \Rightarrow influencia en las propiedades macroscópicas
- Las partículas son ahora indistinguibles (todas las partículas pueden estar en los mismos estados cuánticos) \Rightarrow influencia en las propiedades macroscópicas
- El principio de exclusión de Pauli:
Para conjunto partículas idénticas, Ψ sólo puede ser simétrica o antisimétrica bajo permutaciones de 2 partículas

$$\Psi(\dots, r_k, \dots, r_l, \dots) = \theta \Psi(\dots, r_l, \dots, r_k, \dots), \quad \theta = \pm 1,$$

que deja invariante la densidad de probabilidad de la configuración bajo esa permutación:

$$|\Psi(\dots r_k \dots r_l \dots)|^2 = |\Psi(\dots r_l \dots r_k \dots)|^2,$$

lo que es consecuente con la indistinguibilidad.⁶¹ (¡Esto es Sólo para partículas idénticas! ¡Probabilidad de un protón en r_1 y un electrón en r_2 es diferente de la permutada!)

El PP, sobre indistinguibilidad de partículas idénticas, además de clasificar:

bosones	espín	fermiones	espín
part α	0	electrón	1/2
átomo He (est fund)	0	positrón	1/2
mesón π	0	protón	1/2
fotón	1	neutrón	1/2
deuterón	1	muón	1/2
Ψ simétrica, $\theta = +1$		Ψ antisimétrica, $\theta = -1$,	

juega papel esencial en sistemas con **muchos** grados de libertad (a diferencia de la cuantización de los niveles energéticos):

Hasta ahora hemos estudiado modelos ideales a T altas y densidades bajas (interacciones despreciables) Cuando T disminuye y/o n aumenta, pierde validez la aproximación ‘gas de Boltzmann’ y las propiedades observables del sistema tienden a ser condicionadas por la naturaleza bosónica o fermiónica de sus elementos.

Por otra parte, surgen restricciones acerca del n^o de partículas que pueden estar en un estado cuántico dado: en el caso de bosones no

⁶¹Las partículas son indistinguibles pues al permutarlas lo relevante físicamente esto es $|\Psi|^2$, no cambia

hay restricciones pero, pero el PP \implies que no puede haber dos fermiones en el sistema con los mismos números cuánticos (no se puede construir dicho estado⁶². En consecuencia, es más apropiado usar el *formalismo de segunda cuantización* o de números de ocupación, que incorpora naturalmente esta propiedad de los elementos.

Aunque uno podría pensar en la descripción

$$\Psi(r_1 \dots r_N) = \sum_{m_1 \dots m_N} c(m_1 \dots m_N) \varphi_{m_1}(r_1) \cdots \varphi_{m_N}(r_N),$$

con $\{\varphi_{m_i}(r_i)\}$ base completa para sistema de una partícula — donde

$$c(\dots m_k \dots m_l \dots) = \theta c(\dots m_l \dots m_k \dots) \quad \forall k, l,$$

de modo que

$$c(\dots m_k \dots m_l \dots) = 0 \quad \text{si} \quad m_k = m_l \quad \text{para} \quad \theta = -1$$

que es una descripción formalmente correcta, no es apropiada pues indica los niveles de localización de partículas que, por naturaleza, no pueden ‘marcarse’.

La indistinguibilidad junto con el principio de exclusión de Pauli implica que lo relevante a nivel macroscópico son los números de ocupación de los estados cuánticos como veremos que serán $c(m) = 1, 0$ para fermiones y $c(m) = 0, 1, 2 \dots$ para bosones

Sistemas cuánticos ideales

Sea sistema de N elementos puntuales confinados en V . Los niveles de cada elemento (partícula) vienen determinados por los valores propios del momento \vec{p} y de la 3^a componente del espín, $\sigma \hbar$, donde σ puede tomar $2s + 1$ valores: $-s, -s + 1, \dots, s - 1, s$. Supongamos que, en ausencia campo externo, los valores propios de la energía dependen de \vec{p} pero no del espín, $\epsilon_{\vec{p}, \sigma} = \epsilon_{\vec{p}} = p^2/2m$, de modo que cada valor tiene degeneración $g = 2s + 1$.

⁶²Si tal estado existiera sería $|\psi\psi\rangle = |\psi_1\psi_2\rangle = -|\psi_2\psi_1\rangle = -|\psi\psi\rangle$ y por lo tanto sería el estado $|0\rangle$.

