

Problema 2

Enunciado

Una mezcla gaseosa de N fermiones, de masa m_1 y espín $3/2$, y N bosones, de masa m_2 y espín 0 , se encuentra contenida en un recipiente con un pistón móvil, en contacto con un reservorio térmico a temperatura T . La temperatura es lo suficientemente baja como para asumir que el gas de fermiones se encuentra completamente degenerado y que en el gas de bosones coexisten la fase normal y la fase condensada. Inicialmente la mezcla de especies ocupa un volumen V_0 , pero se le suministra calor de forma cuasiestática hasta que duplica el volumen inicial.

(a) Calcule el trabajo ejercido sobre el sistema en esta expansión reversible (teniendo en cuenta que la presión de una mezcla de gases es la suma de las presiones de cada gas), así como también la variación de su energía interna. ¿Cuál es el calor absorbido por el sistema en este proceso? Por el momento puede considerar que la temperatura T es un dato.

(b) Sabiendo que $1/6$ de los bosones se encuentran inicialmente en la fase normal, determine T en función de los demás datos del problema. ¿Cuál es la fracción de bosones en la fase normal al final del proceso?

Resolución

(a) En este inciso nos piden distintas magnitudes termodinámicas de la expansión que sufre la mezcla formada por el gas de fermiones (cuyas partículas se denotan por «1») y el gas de bosones (rotulados por «2»). Como los subsistemas no interactúan entre sí, las magnitudes son aditivas, y planteando la primera ley en cada caso se tiene que, para la expansión de "1 + 2":

$$\left. \begin{aligned} \Delta U_1 &= Q_1 + W_1 \\ \Delta U_2 &= Q_2 + W_2 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \Delta U = Q + W. \quad (1)$$

La estrategia entonces es bastante simple: valiéndonos de la no interacción entre los fermiones y los bosones, y de la semejanza en su relación de dispersión ($\varepsilon(p) = \frac{p^2}{2m_i}$), podemos calcular en común el logaritmo de la función de partición gran canónica de ambas especies, relacionarlo con la presión y con la energía interna para calcular su variación en la expansión, y de allí despejar los calores absorbidos.

En todo caso si eventualmente agregamos la contribución del estado fundamental para el gas de bosones, lo podemos hacer trivialmente. Recordamos las partículas en el estado fundamental no contribuyen a la presión del gas (porque el momento es nulo).

Englobamos ambos casos (bosones y fermiones) por:

$$i = \begin{cases} 1, f \\ 2, B \end{cases}, \quad (2)$$

$$a = \begin{cases} +1, f \\ -1, B \end{cases}. \quad (3)$$

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

$$\ln(Z_{GC,i}) = ag_i \int \ln(1 + aze^{-\beta\varepsilon_i(p)}) \frac{d\mathbf{r}d\mathbf{p}}{h^3} \quad (4)$$

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

Cambiando de variables a la energía, queda:

$$\ln(Z_{GC,i}) = \int \underbrace{\frac{g_i V}{h^3} 4\pi \sqrt{2m_i^3 \varepsilon^{1/2}}}_{g_i(\varepsilon) = \alpha_i V \varepsilon^{1/2}} \ln(1 + aze^{-\beta\varepsilon}) d\varepsilon$$

$$\ln(Z_{GC,i}) = \int g_i(\varepsilon) \ln(1 + aze^{-\beta\varepsilon}) d\varepsilon, \quad (5)$$

donde

$$\alpha_i = \frac{g_i}{h^3} 4\pi \sqrt{2m_i^3} \quad (6)$$

Como estamos operando en el conjunto gran canónico podemos relacionar el logaritmo de la función de partición con el potencial termodinámico asociado a la colectividad, el gran potencial, y a éste con la presión a partir de la relación de Euler:

$$-k_B T \ln(Z_{GC,i}) = \Omega_i = U_i - TS_i - \underbrace{\mu_i N}_{Euler} - p_i V \Rightarrow p_i = \frac{k_B T}{V} \ln(Z_{GC,i}) \quad (7)$$

Ahora sí, nos conviene analizar por separado cada subsistema.

