

Física Teórica 3 – segundo cuatrimestre de 2023

Guía 7: condensado de BE en una trampa armónica

■ **Problema 6.** La condensación de Bose–Einstein fue obtenida en 1995 confinando bosones mediante potenciales armónicos. Suponga que bosones de espín cero están atrapados 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 tres números,  $n_x$ ,  $n_y$  y  $n_z$ , enteros mayores o iguales que cero. Redefiniendo el cero de la energía para anular la energía del nivel fundamental, la energía de cada estado es

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

a) El número medio de partículas está dado por

$$N = \sum_{\mathbf{n}} \left\{ z^{-1} \exp[\beta\hbar\omega(n_x + n_y + n_z)] - 1 \right\}^{-1}. \quad (1)$$

La suma sobre  $\mathbf{n}$  puede reorganizarse del siguiente modo: i) calcule el número  $\Omega(\mathbf{n})$  de estados de una partícula con una dada energía,  $E_{\mathbf{n}} = n\hbar\omega$ , lo que equivale a distribuir  $n$  objetos indistinguibles en tres cajas distinguibles; ii) reescriba la suma sobre  $\mathbf{n}$  como una suma sobre  $n$  con multiplicidad  $\Omega(n)$ .

b) En la suma anterior, separe la contribución del nivel fundamental y, para los niveles excitados, aproxime las sumas por integrales. El número medio de partículas en los niveles excitados deberá quedar en términos de las funciones  $g_\nu(z)$ .

c) Las partículas no están confinadas en una región acotada. Sin embargo, existe un volumen característico  $V$ , que es función de  $T$  y  $\omega$ . Usando argumentos clásicos, determine este volumen. El límite termodinámico se define tomando  $N$  y  $V$  tendiendo a infinito con  $N/V$  constante. Como la definición de  $V$  puede depender de factores numéricos del orden de uno, fije estos factores de modo que

$$\frac{V}{\lambda^3} = \frac{1}{(\beta\hbar\omega)^3}, \quad (2)$$

donde  $\lambda$  es la longitud de onda térmica.

d) Muestre que la ecuación que determina  $z$  es de la forma

$$N = \frac{z}{1-z} + \frac{V}{\lambda^3} g_3(\tilde{z}) + \frac{5V^{2/3}}{2\lambda^2} g_2(\tilde{z}) + 3\frac{V^{1/3}}{\lambda} g_1(\tilde{z}), \quad (3)$$

donde  $\tilde{z} = ze^{-\beta\hbar\omega}$ .

e) Muestre que, en el límite termodinámico, es posible tener una fracción macroscópica de partículas en el nivel fundamental, aunque  $g_1(\tilde{z})$  diverja cuando  $\tilde{z} \rightarrow 1^-$ .

f) Muestre que, si se va a tomar el límite termodinámico, haya o no haya una fracción macroscópica de partículas en el nivel fundamental, es suficiente con escribir

$$N = \frac{z}{1-z} + \frac{V}{\lambda^3} g_3(z). \quad (4)$$

g) ¿Cuál es la temperatura crítica?

h) Calcule y grafique la energía y el calor específico en función de la temperatura.

■ **Solución.** La suma sobre los estados de una partícula es la suma sobre los tres enteros  $n_x$ ,  $n_y$  y  $n_z$  que definen cada estado:

$$\sum_{\text{estados de una partícula}} = \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \sum_{n_z=0}^{\infty} = \sum_{\mathbf{n}}, \quad (5)$$

donde

$$\mathbf{n} = n_x \hat{x} + n_y \hat{y} + n_z \hat{z}. \quad (6)$$

Si lo que se suma es una función de la energía, puesto que la energía sólo depende de  $n = n_x + n_y + n_z$ , los términos en la suma (5) pueden ser agrupados por igual valor  $n$ ,

$$\sum_{\mathbf{n}} f(n_x + n_y + n_z) = \sum_{n=0}^{\infty} \Omega(n) f(n), \quad (7)$$

