

Física Teórica 3 – 2do. cuatrimestre de 2013

Segundo parcial (27/11)

Problema 1. Un gas en equilibrio está compuesto por bosones b de espín 0 y fermiones f de espín $1/2$, que pueden transformarse unos en otros de acuerdo al siguiente esquema $b \rightleftharpoons f + f$. La masa de los bosones es m y la masa de los fermiones es $m/2$. El gas está a temperatura T , ocupa un volumen V y tiene una masa total igual a $M = Nm$. La energía de las partículas es $p^2/2m_i$.

- ¿Cuál es la relación entre las fugacidades de los dos tipos de partículas y cuál es el rango de valores que pueden tomar?
- Suponga que la fugacidad de los bosones toma algún valor intermedio dentro de su rango de variación. Grafique cualitativamente los números medios de ocupación de cada tipo de partícula en función de la energía.
- Escriba la ecuación que determina las fugacidades.
- Para un valor fijo de la densidad $\rho = M/V$, encuentre la temperatura a la que se produce el condensado de Bose–Einstein para este sistema. Compare con la temperatura crítica del gas de bosones ordinario a la misma densidad.

Solución. (a) Cuando hay equilibrio entre varias clases de partículas que pueden reaccionar entre sí, los potenciales químicos a cada lado de las ecuaciones de reacción deben sumar lo mismo. Si se tiene, por ejemplo,

$$n_A A + n_B B \rightleftharpoons n_C C + n_D D,$$

entonces $n_A \mu_A + n_B \mu_B = n_C \mu_C + n_D \mu_D$. Esto sale de la condición de extremo para la entropía. Para el sistema del problema será $\mu_b = 2\mu_f$, o

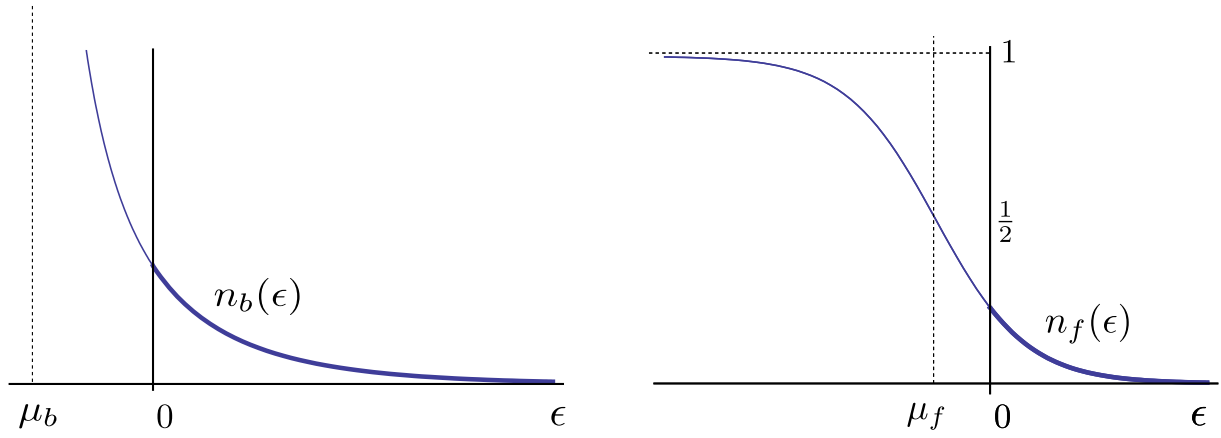
$$z_b = z_f^2.$$

Fijada una de las fugacidades, la otra queda determinada por esta relación. La fugacidad de los bosones es la que impone más restricciones, Hemos visto en clase que para un gas de bosones $0 < z < 1$, lo que corresponde a un potencial químico $\mu_b < 0$.

(b) Los números medios de ocupación para cada tipo de partícula son

$$n_b(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu_b)} - 1}$$
$$n_f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu_f)} + 1} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu_b/2)} + 1}.$$

Teniendo en cuenta que μ_b es menor que cero, queda algo así:



Aquí grafiqué un intervalo de energías mayor que el permitido, para mostrar la posición del potencial químico, pero en realidad debe ser $\epsilon \geq 0$.

