

Clase de Consultas del 29/6

1. Un gas de N bosones des espín s en 2D, confinados en un área A , en el límite UR: $\varepsilon_i = p_i c$

- a) ¿Puede haber condensación de Bose-Einstein (CBE) en este sistema?
- b) ¿Qué temperatura el sistema debe tener para que 1/8 de las partículas salgan del estado fundamental?
- c) ¿Cuál es la ecuación de estado a alta temperatura?

El logaritmo de la función de partición (macrocanónica) nos permite calcular toda cantidad termodinámica de nuestro interés. Para bosones planteamos:

$$\ln(Z_{GC}) = - \sum_i \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon_i}) \quad (1)$$

Ahora bien, los estados monoparticulares están rotulados por la proyección de espín y el momento \mathbf{p} , por lo que tenemos:

$$\ln(Z_{GC}) = \sum_{s, \mathbf{p}} \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon_s(\mathbf{p})}) = -g_s \ln(1 - z) - g_s \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon(\mathbf{p})}), \quad (2)$$

donde usamos que la energía monoparticular no depende del espín y además hemos separado la contribución del estado fundamental, pues sabemos que en un sistema bosónico éste puede estar macroscópicamente poblado. Si la energía del estado fundamental no fuese nula tendríamos un término que va como $-g_s \ln(1 - ze^{-\varepsilon_{min}})$.

Usando el límite semiclásico, podemos pasar la sumatoria a una integral en un elemento del espacio de fases; resulta:

$$\ln(Z_{GC}) = -g_s \ln(1 - z) - g_s \int \frac{d\mathbf{r}d\mathbf{p}}{h^2} \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon(\mathbf{p})}) \quad (3)$$

$$\ln(Z_{GC}) = -g_s \ln(1 - z) - \frac{g_s A}{h^2} 2\pi \int p \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon(p)}) dp \quad (4)$$

$$\ln(Z_{GC}) = -g_s \ln(1 - z) - \frac{g_s A}{h^2} 2\pi \int p dp \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon(p)}) dp \quad (5)$$

Cambiando de variables con $x = \beta pc$, se tiene:

$$\ln(Z_{GC}) = -g_s \ln(1 - z) - \frac{g_s A}{h^2} \frac{2\pi}{(\beta c)^2} \int \beta c p \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon(p)}) d(\beta c p) \quad (6)$$

$$\ln(Z_{GC}) = -g_s \ln(1 - z) - \frac{g_s A}{h^2} \frac{2\pi}{(\beta c)^2} \int x \ln(1 - ze^{-x}) dx \quad (7)$$

Integrando por partes, queda:

$$\ln(Z_{GC}) = -g_s \ln(1-z) - \frac{g_s A}{h^2} \frac{2\pi}{(\beta c)^2} \left[\frac{x^2}{2} \ln(1 - z e^{-x}) \Big|_0^\infty - \underbrace{\int_0^\infty \frac{x^2}{2} \frac{1}{z^{-1} e^x - 1} dx}_{\Gamma(3) \equiv g_3(z)} \right] \quad (8)$$

$$\ln(Z_{GC}) = -g_s \ln(1-z) + g_s A \frac{2\pi}{(\beta h c)^2} g_3(z) \quad (9)$$

Podemos expresar este resultado ya sea de esta forma o bien identificando na longitud de onda térmica, es indiferente.

$$\ln(Z_{GC}) = -g_s \ln(1-z) + g_s A 2\pi \left(\frac{kT}{hc} \right) g_3(z) \quad (10)$$

$$\ln(Z_{GC}) = -g_s \ln(1-z) + g_s \frac{A}{\lambda^2} g_3(z) \quad (11)$$

Concentrémonos ahora en lo que nos preguntaban en este inciso. ¿Puede ocurrir la CBE?

Recordamos que la CBE no es más que la ocupacion macroscópica del estado fundamental a temperatura no nula. Debemos ahora calcular el número medio de partículas:

$$\langle N \rangle = z \left(\frac{\partial \ln(Z_{GC})}{\partial z} \right)_{\beta, A} \quad (12)$$

$$\langle N \rangle = \underbrace{g_s \frac{z}{1-z}}_{\langle N_0 \rangle} + \underbrace{g_s A 2\pi \left(\frac{kT}{hc} \right)^2 g_2(z)}_{\langle N_e \rangle}, \quad (13)$$

donde identificamos la contribución del estado fundamental y la de los estados excitados.