donde  $\Omega(n)$  es el número de formas distintas de sumar tres enteros mayores o iguales que cero tal que el resultado sea  $n$ . Ya vimos en la guía de combinatoria, que ese problema es equivalente a distribuir  $n$  objetos indistinguibles en tres cajas distinguibles. La manera de pensarlo gráficamente era a través de las permutaciones con repetición de  $n+2$  elementos, donde hay  $n$  elementos de una clase y dos elementos de la otra:

$$\bullet \bullet \bullet | \bullet \bullet | \bullet \bullet \bullet \bullet \bullet \quad (8)$$

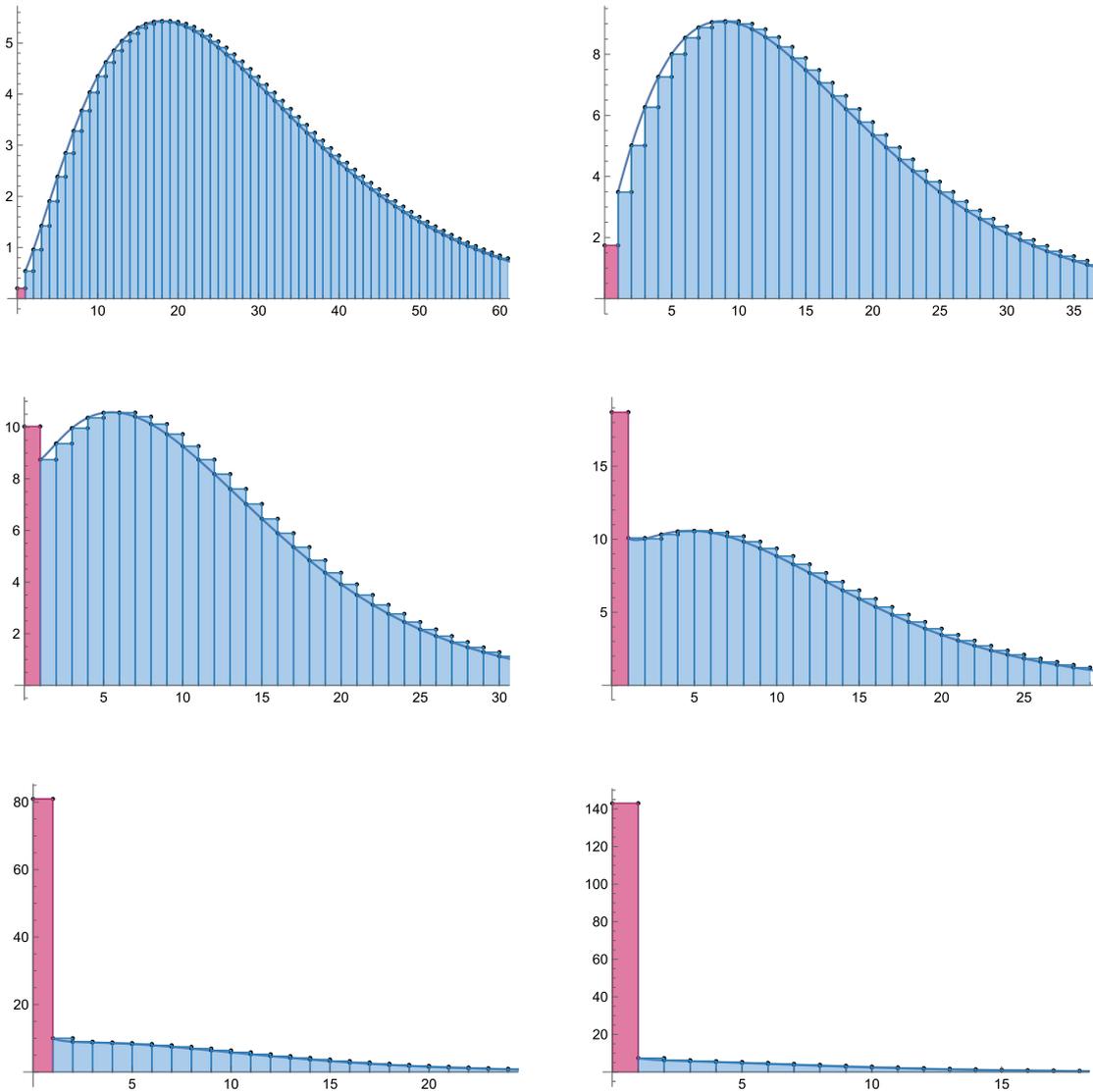
El resultado es

$$\Omega(n) = \frac{(n+2)!}{2! n!} = \frac{(n+2)(n+1)}{2}. \quad (9)$$

Para calcular el número medio de partículas, la función  $f(n)$  en la Ec. (7) es el número medio de ocupación,

$$N = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+2)(n+1)}{2} \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \hbar \omega n} - 1}. \quad (10)$$

La siguiente secuencia de figuras muestra el número de ocupación en función de  $n$  para valores decrecientes de la temperatura, con  $N = 200$ . Para calcular  $z$ , se resolvió la suma numéricamente. La barra roja corresponde al nivel fundamental.



Aunque estamos lejos del límite termodinámico, es evidente que el nivel fundamental se separa del resto de los niveles cuando la temperatura desciende lo suficiente. La suma de la Ec. (10) es igual al área de las barras en cada figura. Esa suma es constante e igual a  $N$ . Para temperaturas altas, podemos aproximar la suma por la integral de una función continua de  $n$ . Pero, por de debajo de cierta temperatura, la aproximación falla debido al comportamiento de la población en el nivel fundamental. Aunque no podamos aproximar toda la suma por una integral, sigue siendo cierto que la suma sobre los niveles excitados, es decir, excluyendo la primera barra de las figuras, estará bien aproximada por una integral. De manera que lo que tenemos que hacer es aislar el término correspondiente al nivel fundamental y aproximar el resto de la suma por una integral. Eso es lo que sigue a continuación.

