

Física Teórica 3 – 2do. cuatrimestre de 2014

Algunos problemas resueltos de la Guía 7

(Es la versión del cuatrimestre pasado. La redacción del primer ejercicio cambió un poco, pero la solución es la misma.)

Problema 1	1
Problema 3	15
Problema 4	16
Problema 5	22

Problema 1

- a) Calcular $\log Z_{GC}$ para un sistema de bosones de espín s , 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) Encontrar la ecuación que define z en términos de N , V y T .
- d) Encontrar la condición que deben cumplir n y d para que sea posible tener condensado para valores no nulos de la temperatura y el volumen por partícula, $v = V/N$, en el límite termodinámico. (Ayuda: observar que para un número muy grande pero finito de partículas, la población del nivel fundamental sólo es apreciable si $1 - z$ es de orden $1/N$, digamos $1 - z = 1/(Nf)$, de modo que la fracción de partículas en el fundamental es $z/[(1 - z)N] \simeq f$. A partir de ahí, reescribir la ecuación del ítem anterior como una ecuación para v/λ^d y analizar en qué casos, cuando $N \rightarrow \infty$, la hipótesis $1 - z = 1/(Nf)$ es compatible con un valor no nulo de v/λ^d . Tener en cuenta que las funciones $g_\nu(z)$ divergen cuando $z \rightarrow 1$ si $\nu \leq 1$.)
- e) ¿Puede haber condensado en el límite termodinámico para un gas bidimensional con $\epsilon = p^2/2m$?
- f) Asumiendo que se está en un caso en donde puede haber condensado, ¿cuál es el valor crítico del parámetro v/λ^d ?
- g) 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.
- h) En 3 dimensiones y para $\epsilon = p^2/2m$

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

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

■ **Solución.** (a) La función de partición en el gran canónico para un gas de bosones de espín s es

$$\log Z_{\text{GC}} = -(2s + 1) \sum_{\mathbf{p}} \log(1 - ze^{-\beta\alpha p^n}).$$

Por simplicidad tomaremos $s = 0$, el caso general se obtiene luego trivialmente. Al pasar de sumas a integrales hay que conservar aparte el término del nivel fundamental,

$$\log Z_{\text{GC}} = -\log(1 - z) - \frac{V}{h^d} \int d^d p \log(1 - ze^{-\beta\alpha p^n}).$$

En coordenadas esféricas es

$$\int d^d p \rightarrow \int d\Omega_d \int dp p^{d-1}.$$

Como nada depende de la dirección del impulso,

$$\int d\Omega_d \int_0^\infty dp p^{d-1} \rightarrow \Omega_d \int_0^\infty dp p^{d-1}.$$

Haciendo el cambio de variables $x = \beta\alpha p^n$, queda

$$dp p^{d-1} = \frac{1}{n(\beta\alpha)^{d/n}} x^{d/n-1}.$$

Luego,

$$\log Z_{\text{GC}} = -\log(1 - z) - \frac{\Omega_d}{n(\beta\alpha)^{d/n}} \frac{V}{h^d} \int_0^\infty dx x^{d/n-1} \log(1 - ze^{-x}).$$

El procedimiento habitual en este punto es integrar por partes,

$$-\int_0^\infty dx x^{d/n-1} \log(1 - ze^{-x}) = -\frac{n}{d} x^{d/n} \log(1 - ze^{-x}) \Big|_0^\infty + \frac{n}{d} \int_0^\infty dx \frac{x^{d/n}}{z^{-1}e^x - 1}.$$

Para evaluar el primer término en $x \rightarrow \infty$, donde el límite requiere algún cuidado, se usa que para $x \gg 1$

$$\log(1 - ze^{-x}) \simeq -ze^{-x}.$$

Luego, cuando $x \rightarrow \infty$, $x^{d/n} \log(1 - ze^{-x}) \rightarrow 0$. Así,

$$\log Z_{\text{GC}} = -\log(1 - z) + \frac{\Omega_d}{d(\beta\alpha)^{d/n}} \frac{V}{h^d} \int_0^\infty dx \frac{x^{d/n}}{z^{-1}e^x - 1}.$$

Las funciones g_ν se definen como

$$g_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty dz \frac{z^{\nu-1}}{ze^z - 1}.$$

Finalmente, entonces,

$$\log Z_{\text{GC}} = -\log(1-z) + \frac{\Omega_d \Gamma\left(\frac{d}{n} + 1\right)}{d(\beta\alpha)^{d/n}} \frac{V}{h^d} g_{\frac{d}{n}+1}(z).$$

Recordando que

$$\Omega_d = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)},$$

y usando que $x\Gamma(x) = \Gamma(x+1)$, resulta

$$\frac{\Omega_d \Gamma\left(\frac{d}{n} + 1\right)}{d(\beta\alpha)^{d/n}} \frac{V}{h^d} = \left(\frac{\pi^{n/2}}{\alpha\beta h^n}\right)^{d/n} V.$$

Lo que multiplica a V tiene unidades $1/\text{volumen}$, y es lo que en este problema hace las veces de longitud de onda térmica^{-d},

$$\lambda^d = \left(\frac{\alpha\beta h^n}{\pi^{n/2}}\right)^{d/n}.$$

Cuando $\alpha = 1/2m$, $n = 2$ y $d = 3$ se recupera el resultado usual,

$$\lambda^3 = \left(\frac{\beta h^2}{2\pi m}\right)^{3/2}.$$

En definitiva, la función de partición se escribe de una manera muy simple:

$$\log Z_{\text{GC}} = -\log(1-z) + \frac{V}{\lambda^d} g_{\nu+1}(z),$$

donde $\nu = d/n$. Aquí lo importante es recordar que $\lambda^d \propto \beta^\nu$. El logaritmo de la función de partición es igual a βPV . Dividiendo por N obtenemos

$$\beta P v = -\frac{1}{N} \log(1-z) + \frac{v}{\lambda^d} g_{\nu+1}(z). \quad (1)$$

Es natural preguntarse si tiene algún sentido conservar el término asociado al nivel fundamental, teniendo en cuenta que está multiplicado por $1/N$, y que en última instancia uno va a tomar $N \rightarrow \infty$. Si z pudiese acercarse mucho a 1, de manera de contrarrestar el factor $1/N$, el término del fundamental podría cobrar importancia. Por ejemplo, si fuera posible tener $z \sim 1 - e^{-N}$, quedaría

$$-\frac{1}{N} \log(1-z) \sim 1.$$

Como estamos escribiendo cantidades intensivas, un número de orden 1 no es despreciable.

Para saber qué tanto puede acercarse z a 1 y cuánto puede llegar a pesar el término del fundamental en la ecuación para la presión, hay que estudiar los números de ocupación. Cada nivel con energía ϵ tiene un número de ocupación dado por

$$n(\epsilon) = \frac{z}{e^{\beta\epsilon} - z}.$$

Estos números tienen que ser mayores que cero. Por lo tanto el máximo valor de la fugacidad está limitado por el mínimo valor de la energía,

$$z < e^{\beta\epsilon_{\min}}.$$

Cuando la energía es αp^n , y p puede tomar el valor 0, la fugacidad tiene que ser menor que 1. La fugacidad tampoco puede acercarse arbitrariamente al valor 1, porque en algún momento el número de partículas en el nivel fundamental, al no estar acotado como los otros, sobrepasaría el valor N . Esto impone una nueva cota al máximo valor de z . La fugacidad no puede sobrepasar el valor de z que hace que todas las partículas estén en el fundamental,

$$N = \frac{z_{\max}}{1 - z_{\max}},$$

lo que implica

$$z_{\max} = \frac{N}{N + 1}.$$

Debe ser entonces $z \leq z_{\max} < 1$. (Esto acota al valor de z , pero no necesariamente dice que z pueda tomar el valor z_{\max} .) Cuando $N \gg 1$, $z_{\max} \simeq 1 - 1/N$. Para este valor de z obtendríamos la máxima contribución del nivel fundamental a la presión en la ec. (1), a saber

$$-\frac{1}{N} \log(1 - z_{\max}) = \frac{1}{N} \log N.$$

Cuando $N \gg 1$ esta cantidad se vuelve despreciable, puesto que $N^{-1} \log N \rightarrow 0$ cuando $N \rightarrow \infty$. La conclusión, entonces, es que en la ecuación para la presión el término del fundamental puede omitirse, quedando simplemente

$$\beta P = \frac{1}{\lambda^d} g_{\nu+1}(z).$$

(b) La energía media es

$$U = -\frac{\partial \log Z_{GC}}{\partial \beta} = \frac{\partial}{\partial \beta} \log(1 - z) + \frac{d}{n\beta} \frac{V}{\lambda^d} g_{\nu+1}(z) = \frac{\nu}{\beta} \frac{V}{\lambda^d} g_{\nu+1}(z).$$

Está claro que aquí no es que hallamos omitido el nivel fundamental, sino que la derivada respecto de β del término $\log(1 - z)$ es cero, porque no hay nada allí que dependa de β . Por otro lado, es más o menos obvio que el fundamental no contribuye a la energía, ya que la energía del fundamental es cero. De haber tenido una energía ϵ_{\min} hubiéramos obtenido

$$U = \frac{\epsilon_{\min}}{z^{-1}e^{\beta\epsilon_{\min}} - 1} + \frac{\nu}{\beta} \frac{V}{\lambda^d} g_{\nu+1}(z),$$

que tiene una interpretación evidente: el primer término es la energía del fundamental multiplicada por el número de partículas en el fundamental. Pero volviendo al caso $\epsilon_{\min} = 0$ y comparando con la ecuación para la presión se obtiene

$$U = \nu PV.$$

Esta relación es la misma que vale para el gas ideal clásico y para el gas de fermiones.