■ 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 por medio de un desarrollo de Sommerfeld (en ese caso se hablaría de «gas altamente degenerado», por ejemplo).

Calculemos 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:

$$\langle N_1 \rangle \equiv N = z \left(\frac{\partial \ln(Z_{GC,1})}{\partial z} \right)_{\beta, V} = \int_0^\infty g_1(\varepsilon) \underbrace{\frac{1}{z^{-1} e^{\beta\varepsilon} + 1}}_{n_{FD}(\varepsilon)} d\varepsilon \quad (8)$$

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 $n_{FD}(\varepsilon)$:

$$U_1 = \int_0^\infty \varepsilon g(\varepsilon) n_{FD}(\varepsilon) d\varepsilon \quad (9)$$

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

$$N = \int_0^{\varepsilon_F} \underbrace{g(\varepsilon)}_{\alpha_1 V \varepsilon^{1/2}} d\varepsilon = \alpha_1 \frac{2}{3} V \varepsilon_F^{3/2} \Rightarrow \varepsilon_F = \left(\frac{3}{2} \frac{N}{V} \frac{1}{\alpha_1} \right)^{2/3} \quad (10)$$

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

$$U_1 = \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon \underbrace{g(\varepsilon)}_{\alpha_1 V \varepsilon^{1/2}} d\varepsilon = \frac{3}{5} N \varepsilon_F = \frac{3}{5} N \left(\frac{3}{2} \frac{1}{\alpha_1} \right)^{2/3} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3} \quad (11)$$

Lo que hacemos ahora es calcular la presión de los fermiones integrando por partes la expresión (6):

$$p_1 = \frac{k_B T}{V} \int \alpha_1 V \varepsilon^{1/2} \ln(1 + z e^{-\beta\varepsilon}) d\varepsilon \quad (12)$$

$$p_1 = \frac{k_B T}{V} \frac{2}{3} \left[\int_0^\infty \alpha_1 V \varepsilon^{3/2} \ln(1 + z e^{-\beta\varepsilon}) d\varepsilon - \int_0^\infty \alpha_1 V \varepsilon^{3/2} \frac{(-\beta) z e^{-\beta\varepsilon}}{1 + z e^{-\beta\varepsilon}} d\varepsilon \right] \quad (13)$$

$$p_1 = \frac{2}{3} \frac{U_1}{V} = \frac{2}{5} \frac{N}{V} \left(\frac{3}{2} \frac{N}{V} \frac{1}{\alpha_1} \right)^{2/3} = \frac{2}{5} \left(\frac{3}{2} \frac{1}{\alpha_1} \right)^{2/3} \left(\frac{N}{V} \right)^{5/3} \quad (14)$$

Calculemos ahora las magnitudes termodinámicas pedidas para el gas de fermiones.

La energía interna es una función de estado por lo que su variación es simplemente su valor en el estado final menos su valor inicial:

$$\Delta U_1 = U_{1,final} - U_{1,inicial} = \frac{3 N^{5/3}}{5 V_0^{2/3}} \left(\frac{3}{2} \frac{1}{\alpha_1} \right)^{2/3} \left[\left(\frac{1}{2} \right)^{2/3} - 1 \right] \quad (15)$$

$$\Delta U_1 = -\frac{3 N^{5/3}}{5 V_0^{2/3}} \left(\frac{3}{2} \frac{1}{\alpha_1} \right)^{2/3} \left[1 - \left(\frac{1}{2} \right)^{2/3} \right], \quad (16)$$

$$\text{con } \alpha_1 = \frac{4}{h^3} 4\pi \sqrt{2m_1^3}.$$

Para calcular el trabajo realizado sobre el gas de fermiones debemos notar que, por estar en contacto con una fuente térmica a temperatura T , la expansión es isotérmica; además sabemos -porque lo aclara el enunciado- que es reversible, por lo que la presión p_1 del gas está definida a lo largo de la expansión. Tenemos entonces:

$$W_1 = - \int_{V_0}^{2V_0} p_1 dV = -\frac{2}{5} \left(\frac{3}{2} \frac{1}{\alpha_1} \right)^{2/3} \left[-\frac{3}{2} N^{5/3} \left(\frac{1}{V} \right)^{2/3} \right] \Big|_{V_0}^{2V_0} \quad (17)$$

$$W_1 = -\frac{3}{5} \left(\frac{3}{2} \frac{1}{\alpha_1} \right)^{2/3} \frac{N^{5/3}}{V_0^{2/3}} \left[1 - \left(\frac{1}{2} \right)^{2/3} \right] = \Delta U_1. \quad (18)$$