Siguiendo la prescripción de separar en las sumas sobre estados el término que corresponde al nivel fundamental,

$$N = \frac{z}{1-z} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(n+2)(n+1)}{2} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\hbar\omega n} - 1}. \quad (11)$$

El próximo paso es aproximar la suma por una integral. Esto puede hacerse con distinto grado de sofisticación. Ver, por ejemplo, este paper. La aproximación más elemental consiste en escribir

$$N_e = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(n+2)(n+1)}{2} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\hbar\omega n} - 1} \simeq \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dn \frac{n^2}{z^{-1}e^{\beta\hbar\omega n} - 1} = \frac{g_3(z)}{(\beta\hbar\omega)^3}. \quad (12)$$

Recordar que las funciones de Bose–Einstein están definidas como

$$g_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^{\infty} dx \frac{x^{\nu-1}}{z^{-1}e^x - 1}. \quad (13)$$

La aproximación (12) es equivalente a la llamada aproximación semiclásica: para bosones en un potencial  $V(\mathbf{r})$ , el número medio de partículas en los estados excitados está dado aproximadamente por

$$N_e = \frac{1}{h^3} \int d^3r \int d^3p \frac{1}{z^{-1}e^{\beta H(\mathbf{r},\mathbf{p})} - 1}, \quad (14)$$

donde

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}). \quad (15)$$

En efecto, si  $V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$ ,

$$N_e = \frac{1}{h^3} \int d^3r \int d^3p \left\{ z^{-1} \exp \left[ \beta \left( \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2} \right) \right] - 1 \right\}^{-1}. \quad (16)$$