(c) El número medio de partículas es

$$N = z \frac{\partial \log Z_{GC}}{\partial z} = \frac{z}{1-z} + \frac{V}{\lambda^d} z \frac{\partial}{\partial z} g_{\nu+1}(z).$$

Es fácil demostrar que las funciones g_ν satisfacen

$$z g'_\nu(z) = g_{\nu-1}(z).$$

Luego,

$$N = \frac{z}{1-z} + \frac{V}{\lambda^d} g_\nu(z). \quad (2)$$

Esta ecuación determina z en función de N , V y T .

(d) La cuestión ahora es si debe conservarse o no el término del nivel fundamental en la ec. (2) cuando $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$ y $V/N = v$. En otras palabras, la pregunta es si existe algún régimen en el cual la fracción de partículas en el estado fundamental no se anule en el límite termodinámico. Esta fracción es

$$\frac{N_0}{N} = \frac{1}{N} \frac{z}{1-z}.$$

Cuando $N \gg 1$, a menos que z tome un valor muy cercano a 1 la fracción será despreciable. Por lo que vimos antes, sabemos que el valor máximo de z cuando $N \gg 1$ es $z_{\max} = 1 - 1/N$. La cuestión se traduce en si es posible alcanzar esos valores de z para temperaturas distintas de cero y densidades finitas. Es más o menos intuitivo que si uno baja la temperatura, más partículas empiezan a poblar los niveles de menor energía. ¿Es posible bajar tanto la temperatura, sin llegar al cero absoluto, de forma que z se aproxime a 1 a una distancia del orden de $1/N$?

Supongamos que sí, que $N \gg 1$ y que hay una fracción no despreciable de partículas en el nivel fundamental. Digamos

$$\frac{N_0}{N} = f.$$

Podríamos decir $f = 1/2$, o $f = 1/100$, o $f = 1/1000$. La idea es que no sea $f = 10^{-23}$. Esa fracción se obtiene si $z = 1 - 1/(Nf)$. En efecto

$$\frac{1}{N} \frac{1 - 1/Nf}{1 - (1 - 1/Nf)} = f - 1/N \simeq f.$$

Entonces, dividiendo por N , la ec. (2) que da N en términos de z se lee como

$$1 = f + \frac{v}{\lambda^d} g_\nu(1 - 1/Nf).$$

Habiendo supuesto un valor de z tal que la fracción de partículas en el fundamental es f , la expresión anterior puede pensarse como una ecuación para v/λ^d . El valor de v/λ^d que hace que la fracción de partículas en el fundamental sea f es

$$\frac{v}{\lambda^d} = \frac{1-f}{g_\nu(1-1/Nf)}.$$

Debido a que $\lambda^d = c\beta^\nu$ resulta

$$vT^\nu = \frac{c(1-f)}{g_\nu(1-1/Nf)}.$$

La constante de proporcionalidad es

$$c = \frac{\alpha^\nu h^d}{k^\nu \pi^{d/2}}. \quad (3)$$

Mientras la temperatura y el volumen por partícula determinados por estas ecuaciones no sean cero, en principio es posible poblar el fundamental con una fracción f de las partículas. Aquí es donde entra el límite termodinámico. Una vez fijada la fracción f , si $N \rightarrow \infty$, manteniendo constante y finito el valor de v , el valor del producto vT^ν necesario para tener una fracción f de partículas en el nivel fundamental es

$$vT^\nu = c(1-f) \lim_{N \rightarrow \infty} [g_\nu(1-1/Nf)]^{-1} = c(1-f) \lim_{z \rightarrow 1^-} [g_\nu(z)]^{-1}$$

Si $g_\nu(z)$ tiene un límite finito cuando $z \rightarrow 1^-$, entonces la ecuación anterior da un valor distinto de cero y realizable para el producto vT^ν ,

$$vT^\nu = \frac{c(1-f)}{g_\nu(1)}. \quad (4)$$

Pero si $g_\nu(z)$ tiende a infinito para $z \rightarrow 1^-$, entonces en el límite termodinámico será imposible tener una fracción f no despreciable de partículas en el nivel fundamental, ya que implicaría $vT^\nu = 0$. Esto proporciona el criterio para decir si es o no es posible tener condensado a temperaturas y densidades finitas. Las funciones g_ν divergen en $z \rightarrow 1^-$ si $\nu \leq 1$. Si $\nu > 1$ tienen un límite finito, dado por la función zeta de Riemann,

$$g_\nu(1) = \zeta(\nu), \quad \nu > 1.$$

Por lo tanto, para las condiciones del problema, si $\nu > 1$ podrá haber condensado y si $\nu \leq 1$ no podrá haberlo. Si $\nu > 1$, el valor máximo del producto vT^ν para el que existe condensado se obtiene cuando $f \rightarrow 0$. Esa es la condición crítica

$$vT^\nu = \frac{c}{g_\nu(1)}.$$

En tres dimensiones y para partículas con $\epsilon = p^2/2m$ resulta

$$vT^{3/2} = \left(\frac{h^2}{2\pi mk} \right)^{3/2} \frac{1}{g_{3/2}(1)}.$$

Para tener una idea de las temperatura críticas, consideremos He^4 cerca del cero absoluto. Su densidad ronda los 0.14 g cm^{-3} ; su masa es de alrededor de 4 unidades atómicas, $m \simeq 6.65 \times 10^{-24} \text{ g}$. Para estos valores resulta $T \simeq 3 \text{ K}$.

A veces ayuda pensar la condición crítica como la condición que señala cuál es el máximo número de partículas que puede haber en los niveles con $\mathbf{p} \neq 0$. Como las funciones $g_\nu(z)$ son crecientes en el intervalo entre 0 y 1, pero acotadas si $\nu > 1$, si se fija el valor de V/λ^d , los niveles con $\mathbf{p} \neq 0$ no pueden contener un número arbitrariamente grande de partículas, sino que este número está acotado por $N_{\max} = (V/\lambda^d) g_\nu(1)$. Cuando el número de partículas en el sistema es igual a N_{\max} , se obtiene la condición crítica:

$$N = \frac{V}{\lambda^d} g_\nu(1).$$

Una vez sobrepasado este valor de N , las partículas en exceso van a parar al nivel fundamental. Es fácil formarse una imagen mental de esto en términos de un vaso que se llena y se desborda. En el ítem (f) reobtendremos la condición crítica siguiendo un método más gráfico para representar la ec. (2).

Para terminar, indiquemos la modificación que significaría una degeneración de espín $S = 2s + 1$. El número de partículas está dado por

$$N = S \left[\frac{z}{1-z} + \frac{V}{\lambda^d} g_\nu(z) \right].$$

Esto se reduce al caso $s = 0$ definiendo $N_S = N/S$. El análisis cualitativo acerca de la posibilidad de tener condensado no cambia. El condensado se reparte por igual entre los S niveles con $\mathbf{p} = 0$. La fracción de partículas en el condensado es

$$\frac{N_0}{N} = \frac{1}{S} \frac{Sz}{1-z}.$$

La ec. (4) debe reescribirse como

$$vT^\nu \rightarrow \frac{c(1-f)}{Sg_\nu(1)}.$$

Por otro lado, la condición crítica pasa a ser

$$vT^\nu = \frac{c}{Sg_\nu(1)}.$$

Al tener la posibilidad de acomodar más partículas para cada valor del impulso, el punto que marca el inicio del condensado se desplaza hacia valores menores de la temperatura y del volumen por partícula.

(e) Para el gas bidimensional de partículas con $\epsilon = p^2/2m$ la ec. (2) es

$$N = \frac{z}{1-z} + \frac{A}{\lambda^2} g_1(z).$$

En este caso $\nu = 1$, de manera que en el límite termodinámico la población del nivel fundamental nunca representa una fracción apreciable del total de partículas. Sin embargo, se trata de un caso con matices: el parámetro νT capaz de producir una fracción apreciable de partículas en el nivel fundamental es cero en el límite termodinámico, pero la forma en que se aproxima a cero cuando $N \rightarrow \infty$ es extremadamente lenta. La función g_1 es una de las pocas que puede escribirse en términos de funciones elementales,

$$g_1(z) = \frac{1}{\Gamma(1)} \int_0^\infty dx \frac{1}{z^{-1}e^x - 1} = \int_0^\infty dx \frac{ze^{-x}}{1 - ze^{-x}} = \log(1 - ze^{-x}) \Big|_0^\infty = -\log(1 - z).$$

Como antes, supongamos que en el nivel fundamental hay una fracción f , apreciable, del total de partículas. Deberían demostrar que, siguiendo los pasos del ítem anterior, eso es posible si

$$aT = \frac{h^2}{2\pi mk} \frac{(1 - f)}{\log Nf},$$

donde a es el área por partícula. Para f de orden 1,

$$aT \sim \frac{h^2}{2\pi mk \log N}.$$

Es cierto que $\log N$ tiende a infinito para $N \rightarrow \infty$ y que entonces $aT \rightarrow 0$. Pero, ¿cuánto puede valer N realmente en la práctica? Si la Tierra estuviera hecha de átomos de He^4 habría alrededor de 10^{50} partículas. ¿Cuánto es el logaritmo de 10^{50} ? Respuesta: un mero 100. Se ve entonces que es muy difícil huir de los efectos de tamaño finito en sistemas de 2 dimensiones. Si fuera posible realizar en el laboratorio uno de estos experimentos, se observaría una fracción apreciable de partículas en el fundamental para temperaturas del orden de 1/10 a 1/100 veces la temperatura de los sistemas tridimensionales. Quien puede enfriar algo a 3 K también puede enfriarlo a 0.3 K. Con un límite termodinámico tan lejos de las situaciones realizables, no se observarían discontinuidades ni cambios abruptos en las derivadas de las funciones termodinámicas. Respecto al caso tridimensional, todo sería más suave. No se observaría una verdadera transición de fase, pero eso no impediría la formación del condensado.

