Problema de bosones

Enunciado

Considere un sistema de partículas idénticas de spin 0 *que no interactúan entre sí. Las partículas se mueven en un espacio de d dimensiones y están atrapadas en una trampa armónica de frecuencia angular ω, de manera que las energías monoparticulares son*

$$\epsilon = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$$

si se piensa en los estados clásicamente, donde $\boldsymbol{p}$ y $\boldsymbol{q}$ son vectores de d componentes y m es la masa de las partículas, o bien

$$\epsilon = \hbar\omega(n_1 + \cdots + n_d)$$

si se piensa en los estados cuánticamente, donde $n_1, \ldots, n_d$ son números enteros no negativos y se ha elegido convenientemente el origen de energías.

(a) Calcule el logaritmo de la función de partición grancanónica del sistema en función de la temperatura y la fugacidad, a partir de la descripción clásica de los estados monoparticulares (ayuda: *el área de una esfera de radio r en un espacio de $2d$ dimensiones es $2\pi^d r^{2d-1}/\Gamma(d)$).*

(b) Repita la cuenta del ítem anterior pero ahora partiendo de la descripción cuántica de los estados monoparticulares, asumiendo que $\beta\hbar\omega \ll 1$ e ignorando las sutilezas asociadas al estado fundamental (ayuda: $(m+k)!/m! \simeq m^k$ *si $m \gg k$).*

(c) Calcule la temperatura crítica del sistema en función del número de partículas. ¿Qué condición debe cumplir d para que haya condensación de Bose-Einstein a temperatura no nula?

(d) Calcule el calor específico a volumen constante en función de la temperatura T y en términos de la temperatura crítica T_c, en los casos $T \gg T_c$ y $T \leq T_c$.

Resolución

(a) Para un sistema de bosones idénticos que no interactúan entre sí, el logaritmo de la función de partición grancanónica es

$$\ln Z_{\mathrm{GC}} = -\sum_i \ln\left(1 - ze^{-\beta\epsilon_i}\right), \tag{1}$$

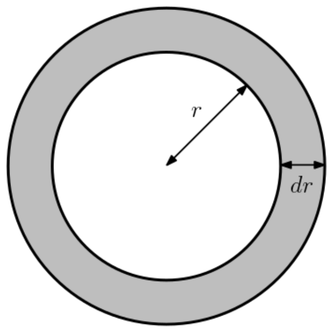
donde la suma es sobre los distintos estados monoparticulares y ϵ_i es la energía del estado monoparticular i. En el caso clásico, la ecuación (1) toma la forma

$$\ln Z_{\mathrm{GC}} = -\int \frac{d^d p d^d q}{h^d} \ln\left[1 - ze^{-\beta\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2\right)}\right]. \tag{2}$$

Definiendo $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{p}/\sqrt{2m}$ y $\boldsymbol{Q} = \sqrt{m\omega^2/2}\,\boldsymbol{q}$ obtenemos una integral más manejable,

$$\ln Z_{\mathrm{GC}} = -\left(\frac{2}{h\omega}\right)^d \int d^dPd^dQ \ln\left[1 - ze^{-\beta(P^2+Q^2)}\right]. \tag{3}$$

Ahora fíjense: tenemos una integral en un espacio de $2d$ dimensiones de una función que sólo depende de la distancia al origen. Entonces, como elemento de volumen podemos tomar una cáscara esférica tal como mostramos en la figura.



El diferencial de volumen será entonces el volumen de la cáscara, es decir, el producto del área A de la esfera por el diferencial de r,

$$d^dPd^dQ = Adr = \frac{2\pi^d}{\Gamma(d)} r^{2d-1}dr, \tag{4}$$

donde en el último paso hemos usado la ayuda del enunciado. Reemplazando en (3) y recordando que $\hbar = h/2\pi$ obtenemos

$$\ln Z_{\mathrm{GC}} = -\left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^d \frac{2}{\Gamma(d)} \int_0^\infty dr\, r^{2d-1} \ln\left(1 - ze^{-\beta r^2}\right). \tag{5}$$

Y ahora ya todo es muy parecido al caso del gas ideal. Definimos $x = \beta r^2$, de manera que $2rdr = dx/\beta$, y después integramos por partes,

$$\begin{aligned}\ln Z_{\mathrm{GC}} &= -\left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^d \frac{1}{\Gamma(d)} \int_0^\infty dx\, x^{d-1} \ln\left(1 - ze^{-x}\right)\\ &= \left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^d \frac{1}{\Gamma(d+1)} \int_0^\infty dx \frac{x^d}{z^{-1}e^x - 1} = \left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^d g_{d+1}(z),\end{aligned} \tag{6}$$

donde en el paso de la primera línea a la segunda hemos usado que $d\Gamma(d) = \Gamma(d+1)$. Y ya está, ésta es la respuesta a la pregunta de este ítem.

