Física Teórica 3 – 2do. cuatrimestre de 2014

Guía 7: *estadística de Bose-Einstein*

1. (a) Calcular $\log Z_{\rm GC}$ para bosones no interactuantes de espín s, contenidos en una caja de volumen V, en d dimensiones y con una relación entre la energía y el impulso $\epsilon(\mathbf{p}) = \alpha p^n$, donde α y n son mayores que cero y $d \geq 1$. (Por analogía con el caso usual, conviene definir una longitud térmica λ proporcional a $\beta^{1/n}$.)

   (b) Encontrar la relación entre la energía media y PV.

   (c) Los números de ocupación deben ser mayores o iguales que cero: ¿qué cota máxima implica esta condición para el valor de z?

   (d) El número de partículas en el nivel fundamental no puede ser mayor que el total de partículas: ¿qué cota máxima, $z_{\max}$, implica esta condición para el valor de z?

   (e) Demostrar que la contribución P_0 del nivel fundamental a la presión, que es una función creciente de z, tiende a cero en el límite termodinámico. Es decir, mostrar que $0 < P_0(z) < P_0(z_{\max})$ y que $P_0(z_{\max}) \to 0$ cuando $N \to \infty$.

   (f) Encontrar la ecuación que define z en términos de N, V y T.

   (g) Demostrar que si $N \gg 1$ (pero no infinito) para que haya una fracción $f = N_0/N$ de partículas en el nivel fundamental, con $1/N \ll f \leq 1$, debe ser $z \simeq 1 - 1/fN$.

   (h) Suponer que vale lo anterior. Entonces, fijada f encontrar una ecuación para v/λ^d.

   (i) El valor de v/λ^d determinado por la ecuación anterior depende de N y de f. Si al hacer $N \to \infty$ ocurre que $v/\lambda^d \to 0$, entonces, para tener una fracción f de partículas en el nivel fundamental, o bien la densidad requerida es infinita (i.e. $v = 0$), o bien la temperatura debe tender a cero (i.e. $\lambda \to \infty$). En tales casos, no hay condensado en el límite termodinámico. Analizar lo que ocurre con v/λ^d cuando $N \to \infty$ y dar las condiciones para que pueda existir condensado a temperaturas mayores que cero y densidades finitas. Tener en cuenta que las funciones $g_\nu(z)$ divergen cuando $z \to 1^-$ si $\nu \leq 1$.

   (j) Primera aplicación: ¿puede haber condensado en el límite termodinámico para un gas bidimensional con $\epsilon = p^2/2m$?

   (k) Siguiendo con el caso anterior: límite termodinámico significa estrictamente $N \to \infty$. Escribir de manera explícita v/λ^2 como función de N y de f y argumentar que, en el caso bidimensional, el resultado de que no hay condensación en el límite termodinámico no dice mucho acerca de situaciones experimentales reales, donde N está acotado, digamos, por el número de nucleones que forman el planeta Tierra.

   (l) Asumiendo que se está en un caso en donde puede haber condensado: en el límite termodinámico ¿cuál es el valor crítico del parámetro v/λ^d a partir del cual es $f > 0$?

   (m) Asumiendo que se está en un caso en donde puede haber condensado, encontrar, en el límite termodinámico, la fracción de partículas en el nivel fundamental: i) como función del parámetro v/λ^d, ii) como función de la temperatura, asumiendo v constante, iii) como función de v, asumiendo T constante. Graficar para $d = 3$ y $n = 2$.

(n) Un tratamiendo alternativo al anterior para determinar si hay o no condensado consiste en analizar gráficamente la forma que toma la ecuación que determina λ^d/v como función de z. A partir de la ecuación que determina N como función de z, despejar una ecuación de la forma

$$\frac{\lambda^d}{v} = F(\lambda, N, z), \tag{1}$$

y analizar la gráfica de F, considerada función de z, a medida que el parámetro N se hace más y más grande. En el límite $N \to \infty$, F no es una función propiamente dicha, pero el problema gráfico de encontrar la solución de la ec. (1) continúa estando bien definido. Encontrar la condición para que haya condensado y el valor crítico de λ^d/v en caso de que lo haya.

(o) En la mayoría de los libros se encuentran las siguientes fórmulas, válidas en 3 dimensiones y para $\epsilon = p^2/2m$,

$$\frac{C_V}{kN} = \begin{cases} \dfrac{15}{4}\dfrac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - \dfrac{9}{4}\dfrac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)}, & \dfrac{v}{\lambda^3} > \left(\dfrac{v}{\lambda^3}\right)_{\text{crit}}, \\ \dfrac{15}{4}\dfrac{v}{\lambda^3}\, g_{5/2}(1), & \dfrac{v}{\lambda^3} < \left(\dfrac{v}{\lambda^3}\right)_{\text{crit}}. \end{cases}$$

Encontrar la generalización de estas fórmulas para bosones en una caja de d dimensiones y con $\epsilon = \alpha p^n$, asumiendo que se está en un caso en donde puede haber condensado.