(c) Para determinar las fugacidades hay que plantear, por un lado, las ecuaciones que dan los números de cada tipo de partículas, y por otro lado la conservación implícita en la ecuación de reacción $b \rightleftharpoons f + f$. Para el gas de bosones, suponiendo que no haya condensado, es

$$\frac{N_b}{V} = \frac{1}{\lambda_b^3} g_{3/2}(z_b),$$

donde

$$\lambda_b = \frac{h}{\sqrt{2\pi m_b kT}} = \frac{h}{\sqrt{2\pi m kT}}.$$

Para el gas de fermiones,

$$\frac{N_f}{V} = 2 \frac{1}{\lambda_f^3} f_{3/2}(z_f),$$

donde el factor 2 tiene en cuenta la degeneración de espín y donde

$$\lambda_f = \frac{h}{\sqrt{2\pi m_f kT}} = \frac{h}{\sqrt{\pi m kT}} = \sqrt{2} \lambda_b.$$

Ahora bien, puede pensarse que el equilibrio es alcanzado a partir de un estado en el que sólo hay fermiones. Si la masa total del gas es mN , quiere decir que puede descomponerse en $2N$ fermiones. En el equilibrio, haya o no haya condensado, esos $2N$ fermiones estarán presentes en la forma de N_f fermiones libres y de $2N_b$ bosones, ya que a cada bosón corresponden 2 fermiones:

$$2N = 2N_b + N_f.$$

Otra forma de pensar esto es a partir de la ecuación de reacción $b \rightleftharpoons f + f$. Supongamos que el número de bosones cambie en ΔN_b unidades. Si ΔN_b es negativo, esto quiere decir que se formaron $\Delta N_f = -2\Delta N_b$ fermiones. Y viceversa, si ΔN_b es positivo, el número de fermiones tiene que haber cambiado en $-2\Delta N_b$, para dar cuenta de los nuevos ΔN_b bosones. En general, entonces, $\Delta N_f = -2\Delta N_b$, o bien

$$2N_b + N_f = \text{constante} \equiv C.$$

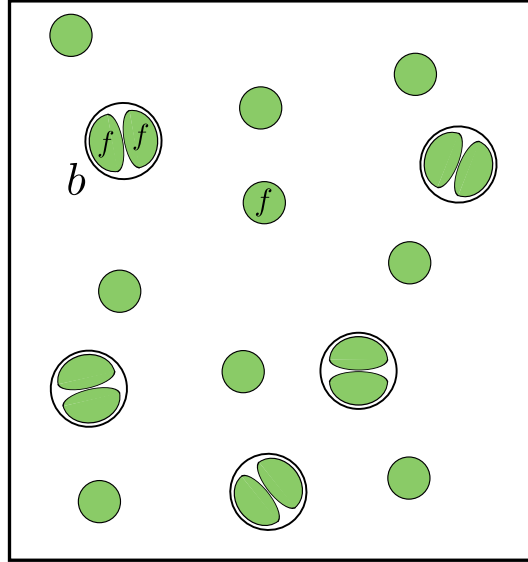
El valor de la constante puede obtenerse a partir de la masa total del gas,

$$M = mN_b + \frac{m}{2}N_f = \frac{m}{2}(2N_b + N_f) = \frac{m}{2}C.$$

El dato del problema era que $M = mN$, entonces $C = 2N$ y por lo tanto

$$2N_b + N_f = 2N.$$

En realidad la conservación de la masa hubiera bastado para llegar a esta conclusión. El mejor argumento, sin embargo, creo que es un simple dibujo:



Suponiendo que no haya condensado, dividiendo la igualdad $2N = 2N_b + N_f$ por el volumen y usando las densidades de cada especie de partículas queda

$$\frac{2N}{V} = 2 \frac{1}{\lambda_b^3} g_{3/2}(z_b) + 2 \frac{1}{\lambda_f^3} f_{3/2}(z_f).$$

(El factor 2 para los fermiones viene del espín.) La relación entre las fugacidades y las longitudes de onda térmica permite escribir

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{\lambda_b^3} \left[g_{3/2}(z_b) + \frac{1}{2^{3/2}} f_{3/2}(\sqrt{z_b}) \right].$$

Tanto $g_{3/2}$ como $f_{3/2}$ son funciones crecientes y acotadas en el intervalo $0 \leq z \leq 1$, de modo que al aproximarse z_b a 1 se tiene la situación típica que da lugar al condensado de BE. A todos los efectos prácticos, por debajo de la temperatura crítica (que se calcula en el siguiente ítem) la fugacidad de los bosones y de los fermiones es $z_b = \sqrt{z_b} = 1$.