Inmediatamente hallamos que el calor absorbido por el gas de fermiones es nulo (bajo la aproximación de gas completamente degenerado):

$$\Delta \mathcal{U}_1 = Q_1 + W_1 \Rightarrow Q_1 = 0. \quad (19)$$

Esto se cumple punto a punto del proceso y podríamos verificarlo a partir de la forma diferencial que toma la primera ley:

$$dU_1 = \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{T,N} dV = \delta Q - p_1 dV \quad (20)$$

$$-\frac{3}{5} \left(\frac{3}{2} \frac{1}{\alpha_1} \right)^{2/3} \frac{2}{3} \left(\frac{N}{V} \right)^{5/3} dV = -\frac{2}{5} \left(\frac{3}{2} \frac{1}{\alpha_1} \right)^{2/3} \left(\frac{N}{V} \right)^{5/3} dV = \delta Q - \underbrace{\frac{2}{5} \left(\frac{3}{2} \frac{1}{\alpha_1} \right)^{2/3} \left(\frac{N}{V} \right)^{5/3}}_{p_1} dV, \quad (21)$$

$$\delta Q = 0, \quad (22)$$

o más sencillamente notando que, como el gas fermiones está completamente degenerado, su energía interna no depende de la temperatura y por lo tanto su capacidad calorífica es nula.

■ Bosones:

Por prolijidad agreguemos la contribución del estado fundamental a la función de partición del gas de bosones:

$$\ln(Z_{GC,2}) \stackrel{(7)}{=} \underbrace{\frac{p_2 V}{k_B T}} = - \int_{\alpha_2 V \varepsilon^{1/2}} g_2(\varepsilon) \ln(1 - z e^{-\beta \varepsilon}) d\varepsilon - g_B \ln(1 - z) \quad (23)$$

$$\ln(Z_{GC,2}) = \frac{p_2 V}{k T} = - \int g_2(\varepsilon) \ln(1 - z e^{-\beta \varepsilon}) d\varepsilon - g_2 \ln(1 - z) \quad (24)$$

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

$$\ln(Z_{GC,2}) = \frac{p_2 V}{k_B T} = \frac{g_2 V}{\lambda_2^3} \underbrace{\int \frac{x^{3/2}}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon} - 1} dx}_{g_{5/2}(z)} - g_B \ln(1 - z), \quad (25)$$

y si dividimos por V :

$$\frac{p_2}{k_B T} = \frac{g_2}{\lambda_2^3} g_{5/2}(z) - \cancel{\frac{g_2 \ln(1-z)}{V_B}}, \quad (26)$$

donde no incluimos el aporte del estado fundamental para la presión (pueden probar más cuidadosamente que es despreciable) y $\lambda_2 = \frac{h}{\sqrt{2\pi m_2 k_B T}}$ es la longitud de onda térmica.

Al integrar por partes (24) también hallamos como para los fermiones una relación entre la presión, el volumen y la energía interna:

$$p_2 V = \frac{2}{3} U_2 \Rightarrow U_2 = \frac{3}{2} p_2 V = \frac{3}{2} k_B T V \frac{g_2}{\lambda_2^3} g_{5/2}(z), \quad (27)$$

pues el fundamental no contribuye a la energía interna.

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:

$$p_2 = k_B T \frac{g_2}{\lambda_2^3} g_{5/2}(1) = \frac{k_B T}{\lambda_2^3} \zeta(5/2), \quad (28)$$

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

$$U_2 = \frac{3}{2} p_2 V = \frac{3}{2} \frac{k_B T V}{\lambda_2^3} \zeta(5/2), \quad (29)$$

con ζ la función zeta de Riemann.

