

Física Teórica 3 – 1er cuatrimestre de 2023

Guía 6: estadística cuántica II

Estadística de Bose–Einstein

- 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 $\beta^{1/n}$.)
 - Encontrar la relación entre la energía media y PV .
 - Encontrar la ecuación que define z en términos de N , V y T .
 - 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.
 - ¿Puede haber condensado en el límite termodinámico para un gas bidimensional con $\epsilon = p^2/2m$?
 - Asumiendo que se está en un caso en donde puede haber condensado, ¿cuál es el valor crítico del parámetro v/λ^d ?
 - 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.
 - 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.

- Suponga que la función de partición de un sistema bosónico es tal que

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

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

- Demuestre que la ecuación que determina z en términos de N , v y T es una cuadrática.
- Encuentre el valor crítico del parámetro $vT^{3/2}$.

- (c) Encuentre la solución de la cuadrática que corresponde al caso físico con $0 < z < 1$.
- (d) Grafique la fracción n_0 de partículas en el nivel fundamental como función de T para v y N constantes. Observe qué ocurre al tomar valores cada vez mayores de N .
- (e) Grafique la presión p como función de v para T y N constantes y analice lo que ocurre al tomar valores cada vez mayores de N .
- (f) Grafique la energía por partícula U/N como función de T para v y N constantes y analice lo que ocurre al tomar valores cada vez mayores de N .
- (g) Ídem para el calor específico a volumen constante.
3. Un sistema está compuesto por N partículas libres. Cada partícula puede estar en dos estados, con energías 0 y $\epsilon > 0$ respectivamente. Calcule la fracción de partículas en cada nivel en estos dos casos: i) las partículas son distinguibles, ii) las partículas son bosones idénticos. Para N fijo, graficar las fracciones en función de T , y viceversa (usar escalas logarítmicas). Demostrar que para $T > 0$, 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 .
4. Considere un gas ideal de Bose–Einstein cuyas partículas tienen grados de libertad internos. Asuma que sólo es necesario tomar en cuenta el primer nivel interno excitado, con energía ϵ_1 por encima del nivel fundamental de energía $E = 0$. Si la temperatura crítica del gas sin grados de libertad internos es T_c^0 , muestre que en los límites en que $\epsilon_1 \gg kT_c^0$ y $\epsilon_1 \ll kT_c^0$ la temperatura crítica del gas que sí tiene grados de libertad internos es, respectivamente,

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

Fórmulas útiles:

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

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.

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

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

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

- Escriba el número medio de partículas como una suma sobre los estados de una partícula. Ignorando por ahora los problemas asociados al nivel fundamental, ¿qué condición debe pedirse para poder aproximar la suma por una integral?
 - La manera más directa de transformar la suma en una integral consiste en escribir una integral para cada una de las sumatorias, sobre n_x , n_y y n_z , respectivamente. La integral tridimensional resultante involucra una función de $n_x + n_y + n_z$, y puede reescribirse de manera más sencilla observando que el integrando es constante sobre planos de la forma $n_x + n_y + n_z = c$, que en el octante $n_x, n_y, n_z > 0$ definen triángulos equiláteros de lado c , con normal $(1, 1, 1)/\sqrt{3}$. Calcule el volumen infinitesimal que corresponde a cada triángulo en términos de c y dc y reescriba la integral como una integral sobre c . Finalmente, escriba todo en términos de alguna de las funciones $g_\nu(z)$.
 - Un método alternativo para escribir N surge de observar que el mismo cambio de variables $c = n_x + n_y + n_z$ hecho en la integral triple del ítem anterior podría haber sido hecho antes de pasar de la suma a la integral. En otras palabras, en lugar de sumar sobre n_x , n_y y n_z , podría haberse sumado sobre niveles de energía m , incluyendo una multiplicidad. Calcule el número de estados de una partícula con una dada energía $m\hbar\omega$ y reescriba la suma sobre estados como una suma sobre m . Puesto que se tiene una suma en lugar de tres, el paso a la integral lleva directamente a una integral unidimensional. Reobtenga así el resultado del ítem anterior.
 - Cuando el potencial químico se aproxima arbitrariamente a la energía del nivel fundamental, el número de partículas en dicho estado se vuelve macroscópico: ¿por qué? Calcule bajo esas condiciones cuántas partículas se encontrarán por encima del nivel fundamental.
 - Halle la temperatura crítica y discuta el límite termodinámico.
 - Calcule la energía del gas para temperaturas por debajo de la crítica.
7. Considere un sistema de bosones idénticos que no interactúan entre sí. Cada partícula puede tener dos energías, 0 y $\epsilon > 0$. El nivel fundamental no está degenerado, mientras que el nivel excitado tiene una degeneración $g = \alpha V$, donde V es el volumen que ocupa el sistema y α es una constante con dimensiones de $(\text{volumen})^{-1}$. El sistema está en equilibrio a temperatura T y fugacidad z .
- Escriba el logaritmo de la función de partición grancanónica del sistema, y a partir de ahí obtenga el número de partículas, N , la presión, p , y la energía, U , como funciones de T , V y z (despreciando las contribuciones que se anulan en el límite termodinámico).
 - Obtenga z y la fracción de partículas en el estado fundamental, f , como funciones de T y $v = V/N$ en el límite termodinámico. Grafique f a T constante y a v constante.

(c) Obtenga p y el calor específico a volumen constante, c_V , como funciones de T y v . Grafique p a T constante y c_V a v constante.

8. Pruebe que la entropía por fotón en la radiación de cuerpo negro es independiente de la temperatura, y en d dimensiones espaciales está dada por

$$s = (d + 1) \frac{\sum_{n=1}^{\infty} n^{-d-1}}{\sum_{n=1}^{\infty} n^{-d}}.$$

Pruebe que la respuesta habría sido $s = d + 1$ si los fotones obedecieran la estadística de Boltzmann.

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

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

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

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

10. En un monocristal de cobre cada átomo tiene un solo electrón que contribuye a la conducción eléctrica. Asumiendo que éstos no interactúan entre sí, ni tampoco con los iones de la red cristalina, de forma tal que pueden considerarse como libres, las únicas contribuciones al calor específico serán las provenientes de las vibraciones de la red y las de la energía cinética de los electrones de conducción.

(a) Encuentre la temperatura de Debye.

(b) Calcule la temperatura de Fermi.

(c) ¿Cómo será dependencia del calor específico con la temperatura cuando $T \rightarrow 0$?

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

Datos: densidad de átomos del cobre: $n = 8.5 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$; velocidad del sonido efectiva: $c_s \approx 2600 \text{ m/s}$; $k = 1.4 \times 10^{-23} \text{ J/K}$; $\hbar = 6.62 \times 10^{-34} \text{ Js}$; $m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$.