Un criterio rápido para saber si podemos tener CBE es ver si $\langle N_e \rangle$ se encuentra acotado. Toda partícula que no esté en un estado excitado pasa a poblar el fundamental.

Aquí es donde debemos analizar el comportamiento de $\langle N_e \rangle$; esto depende del problema en sí. En este caso vemos que $\langle N_e \rangle \sim g_2(z)$. Sabemos que una de las propiedades que tienen las integrales de Bose (que forman parte de las funciones polilogarítmicas) es que éstas son crecientes con la fugacidad; esto puede notarse observando que a medida que z crece el denominador del integrando es cada vez menor y el integrando cada vez mayor. Tenemos así, a una temperatura dada T , que:

$$\langle N_e \rangle (z, T) \leq \langle N_e \rangle (z_{max}, T) \quad (14)$$

Eludimos esta discusión y usamos lo que sabemos en este tipo de problemas: que en general $z_{max} = 1$. ¿Pero como probamos esto?

En un análisis general $0 < z \leq z_{max} < 1 = e^{\beta \epsilon_{min}}$. La fugacidad acercarse arbitrariamente a 1, porque si $\langle N \rangle$ no fuera infinito (i.e. no estuviéramos en el límite termodinámico) llegaríamos al punto en el que el número de partículas en el fundamental sobrepasaría el valor de $\langle N \rangle$. El valor máximo que puede tomar la fugacidad es aquel en el cual todas las partículas se encuentran en el estado fundamental:

$$\langle N \rangle = g_s \frac{z_{max}}{1 - z_{max}} = z_{max} = \frac{\langle N \rangle}{\langle N \rangle + g_s} = \frac{1}{1 + \frac{g_s}{\langle N \rangle}} \approx 1 - \frac{g_s}{\langle N \rangle}. \quad (15)$$

En la práctica para $\langle N \rangle$ suficientemente grande $z_{max} \approx 1$. Esta discusión puede eludirse cuando trabajamos, y más aún cuando estamos en el límite termodinámico.

Sigamos. Estábamos viendo si la población de los estados excitados está acotada superiormente. Usando lo que acabamos de mencionar y (14), llegamos a que:

$$\langle N_e \rangle (z, T) \leq \langle N_e \rangle (1, T) = g_s A 2\pi \left(\frac{kT}{hc} \right)^2 \underbrace{g_2(1)}_{\zeta(2)} (= "Finito") \quad (16)$$

Las funciones polilogarítmicas tienen una propiedad muy importante: cuando se evalúan en 1, si su subíndice ν es menor que 1, entonces $g_\nu(1)$ no está definida sino que diverge; si su subíndice ν es mayor que 1, entonces $g_\nu(1) = \zeta(\nu)$, donde ζ es la función zeta de Riemann evaluada en ν , una cantidad tabulada. En este caso el subíndice de la integral de Bose es mayor que 1, luego tenemos que el número de partículas en estados excitados está acotado.

¡Esto no siempre ocurre! Si por ejemplo analizamos por ejemplo el caso 2D con relación de dispersión $\varepsilon \sim p^2$ llegaríamos a que $\langle N_e \rangle \sim g_1(z) \Rightarrow \langle N_e \rangle (z, T) \leq \langle N_e \rangle (1, T) \sim g_1(1) (= "Infinito")$ y no podríamos tener (al menos con el análisis que estamos realizando) condensación de BE. Pueden analizar otros caso a partir del problema 1 de la guía.

Vimos entonces que para este problema podemos tener CBE. ¿Por qué? Supongamos que $\langle N \rangle$ a temperatura T es mayor que la cota que encontramos para los estados excitados; en ese caso condensan bosones en el estado fundamental ya que no son aceptados en los estados excitados.

Este fenomeno depende de la temperatura (o de la densidad, según como se piense). Si quisiéramos hallar la temperatura crítica por debajo de la cual se observa la fase condensada, ¿qué hacemos?. Podemos suponer que el número de bosones en el sistema está fijado al valor N y que la temperatura disminuye gradualmente hasta que, a una temperatura T_c , crítica, se alcanza la cota anteriormente calculada:

$$N = N_e \langle N_e \rangle (1, T_c). \quad (17)$$

Por debajo de T_c el número de bosones en el sistema es mayor que el número de bosones que pueden encontrarse en estados excitados:

$$N > \langle N_e \rangle (1, T). \quad (18)$$

La diferencia es cada vez mayor a medida que T disminuye -de (16) $\langle N_e \rangle \sim T^2$ - y va a poblar el estado fundamental.