El operador hamiltoniano para un sistema ideal se puede poner en formalismo de segunda cuantización como⁶³

$$\hat{H} = \sum_{\vec{p}} \sum_{\sigma} \epsilon_{\vec{p}} a_{\vec{p},\sigma}^+ a_{\vec{p},\sigma} = \sum_{\vec{p}} \sum_{\sigma} \epsilon_{\vec{p}} \hat{N}_{\vec{p},\sigma}$$

donde $\hat{N}_{\vec{p},\sigma}$ es el operador número con valores esperados $n_{\vec{p},\sigma} = 0, 1, 2, \dots$. La función de partición canónica es entonces:

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} = \sum_{\left\{ n_{p\sigma}; \sum_{p,\sigma} n_{p\sigma} = N \right\}} \exp \left(-\beta \sum_{p,\sigma} \epsilon_{p\sigma} n_{p\sigma} \right). \quad (23)$$

La sencillez de esta expresión, consecuencia de ser \hat{H} diagonal en la representación de n^{os} de ocupación ($\{|n_{p\sigma}\rangle\}$), es aparente: la restricción en la suma impide que Z factorice como Z_{cl} ,⁶⁴ lo que refleja \exists de ‘correlaciones cuánticas’ asociadas con el principio de indistinguibilidad⁶⁵ y se hace difícil el cálculo de la suma en (23).

Lo anterior es importante pues si las correlaciones cuánticas se manifiestan en la función de partición, esto también se va a notar con bastante probabilidad a nivel macroscópico, generalmente a temperaturas bajas y densidades altas. En otras condiciones la aproximación de Boltzmann era aceptable.

⁶³Aquí $a_{\vec{p},\sigma}^+$ ($a_{\vec{p},\sigma}$) es el operador creación (destrucción) de una partícula de momento \vec{p} y espín σ y son tal que $[a^+, a] = 1$, $a = (a^+)^+$ y $a^+ = (a)^+$, y actúan de la forma $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$; $a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$; $a^+a|n\rangle = n|n\rangle$. luego $\hat{N}_{\vec{p},\sigma} = a_{\vec{p},\sigma}^+ a_{\vec{p},\sigma}$ es el operador número de valores propios $n_{p\sigma} = 0, 1, 2, \dots$

⁶⁴En el caso clásico no aparece la variable espín y las partículas son distinguibles de forma que cada configuración o forma de ocupar los estados puede realizarse de $N!/\prod n_p$ formas distintas, que no es mas que el coeficiente multinomial de Newton, de donde:

$$Z_{cl} = \sum_{\{n_p; \sum n_p = N\}} \frac{N!}{\prod n_p!} \prod_p e^{-\beta \epsilon_p n_p} = \left(e^{-\beta \epsilon_1} + e^{-\beta \epsilon_2} + \dots \right)^N = \left(\sum_p \exp[-\beta \epsilon_p] \right)^N,$$

resultado que ya obtuvimos antes salvo el factor $1/N!$ (factor de indistinguibilidad cuántico)

⁶⁵ Z_{cl} factoriza pues no hay correlaciones entre elementos. Pero aquí, los ϵ_p no son independientes: se desarrollan correlaciones debidas a la indistinguibilidad.

Cálculo en la macrocanónica

La dificultad anterior puede suavizarse trabajando en la colectividad macrocanónica. En este caso la función de partición macrocanónica es:

$$\Xi(\beta, V, \mu) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_m e^{-\beta E_m^{(N)} + \beta \mu N} \quad (24)$$

donde $E_m^{(N)}$, es el autovalor del hamiltoniano, $\hat{H} |m\rangle = E_m^{(N)} |m\rangle$, indica que cada estado del sistema con N elementos está caracterizado por el conjunto de números cuánticos m . En nuestro caso $m = \{|n_{p,\sigma}\rangle\} \forall p, \sigma$ y $E_m^{(N)} = \sum_{p,\sigma} \epsilon_p n_{p\sigma}$ con $N = \sum_{p,\sigma} n_{p\sigma}$ luego tenemos:

$$\begin{aligned} \Xi(T, V, \mu) &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\left\{n_{p\sigma}\right\}} e^{-\beta \sum_{p,\sigma} \epsilon_p n_{p\sigma}} e^{\beta \mu \sum_{p,\sigma} n_{p\sigma}} \\ &\quad \left(\sum_{p,\sigma} n_{p\sigma} = N \right) \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\left\{n_{p\sigma}; \sum_{p,\sigma} n_{p\sigma} = N\right\}} \exp \left(\beta \sum_p \sum_{\sigma} (\mu - \epsilon_p) n_{p\sigma} \right) \end{aligned}$$