(f) y (g) En el ítem (d) calculamos el máximo valor del producto ν/λ^d para el que hay condensado. La lógica fue la siguiente: asumimos que había una fracción f de partículas en el nivel fundamental y vimos que en tal caso valía

$$\frac{\nu}{\lambda^d} = \frac{(1 - f)}{g_\nu(1)},$$

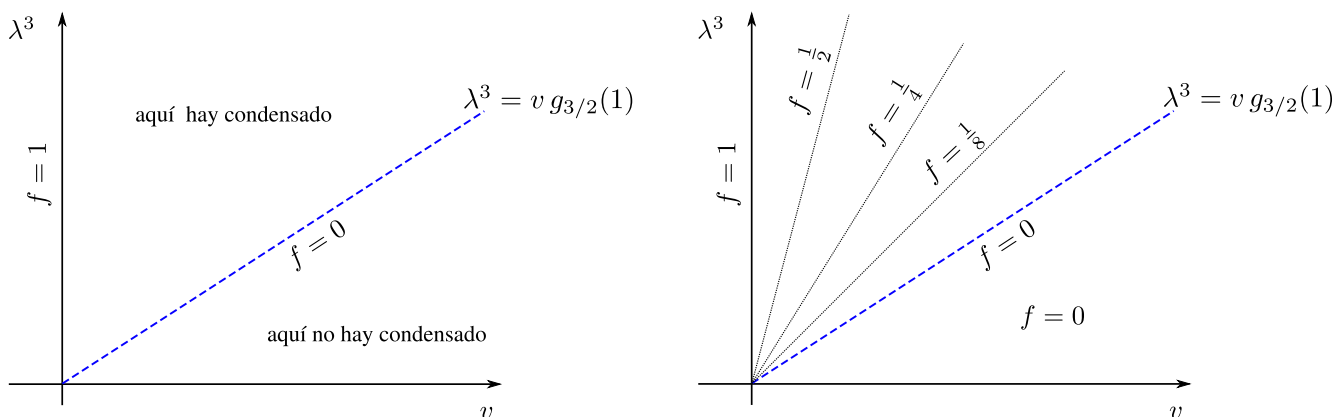
en el límite termodinámico y siempre que ν fuera mayor que 1. Cuanto menor es la fracción de partículas en el condensado, mayor es ν/λ^d , es decir, estamos en una situación más fácil de realizar experimentalmente. El valor crítico se obtiene cuando $f \rightarrow 0$,

$$\frac{\nu}{\lambda^d} = \frac{1}{g_\nu(1)}.$$

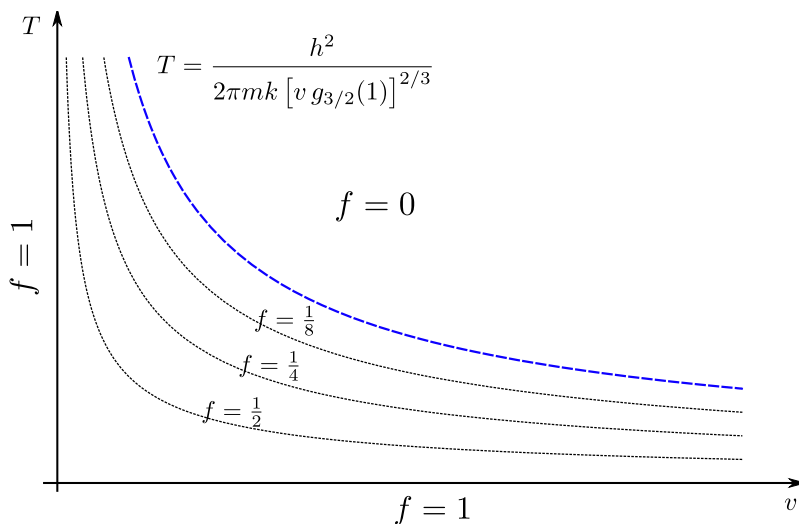
Para valores mayores del producto v/λ^d no hay condensado. A medida que v/λ^d disminuye desde el valor crítico, la fracción f aumenta desde 0, y se hace 1 cuando $v/\lambda^d = 0$. En el caso ordinario del gas en tres dimensiones y energía $p^2/2m$, la relación entre v y λ^3 que define la curva crítica es

$$\frac{v}{\lambda^3} = \frac{1}{g_{3/2}(1)}.$$

El plano $v\lambda^3$ queda dividido en dos zonas, como muestra la figura de la izquierda. Las curvas con f constante en la región del condensado son rectas, como muestra la figura de la derecha.



En el plano vT las curvas de f constante en la zona del condensado dejan de ser rectas, pero es más fácil de leer lo que está pasando. Abajo se muestra el caso $\nu = 1$, que es representativo de los todos los otros.



Por encima de la curva de trazos no hay condensado. Esa sería la región de baja densidad (es decir, v grande) y alta temperatura. Por debajo de la curva crítica hay condensado. Cada fracción f de partículas en el condensado define una curva en el plano vT ,

$$T(v) = \left[\frac{c(1-f)}{v g_\nu(1)} \right]^{1/\nu}.$$

En la figura se grafican las curvas para $f = 1/8, 1/4$ y $1/2$. En el límite en que $f \rightarrow 1$, lo que se obtiene son el par de semiejes correspondientes a $T = 0$ y $v = 0$. Hasta aquí llega el razonamiento que seguimos en los ítems anteriores.

De manera alternativa, la condición crítica y su relación con el límite termodinámico pueden encontrarse resolviendo gráficamente la ec. (2),

$$N = \frac{z}{1-z} + \frac{V}{\lambda^d} g_\nu(z),$$

donde $\nu = d/n$. Ésta es una ecuación para z . Debido a que se va a tomar el límite termodinámico, conviene dividir por N e introducir la cantidad intensiva $v = V/N$. Reacomodando un poco los términos queda

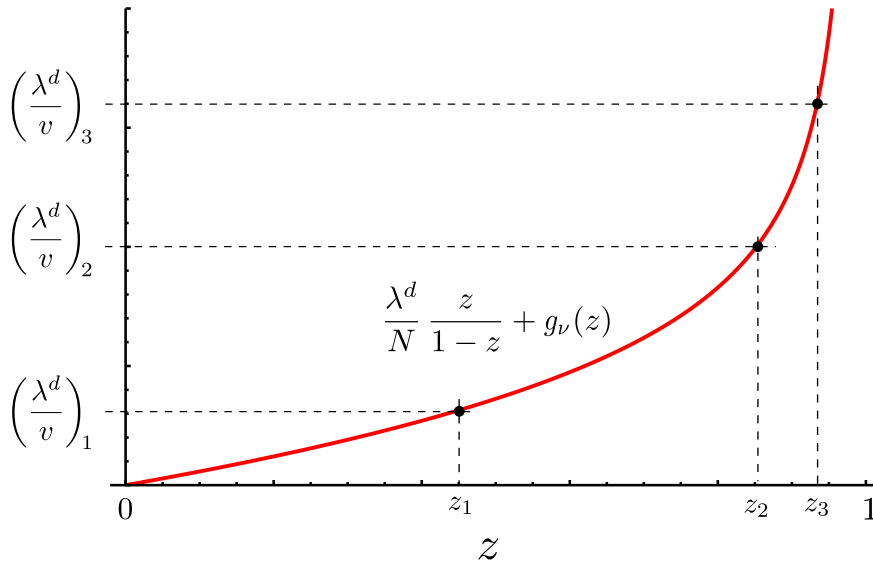
$$\frac{\lambda^d}{v} = \frac{\lambda^d}{N} \frac{z}{1-z} + g_\nu(z). \quad (5)$$

Es evidente que al tomar $N \rightarrow \infty$ la contribución del nivel fundamental tiende a cero, a menos que $1 - z$ tienda al mismo tiempo a un valor del orden de $1/N$.