(d) La situación crítica ocurre cuando $z_b \rightarrow 1^-$. En tal caso

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{\lambda_b^3} \left[g_{3/2}(1) + \frac{1}{2^{3/2}} f_{3/2}(1) \right].$$

En términos de la densidad de masa $\rho = mN/V$, se obtiene

$$(\lambda_b^3)_{\text{crit}} = \frac{m}{\rho} \left[g_{3/2}(1) + \frac{1}{2^{3/2}} f_{3/2}(1) \right].$$

Según se sabe

$$g_{3/2}(1) = \zeta(3/2), \quad f_{3/2}(1) = (1 - 2^{1-3/2}) \zeta(3/2) = \left(1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\right) \zeta(3/2),$$

de modo que

$$(\lambda_b^3)_{\text{crit}} = \left(\frac{3 + \sqrt{2}}{4} \right) \frac{m}{\rho} \zeta(3/2).$$

Para el gas de bosones usual a la misma densidad, la condición crítica es

$$(\lambda_0^3)_{\text{crit}} = \frac{m}{\rho} \zeta(3/2).$$

Puesto que λ^3 es proporcional a $T^{-3/2}$, la relación entre las temperaturas críticas del gas usual y del gas compuesto por fermiones y bosones es

$$\frac{T}{T_0} = \left(\frac{4}{3 + \sqrt{2}} \right)^{2/3} < 1.$$

Tiene sentido que la temperatura crítica del gas compuesto sea más baja, ya que hay más estados excitados disponibles, lo que resta partículas al nivel fundamental donde ocurre el condensado.

Como nota final: hubo quienes buscaron relacionar las fugacidades igualando las presiones parciales de los dos tipos de partículas. Pero eso es incorrecto. No se trata de dos sistemas que pueden intercambiar volumen, sino que comparten el mismo volumen. Además, basta pensar en una situación con gases ordinarios: si la presión de todos los componentes fuera la misma, por mínima que fuera la cantidad de cada uno, la presión del aire atmosférico sería cientos de veces mayor de lo que es, y bastaría agregar una sola molécula de un nuevo elemento para aumentarla de manera no despreciable.

Problema 2. En una caja bidimensional cuadrada de área A se encuentra un gas de fotones a temperatura T .

- Encuentre la energía U del gas en función de T .
- Encuentre el calor específico a área constante en función de T .
- Muestre que se cumple la siguiente relación entre la presión p y la energía: $pA = \alpha U$, y encuentre el valor de la constante α .
- La caja bidimensional puede pensarse como el límite de una caja prismática tridimensional de dimensiones $\sqrt{A} \times \sqrt{A} \times H$, donde $H \ll \sqrt{A}$. Si la temperatura es T , ¿cuánto debe valer H para que la caja pueda ser considerada bidimensional? Estime esta longitud a temperatura ambiente.

- e) (Opcional.) Si en la caja se hace una pequeña abertura de longitud δl , encuentre la energía irradiada por unidad de tiempo y unidad de longitud en función de la temperatura (es decir, el análogo de la ley de Stefan–Boltzmann, pero para un gas de fotones en una caja bidimensional). *Ayuda:* tenga en cuenta que la radiación electromagnética escapa de la apertura con velocidad c . Se puede asumir que la abertura no afecta el carácter isotrópico de la distribución.

Solución. (a) El gas de fotones puede tratarse como un gas de bosones ultrarrelativistas con una doble degeneración de helicidad y potencial químico cero. La energía de un gas así es

$$U = 2 \frac{A}{h^2} \int d^2p \frac{pc}{e^{\beta pc} - 1} = \frac{4\pi A}{(hc)^2} (kT)^3 \int_0^\infty dx \frac{x^2}{e^x - 1} = \frac{8\pi A}{(hc)^2} g_3(1) (kT)^3.$$

- (b) El calor específico se calcula directamente

$$c_A = \frac{24\pi k A}{(hc)^2} g_3(1) (kT)^2.$$

- (c) La presión puede determinarse a partir del logaritmo de la función de partición:

$$\frac{pA}{kT} = 2 \frac{A}{h^2} \int d^2p \left[-\log(1 - e^{-\beta pc}) \right] = \frac{4\pi A}{h^2} \int_0^\infty dp p \left[-\log(1 - e^{-\beta pc}) \right].$$

Integrando por partes, según el procedimiento usual,

$$\frac{pA}{kT} = \frac{4\pi A}{h^2} \int_0^\infty dp \frac{p^2}{2} \frac{\beta c}{e^{\beta pc} - 1}.$$