Con los cambios de variables

$$\frac{\beta p^2}{2m} \rightarrow u^2, \quad \frac{\beta m\omega^2 r^2}{2} \rightarrow w^2, \quad (17)$$

queda

$$N_e = \frac{1}{h^3} \left( \frac{2m}{\beta} \right)^{3/2} \left( \frac{2}{\beta m\omega^2} \right)^{3/2} \int d^3u \int d^3w \frac{1}{z^{-1}e^{u^2+w^2} - 1}. \quad (18)$$

Introduciendo el vector  $\mathbf{q}$ , cuyas coordenadas cartesianas son  $(u_x, u_y, u_z, w_x, w_y, w_z)$ ,

$$N_e = \frac{8}{(\beta\hbar\omega)^3} \int d^6q \frac{1}{z^{-1}e^{q^2} - 1} = \frac{8\Omega_6}{(\beta\hbar\omega)^3} \int_0^{\infty} dq \frac{q^5}{z^{-1}e^{q^2} - 1}. \quad (19)$$

Finalmente, con el cambio de variables  $q^2 \rightarrow x$  y usando que  $\Omega_6 = \pi^3$ ,

$$N_e = \frac{1}{2(\beta\hbar\omega)^3} \int_0^{\infty} dx \frac{x^2}{z^{-1}e^x - 1} = \frac{g_3(z)}{(\beta\hbar\omega)^3}, \quad (20)$$

que coincide con el resultado (12).

En lugar de aplicar la aproximación anterior, usaremos una aproximación un poco más precisa, que consiste en reemplazar la suma en la Ec. (11) por la integral, pero sin aproximar la densidad de estados por el término dominante para  $n \gg 1$ :

$$\begin{aligned} N_e &= \frac{1}{2} \int_1^\infty dn \frac{(n+2)(n+1)}{z^{-1}e^{\beta\hbar\omega n} - 1} = \frac{1}{2} \int_0^\infty dn \frac{(n+3)(n+2)}{\tilde{z}^{-1}e^{\beta\hbar\omega n} - 1} \\ &= \int_0^\infty dx \left[ \frac{x^2}{2(\beta\hbar\omega)^3} + \frac{5x}{2(\beta\hbar\omega)^2} + \frac{3}{\beta\hbar\omega} \right] \frac{1}{\tilde{z}^{-1}e^x - 1}, \end{aligned} \quad (21)$$

donde

$$\tilde{z} = ze^{-\beta\hbar\omega}. \quad (22)$$

En términos de las funciones de Bose–Einstein, resulta

$$N_e = \frac{g_3(\tilde{z})}{(\beta\hbar\omega)^3} + \frac{5g_2(\tilde{z})}{2(\beta\hbar\omega)^2} + \frac{3g_1(\tilde{z})}{\beta\hbar\omega}. \quad (23)$$

En definitiva, la ecuación que determina la fugacidad es

$$N = \frac{z}{1-z} + \frac{g_3(\tilde{z})}{(\beta\hbar\omega)^3} + \frac{5g_2(\tilde{z})}{2(\beta\hbar\omega)^2} + \frac{3g_1(\tilde{z})}{\beta\hbar\omega}. \quad (24)$$

Digamos algo acerca del límite termodinámico de este sistema. Clásicamente, el teorema de equipartición aplicado a un oscilador armónico unidimensional implica

$$\frac{m\omega^2}{2} \langle x^2 \rangle = \frac{1}{2}kT. \quad (25)$$

Entonces,

$$\sqrt{\langle x^2 \rangle} = \sqrt{\frac{kT}{m\omega^2}}. \quad (26)$$

El volumen característico de la región visitada por las partículas será

$$V = \left( \frac{\alpha kT}{m\omega^2} \right)^{3/2}, \quad (27)$$

donde  $\alpha$  es un factor numérico de orden uno, que elegiremos para obtener expresiones más simples. El volumen  $V$  puede controlarse a través de  $\omega$ . Escrito en términos de  $V$ ,