Consideramos primero un sistema con sólo dos niveles accesibles, es decir $m = |n_1, n_2\rangle$; y definimos $a \equiv \exp[\beta(\mu - \epsilon_1)]$ y $b \equiv \exp[\beta(\mu - \epsilon_2)]$. Se tiene:

$$\begin{aligned} \Xi &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\substack{n_1, n_2 \\ (n_1+n_2=N)}} \exp[\beta \mu (n_1 + n_2)] \exp[-\beta(\epsilon_1 n_1 + \epsilon_2 n_2)] \\ &= \sum_N \sum_{n_1} \sum_{n_2} a^{n_1} b^{n_2} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^N a^{N-n_2} b^{n_2} \end{aligned}$$

Para obtener esto hemos usado la prescripción siguiente:

► fija N , suma para n_2 desde 0 hasta N (n_1 ya viene determinado $n_1 = N - n_2$)

$N = 0$	$n_2 = 0$	1
$N = 1$	$n_2 = 0, 1$	$a + b$
$N = 2$	$n_2 = 0, 1, 2$	$a^2 + ab + b^2$
$N = 3$	$n_2 = 0, 1, 2, 3$	$a^3 + a^2b + ab^2 + b^3$
.....

► suma entonces todos estos resultados parciales, desde $N = 0$ hasta $N = \infty$. Nos queda:

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty} a^n\right) + b \left(\sum_{n=0}^{\infty} a^n\right) + b^2 \left(\sum_{n=0}^{\infty} a^n\right) + \dots = \left(\sum_{n=0}^{\infty} a^n\right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} b^n\right)$$

Pero la suma resultante puede también interpretarse como sigue:

★ fija la potencia de a y suma sobre todas las potencias de b , desde 0 hasta ∞ , esto es,

$n_1 = 0$	$n_2 = 0, \dots, \infty$	$1 + b + b^2 + \dots$
$n_1 = 1$	”	$a + ab + ab^2 + \dots$
$n_1 = 2$	”	$a^2 + a^2b + a^2b^2 + \dots$
.....

★ suma entonces sobre todas las potencias de a , esto es,

$$\Xi = \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} a^{n_1} b^{n_2} = \prod_{\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \alpha^n, \quad \alpha = a, b, \dots$$

Luego

$$\Xi = \prod_i \sum_{n_i=0}^{\infty} e^{\beta(\mu - \epsilon_i)n_i}$$

que se puede extender a un conjunto de niveles etiquetados por $i = p, \sigma$ de donde se sigue:

$$\Xi = \prod_p \prod_\sigma \sum_{n_{p\sigma}} \exp [\beta (\mu - \epsilon_p) n_{p\sigma}] \quad (25)$$

¡sin restricciones! — gracias a la suma sobre N en (24). Luego la función de partición macrocanónica factoriza.

Tenemos entonces de (25):

Fermiones: sólo es posible $n = 0, 1$, luego

$$\Xi (T, V, \mu) = \prod_p \prod_\sigma \left(1 + e^{\beta(\mu - \epsilon_p)} \right)$$

Bosones: $n = 0, 1, 2, \dots$, luego

$$\begin{aligned} \Xi (T, V, \mu) &= \prod_p \prod_\sigma \left(1 + e^{\beta(\mu - \epsilon_p)} + 2e^{\beta(\mu - \epsilon_p)} + \dots \right) \\ &\quad \text{serie geométrica} \\ &= \prod_p \prod_\sigma \left(1 - e^{\beta(\mu - \epsilon_p)} \right)^{-1} \end{aligned}$$

Nota: la convergencia de esta serie requiere que $\exp [\beta (\mu - \epsilon_p)] < 1 \forall \epsilon_p$ luego (suponiendo $\epsilon_{p=0} = 0$) el potencial químico ha de ser negativo.