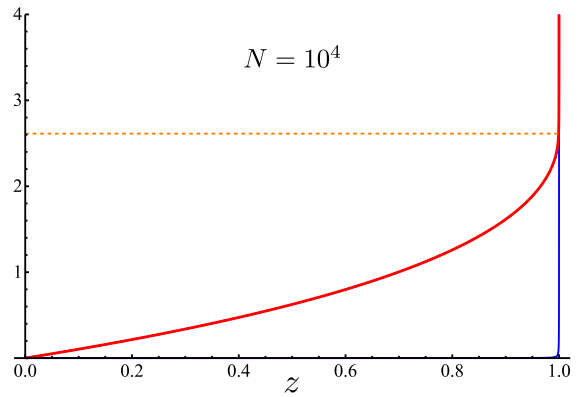
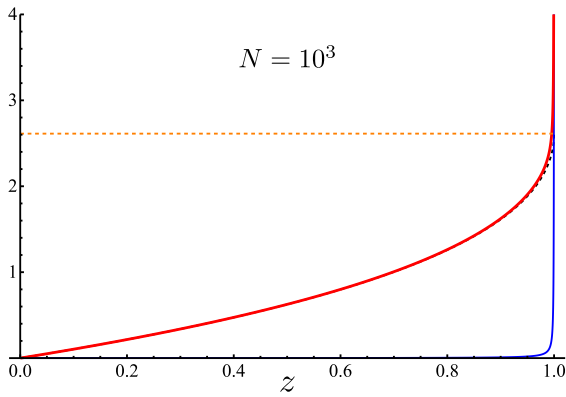
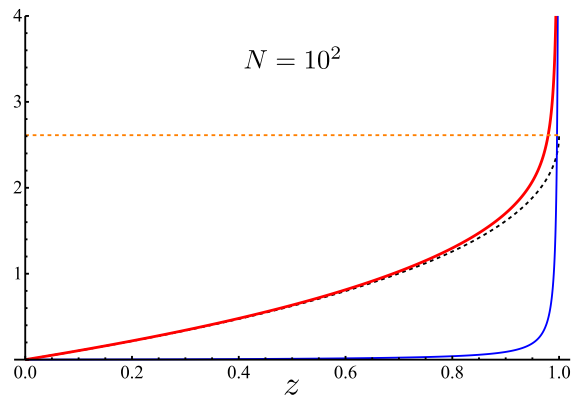
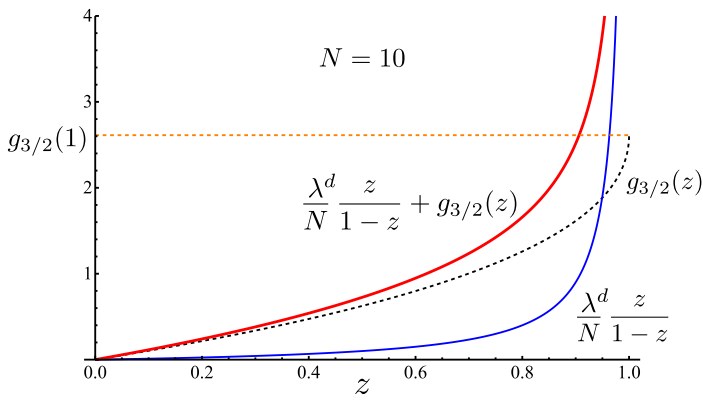
La solución gráfica de la ec. (5) se obtiene buscando la intersección de la cota de nivel λ^d/v con el gráfico de la función

$$F(z) = \frac{\lambda^d}{N} \frac{z}{1-z} + g_\nu(z).$$

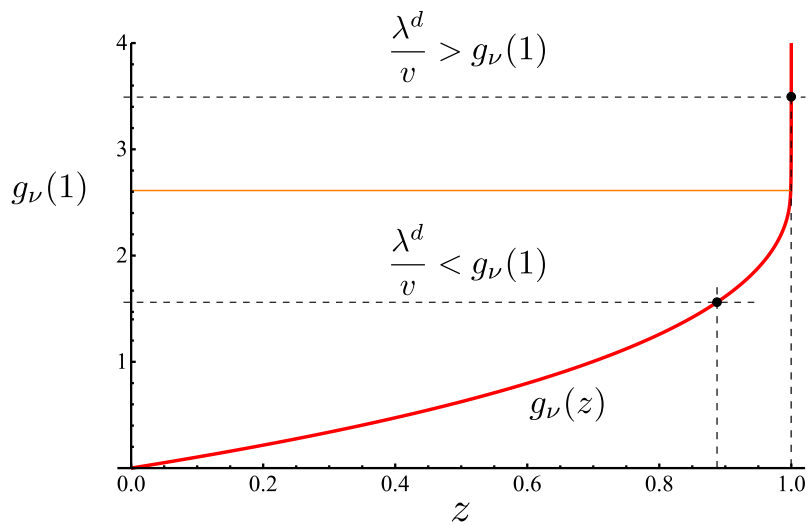
La figura siguiente muestra tres elecciones de λ^d/v y las tres soluciones para la fugacidad.



A medida que N aumenta, la contribución del término proporcional a $z/(1-z)$ en la ec. (5) se hace cada vez más pequeña. La figura de abajo muestra lo que pasa para el caso $\nu = 3/2$. La curva azul es la función $(\lambda^d/N) z/(1-z)$, la curva de trazos es la función $g_\nu(z)$ y la curva roja es la suma de las dos, $F(z)$. En línea de trazos horizontal está el valor de $g_{3/2}(1)$. Se ha elegido $\lambda = 1$.



Para $N = 100$ todavía es posible distinguir cada función por separado. Pero cuando $N = 1000$ ya es difícil distinguir en los gráficos la curva roja de la curva de trazos, y la curva azul es prácticamente un ángulo recto. Ocurre que cuando $N \gg 1$ pero finito, la función $z/(1-z)$ sólo es apreciablemente distinta de cero cuando $1-z$ es de orden $1/N$. Durante casi todo el intervalo de variación de z , lo único que vemos es la función $g_\nu(z)$. Sólo en la inmediata vecindad 1 la otra contribución es apreciable. En el límite cuando $N \rightarrow \infty$, la gráfica de la función $F(z)$ tiende a la curva roja que muestra la figura siguiente, que usa de ejemplo el caso con $\nu = 3/2$.



Por más que no le podamos llamar a eso una *función*, el problema gráfico sigue siendo el mismo: buscar la intersección de la cota de nivel λ^d/v con el gráfico límite de $F(z)$ cuando $N \rightarrow \infty$. Ahora es evidente que hay dos situaciones completamente distintas. Si λ^d/v es menor que $g_\nu(1)$, la solución se encuentra resolviendo

$$\frac{\lambda^d}{v} = g_\nu(z).$$

Pero si λ^d/v es mayor que $g_\nu(1)$, la solución es $z = 1$. La figura anterior ilustra esos dos casos. El límite entre una y otra solución es la condición crítica

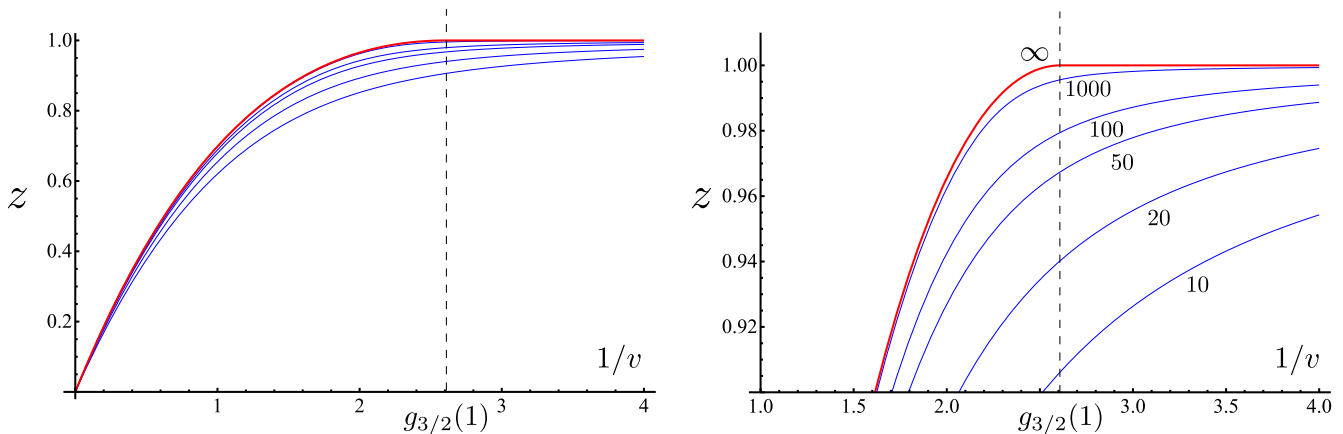
$$\frac{\lambda^d}{v} = g_\nu(1),$$

indicada en la figura anterior con la línea horizontal continua.

La solución numérica de la ec. (5) permite observar la aparición gradual de la singularidad. Los gráficos que siguen fueron hechos en el *Mathematica*. Representan la solución de la ec. (5), $z(N, \lambda, 1/v)$, para $\lambda^d = 1$ y $\nu = 3/2$, y donde N hace las veces de un parámetro.

$$\frac{1}{v} = \frac{1}{N} \frac{z}{1-z} + g_\nu(z) \rightarrow z_N(v^{-1}). \quad (6)$$

La curva roja es la solución cuando $N \rightarrow \infty$. Las curvas azules son para N entre 10 y 1000. A la derecha se grafica la zona crítica en detalle y se muestran los valores de N de cada una de las curvas intermedias.