(z) Encontrar la generalización de las ecs. 12.62 a 12.66 de la segunda edición del libro de Huang.

2. Suponga que la función de partición de un sistema bosónico es tal que

$$\log Z_{\text{GC}} = -\log(1 - z) + 2VT^{3/2}\log\left(\frac{2}{2 - z}\right).$$

Esto no pretende ser la ecuación de ningún sistema real, pero se ajusta al objetivo del problema, a saber: ver cómo aparecen las discontinuidades en las funciones termodinámicas (o en sus derivadas) cuando $N \to \infty$. La elección de la ecuación fundamental permite encontrar z explícitamente, sin necesidad de invertir las funciones g_ν, sino resolviendo una simple cuadrática. Aunque todo puede resolverse sobre el papel, el objetivo no es ese. El problema sólo tiene sentido si se trabaja en la computadora y se pueden hacer los gráficos de manera inmediata.

(a) Demuestre que la ecuación que determina z en términos de N, v y T es una cuadrática.

(b) Encuentre el valor crítico del parámetro $vT^{3/2}$.

(c) Encuentre la solución de la cuadrática que corresponde al caso físico con $0 < z < 1$.

(d) Grafique la fracción n_0 de partículas en el nivel fundamental como función de T para v y N constantes. Observe qué ocurre al tomar valores cada vez mayores de N.

(e) Grafique la Pv como función de v para T y N constantes y analice lo que ocurre al tomar valores cada vez mayores de N.

(f) Grafique la energía por partícula U/N como función de T para v y N constantes y analice lo que ocurre al tomar valores cada vez mayores de N.

(g) Ídem para el calor específico a volumen constante.

3. Un sistema está compuesto por N partículas libres. Cada partícula puede estar en dos estados, con energías 0 y $\epsilon > 0$ respectivamente. Calcule la fracción de partículas en cada nivel en estos dos casos: i) las partículas son distinguibles, ii) las partículas son bosones idénticos. Para N fijo, graficar las fracciones en función de T, y viceversa (usar escalas logarítmicas). Demostrar que para $0 < T$, cuando $N \to \infty$, la fracción de bosones en el nivel fundamental tiende a 1, mientras que en el sistema de partículas distinguibles es una función no nula de T, independiente de N.

4. Considere un gas ideal de Bose$-$Einstein cuyas partículas tienen grados de libertad internos. Asuma que sólo es necesario tomar en cuenta el primer nivel interno excitado, con energía ϵ_1 por encima del nivel fundamental de energía $E = 0$. Si la temperatura crítica del gas sin grados de libertad internos es T_c^0, muestre que en los límites en que $\epsilon_1 \gg kT_c^0$ y $\epsilon_1 \ll kT_c^0$ la temperatura crítica del gas que sí tiene grados de libertad internos es, respectivamente,

$$\frac{T_c}{T_c^0} \simeq 1 - \frac{2e^{-\epsilon_1/kT_c^0}}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}, \qquad \frac{T_c}{T_c^0} \simeq \left(\frac{1}{2}\right)^{2/3}\left[1 + \frac{2^{4/3}}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}\left(\frac{\pi\epsilon_1}{kT_c^0}\right)^{1/2}\right].$$

Fórmulas útiles:

$$g_\nu(z) = z + \frac{z^2}{2^\nu} + \ldots, \qquad g_\nu\left(e^{-\alpha}\right) = \frac{\Gamma(1-\nu)}{\alpha^{1-\nu}} + \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\,\zeta(\nu-n)\,\alpha^n.$$

5. Considere un gas de bosones de espín 1, a temperatura T y densidad $1/v$. Si se aplica un campo magnético H, la energía de las partículas adquiere una contribución $-Hm_0s$, donde s puede tomar los valores $-1, 0$ y 1. Asumir que H y m_0 son mayores que cero.

   (a) Escribir las energías de los autoestados de las partículas y los correspondientes números de ocupación, definiendo fugacidades efectivas $z_s = \exp[\beta(\mu + Hm_0s)] = ze^{sx}$.

   (b) Escribir la ecuación de estado en forma paramétrica: βPV y N como funciones de z y T. Tener en cuenta que puede haber una fase condensada. Interpretar los límites $x \to 0$ y $x \to \infty$.

   (c) Escribir la ecuación que determina la temperatura de condensación T_c y resolverla de modo aproximado en los casos en que x, evaluada en T_c, sea mucho mayor que 1 o muy próxima a cero. Las fórmulas dadas en el enunciado del problema anterior también pueden ser útiles aquí.