De (17) hallamos inmediatamente que:

$$N = g_s A 2\pi \left(\frac{kT_c}{hc} \right)^2 \zeta(2) \quad (19)$$

b) Quiero hallar la temperatura T en la que 1/8 de los bosones pueblan estados exitados. La fracción condensada no es despreciable, entonces, lo que implica que $T < T_c$:

$$1 = \frac{\langle N_0 \rangle}{N} + \frac{\langle N_e \rangle}{N} = \underbrace{\frac{f_0}{7/8}}_{7/8} + \underbrace{\frac{f_e}{1/8}}_{1/8} \quad (20)$$

Como hay una fase condensada para que la población del estado fundamental sea relevante tenemos necesariamente que tener $z = 1$. Así:

$$f_e = \frac{\langle N_e \rangle (z = 1, T)}{N} = \frac{g_s A 2\pi}{N} \left(\frac{kT}{hc} \right)^2 \underbrace{\zeta(2)}_{Dato} = 1/8. \quad (21)$$

c) Para hallar la ecuación de estado a alta temperatura tenemos que tener en cuenta que, a la misma, $z = e^{\beta\mu}$ es muy pequeña. El aspecto que tienen las funciones polilogarítmicas para z chica es:

$$g_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}}{z^{-1}e^x - \underbrace{1}_{Despreciable}} dx \approx \frac{z}{\Gamma(\nu)} \underbrace{\int_0^\infty x^{\nu-1} e^{-x} dx}_{\Gamma(\nu)} = z. \quad (22)$$

Siempre que estemos operando a temperatura alta tendremos $g_\nu(z) \approx z$ o $f_\nu(z) \approx z$.

Lo que esperamos es que a temperatura alta recuperemos la ecuación de estado de un gas ideal. Veamos:

El logaritmo de la función de partición está conectado con la presión via la definición del potencial gran canónico y la relación de Euler: Por otro lado $-kT \ln(Z_{GC}) = \Omega = -pA$. En general la presión no tiene aporte del estado fundamental ya que para el mismo el momento es nulo. Juntando todo esto, tenemos

$$\ln(Z_{GC}) = g_s \frac{A}{\lambda^2} g_3(z) = \frac{pA}{kT} \quad (23)$$

$$pA = kT g_s \frac{A}{\lambda^2} g_3(z) \quad (24)$$

A alta temperatura $g_\nu(z) \approx z$, así:

$$pA = kT g_s \frac{A}{\lambda^2} z \quad (25)$$

¡Debemos eliminar la fugacidad de esta ecuación! La manera de hacerlo es usando la ecuación para el número de partículas y notando que a alta temperatura no tenemos fase condensada. Entonces:

$$\langle N \rangle \underset{T > T_c}{=} g_s \frac{A}{\lambda^2} g_2(z) \underset{T \text{ alta}}{\approx} g_s \frac{A}{\lambda^2} z \quad (26)$$

Reemplazando (26) en (25) obtenemos la ecuación de estado del gas ideal, tal cual esperábamos:

$$pA = \langle N \rangle kT \quad (27)$$

¿Qué deberían llevarse de este problema?

- Un criterio sencillo para saber cuándo puede haber condensación de Bose-Einstein. (Haciendo los cambios que sean necesarios para estudiar otros problemas.)
- Para un gas de bosones el estado fundamental no contribuye a la presión.
- En 2D puede haber (al menos en el papel) condensación de Bose-Einstein. Eso depende de cuál sea la relación de dispersión.

2. Problema antediluviano de parcial. No recuerdo de dónde lo saqué la verdad, si de Estufis o de la fotocopiadora.

Nos dicen que tenemos un cilindro seccionado por un pistón móvil conductor de calor. De un lado hay un gas de fermiones de espín 1/2 y masa m_f y del otro un gas de bosones de espín 0 y masa m_B . El sistema se encuentra en contacto con un foto térmico a temperatura T tal que:

- Los fermiones están completamente degenerados.
- En el gas de bosones coexisten la fase normal y la fase condensada.

Nos cuestionan: si $\langle N_f \rangle = \langle N_B \rangle = N(DATO)$, entonces ¿cuál es la posición de equilibrio del tabique?.