$$(\beta\hbar\omega)^2 = \beta\hbar^2 \frac{\alpha}{mV^{2/3}} = \frac{\beta\hbar^2}{2\pi m} \frac{\alpha}{2\pi V^{2/3}} = \frac{\alpha}{2\pi} \left( \frac{\lambda^3}{V} \right)^{2/3}, \quad (28)$$

donde  $\lambda$  es la longitud de onda térmica. Vemos que conviene elegir  $\alpha = 2\pi$ . Por analogía con el problema usual de las partículas en una caja, el límite termodinámico en este sistema se obtiene tomando  $N \rightarrow \infty$  y  $V \rightarrow \infty$ , manteniendo  $N/V$  constante. Hacer tender  $V$  a

infinito es equivalente a hacer tender  $\omega$  a cero. En otras palabras, el límite termodinámico se obtiene con  $N \rightarrow \infty$  y  $\omega \rightarrow 0$ , manteniendo constante el producto  $\omega N^{1/3}$ .

Usando el resultado (28) en la Ec. (24), queda

$$N = \frac{z}{1-z} + \frac{V}{\lambda^3} g_3(\tilde{z}) + \frac{5}{2} \frac{V^{2/3}}{\lambda^2} g_2(\tilde{z}) + 3 \frac{V^{1/3}}{\lambda} g_1(\tilde{z}). \quad (29)$$

Esta ecuación se puede reescribir como

$$1 = \frac{z}{(1-z)N} + \frac{V}{N\lambda^3} g_3(\tilde{z}) + \frac{5}{2N^{1/3}} \left( \frac{V}{N\lambda^3} \right)^{2/3} g_2(\tilde{z}) + \frac{3}{N^{2/3}} \left( \frac{V}{N\lambda^3} \right)^{1/3} g_1(\tilde{z}). \quad (30)$$

El objetivo es ver qué términos es necesario conservar para estudiar el límite termodinámico. Aquí estas notas van a diferir un poco de lo visto en clase. Lo primero que vamos a determinar es una cota para el valor máximo que puede tomar  $z$ . El número medio de partículas en el nivel fundamental tiene que ser menor o igual que el número total de partículas,

$$\frac{z}{1-z} \leq N \quad (31)$$

Reordenando un poco, queda

$$z \leq \frac{N}{N+1}. \quad (32)$$

Si  $N \gg 1$ ,

$$\frac{N}{N+1} \approx 1 - \frac{1}{N}. \quad (33)$$

Entonces, debe ser

$$z \lesssim 1 - \frac{1}{N}. \quad (34)$$

Esta no es la mejor cota posible, pero así y todo debe cumplirse. Todos los términos que figuran en el segundo miembro de la Ec. (30) son funciones crecientes de  $z$ . Si  $z$  llegara a valer  $N/(N+1)$ ,

$$\begin{aligned} \frac{z}{(1-z)N} &\approx 1, \\ g_3(\tilde{z}) &\approx g_3 \left[ \left( 1 - \frac{1}{N} \right) e^{-\beta \hbar \omega} \right], \\ \frac{1}{N^{1/3}} g_2(\tilde{z}) &\approx \frac{1}{N^{1/3}} g_2 \left[ \left( 1 - \frac{1}{N} \right) e^{-\beta \hbar \omega} \right], \\ \frac{1}{N^{2/3}} g_1(\tilde{z}) &\approx \frac{1}{N^{2/3}} g_1 \left[ \left( 1 - \frac{1}{N} \right) e^{-\beta \hbar \omega} \right]. \end{aligned} \quad (35)$$