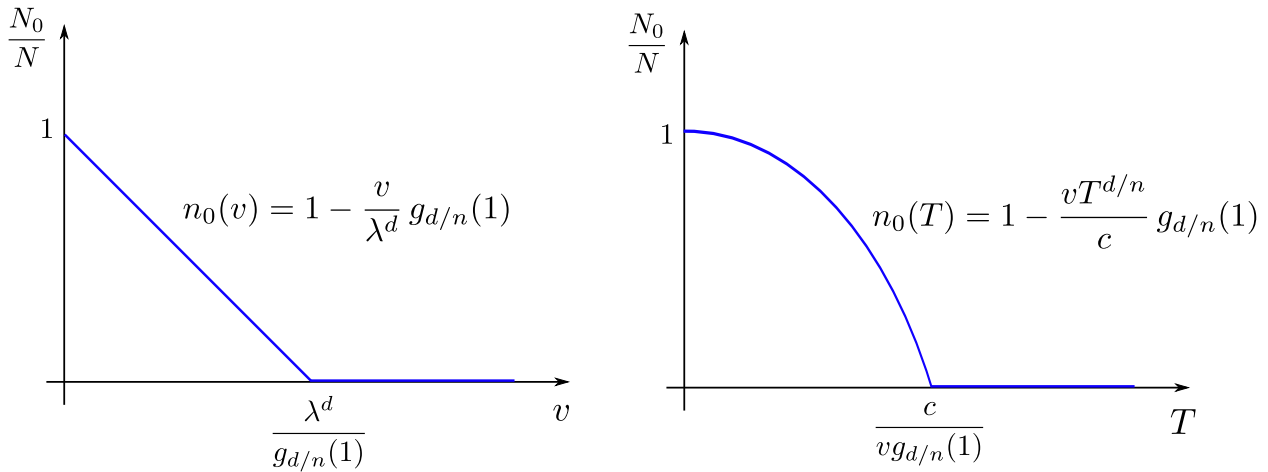
Un punto algo delicado en este argumento es qué pasa con el nivel fundamental cuando $\lambda^d/v > g_\nu(1)$, porque si z fuera verdaderamente igual a 1 la fracción de partículas en el fundamental no estaría bien definida. Lo que hay que notar es que la solución gráfica de la ec. (5) cuando $N \gg 1$ y $\lambda^d/v > g_\nu(1)$ sólo permite obtener z dentro de un error de orden $1/N$, porque se han despreciado todos los detalles de lo que pasa en el pequeño intervalo de ancho $1/N$ en la vecindad del 1. Que z tenga un error de orden $1/N$ no afecta en nada a las funciones que están bien definidas cuando $z \rightarrow 1^-$, en especial la propia $g_\nu(z)$. Da lo mismo tener $g_\nu(1)$ que $g_\nu(1 - 1/Nf)$, cuando $N \gg 1$. Pero para la función $z/(1-z)$ es esencial conocer z cerca del 1 con precisión $1/N$. El problema tiene una solución más simple de lo que parece. En la región cercana a 1, para $N \gg 1$ habría que resolver la ecuación

$$1 = \frac{1}{N} \frac{z}{1-z} + \frac{v}{\lambda^d} g_\nu(1).$$

El primer término representa la fracción de partículas en el condensado, y el segundo, la fracción de partículas con $\mathbf{p} \neq 0$. Ahora bien, lo verdaderamente importante no es cuánto vale z en esta región, sino cuánto vale la fracción de partículas en el condensado. Es decir, no hay necesidad de despejar z , basta con saber que

$$n_0 = \frac{1}{N} \frac{z}{1-z} = 1 - \frac{v}{\lambda^d} g_\nu(1). \quad (7)$$

En resumen, si $\lambda^d/v \leq g_\nu(1)$, la fracción de partículas en el condensado es cero. Si $\lambda^d/v > g_\nu(1)$, la fracción de partículas en el condensado está dada por (7). La figura muestra el comportamiento de N_0/N para distintas elecciones de la variable de control:



Recordar que $\lambda^d = c/T^{d/n}$, donde la constante c fue definida en la ec. (3). En el primer caso λ^d está fija y la fracción se considera función de v . En el segundo caso, v está fijo y la fracción se considera función de la temperatura.

(h) Para calcular el calor específico en el caso general se parte de la ecuación para la energía,

$$U = \nu k T \frac{V}{\lambda^d} g_{\nu+1}(z),$$

donde $\nu = d/n$. El calor específico es la derivada de U respecto de T a N y V constantes, de manera que la fugacidad es una presencia molesta en esta ecuación. Al derivar respecto de T hay que considerar que z es una función de T , V y N :

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V,N} = (\nu + 1) \nu k \frac{V}{\lambda^d} g_{\nu+1}(z) + \nu k T \frac{V}{\lambda^d} g'_{\nu+1}(z) \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_{V,N}. \quad (8)$$

Para escribir el primer término se usó que $\lambda^d \propto T^{-\nu}$. La derivada de z respecto de la temperatura se calcula diferenciando la ecuación para N ,

$$1 = \frac{1}{N} \frac{z}{1-z} + \frac{v}{\lambda^d} g_\nu(z).$$

Como regla general, el límite termodinámico siempre tiene que tomarse al final del cálculo, aunque uno estaría tentado de decir que si hay condensado $z = 1$ y su derivada debería ser cero. Veremos que eso en

verdad ocurre, pero sin saltarnos pasos. Puesto que interesa el caso en que N y V se mantienen constantes, derivando la ecuación anterior respecto de T resulta

$$0 = \frac{1}{N} \frac{z'}{(1-z)^2} + \frac{v}{\lambda^d} g'_\nu(z) z' + \frac{\nu}{T} \frac{v}{\lambda^d} g_\nu(z),$$

donde z' es la derivada de z respecto de T a V y N constantes. Luego, usando que $g'_{n+1} = z^{-1} g_n$, se obtiene

$$\frac{z'}{z} = - \frac{\frac{\nu}{T} g_\nu(z)}{\frac{\lambda^d}{vN} \frac{z}{(1-z)^2} + g_{\nu-1}(z)}.$$

En términos de la fracción de partículas en el nivel fundamental,

$$f = \frac{1}{N} \frac{z}{1-z},$$

resulta

$$\frac{z'}{z} = - \frac{\frac{\nu}{T} g_\nu(z)}{\frac{\lambda^d}{v} N f^2 + g_{\nu-1}(z)}.$$

Cuando $N \gg 1$, la fracción de partículas en el condensado es de orden $1/N$, a menos que z difiera de 1 en cantidades también de orden $1/N$. Esto quiere decir que el producto $N f^2$ es de orden $1/N$ si no hay condensado y de orden N sí lo hay. Al tomar $N \rightarrow \infty$, en el primer caso se obtiene

$$\frac{z'}{z} \rightarrow - \frac{\nu}{T} \frac{g_\nu(z)}{g_{\nu-1}(z)}.$$

Esto corresponde a la situación en que $z < 1$ y no hay condensado. En el otro caso resulta

$$\frac{z'}{z} \rightarrow 0,$$

que era lo que esperábamos, ya que si hay condensado, en el límite termodinámico es $z = 1$, independientemente de T . Entonces, si hay condensado el resultado es bastante simple,

$$C_V = (\nu + 1) \nu k \frac{V}{\lambda^d} g_{\nu+1}(1).$$

Dividiendo por kN ,

$$\frac{C_V}{kN} = (\nu + 1) \nu \frac{v}{\lambda^d} g_{\nu+1}(1).$$

Si $z < 1$, se obtiene, en cambio,

$$C_V = (\nu + 1) \nu k \frac{V}{\lambda^d} g_{\nu+1}(z) - \nu^2 k \frac{V}{\lambda^d} \frac{g_\nu(z)^2}{g_{\nu-1}(z)}.$$

Dividiendo por kN y usando que $\lambda^d/\nu = g_\nu(z)$, queda

$$\frac{C_V}{kN} = (\nu + 1)\nu \frac{g_{\nu+1}(z)}{g_\nu(z)} - \nu^2 \frac{g_\nu(z)}{g_{\nu-1}(z)}.$$

Se propone como ejercicio calcular la variación del calor específico y de su derivada respecto de T a cada lado de la transición, $z \rightarrow 1^-$ y $z = 1$. Que haya o no discontinuidades dependerá del valor de ν .

Una nota de prudencia. Aunque pudimos haber usado desde el comienzo que $z = 1$ en la región donde hay condensado, y así evitarnos calcular allí su derivada, siempre hay que tener el cuidado de calcular primero las cosas para $N \gg 1$ y después tomar el límite $N \rightarrow \infty$. Por ejemplo: una de las primeras observaciones que hicimos fue que en la expresión para el logaritmo de la función de partición,

$$\Omega = -\log(1 - z) + \frac{V}{\lambda^d} g_{\nu+1}(z),$$

el término $-\log(1 - z)$, asociado al nivel fundamental, nunca daba una contribución finita en el límite termodinámico. Pero si, guiados por ese resultado, hubiéramos escrito directamente

$$\Omega = \frac{V}{\lambda^d} g_{\nu+1}(z),$$

luego, al calcular el número de partículas como $z\partial\Omega/\partial z$, nunca hubiéramos recuperado la contribución del nivel fundamental, $z/(1 - z)$, y en el camino habríamos perdido todo indicio del condensado. En lugar de eso, primero tomamos la derivada de Ω completo, nivel fundamental incluido, estudiamos el caso con $N \gg 1$ y recién al final consideramos el límite $N \rightarrow \infty$. Ese debería ser el modo de proceder, en general, en todos los cálculos que involucren el límite termodinámico.

Problema 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 $N \rightarrow \infty$, 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 .