Aquí se reconoce la energía, a menos de un factor $\beta/2$. Resulta finalmente

$$\frac{pA}{kT} = \frac{1}{2} \beta U \rightarrow pA = \frac{U}{2}.$$

(d) En los ítems anteriores, el hecho de que la caja fuera bidimensional se usó para escribir todas las cantidades termodinámicas directamente integrando en dos dimensiones, como si no hubiera fotones moviéndose en la tercera dirección. ¿Cómo se llega a esa situación en un mundo 3D donde no existen cajas estrictamente bidimensionales? Lo que habría que pedir es que la probabilidad de excitar un fotón en la dirección transversal sea muy pequeña. Supongamos que la caja tenga altura H . El número de onda en la dirección z de un fotón que se mueva fuera del plano xy será al menos de orden $2\pi/H$. Eso corresponde a una energía mínima de orden $\epsilon_H = hc/H$. A medida que H disminuye esta energía aumenta, porque cada vez es necesario producir un fotón con una longitud de onda menor para poder acomodarlo en la dirección z . Cuando el factor $e^{\beta \epsilon_H}$ sea mucho mayor que 1, el número medio de fotones moviéndose en la dirección z será muy pequeño y la caja podrá considerarse efectivamente bidimensional. La condición de que $\beta hc/H$ sea mucho mayor que 1 implica que $H \ll \beta hc$. Evaluando en $T = 300$ K, queda $H \ll 5 \times 10^{-5}$ m, es decir H debe ser mucho menor que una centésima de milímetro.

Más formalmente, al pasar de una suma sobre números de onda a una integral sobre impulsos, la suma sobre el número de onda asociado a z contendrá sólo el término más bajo, porque cualquier excitación con

mayor frecuencia en esa dirección dará una contribución despreciable. Suponiendo condiciones de contorno periódicas, los valores permitidos del impulso serán

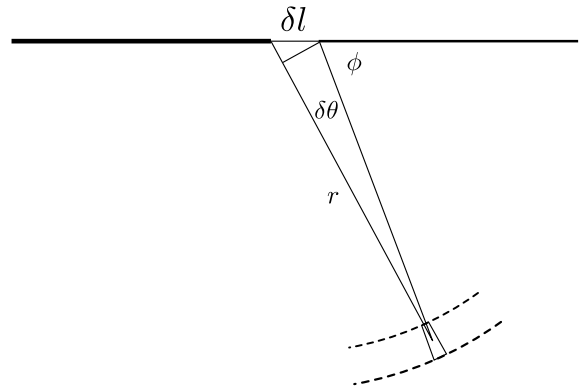
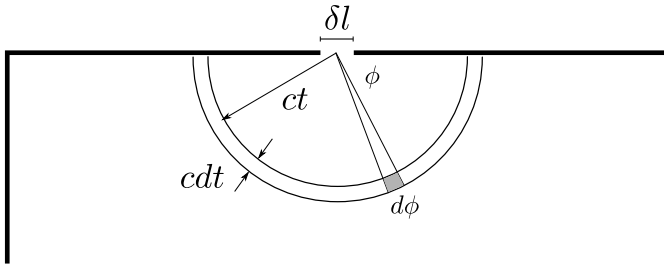
$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} = \hbar \left(\frac{2\pi n_x}{L}, \frac{2\pi n_y}{L}, \frac{2\pi n_z}{H} \right).$$

Entonces, típicamente habrá que calcular cosas del estilo

$$\begin{aligned} \langle f \rangle &= \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \sum_{n_z=-\infty}^{\infty} \frac{f(n_x, n_y, n_z)}{\exp \left[\beta \left(hc \sqrt{\frac{n_x^2 + n_y^2}{L^2} + \frac{n_z^2}{H^2}} \right) \right] - 1} \\ &= \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{f(n_x, n_y, 0)}{\exp \left[\beta \left(hc \sqrt{\frac{n_x^2 + n_y^2}{L^2}} \right) \right] - 1} + \sum_{n_z \neq 0} \frac{f(n_x, n_y, n_z)}{\exp \left[\beta \left(hc \sqrt{\frac{n_x^2 + n_y^2}{L^2} + \frac{n_z^2}{H^2}} \right) \right] - 1} \right\} \\ &\approx \sum_{n_x, n_y=0}^{\infty} \frac{f(n_x, n_y, 0)}{\exp \left[\beta \left(hc \sqrt{\frac{n_x^2 + n_y^2}{L^2}} \right) \right] - 1} \rightarrow \frac{A}{h^2} \int d^2 p f(p_x, p_y, 0) \frac{1}{e^{\beta p c} - 1}. \end{aligned}$$

Si $\beta hc/H \gg 1$, cualquier término que se incluya con $n_z \neq 0$ estará exponencialmente suprimido.