Las magnitudes termodinámicas pueden calcularse análogamente a como lo hicimos para el gas de fermiones. A saber, la variación de energía interna de los bosones en la expansión está dada por:

$$\Delta U_2 = U_{2,final} - U_{2,inicial} = \frac{3}{2} \frac{k_B T V_0}{\lambda_2^3} \zeta(5/2), \quad (30)$$

el trabajo ejercido sobre el gas por medio de:

$$W_2 = - \int_{V_0}^{2V_0} p_2 dV = - \frac{k_B T V_0}{\lambda_2^3} \zeta(5/2) \quad (31)$$

y el calor absorbido es:

$$Q_2 = \Delta U_2 - W_2 = \frac{3}{2} \frac{k_B T V_0}{\lambda_2^3} \zeta(5/2) + \frac{k_B T V_0}{\lambda_2^3} \zeta(5/2) = \frac{5}{2} \frac{k_B T V_0}{\lambda_2^3} \zeta(5/2). \quad (32)$$

Por lo tanto tenemos que para el sistema formado por las dos especies:

$$\Delta U = \Delta U_1 + \Delta U_2 = -\frac{3}{5} \frac{N^{5/3}}{V_0^{2/3}} \left(\frac{3}{2} \frac{1}{\alpha_1} \right)^{2/3} \left[1 - \left(\frac{1}{2} \right)^{2/3} \right] + \frac{3}{2} \frac{k_B T V_0}{\lambda_2^3} \zeta(5/2), \quad (33)$$

$$W = W_1 + W_2 = -\frac{3}{5} \frac{N^{5/3}}{V_0^{2/3}} \left(\frac{3}{2} \frac{1}{\alpha_1} \right)^{2/3} \left[1 - \left(\frac{1}{2} \right)^{2/3} \right] - \frac{k_B T V_0}{\lambda_2^3} \zeta(5/2), \quad (34)$$

y

$$Q = \cancel{Q_1} + Q_2 = \frac{5}{2} \frac{k_B T V_0}{\lambda_2^3} \zeta(5/2). \quad (35)$$

(b) Para responder este inciso debemos escribir explícitamente la expresión para el número medio de bosones. Teniendo en cuenta que $g'_\nu(z) = \frac{g_{\nu-1}(z)}{z}$ y que el espín de los bosones es nulo, por (25):

$$\langle N_2 \rangle \equiv N = z \left(\frac{\partial \ln(Z_{GC,2})}{\partial z} \right)_{\beta, V} = \frac{z}{1-z} + \underbrace{\frac{V}{\lambda_2^3}}_{\langle N_0 \rangle} \underbrace{g_{3/2}(z)}_{\langle N_e \rangle} = \frac{z}{1-z} + V \left(\frac{2\pi m_2 k_B T}{h^2} \right)^{3/2} g_{3/2}(z), \quad (36)$$

donde se separaron la contribuciones del estado fundamental y de los estados excitados. Ya vimos que por tener una fase condensada debe ser $z \approx 1$ (Uds. podrían probar que la condensación de BE es posible en este caso viendo que

el número medio de bosones excitados, una función creciente con la fugacidad pues g_ν lo es, se encuentra acotado); entonces, dividiendo por el número total de bosones:

$$1 = f_0 + f_e, \quad (37)$$

donde f_0 es la fracción de bosones en el estado fundamental y $f_e = \frac{V}{N} \left(\frac{2\pi m_2 k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \zeta(3/2)$ es la fracción de bosones en estados excitados.

Entonces:

- Si inicialmente $f_{e,incial} = 1/6$:

$$\frac{V_0}{N} \left(\frac{2\pi m_2 k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \zeta(3/2) = \frac{1}{6} \Rightarrow T = \frac{h^2}{2\pi m_2 k_B T} \left(\frac{1}{6} \frac{N}{V_0 \zeta(3/2)} \right)^{2/3}. \quad (38)$$

- En el estado final caracterizado por $V = 2V_0$, la fracción de bosones en la fase normal será:

$$f_{e,final} = \frac{2V_0}{N} \zeta(3/2) \left(\frac{2\pi m_2 k_B T}{h^2} \right)^{3/2} = 2f_{e,incial} = \frac{2}{6} = \frac{1}{3}. \quad (39)$$