Los dos casos:

$$\Xi (T, V, \mu) = \prod_p \prod_\sigma \left(1 - \theta e^{\beta(\mu - \epsilon_p)} \right)^{-\theta}, \quad \theta = \begin{cases} +1 & \text{bosones} \\ -1 & \text{fermiones} \end{cases}$$

Se trata de un buen ejemplo en el que la macrocanónica es matemáticamente más conveniente que la canónica, pues la primera factoriza. Pero:

- Los factores se refieren a niveles energéticos individuales, no a partículas como sí ocurría en el gas de Boltzmann.
- El producto es infinito

Termodinámica del Gas ideal cuántico: Ecuación de estado. Parámetro de degeneración. Estadística de los números de ocupación

Una vez que ya tenemos la función de partición macrocanónica factorizada para el gas ideal cuántico vamos a obtener toda la termodinámica.

El potencial macrocanónico es

$$\begin{aligned} VP(T, \mu) &= kT \ln \Xi(T, V, \mu) \\ &= -\theta kT \sum_p \sum_\sigma \ln \left\{ 1 - \theta e^{\beta(\mu - \epsilon_p)} \right\} \end{aligned}$$

Pero:

- ϵ_p es independiente de σ , por lo que \sum_σ sólo produce un factor g , la degeneración del nivel ϵ_p , y
- para sistemas macroscópicos, valores consecutivos de \vec{p} están suficientemente próximos para poder sustituir \sum_p por $Vh^{-3} \int d\vec{p}$ (salvo para bosones a bajas temperaturas, un caso que se trata con detalle más adelante).

luego:

$$VP = -\theta g kT \frac{V}{h^3} \int d\vec{p} \ln \left\{ 1 - \theta \exp \left(\frac{\mu - p^2/2m}{kT} \right) \right\}$$

Integrando sobre los ángulos y haciendo $x \equiv p^2/2mkT$:

$$P(T, \mu) = -\pi \theta g m^{3/2} (2kT)^{5/2} h^{-3} \int_0^\infty dx \sqrt{x} \ln \left[1 - \theta \exp \left(-x + \frac{\mu}{kT} \right) \right]$$

Integrando por partes y usando la longitud de onda térmica, $\Lambda(T) = h/\sqrt{2\pi mkT}$, se tiene

$$P(T, \mu) = \frac{2}{3} kT g \Lambda^{-3} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \frac{x^{3/2}}{\exp(x - \mu/kT) - \theta} \quad (26)$$

Conviene reemplazar la dependencia en μ , por ejemplo por la densidad de partículas,

$$n = \left(\frac{\partial P}{\partial \mu} \right)_T = \frac{2}{3} g \Lambda^{-3} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \frac{x^{3/2} \exp(x - \mu/kT)}{[\exp(x - \mu/kT) - \theta]^2}$$

que, integrada por partes es

$$n(T, \mu) = g \Lambda^{-3} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{\exp(x - \mu/kT) - \theta} \quad (27)$$

COMBINANDO (26) y (27) SE TIENE P EN FUNCIÓN DE n y T , EE, LA **ECUACIÓN DE ESTADO**

$$P = P(n, T)$$

PARA UN **GAS CUÁNTICO IDEAL** (sin interacciones).

Otras propiedades se siguen de aquí usando relaciones termodinámicas familiares. Por ejemplo, se encuentra

$$\tilde{u}(T, \mu) \equiv \frac{U}{V} = \frac{3}{2} P \quad \rightarrow \quad P = \frac{2}{3} \tilde{u},$$

que también satisface el *gas de Boltzmann*, lo cual es notable puesto que otra termodinámica que se obtenga de (26) y (27) es bien distinta. En particular, los gases ideales de bosones y fermiones, a pesar de no involucrar interacciones entre sus elementos, no satisfacen la definición de *gas perfecto* antes establecida, consecuencia de la existencia de las ‘correlaciones cuánticas’ ya comentadas.

No es fácil obtener ecuaciones de estado explícitas a partir de las paramétricas (26) y (27); en lecciones posteriores veremos cómo hacerlo en casos particulares. Sólo muy recientemente se han encontrado algunas, por ejemplo para un gas de fermiones puede escribirse⁶⁶

$$P = nkT + \frac{\Lambda^3}{2^{3/2}\pi g} nP \int_1^\infty dy y^{-2} [\psi_n(y) - \psi_P(y)]$$

donde

$$\psi_n(y) = \tan^{-1} \frac{\tilde{\beta}_n (\ln y)^{1/2}}{1 + \tilde{\beta}_n y \int_1^\infty d\omega \frac{(\ln \omega)^{1/2}}{\omega(\omega - y)}}$$

$$\psi_P(y) = \tan^{-1} \frac{\tilde{\beta}_P (\ln y)^{3/2}}{1 + \tilde{\beta}_P y \int_1^\infty d\omega \frac{(\ln \omega)^{3/2}}{\omega(\omega - y)}}$$

con

$$\tilde{\beta}_n = \frac{4\sqrt{2\pi g}}{n\Lambda^3}, \quad \tilde{\beta}_P = \frac{8\sqrt{2\pi g}kT}{3P\Lambda^3}.$$

que es bastante compleja y debe resolverse numéricamente.