(e) Este cálculo es más simple para fotones que para un gas de partículas no relativistas, porque todos los fotones se mueven a la misma velocidad. En el intervalo de tiempo que va entre t y $t + dt$, únicamente pueden alcanzar la abertura los fotones que se encuentran sobre el arco que muestra la figura, y que tiene un radio $r = ct$ y un espesor $dr = cdt$.



Consideremos, dentro de este arco, un elemento de volumen formando un ángulo ϕ con la pared de la caja, como se muestra a la derecha de la figura. El número de fotones con impulso entre p y $p + dp$ en ese elemento de volumen es

$$dn_p = 2 \times \frac{2\pi}{h^2} \frac{p dp}{e^{\beta p c} - 1} dA,$$

donde $dA = r dr d\phi$ y el factor 2 se incluye por la degeneración de helicidad. No todos los fotones en este elemento de volumen escapan por la abertura, sino sólo aquellos que se propagan en la dirección adecuada. Únicamente los fotones que se mueven en las direcciones dentro del ángulo $\delta\theta = \delta l \sin \phi / r$ atravesarán la abertura. Debido a que la distribución es isotrópica, esos fotones representan una fracción $\delta\theta / (2\pi)$ de los fotones contenidos en el elemento de volumen en cuestión. Así, la energía transportada por los fotones con impulso entre p y $p + dp$ que escapan por la abertura entre t y $t + dt$, provenientes del elemento de volumen considerado, será

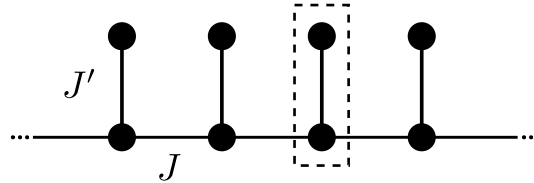
$$d\epsilon(p, \phi) = pc \times dn_p \times \frac{\delta\theta}{2\pi} = \frac{4\pi c}{h^2} \frac{p^2 dp}{e^{\beta pc} - 1} r dr d\phi \frac{\delta l}{2\pi r} \sin \phi$$

$$= \frac{2c^2}{h^2} \frac{p^2 dp}{e^{\beta pc} - 1} dt d\phi \delta l \sin \phi.$$

La energía total que escapa por unidad de tiempo y de longitud se obtiene luego de dividir por $dt \delta l$ e integrar en todos los impulsos p y las direcciones ϕ ,

$$W = \frac{2c^2}{h^2} \int_0^\pi d\phi \int_0^\infty dp \frac{p^2 dp}{e^{\beta pc} - 1} \sin \phi = \frac{8\zeta(3)}{ch^2} (kT)^3.$$

Problema 3. Cada espín de una cadena de Ising unidimensional interactúa con un espín adicional, como muestra la figura. Los espines de la cadena original interactúan con un acoplamiento J , mientras que el acoplamiento con los espines fuera de la cadena es J' . La cadena contiene N unidades elementales de 2 espines. No hay campo magnético externo.



- Encuentre la función de partición canónica si la cadena tiene extremos abiertos.
- Encuentre la función de partición canónica si la cadena es cerrada.
- Muestre que cuando $N \gg 1$, todas las cantidades termodinámicas intensivas son independientes de si la cadena es abierta o cerrada.

Solución. (a) Llamando s_i a los espines de la cadena de Ising original y s'_i a los espines adicionales, la función de partición canónica, sin campo magnético externo y con extremos abiertos, es

$$Z_N = \sum_{s_1, \dots, s_N} \sum_{s'_1, \dots, s'_N} \exp [\beta J (s_1 s_2 + \dots + s_{N-1} s_N)] \exp [\beta J' (s_1 s'_1 + s_2 s'_2 + \dots + s_N s'_N)].$$

Aquí lo más sencillo es sumar sobre los espines adicionales, ya que no están ligados entre sí:

$$Z_N = \sum_{s_1, \dots, s_N} \exp [\beta J (s_1 s_2 + \dots + s_{N-1} s_N)] \left\{ \sum_{s'_1, \dots, s'_N} \exp [\beta J' (s_1 s'_1 + s_2 s'_2 + \dots + s_N s'_N)] \right\}$$

$$= \sum_{s_1, \dots, s_N} \exp [\beta J (s_1 s_2 + \dots + s_{N-1} s_N)] \prod_{j=1}^N \left(e^{\beta J' s_j} + e^{-\beta J' s_j} \right).$$