■ **Solucion.** Este problema ilustra la diferencia entre el comportamiento de partículas distinguibles y el de partículas indistinguibles que siguen la estadística de Bose–Einstein. Conviene usar el ensamble canónico. Para las partículas distinguibles, la fracción de partículas en el estado fundamental es igual a la probabilidad de que una partícula dada esté en el fundamental,

$$n_0 = \frac{1}{1 + e^{-\beta\epsilon}}.$$

Aquí se usó que la probabilidad es proporcional a $e^{-\beta E}$, que el nivel fundamental tiene energía 0, y que la probabilidad total debe sumar 1. Lo mismo se obtendría a través de la función de partición; calculando la energía y dividiendo por ϵN se obtendría la fracción de partículas en el estado excitado. Para los bosones, el número de partículas en el fundamental se obtiene promediando la probabilidad de que haya N_0 partículas en el fundamental. Lo que distingue cada estado es únicamente el número de partículas en cada nivel de energía. Aquí sí conviene escribir la función de partición, usando como variable de la suma el número de partículas en el estado excitado,

$$Z_{\text{BE}} = \sum_{n=0}^N e^{-\beta \epsilon n} = \frac{1 - e^{-\beta \epsilon (N+1)}}{1 - e^{-\beta \epsilon}}.$$

Luego, la fracción de partículas en el fundamental es

$$\begin{aligned} n'_0 &= 1 - \frac{1}{N} \frac{\partial \log Z}{\partial (-\beta \epsilon)} \\ &= \frac{1}{1 - e^{-\beta \epsilon (N+1)}} + \frac{1}{N} \left[\frac{1}{e^{\beta \epsilon (N+1)} - 1} - \frac{1}{e^{\beta \epsilon} - 1} \right]. \end{aligned}$$

Se han omitido algunos simples pasos algebraicos. Ahora tomemos el límite $N \rightarrow \infty$. En el caso de las partículas distinguibles no había ninguna dependencia en N , así que la fracción sigue siendo

$$n_0 = \frac{1}{1 + e^{-\beta \epsilon}}.$$

Para los bosones, en cambio,

$$n'_0 \rightarrow 1.$$

Un ejercicio posible es usar el ensamble gran canónico en lugar del canónico. Para las partículas distinguibles todos los cálculos son equivalentes, pero para los bosones hay que encontrar z resolviendo una cuadrática. Aparecen funciones más complicadas, pero cuando $N \gg 1$ se recuperan los resultados del canónico. Lo aconsejable es resolver todo en la computadora, como en el problema 2.

Problema 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 por encima del nivel fundamental de energía $E = 0$. Si la temperatura crítica del gas sin grados de libertad internos es T_0 , muestre que en los límites en que $\epsilon \gg kT_0$ y $\epsilon \ll kT_0$ la temperatura crítica del gas que sí tiene grados de libertad internos es, respectivamente,

$$\frac{T_c}{T_0} \simeq 1 - \frac{2e^{-\epsilon/kT_0}}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}, \quad \frac{T_c}{T_0} \simeq \left(\frac{1}{2}\right)^{2/3} \left[1 + \frac{2^{4/3}}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \left(\frac{\pi\epsilon}{kT_0}\right)^{1/2} \right].$$

Fórmulas útiles:

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

■ **Solución.** Como el problema habla de temperaturas críticas, se entiende que en algún momento debe tomarse el límite termodinámico. Pero mientras eso no sea esencial todas las ecuaciones que escribamos serán válidas para sistemas con N y V finitos. El logaritmo de la función de partición se escribe como la suma de dos términos, uno correspondiente a las partículas que, respecto del grado de libertad interno, están en el nivel fundamental, y otro correspondiente a las partículas que están en el nivel excitado:

$$\log Z_{GC} = - \sum_{\mathbf{p}} \log \left[1 - z \exp \left(\beta \frac{p^2}{2m} \right) \right] - \sum_{\mathbf{p}} \log \left\{ 1 - z \exp \left[\beta \left(\frac{p^2}{2m} + \epsilon \right) \right] \right\}.$$

Puede pensarse en términos de dos sistemas de partículas en equilibrio. Todas las funciones termodinámicas extensivas se escribirán como la suma de dos contribuciones. En especial, el número de partículas será

$$N = \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \frac{p^2}{2m}} - 1} + \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{z^{-1} \exp \left[\beta \left(\frac{p^2}{2m} + \epsilon \right) \right] - 1}.$$

Los dos sistemas de partículas tienen la misma fugacidad, ocupan el mismo volumen y están a la misma temperatura.

En la práctica, el hecho de que el factor $e^{\beta\epsilon}$ aparezca multiplicado por z^{-1} permite definir una fugacidad efectiva, $z_\epsilon = ze^{-\beta\epsilon}$, para las partículas que están en el nivel excitado. De esa manera, si uno conoce el potencial $\Omega_{BE}(z, V, \beta)$ para el problema usual sin grados de libertad internos, que en este caso sería

$$\Omega_{BE}(z, V, \beta) = - \sum_{\mathbf{p}} \log \left[1 - z \exp \left(\beta \frac{p^2}{2m} \right) \right] \rightarrow - \log(1-z) + \frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z),$$

resulta entonces

$$\begin{aligned} \log Z_{GC} &= \Omega_{BE}(z, V, \beta) + \Omega_{BE}(z_\epsilon, V, \beta) \\ &= \Omega_{BE}(z, V, \beta) + \Omega_{BE}(ze^{-\beta\epsilon}, V, \beta). \end{aligned}$$

Para calcular el número de partículas, notar que

$$z \frac{\partial}{\partial z} \left[\Omega_{BE}(ze^{-\beta\epsilon}, V, \beta) \right] = z_\epsilon \frac{\partial}{\partial z_\epsilon} \Omega_{BE}(z_\epsilon, V, \beta).$$

Si el número de partículas del problema sin grados de libertad internos está dado por la función

$$N_{BE}(z, V, \beta) = z \frac{\partial}{\partial z} \Omega_{BE}(z, V, \beta) = \frac{z}{1-z} + \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(z),$$

ahora será

$$N(z, V, \beta) = N_{BE}(z, V, \beta) + N_{BE}(z_\epsilon, V, \beta).$$

La ecuación que determina la fugacidad es entonces

$$N = \left[\frac{z}{1-z} + \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(z) \right] + \left[\frac{z}{e^{\beta\epsilon} - z} + \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(ze^{-\beta\epsilon}) \right].$$

El problema no lo pide, pero es instructivo calcular la energía. Para el gas sin grados de libertad internos quedaría

$$U_{\text{BE}}(z, V, \beta) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \Omega_{\text{BE}}(z, V, \beta).$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial \beta} [\Omega_{\text{BE}}(ze^{-\beta\epsilon}, V, \beta)] &= -\frac{\partial \Omega_{\text{BE}}}{\partial \beta}(ze^{-\beta\epsilon}, V, \beta) + ze^{-\beta\epsilon} \frac{\partial \Omega_{\text{BE}}}{\partial z}(ze^{-\beta\epsilon}, V, \beta) \\ &= U_{\text{BE}}(z_\epsilon, V, \beta) + \epsilon N(z_\epsilon, V, \beta). \end{aligned}$$

Luego,

$$U(z, V, \beta) = U_{\text{BE}}(z, V, \beta) + U_{\text{BE}}(z_\epsilon, V, \beta) + \epsilon N(z_\epsilon, V, \beta).$$

El significado de esta ecuación es obvio.

Si $\epsilon = 0$, el problema se reduce al caso usual, pero hay que tener en cuenta una degeneración igual a 2. La ecuación que determina en ese caso la fugacidad es

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

La condición crítica está dada por

$$\frac{\lambda^3}{v} = 2g_{3/2}(1).$$

Si se fija la densidad, la temperatura crítica es

$$T_c = \frac{1}{2^{2/3}} T_0,$$

donde

$$T_0 = \frac{h^2}{2\pi m k [v g_{3/2}(1)]^{2/3}}$$

es la temperatura crítica del gas sin grados de libertad internos.

Si $\epsilon > 0$ hay que analizar la ecuación

$$N = \left[\frac{z}{1-z} + \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(z) \right] + \left[\frac{z}{e^{\beta\epsilon} - z} + \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(ze^{-\beta\epsilon}) \right]. \quad (9)$$

Debido a que va a interesar tomar el límite termodinámico, asumiremos que $N \gg 1$. Una cosa es clara: si no hay condensado en el nivel fundamental tampoco habrá condensado en el nivel con $\mathbf{p} = 0$ pero energía ϵ . Es decir, si

$$\frac{N_0}{N} = \frac{1}{N} \frac{z}{1-z}$$

es despreciable, también será despreciable el término

$$\frac{N_0^\epsilon}{N} = \frac{1}{N} \frac{z}{e^{\beta\epsilon} - z}.$$

Esto es debido simplemente a que

$$\frac{z}{e^{\beta\epsilon} - z} < \frac{z}{1-z}.$$

La pregunta entonces es: ¿qué pasa si hay condensado en el nivel fundamental? ¿Es necesario retener los dos términos, N_0 y N_0^ϵ ? ¿Puede haber condensado simultáneamente en el par de niveles con $\mathbf{p} = 0$?