Para la mayoría de los casos, como primer método para obtener información física relevante con poco esfuerzo, estudiamos la ecuación de estado para pequeñas fugacidades,

$$z \equiv e^{\mu/kT} \ll 1,$$

lo que, como se verá en otra parte,⁶⁷ se corresponde con **efectos cuánticos débiles**. Se sigue entonces que la integral en (26):

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dx \frac{x^{3/2}}{\exp(x - \mu/kT) - \theta} &= \int_0^\infty dx \frac{x^{3/2}}{e^x z^{-1} - \theta} = \int_0^\infty dx x^{3/2} e^{-x} z (1 - \theta z e^{-x})^{-1} \\ &= \int_0^\infty dx x^{3/2} e^{-x} z (1 + \theta e^{-x} z + e^{-2x} z^2 + \dots) \end{aligned}$$

⁶⁶Hecho, por ejemplo, en M.M. Nieto, *J.Math.Phys.* **11**, 1346 (1970), donde también se trata la versión relativista de esta ecuación de estado (ver luego para fermiones).

⁶⁷Para concluir esto es necesario conocer previamente la dependencia de μ en n y T ; de todos modos, usando la expresión del potencial químico para el gas de Boltzmann, ya puede verse con facilidad que $z \rightarrow 0$ nos acerca al caso clásico pues para el gas de Boltzmann $z = n/f(T)$ luego $\mu = kT \ln z = kT \ln n - kT \ln f(T) < 0$ pues $n \ll 1$ para preservar el carácter ideal y $f(T)$ crece con T . Luego la fugacidad del gas de Boltzmann es muy pequeña.

que conduce a

$$P = gkT\Lambda^{-3}z \left(1 + \theta 2^{-5/2}z + 3^{-5/2}z^2 + \dots \right)$$

De la misma forma, se tiene:

$$n = g\Lambda^{-3}z \left(1 + \theta 2^{-3/2}z + 3^{-3/2}z^2 + \dots \right)$$

Invirtiendo ésta,⁶⁸

$$z = g^{-1}\Lambda^3n \left[1 - \theta 2^{-3/2}g^{-1}\Lambda^3n + \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{3^{3/2}} \right) g^{-2}\Lambda^6n^2 + \dots \right]$$

y sustituyendo en la serie para P :

$$P = nkT \left[1 - \theta 2^{-5/2}g^{-1}\Lambda^3n + \left(\frac{1}{8} - \frac{2}{3^{3/2}} \right) g^{-2}\Lambda^6n^2 + \dots \right]$$

$$P = nkT \left(1 - 0'1768 \theta g^{-1}\Lambda^3n - 0'0033 g^{-2}\Lambda^6n^2 + \dots \right) \quad (28)$$

Esta expresión es un desarrollo del virial (es decir, en potencias de la densidad) característico de gases imperfectos cuya desviación del comportamiento 'perfecto' es consecuencia de (débiles) efectos cuánticos más que de interacciones.

Vemos en (28) que la primera corrección al comportamiento 'perfecto' tiene signo distinto para fermiones y bosones:

⁶⁸Usando el Teorema de Lagrange. Por ejemplo, en H.D. Dwight, *Tables of Integrals*, McMillan, NY 1969, página 15.

para fermiones ($\theta = -1$): la presión (para valores de n y T dados) es mayor que la del gas perfecto: es como si existiera una fuerza repulsiva adicional entre fermiones (consecuencia del principio de exclusión en un entorno cooperativo) que desfavoreciese configuraciones con partículas muy próximas entre sí;

para bosones ($\theta = 1$): la cooperatividad se manifiesta en un efecto como el que produciría una fuerza atractiva.