El hecho de que cada espín tome únicamente los valores ± 1 hace que cada término de la forma

$$e^{\beta J' s_j} + e^{-\beta J' s_j}$$

sea en realidad independiente de s_j ,

$$e^{\beta J' s_j} + e^{-\beta J' s_j} = 2 \cosh(\beta J').$$

En definitiva,

$$Z_N = [2 \cosh(\beta J')]^N \sum_{s_1, \dots, s_N} \exp [\beta J (s_1 s_2 + \dots + s_{N-1} s_N)].$$

La última suma es la función de partición de la cadena con extremos abiertos a campo externo nulo, que resolvimos en clase (y que de todas maneras es la más fácil de calcular),

$$\sum_{s_1, \dots, s_N} \exp [\beta J (s_1 s_2 + \dots + s_{N-1} s_N)] = 2^N [\cosh(\beta J)]^{N-1}.$$

El resultado final es

$$Z_N = 2^{2N} [\cosh(\beta J')]^N [\cosh(\beta J)]^{N-1}.$$

(b) El procedimiento anterior se aplica igualmente a la cadena cerrada,

$$Z_N = [2 \cosh(\beta J')]^N \sum_{s_1, \dots, s_N} \exp [\beta J (s_1 s_2 + \dots + s_{N-1} s_N + s_N s_1)].$$

La última suma es la función de partición de la cadena cerrada y campo externo nulo. Podrían haber recordado el resultado de la guía, o si no plantear por ejemplo la matriz de transferencia, que en este caso es muy simple:

$$Z_{cc} = \sum_{s_1, \dots, s_N} \exp [\beta J (s_1 s_2 + \dots + s_{N-1} s_N + s_N s_1)] = \text{Tr } \mathbf{M}^N,$$

donde

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} y & 1/y \\ 1/y & y \end{pmatrix},$$

con $y = e^{\beta J}$. Los autovalores son

$$\lambda_{\pm} = y \pm \frac{1}{y}.$$

Luego,

$$Z_{cc} = \left(y + \frac{1}{y}\right)^N + \left(y - \frac{1}{y}\right)^N = 2^N \left\{ [\cosh(\beta J)]^N + [\sinh(\beta J)]^N \right\}.$$

Es un resultado lo suficientemente sencillo como para recordarlo, habiendo hecho los problemas de la guía. Finalmente,

$$Z_N = 2^{2N} [\cosh(\beta J')]^N \left\{ [\cosh(\beta J)]^N + [\sinh(\beta J)]^N \right\}.$$

(c) Para saber si las cantidades termodinámicas dependen de las condiciones de contorno, hay que evaluar F_N/N cuando $N \gg 1$, donde $F_N = -kT \log Z_N$. Para la cadena con extremos abiertos, queda

$$\begin{aligned} \frac{F_N}{N} &= -\frac{kT}{N} \{2N \log 2 + N \log [\cosh(\beta J')] + (N-1) \log [\cosh(\beta J)]\} \\ &\rightarrow -kT \log [4 \cosh(\beta J') \cosh(\beta J)]. \end{aligned}$$

Para la cadena cerrada, en cambio, resulta

$$\frac{F_N}{N} = -\frac{kT}{N} \left(2N \log 2 + N \log \cosh(\beta J') + \log \left\{ [\cosh(\beta J)]^N + [\sinh(\beta J)]^N \right\} \right).$$

El sinh es siempre menor, en valor absoluto, que el cosh. De manera que

$$\left| \frac{\sinh(\beta J)}{\cosh(\beta J)} \right| < 1,$$

y por lo tanto

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \log \left\{ [\cosh(\beta J)]^N + [\sinh(\beta J)]^N \right\} &= \frac{1}{N} \log \left([\cosh(\beta J)]^N \left\{ 1 + \left[\frac{\sinh(\beta J)}{\cosh(\beta J)} \right]^N \right\} \right) \\ &\rightarrow \log [\cosh(\beta J)]. \end{aligned}$$

Así termina obteniéndose el mismo resultado que para la cadena con extremos abiertos,

$$\frac{F_N}{N} \rightarrow -kT \log [4 \cosh(\beta J') \cosh(\beta J)].$$

Puesto que el efecto de los espines adicionales es el mismo sobre los dos tipos de cadena, hubiera bastado con citar el resultado para las cadenas de Ising usuales.