Si todas las partículas estuvieran en el nivel fundamental con energía 0, debería ser

$$N = \frac{z}{1-z},$$

lo que para $1 \ll N$ implica $z \simeq 1 - 1/N$. Esto es lo máximo que se va a acercar z al valor 1. Todos los números de ocupación son funciones crecientes de z . Analizando lo que ocurre en esta región uno podrá tener una idea del valor máximo que puede tomar cada término de la ecuación (9). Supongamos que z esté en esa región, digamos, $z = 1 - 1/(Nf)$, con f un número de orden 1. En tal caso la fracción de partículas en el nivel fundamental sería

$$\frac{N_0}{N} = \frac{1}{N} \frac{1 - 1/Nf}{1/Nf} = f - \frac{1}{N} \simeq f.$$

Por otro lado, la fracción de partículas en el nivel excitado pero con $\mathbf{p} = 0$ sería

$$\frac{N_0^\epsilon}{N} = \frac{1}{N} \frac{z}{e^{\beta\epsilon} - z} \simeq \frac{f}{Nf(e^{\beta\epsilon} - 1) + 1}.$$

Mientras sea $\epsilon \neq 0$, al hacer $N \rightarrow \infty$ este término siempre será despreciable frente a los otros en el límite termodinámico, no importa qué tan pequeño sea ϵ . Esto significa que para estudiar el límite termodinámico sólo es necesario retener los siguientes términos de la ec. (9),

$$N = \frac{z}{1-z} + \frac{V}{\lambda^3} \left[g_{3/2}(z) + g_{3/2}(ze^{-\beta\epsilon}) \right].$$

Esta ecuación no difiere cualitativamente de la que se encuentra en el problema del condensado usual. Lo único que importa en este tipo de ecuaciones es que sean de la forma

$$N = \frac{z}{1-z} + \frac{V}{\lambda^3} F(z, T),$$

con F una función monótona creciente de z , tal que $F(0, T) = 0$, y con un límite finito para $z \rightarrow 1^-$,

$$\lim_{z \rightarrow 1^-} F(z, T) = f(T) < \infty.$$

La condición crítica es entonces

$$\lambda^3 = vF(1, T).$$

Para el problema en cuestión es

$$\lambda^3 = v \left[g_{3/2}(1) + g_{3/2}(e^{-\beta\epsilon}) \right]. \quad (10)$$

Antes, cuando no había grados de libertad internos, la relación que definía los puntos de transición resultaba muy sencilla. La curva de los puntos de transición en el plano $v\lambda^3$ era simplemente

$$\lambda^3 = v g_{3/2}(1).$$

La ec. (10) sigue definiendo una curva en el plano $v\lambda^3$, pero ya no está dada por una relación tan simple como la anterior. No sólo hay una exponencial de por medio, sino la función $g_{3/2}$. No podemos esperar despejar λ^3 o T en función de v . El problema pide encontrar la temperatura crítica $T_c(v)$ bajo condiciones particulares del producto $\beta_c\epsilon$, que hacen posible obtener expresiones aproximadas para la relación entre v y T en la transición.

Sacando factor común $g_{3/2}(1)$ en la ec. (10) la relación crítica es

$$\lambda_c^3 = v g_{3/2}(1) \left[1 + \frac{g_{3/2}(e^{-\beta_c\epsilon})}{g_{3/2}(1)} \right].$$

El producto $\lambda_0^3 = v g_{3/2}(1)$ es el valor crítico del parámetro λ^3 para el gas sin grados de libertad, de modo que

$$\frac{\lambda_c^3}{\lambda_0^3} = 1 + \frac{g_{3/2}(e^{-\beta_c\epsilon})}{g_{3/2}(1)}. \quad (11)$$

El miembro de la derecha es una función monótona de ϵ . Los dos casos extremos se obtienen con $\epsilon \rightarrow 0$ y $\epsilon \rightarrow \infty$,

$$1 + \frac{g_{3/2}(1)}{g_{3/2}(1)} = 2, \quad 1 + \frac{g_{3/2}(0)}{g_{3/2}(1)} = 1.$$

Esto acota los posibles valores del cociente λ_c^3/λ_0^3 . En términos de la temperatura crítica, sería

$$\frac{1}{2^{2/3}} T_0 < T_c < T_0.$$

El enunciado pide considerar los casos $\epsilon \gg kT_0$ y $\epsilon \ll kT_0$. Pero la desigualdad anterior dice que T_c siempre va a ser del mismo orden de magnitud que T_0 . Es equivalente, por lo tanto, escribir las condiciones del enunciado en términos de T_c , lo que simplifica un poco las cuentas.

Primer caso: $\beta_c \epsilon \gg 1$. Físicamente, esto significa que en la región de la transición los niveles excitados (respecto del grado de libertad interno) van a estar muy poco poblados. La brecha de energía ϵ va a ser tan alta respecto de kT que, prácticamente, será como si el nivel interno excitado no existiera. Es decir, deberíamos esperar que la temperatura crítica fuera aproximadamente igual a la de un gas de partículas sin grados de libertad internos. Si para v y ϵ fijos la transición se produce a una temperatura tal que $\beta_c \epsilon \gg 1$, el argumento de la función $g_{3/2}(e^{-\beta_c \epsilon})$ es muy cercano a cero. Puesto que $g_\nu(z) = z + z^2/2^\nu + \dots$, en ese caso vale la aproximación

$$g_{3/2}(e^{-\beta_c \epsilon}) \simeq e^{-\beta_c \epsilon}.$$

La ecuación aproximada que relaciona λ_c^3 con v en esa región es

$$\frac{\lambda_c^3}{\lambda_0^3} \simeq 1 + \frac{e^{-\beta_c \epsilon}}{g_{3/2}(1)}.$$

En el límite en que $\epsilon \rightarrow \infty$ se obtiene $\lambda_c = \lambda_0$ y $\beta_c = \beta_0$. Si el producto $\beta_c \epsilon$ es muy grande pero finito, λ_c debe diferir poco de λ_0 . Como el término proporcional a $e^{-\beta_c \epsilon}$ es una perturbación, a primer orden el valor de β_c en el exponente puede reemplazarse por el que se encuentra cuando ϵ es infinito,

$$\frac{\lambda_c^3}{\lambda_0^3} \simeq 1 + \frac{e^{-\beta_0 \epsilon}}{g_{3/2}(1)}.$$

Debido a que $\lambda^3 \propto T^{3/2}$,

$$\frac{T_c}{T_0} \simeq \left[1 + \frac{e^{-\beta_0 \epsilon_c}}{g_{3/2}(1)} \right]^{-2/3} \simeq 1 - \frac{2e^{-\beta_0 \epsilon_c}}{3g_{3/2}(1)}.$$

Para más datos, $g_{3/2}(1) = \zeta(3/2)$.

Segundo caso: $\beta_c \epsilon \ll 1$. Físicamente, debido a que ϵ es mucho menor que kT_c los dos niveles del grado de libertad interno tendrán más o menos la misma población. En estas condiciones, en lo que respecta a los niveles con $\mathbf{p} \neq 0$, al momento de producirse la transición es prácticamente como si fuera $\epsilon = 0$ y se tratase de partículas con una degeneración 2. Es decir, como aproximación de orden cero deberíamos recuperar el caso $\epsilon = 0$. Bajo la hipótesis de que $\beta_c \epsilon \ll 1$, será $e^{-\beta_c \epsilon}$ aproximadamente 1. En tal caso se puede usar el desarrollo de las funciones $g_\nu(e^{-\alpha})$ cuando $\alpha \rightarrow 0^+$:

$$g_{3/2}(e^{-\beta_c \epsilon}) = g_{3/2}(1) + \Gamma\left(-\frac{1}{2}\right) (\beta_c \epsilon)^{1/2} + \mathcal{O}(\beta_c \epsilon).$$

Aquí $\Gamma(-1/2) = -2\Gamma(1/2) = -2\sqrt{\pi}$. La ecuación aproximada que da la relación entre la densidad y la temperatura crítica es entonces

$$\lambda_c^3 = 2vg_{3/2}(1) \left[1 - \frac{(\pi\beta_c \epsilon)^{1/2}}{g_{3/2}(1)} \right].$$

Usando el resultado del gas sin grados de libertad,

$$\lambda_0^3 = v g_{3/2}(1),$$

queda

$$\frac{\lambda_c^3}{\lambda_0^3} = 2 \left[1 - \frac{(\pi \beta_c \epsilon)^{1/2}}{g_{3/2}(1)} \right]. \quad (12)$$

La aproximación de orden cero se obtiene escribiendo $\epsilon = 0$,

$$\lambda_c^3 \simeq 2\lambda_0^3,$$

es decir

$$\beta_c \simeq 2^{2/3} \beta_0.$$

El orden siguiente en la aproximación se obtiene reemplazando la aproximación de orden cero en el segundo miembro de la ec. (12), donde β_c aparece dentro del término que representa la perturbación a la ecuación de orden cero,

$$\lambda_c^3 \simeq 2\lambda_0^3 \left[1 - \frac{(\pi 2^{2/3} \beta_0 \epsilon)^{1/2}}{g_{3/2}(1)} \right].$$

Conservando términos de hasta orden $(\beta_0 \epsilon)^{1/2}$ resulta

$$\frac{T_c}{T_0} = \frac{1}{2^{2/3}} \left[1 + \frac{2^{4/3} (\pi \beta_0 \epsilon)^{1/2}}{3 g_{3/2}(1)} \right].$$

Aunque la temperatura crítica cuando $\epsilon \rightarrow 0^+$, se aproxima a la del gas con degeneración 2, en otros aspectos no se recupera el caso $\epsilon = 0$. Distingamos los dos niveles del grado de libertad interno mediante un índice s , que tome los valores 0 y 1, de modo la energía asociada sea $s\epsilon$. Cuando ϵ es estrictamente igual a cero, para cada valor de \mathbf{p} habrá el mismo número de partículas con $s = 0$ que con $s = 1$, ya que el problema es completamente simétrico respecto de s . En especial, el condensado contendrá partes iguales de partículas en cada nivel del grado de libertad interno. Pero vimos antes que cuando $\epsilon > 0$, por pequeño que sea, en el límite termodinámico el nivel con $\mathbf{p} = 0$ y $s = 1$ nunca adquiere una fracción macroscópica de partículas. Esto significa que para $\epsilon \rightarrow 0^+$ en el condensado sólo habrá partículas con $s = 0$. Sin embargo, respecto a las partículas con $\mathbf{p} \neq 0$, las poblaciones con $s = 0$ y $s = 1$ tienden a igualarse cuando $\epsilon \rightarrow 0^+$, porque $g_{3/2}(ze^{-\beta\epsilon}) \rightarrow g_{3/2}(z)$. Para estos niveles el límite $\epsilon \rightarrow 0^+$ equivale al caso con $\epsilon = 0$.