Vemos que el desarrollo anterior también es un desarrollo en Λ . Ahora, a posteriori, podemos comentar sobre la validez de esta descripción. El parámetro relevante resulta ser

$$\delta \equiv g^{-1} \Lambda^3 n = g^{-1} \left(\frac{h^2}{2\pi m k T} \right)^{3/2} n,$$

llamado **parámetro de degeneración**, y la convergencia del desarrollo exige que $\delta < 1$ y pequeño. En particular, la aproximación *gas de Boltzmann* se sigue para $\delta \ll 1$, esto es,

para temperaturas altas (dada la densidad), o

para densidades bajas (dada la temperatura)

Por otra parte, δ será mayor (implicando efectos cuánticos más notables) cuanto menores sean T y n , de modo que los efectos cuánticos serán más notables en moléculas ligeras (m más pequeño) a T 's bajas y densidades altas. Es el caso del helio, en el que los efectos cuánticos llegan a manifestarse a nivel macroscópico. En el hidrógeno, más ligero, las interacciones intermoleculares son fuertes y sus efectos predominan sobre los cuánticos; por el contrario, las interacciones son débiles en el gas noble helio.

El desarrollo diverge para δ grande; el caso de un gas ideal cuántico *fuertemente degenerado* requiere un tratamiento distinto del presente, y diferenciado para bosones y fermiones, como se hace en lecciones siguientes.

Números de ocupación

En formalismo de segunda cuantización, el valor medio, $\langle n_{p\sigma} \rangle$, del número de ocupación del estado (\vec{p}, σ) de momento lineal \vec{p} y 3ª componente de espín σ es

$$\langle n_{p\sigma} \rangle = \text{Tr} (a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} \hat{\rho})$$

con el operador densidad macrocanónico

$$\hat{\rho} = \frac{1}{\Xi} \exp \left[\beta \sum_{\vec{p}} \sum_{\sigma} (\mu - \epsilon_p) a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} \right].$$

Usando n para designar $n_{p\sigma}$, la función de partición macrocanónica (como hemos visto) puede escribirse:

$$\Xi = \prod_{\vec{p}, \sigma} \sum_n e^{\beta(\mu - \epsilon_p)n}$$

y por definición

$$\langle n_{p\sigma} \rangle = \frac{\sum_n n \exp [\beta (\mu - \epsilon_p) n]}{\sum_n \exp [\beta (\mu - \epsilon_p) n]} = \frac{\partial}{\partial (\beta\mu)} \ln \left\{ \sum_n \exp [\beta (\mu - \epsilon_p) n] \right\}$$

Pero sabemos que

$$\prod_{\vec{p}, \sigma} \sum_n \exp [\beta (\mu - \epsilon_p) n] = \prod_{\vec{p}, \sigma} \left[1 - \theta e^{\beta(\mu - \epsilon_p)} \right]^{-\theta},$$

luego

$$\langle n_{p\sigma} \rangle = \frac{\partial}{\partial (\beta\mu)} \ln \left[1 - \theta e^{\beta(\mu - \epsilon_p)} \right]^{-\theta} = -\theta \frac{-\theta e^{\beta(\mu - \epsilon_p)}}{1 - \theta e^{\beta(\mu - \epsilon_p)}}.$$

Esto es,

$$\langle n_{p\sigma} \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_p - \mu)} - \theta}$$

que me da el número de ocupación promedio en el estado (\vec{p}, σ) , con ⁶⁹

$$\theta = \begin{cases} +1 & \text{estadística o distribución de Bose-Einstein} \\ -1 & \text{'' Fermi-Dirac} \\ 0 & \text{'' Maxwell-Boltzmann.} \end{cases}$$

Otra función de interés (ej, en estudio de semiconductores) es

$$1 + \theta \langle n_{p\sigma} \rangle = \frac{e^{\beta(\epsilon_p - \mu)}}{e^{\beta(\epsilon_p - \mu)} - \theta}$$

que, para fermiones (es decir, $n = 0, 1$ de modo que $0 < \langle n_{p\sigma} \rangle < 1$), representa el número medio de huecos en el estado (\vec{p}, σ) (densidad de huecos). En el caso de bosones no tiene esta interpretación pues $\langle n \rangle \sim n$ no está acotado.

En los próximos dos temas y sus lecciones correspondientes vamos a estudiar el caso de gas ideal muy degenerado ($\delta \gg 1$) y tenemos que hacerlo separado para fermiones y bosones.

⁶⁹Puesto que $\langle n_{p\sigma} \rangle$ es aquí independiente de σ , estamos suponiendo que hay el mismo número medio de partículas en cada nivel con cada una de las posibles orientaciones de espín, de modo que el estado de equilibrio del gas es ‘no polarizado’, con valor medio de espín total nulo.