Lo primero que debemos hacer en este tipo de problemas es establecer las condiciones de equilibrio termodinámico. La igualdad de temperaturas viene asegurada por el enunciado, pues el cilindro se encuentra en contacto con un foco térmico a temperatura T . La otra condición de equilibrio, en este caso mecánico viene dado por la igualdad de las presiones:

$$p_f = p_B \quad (28)$$

Ahora, hay muchas formas en las que podemos introducir esta condición. Tal cual vimos en el problema anterior, cuando trabajamos en el conjunto gran canónico hay una relación entre la presión y el logaritmo

de la función de partición dada por $-kT \ln(Z_{GC}) = -pV$. Como aquí las temperaturas son iguales, tenemos como condición de equilibrio

$$\frac{\ln(Z_{GC,f})}{V_f} = \frac{\ln(Z_{GC,B})}{V_B}. \quad (29)$$

Por otro lado para los gases ideales de fermiones o bosones con relación de dispersión del tipo $\varepsilon \sim p^\alpha$, la energía interna es directamente proporcional a $\ln(Z_{GC})$. Entonces, podemos reescribir la condición de equilibrio mecánico según:

$$\frac{U_f}{V_f} = \frac{U_B}{V_B}. \quad (30)$$

¡Podemos resolver el problema como queramos, tenemos varias opciones!

En cualquier caso lo primero que debemos hacer es calcular el logaritmo de la función de partición de ambos gases. Los analizamos en conjunto porque ambos tienen la misma relación de dispersión; en todo caso si eventualmente quisiera agregar la contribución del fundamental para el gas de bosones lo podemos hacer trivialmente, pero recordamos que para los bosones las partículas en el estado fundamental no contribuyen a la presión del gas.

Dicho podemos englobar ambos casos con:

$$i = f, B \quad (31)$$

$$a = \begin{cases} -1, B \\ +1, f \end{cases}. \quad (32)$$

Luego usando la aproximación semiclásica para $\varepsilon_i = \frac{p^2}{2m_i}$, resulta:

$$\ln(Z_{GC,i}) = ag_i \int \frac{d\mathbf{r}d\mathbf{p}}{h^3} \ln(1 + aze^{-\beta\varepsilon_i(p)}) \quad (33)$$

$$\ln(Z_{GC,i}) = \frac{g_i V_i}{h^3} 4\pi \int p^2 \ln(1 + aze^{-\beta\varepsilon_i(p)}) dp.$$

Cambiando de variables a la energía queda:

$$\begin{aligned} \ln(Z_{GC,i}) &= \int \underbrace{\frac{g_i V_i}{h^3} 4\pi \sqrt{2m_i^3} \varepsilon^{1/2}}_{g_i(\varepsilon)} a \ln(1 + aze^{-\beta\varepsilon}) d\varepsilon \\ \ln(Z_{GC,i}) &= \int g_i(\varepsilon) a \ln(1 + aze^{-\beta\varepsilon}) d\varepsilon. \end{aligned} \quad (34)$$

Ahora sí nos conviene analizar por separado el gas de fermiones y de bosones.

Notación: no confundir la densidad de estados $g_i(\varepsilon)$ con la degeneración de espín g_i .

■ Fermiones:

El enunciado nos dice que la temperatura del sistema es tal que el gas de fermiones puede considerarse «completamente degenerado». Esto significa que $T \ll T_F$ y además podemos tomarla como nula, sin realizar corrección alguna via un desarrollo de Sommerfeld (en ese caso se hablaría de «gas altamente degenerado», igualmente nosotros seríamos más explícitos en el pedido). En un caso u otro siempre es útil calcular la energía de Fermi, la cota superior de la energía a temperatura nula. Para avanzar tenemos que derivar expresiones para el número medio de fermiones y para la energía interna del gas.

$$\langle N_f \rangle = z \left(\frac{\partial \ln(Z_{GC,f})}{\partial z} \right)_{\beta, V_f} = \int_0^\infty g_f(\varepsilon) \underbrace{\frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} + 1}}_{n_{FD}(\varepsilon)} d\varepsilon \quad (35)$$

Por otro lado la energía interna puede derivarse automáticamente sumando sobre estados la cantidad ε de la cual queremos hallar su valor medio ponderando por la distribución adecuada, en este caso la distribución de Fermi-Dirac $n_{FD}(\varepsilon)$:

$$U = \int_0^{\infty} \varepsilon g(\varepsilon) n_{FD}(\varepsilon) d\varepsilon \quad (36)$$

Calculemos ahora la energía de Fermi. A $T = 0K$, $n_{FG}(\varepsilon) = \theta(\varepsilon_F - \varepsilon)$, por lo cual:

$$\langle N_f \rangle = \int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon) d\varepsilon = \alpha_f \frac{2}{3} \varepsilon_F^{3/2} \quad (37)$$