Problema 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, es decir, βPV y N como funciones de z y T . Tener en cuenta que puede haber una fase condensada. Interpretar los límites $x \rightarrow 0$ y $x \rightarrow \infty$.
- 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.

■ **Solución.** (a) Este problema es muy parecido al anterior. El gran potencial se escribe como la suma de tres contribuciones, una para cada proyección del espín,

$$\log Z_{GC} = - \sum_{\mathbf{p}} \log \left\{ 1 - z \exp \left[\beta \left(\frac{p^2}{2m} + \epsilon \right) \right] \right\} - \sum_{\mathbf{p}} \log \left\{ 1 - z \exp \left[\beta \frac{p^2}{2m} \right] \right\} \\ - \sum_{\mathbf{p}} \log \left\{ 1 - z \exp \left[\beta \left(\frac{p^2}{2m} - \epsilon \right) \right] \right\},$$

donde $\epsilon = Hm_0$. El primer término corresponde a $s = -1$, el segundo a $s = 0$ y el tercero a $s = 1$. Si $\Omega(V, T, z)$ es el gran potencial de un sistema de bosones, con la misma masa que las partículas originales, pero sin degeneración de espín, entonces será

$$\log Z_{GC} = \Omega(V, T, ze^{-\beta\epsilon}) + \Omega(V, T, z) + \Omega(V, T, ze^{\beta\epsilon}).$$

Todas las funciones termodinámicas extensivas se escribirán como la suma de tres contribuciones, una para cada proyección del espín y con una fugacidad efectiva $z_s = ze^{sx}$, donde $x = \beta\epsilon$. En especial,

$$N(V, T, z) = N(V, T, z_{-1}) + N(V, T, z_0) + N(V, T, z_1).$$

Notar que esto vale porque

$$z \frac{\partial}{\partial z} = (ze^a) \frac{\partial}{\partial (ze^a)}.$$

(b) El nivel fundamental tiene ahora una energía $-\epsilon$, que, por hipótesis, es menor que cero. Eso implica que la fugacidad puede tomar los valores $0 < z < e^{-\beta\epsilon}$, donde $e^{-\beta\epsilon} < 1$. Si definimos $z^* = ze^{\beta\epsilon}$, tendremos $0 < z^* < 1$, como en el caso usual. En términos de z^* queda

$$\log Z_{GC} = \Omega(V, T, z^* e^{-2\beta\epsilon}) + \Omega(V, T, z^* e^{-\beta\epsilon}) + \Omega(V, T, z^*).$$

Pasando de sumas a integrales pero conservando separadamente los términos con $\mathbf{p} = 0$, la ecuación de estado es

$$\beta PV = \left[-\log(1 - z^* e^{-2\beta\epsilon}) + \frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z^* e^{-2\beta\epsilon}) \right] + \left[-\log(1 - z^* e^{-\beta\epsilon}) + \frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z^* e^{-\beta\epsilon}) \right] + \left[-\log(1 - z^*) + \frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z^*) \right].$$

Por otro lado, el número de partículas queda definido por

$$N(V, T, z) = N(V, T, z^* e^{-2\beta\epsilon}) + N(V, T, z^* e^{-\beta\epsilon}) + N(V, T, z^*)$$

$$= \left[\frac{z^* e^{-2\beta\epsilon}}{1 - z^* e^{-2\beta\epsilon}} + \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(z^* e^{-2\beta\epsilon}) \right] + \left[\frac{z^* e^{-\beta\epsilon}}{1 - z^* e^{-\beta\epsilon}} + \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(z^* e^{-\beta\epsilon}) \right] + \left[\frac{z^*}{1 - z^*} + \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(z^*) \right].$$

Cada corchete corresponde a una proyección del espín, en el orden -1 , 0 , y 1 . Todos los términos que aparecen aquí son funciones crecientes de z^* . Si la fracción de partículas en el nivel fundamental ($\mathbf{p} = 0$ y $s = 1$) es despreciable, también serán despreciables las fracciones de partículas en los niveles fundamentales respecto de las otras proyecciones del espín. Es decir, si puede omitirse el término $z^*/(1 - z^*)$, entonces también podrán omitirse los otros dos términos análogos, porque están evaluados en una fugacidad efectiva menor que z^* . Ahora supongamos que la fracción de partículas en el fundamental no es despreciable. Cuando $N \gg 1$ eso ocurrirá si $z^* \sim 1 - 1/N$. Digamos que es $z^* = 1 - 1/(Nf)$ con $f < 1$. Entonces las fracciones de partículas en los niveles fundamentales respecto de cada proyección del espín serán

$$\frac{1}{N} \frac{z^* e^{-2\beta\epsilon}}{1 - z^* e^{-2\beta\epsilon}} \simeq \frac{f}{Nf(e^{2\beta\epsilon} - 1) + 1}, \quad (s = -1)$$

$$\frac{1}{N} \frac{z^* e^{-\beta\epsilon}}{1 - z^* e^{-\beta\epsilon}} \simeq \frac{f}{Nf(e^{\beta\epsilon} - 1) + 1}, \quad (s = 0)$$

$$\frac{1}{N} \frac{z^*}{1 - z^*} \simeq f. \quad (s = 1) \quad (13)$$

A menos que el campo magnético sea estrictamente cero, las dos primeras fracciones serán mucho menores que la tercera. La conclusión es que, para campos no nulos, no es necesario tener en cuenta los términos fundamentales respecto de las proyecciones del espín -1 y 0 . La ecuación que determina la fugacidad cuando $N \gg 1$ es, por lo tanto,

$$N = \frac{z^*}{1 - z^*} + \frac{V}{\lambda^3} \left[g_{3/2}(z^* e^{-2\beta\epsilon}) + g_{3/2}(z^* e^{-\beta\epsilon}) + g_{3/2}(z^*) \right]. \quad (14)$$

En cuanto a la presión, ya sabíamos que para el gas usual la contribución del nivel fundamental era despreciable. De modo que ahora tampoco será necesario conservar ninguno de los términos fundamentales respecto de las proyecciones del espín:

$$\beta PV = \frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z^* e^{-2\beta\epsilon}) + \frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z^* e^{-\beta\epsilon}) + \frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z^*).$$

Cuando $\epsilon \rightarrow \infty$, $e^{-\beta\epsilon} \rightarrow 0$ y sólo sobreviven en N y en la presión los términos correspondientes a la proyección $s = 1$ del espín. El campo es tan alto que, a todos los efectos, las partículas se comportan como si tuvieran una sola proyección permitida del espín. En cambio, si $\epsilon \rightarrow 0^+$, no hay diferencias entre las distintas proyecciones, los argumentos de todas las funciones $g_{3/2}$ y $g_{5/2}$ tienden a z^* y el gas se comporta como un gas de partículas con degeneración 3, pero con una salvedad: de los tres niveles fundamentales asociados a cada proyección del espín, según lo que vimos antes, sólo el nivel con $s = 1$ puede tener una fase condensada. Si un gas de partículas con degeneración de espín 3, esto es, ϵ estrictamente igual a 0, tiene fase condensada, entonces a cada proyección del espín corresponde $1/3$ de las partículas del condensado. En cambio, si $\epsilon \rightarrow 0^+$, al tomar el límite termodinámico la única fracción no despreciable de partículas con $\mathbf{p} = 0$ es aquella con $s = 1$.

El problema de la condensación para este gas es análogo al usual, la única diferencia es que hay que reemplazar la función $g_{3/2}$ por todo el corchete en la ec. (14). Sigue siendo una función monótona creciente de z^* , acotada cuando $z^* \rightarrow 1^-$ y sigue estando multiplicada por un factor V . La condición crítica se expresa ahora como

$$\frac{\lambda^3}{v} = g_{3/2}(e^{-2\beta\epsilon}) + g_{3/2}(e^{-\beta\epsilon}) + g_{3/2}(1).$$

Cuando $\epsilon \rightarrow \infty$, los dos primeros términos tienden a cero y se obtiene la relación usual para un gas sin grados de libertad. Esto es razonable, ya que un campo magnético muy alto hace inaccesibles todas las proyecciones del espín salvo la de menor energía. En el límite $\epsilon \rightarrow 0^+$, se recupera el caso con degeneración 3. Estudiar con detalle cuáles son las primeras correcciones en cada caso es muy parecido a lo hecho en el problema anterior y se deja como ejercicio.