(b) En el caso cuántico, la ecuación (1) toma la forma

$$\ln Z_{\mathrm{GC}} = -\sum_{n_1,\dots,n_d} \ln\left[1 - ze^{-\beta\hbar\omega(n_1+\cdots+n_d)}\right]. \tag{7}$$

Nótese que el sumando sólo depende de $n \equiv n_1 + \cdots + n_d$. Por lo tanto, podemos reescribir esta ecuación como una suma sobre n si incluimos la multiplicidad de cada valor de esta variable. ¿Cuántos estados $n_1, \ldots, n_d$ hay con un cierto valor de n? Bueno, es el número de formas de repartir n bolas indistinguibles en d cajas distinguibles,

$$\Omega(n) = \binom{n+d-1}{n} = \frac{(n+d-1)!}{n!(d-1)!}, \tag{8}$$

de manera que

$$\ln Z_{\mathrm{GC}} = -\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+d-1)!}{n!(d-1)!} \ln\left(1 - z e^{-\beta\hbar\omega n}\right). \tag{9}$$

Ahora, el enunciado nos dice que asumamos $\beta\hbar\omega \ll 1$. Eso corresponde al límite termodinámico, porque, en un sistema de osciladores armónicos, ω juega el rol de $1/L$. Asumiendo que estamos en ese régimen, el sumando decae muy lentamente con n y por lo tanto el valor de la suma infinita va a ser muy grande (diverge en el límite $\beta\hbar\omega \to 0$). En cambio, la contribución de los primeros términos (n pequeño), se mantiene acotada (es finita en el límite $\beta\hbar\omega \to 0$), y por lo tanto es despreciable frente al total[1]. En otras palabras, para $\beta\hbar\omega \ll 1$ la suma está dominada por valores grandes de n. Para n grande la ayuda del enunciado nos dice que podemos aproximar

$$\frac{(n+d-1)!}{n!(d-1)!} \simeq \frac{n^{d-1}}{(d-1)!}. \tag{10}$$

Para n pequeño eso no es una buena aproximación, pero no importa porque la contribución de los términos con n pequeño es despreciable, así que tenemos

$$\ln Z_{\mathrm{GC}} \simeq -\frac{1}{(d-1)!} \sum_{n=0}^{\infty} n^{d-1} \ln\left(1 - z e^{-\beta\hbar\omega n}\right). \tag{11}$$

Ahora, usando de vuelta que el sumando decae muy lentamente con n podemos aproximar esta suma por una integral[2],

$$\ln Z_{\mathrm{GC}} \simeq -\frac{1}{(d-1)!} \int_0^{\infty} dn\, n^{d-1} \ln\left(1 - z e^{-\beta\hbar\omega n}\right). \tag{12}$$

Y el resto ya es tarea fácil: hacemos el cambio de variables $x = \beta\hbar\omega n$ y después integramos por partes,

$$\begin{aligned} \ln Z_{\mathrm{GC}} &= -\left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^d \frac{1}{(d-1)!} \int_0^{\infty} dx\, x^{d-1} \ln\left(1 - z e^{-x}\right) \\ &= \left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^d \frac{1}{d!} \int_0^{\infty} dx\, \frac{x^d}{z^{-1} e^x - 1} = \left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^d g_{d+1}(z), \end{aligned} \tag{13}$$

[1] Hay sutilezas asociadas al estado fundamental para z cercano a 1, pero el enunciado nos dice que las ignoremos.

[2] Acá vale la misma aclaración que en la anterior nota al pie.

donde en el último paso hemos usado que $d! = \Gamma(d+1)$. Como vemos, recuperamos el mismo resultado que en el ítem anterior.

(c) Para calcular la temperatura crítica, la ecuación que nos interesa es la que da el número de partículas,

$$N = z\frac{\partial}{\partial z}\ln Z_{\mathrm{GC}} = \left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^d g_d(z). \tag{14}$$

La temperatura crítica es la mínima temperatura a la que esta ecuación se puede satisfacer, que corresponde al valor máximo de la fugacidad, $z = 1$ (para temperaturas inferiores, esta ecuación es incorrecta y debe ser corregida agregando la contribución del estado fundamental). Así pues, tenemos

$$N = \left(\frac{kT_c}{\hbar\omega}\right)^d g_d(1), \tag{15}$$

y por lo tanto

$$T_c = \frac{\hbar\omega}{k}\left(\frac{N}{g_d(1)}\right)^{1/d} = \begin{cases} \frac{\hbar\omega}{k}\left(\frac{N}{\zeta(d)}\right)^{1/d} & d > 1 \\ 0 & d = 1, \end{cases} \tag{16}$$

donde en el último paso hemos usado que $g_\nu(1)$ diverge para $\nu \leq 1$ y $g_\nu(1) = \zeta(\nu)$ para $\nu > 1$. A partir de este resultado podemos responder a la otra pregunta de este ítem: para que haya condensación de Bose-Einstein a temperatura no nula, se debe cumplir $d > 1$.

(d) Para calcular el calor específico, empezamos calculando la energía,

$$E = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_{\mathrm{GC}} = dkT\left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^d g_{d+1}(z). \tag{17}$$

Estudiemos los dos casos que pide el enunciado. Para $T \gg T_c$ tenemos $z \ll 1$ y por lo tanto $g_\nu(z) \simeq z$. Comparando (17) con (14) obtenemos entonces

$$E \simeq dNkT \qquad T \gg T_c. \tag{18}$$

Por otra parte, para $T \leq T_c$ tenemos $z = 1$ y por lo tanto

$$E = dkT\left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^d g_{d+1}(1) = dNkT\left(\frac{T}{T_c}\right)^d \frac{g_{d+1}(1)}{g_d(1)} \qquad T \leq T_c, \tag{19}$$

donde en el último paso hemos despejado $(k/\hbar\omega)^d$ de (15). Derivando las ecuaciones (18) y (19) respecto a la temperatura y dividiendo por N obtenemos el calor específico en los dos regímenes que se piden,

$$c_V = \frac{1}{N}\frac{\partial E}{\partial T} = \begin{cases} dk & T \gg T_c \\ d(d+1)k\left(\frac{T}{T_c}\right)^d \frac{g_{d+1}(1)}{g_d(1)} & T \leq T_c. \end{cases} \tag{20}$$

Nótese que a temperaturas altas estamos recuperando lo que predice el teorema de equipartición para un sistema de osciladores armónicos.