6. La condensación de Bose$-$Einstein fue experimentalmente obtenida por primera vez en 1995, confinando a las partículas mediante potenciales armónicos. Suponga que las partículas están atrapadas en un potencial de la forma $V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m\omega^2r^2$. Los estados de una partícula están dados entonces por 3 números, n_x, n_y y n_z, enteros mayores o iguales que cero, y la energía de cada estado es

$$\epsilon_{n_x,n_y,n_z} = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z).$$

(El cero de energía se ha redefinido para anular la energía del nivel fundamental.)

   (a) Escriba el número medio de partículas en los niveles excitados como una suma sobre los estados de una partícula. ¿Qué condición debe pedirse para poder aproximar la suma por una integral?

(b) En el problema (9) de la Guía 6, que trataba de un gas de fermiones en un potencial armónico, ya se presentó un método para transformar la suma sobre estados en una integral. El método consistía en calcular el número de estados de una partícula con una dada energía $M\hbar\omega$, reescribir la suma sobre estados como una suma sobre M, y aproximar, del modo más liso y llano, esa suma por una integral. Siguiendo ese mismo camino, escriba el número medio de partículas en los niveles excitados en términos de alguna de las funciones $g_\nu(z)$.

(c) (Opcional.) Un método alternativo para transformar la suma en una integral sobre el espacio de fases consiste en hacer el reemplazo $\sum_{\text{estados}} \to \int \frac{d^3r d^3p}{h^3}$. Reobtenga así el resultado del ítem anterior.

(d) (Opcional.) Un método alternativo para transformar la suma en una integral consiste en calcular aproximadamente la densidad de estados $D(\epsilon)$. Para eso, calcule el volumen $\Omega(\epsilon)$ del espacio de fases clásico de una partícula con energía $\epsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}) < \epsilon$, donde $\epsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2}$, y luego calcule $D(\epsilon) \simeq \Omega'(\epsilon)$. Alternativamente, puede usar que

$$D(\epsilon) \simeq \int \frac{d^3r d^3p}{h^3}\, \delta\big(\epsilon - \epsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})\big).$$

Habiendo calculado $D(\epsilon)$ aproximadamente, haga el paso de la suma a la integral, $\sum_{\text{estados}} \to \int d\epsilon\, D(\epsilon)$, y reobtenga así los resultados de los ítems anteriores.

(e) Teniendo en cuenta la población del nivel fundamental y el resultado para el número de partículas en los niveles excitados, escriba la ecuación que relaciona N con z.

(f) Aplicando los mismos criterios que en el problema (1) diga si hay o no condensado.

(g) Halle la temperatura crítica y discuta el límite termodinámico.

(h) Calcule la energía del gas para temperaturas por debajo de la crítica.

7. Considere el gas de bosones en tres dimensiones y confinado por un potencial armónico isótropo $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$, estudiado en el problema anterior.

   (a) Encuentre la densidad de partículas $n(r)$.

   (b) Con la ayuda de algún programa, grafique la densidad para temperaturas cercanas a la transición (por debajo y por encima de la misma) y distinga las contribuciones del condensado y de las excitaciones.

   (c) Muestre que, incluso para $T < T_c$, la cola de la densidad de partículas revela la temperatura del gas.

8. Considere un sólido de n dimensiones con excitaciones que tienen una relación de dispersión $\omega = \alpha k^s$, donde ω es la frecuencia angular, k el módulo del vector de onda y α una constante. Cada excitación contribuye a la energía con $\epsilon = \hbar\omega$.

   (a) Calcule la densidad de estados $g(\omega)$ en la aproximación de Debye, es decir considerando al sólido como continuo. Escriba la expresión para la energía del sistema.

   (b) Demuestre que para temperaturas muy bajas la dependencia del calor específico con la temperatura es $C_V \sim T^{\,n/s}$.

(c) ¿Cuál es la dependencia de C_V con la temperatura en el límite de temperaturas altas? En el mismo límite, ¿cómo depende de $\hbar$? No hace falta hacer cuentas.

9. Se tiene un monocristal de sodio metálico. Cada sodio tiene un solo electrón que contribuye a la conducción. Haremos la aproximación de que los electrones no interactúan entre sí y tampoco con el cristal, de forma tal que pueden considerarse como libres. La única contribución al calor específico que tendremos en cuenta será la proveniente de las vibraciones de la red y de la energía cinética de los electrones de conducción.

   (a) Encuentre la temperatura de Debye.

   (b) Encuentre la temperatura de Fermi.

   (c) ¿Cómo será la dependencia de C_V con la temperatura cuando $T \to 0$?

   (d) ¿Cuánto valdrá aproximadamente C_V a temperatura ambiente?

   Datos:

   La masa atómica del sodio es aproximadamente 23 u.a. Para el sodio metálico, en condiciones normales de presión y temperatura, es $\rho = 0.97$ g cm^{-3}, velocidad del sonido $= 3.2$ km s^{-1}. Además, $k = 1.38 \times 10^{-23}$ J K^{-1}, $\hbar = 1.054 \times 10^{-34}$ J s, masa del electrón $= 9.1 \times 10^{-31}$ kg.