Por otro lado, como el problema nos dice que estamos a temperatura nula:

$$U = \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon \underbrace{g(\varepsilon)}_{\alpha_f \varepsilon^{1/2}} d\varepsilon = \frac{3}{5} \langle N_f \rangle \varepsilon_F \quad (38)$$

Lo que hacemos ahora es calcular la presión de los fermiones integrando por partes la expresión (34):

$$\frac{p_f V_f}{kT} = \int \alpha_f \varepsilon^{1/2} \ln(1 + z e^{-\beta \varepsilon}) d\varepsilon \quad (39)$$

$$\frac{p_f V_f}{kT} = (\beta) 2/3 \int \underbrace{\alpha_f \varepsilon^{1/2}}_{g_f(\varepsilon)} \varepsilon \underbrace{\frac{1}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon} + 1}}_{n_{FD}(\varepsilon)} d\varepsilon \quad (40)$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{U_f}$

$$p_f V_f = (2/3) U_f \quad (41)$$

Como a $T = 0K$, $U_f = \frac{3}{5} \langle N_f \rangle \varepsilon_F$, resulta:

$$p_f V_f = \frac{2}{5} \langle N_f \rangle \varepsilon_F \quad (42)$$

Tenemos que notar que no fue necesario pasar a integrales de Fermi para hacer este análisis. Tampoco lo sería si nos pidieran un desarrollo de Sommerfeld, simplemente basta con saber que a temperatura mucho menor que la de Fermi vale:

$$\int \varphi(\varepsilon) n_{FD}(\varepsilon) d\varepsilon \approx \int_0^{\mu} \varphi(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \frac{d\varphi}{d\varepsilon} \Big|_{\mu} \quad (43)$$

(Pueden ver cómo se usa esta expresión en la resolución del problema 10 de la guía de bosones, para la contribución electrónica del calor específico del cobre.)

■ Bosones:

Agreguemos la contribución del estado fundamental

$$\ln(Z_{GC}, B) = \frac{p_B V_B}{kT} = - \int \underbrace{g_B(\varepsilon)}_{\alpha_B \varepsilon^{1/2}} \ln(1 - z e^{-\beta \varepsilon}) d\varepsilon - g_B \ln(1 - z) \quad (44)$$

$$\frac{p_B V_B}{kT} = - \int g_B(\varepsilon) \ln(1 - z e^{-\beta \varepsilon}) d\varepsilon - g_B \ln(1 - z) \quad (45)$$

Si integro por partes y adimensionalizo para que surga una integral de Bose, nos queda:

$$\frac{p_B V_B}{kT} = \frac{g_B V_B}{\lambda_B^3} \int \underbrace{\frac{x^{3/2}}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon} - 1}}_{g_{5/2}(z)} dx - g_B \ln(1 - z) \quad (46)$$

Si divido por V_B :

$$\frac{p_B}{kT} = \frac{g_B}{\lambda_B^3} g_{5/2}(z) - \frac{g_B \ln(1-z)}{V_B}, \quad (47)$$

donde no incluimos el aporte del estado fundamental para la presión (que es despreciable puede probarse más cuidadosamente).

¿Cómo seguimos?

Como en el enunciado nos dicen que tenemos una fase condensada, inmediatamente inferimos que $z = 1$, pues de lo contrario la población del estado fundamental no sería relevante. Tenemos entonces:

$$\frac{p_B}{kT} = \frac{g_B}{\lambda_B^3} g_{5/2}(1) = \frac{1}{\lambda_B^3} \zeta(5/2), \quad (48)$$

donde usé que el gas de bosones tiene espín 0 y que $g_\nu(1) = \zeta(\nu)$ para $\nu > 1$.

Igualando (48) con (42) tenemos:

$$\frac{kT}{\lambda_B^3} \zeta(5/2) = \frac{1}{V_f} \frac{2}{5} \underbrace{\langle N_f \rangle}_{N} \varepsilon_F \quad (49)$$

¡Y ya estaría! Porque N y T son datos y la energía de Fermi depende de N a partir de (37). De (49) determinamos V_f y de $V = V_f + V_B$, V_B .

¿Qué deberían llevarse de este problema?

- No necesitan trabajar con integrales de Fermi para resolver un problema de fermiones. ¡Es a gusto de cada uno!
- En fase condensada $z = 1$. ¡Extrapolar a otros problemas con recaudos!