Las funciones  $g_3$  y  $g_2$  están acotadas cuando  $z \rightarrow 1^-$ . Si hacemos tender  $N$  a infinito y  $\omega$  a cero, manteniendo constante el valor de  $N/V$ ,

$$\begin{aligned} \frac{V}{N\lambda^3} g_3 \left[ \left(1 - \frac{1}{N}\right) e^{-\beta\hbar\omega} \right] &\rightarrow \frac{V}{N\lambda^3} g_3(1), \\ \frac{1}{N^{1/3}} \left( \frac{V}{N\lambda^3} \right)^{2/3} g_2 \left[ \left(1 - \frac{1}{N}\right) e^{-\beta\hbar\omega} \right] &\rightarrow \frac{1}{N^{1/3}} \left( \frac{V}{N\lambda^3} \right)^{2/3} g_2(1) \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (36)$$

Esto quiere decir que si vamos a tomar el límite termodinámico, podemos ignorar el término proporcional a  $g_2$  en la Ec. (29). Aun en el peor de los casos, este término tiende a cero en el límite termodinámico. El verdadero peligro está en la función  $g_1$ , porque es divergente cuando  $z \rightarrow 1^-$ . Para  $g_1$  tenemos una expresión en términos de funciones elementales,

$$g_1(z) = \int_0^\infty dx \frac{1}{z^{-1}e^x - 1} = \int_0^\infty dx \frac{ze^{-x}}{1 - ze^{-x}} = \int_0^z dy \frac{1}{1-y} = -\log(1-z). \quad (37)$$

Esta función, como todas las funciones  $g_\nu$ , es creciente en el intervalo  $[0, 1)$ , por lo tanto, volviendo a la última línea de la Ec. (35),

$$0 \leq \frac{1}{N^{2/3}} g_1 \left[ \left(1 - \frac{1}{N}\right) e^{-\beta\hbar\omega} \right] \leq \frac{1}{N^{2/3}} g_1 \left(1 - \frac{1}{N}\right) = \frac{1}{N^{2/3}} \log N. \quad (38)$$

Pero cuando  $N \rightarrow \infty$ ,

$$\frac{1}{N^{2/3}} \log N \rightarrow 0, \quad (39)$$

de forma que, en el límite termodinámico,

$$\frac{1}{N^{2/3}} \left( \frac{V}{N\lambda^3} \right)^{1/3} \log N \rightarrow 0. \quad (40)$$

Así, aunque la función  $g_1$  diverja, la fracción de partículas asociada al último término en la Ec. (29), aun en el peor de los casos posibles, tiende a cero en el límite termodinámico. De manera que todo lo que necesitamos conservar para estudiar este límite son los primeros dos términos de la Ec. (29), reemplazando  $\tilde{z}$  por  $z$ ,

$$N = \frac{z}{1-z} + \frac{V}{\lambda^3} g_3(z). \quad (41)$$

Cuando  $N \gg 1$ , a menos que  $z$  difiera de uno en una cantidad del orden de  $1/N$ , la fracción de partículas en el nivel fundamental es prácticamente cero,

$$f = \frac{N_0}{N} = \frac{1}{N} \frac{z}{1-z} \approx 0. \quad (42)$$

El nivel fundamental empieza a poblarse cuando se saturan los estados excitados. Eso ocurre cuando la fugacidad es muy próxima a uno. A los efectos de los niveles excitados,

decir que la fugacidad es muy próxima a uno, es lo mismo que decir que la fugacidad es igual a uno, porque la función  $g_3$  tiene un límite finito cuando  $z \rightarrow 1^-$ . La condición de saturación para los niveles excitados es entonces

$$N = \frac{V}{\lambda^3} g_3(1). \quad (43)$$

Esta es la condición crítica. Puesto que

$$\frac{V}{\lambda^3} = \frac{1}{(\beta \hbar \omega)^3}, \quad (44)$$

y que  $g_3(1) = \zeta(3)$ , resulta

$$\frac{kT_c}{\hbar\omega} = \left[ \frac{N}{\zeta(3)} \right]^{1/3}. \quad (45)$$

Notando que

$$N = \frac{(kT_c)^3}{(\hbar\omega)^3} \zeta(3), \quad (46)$$

por encima de la temperatura crítica, donde

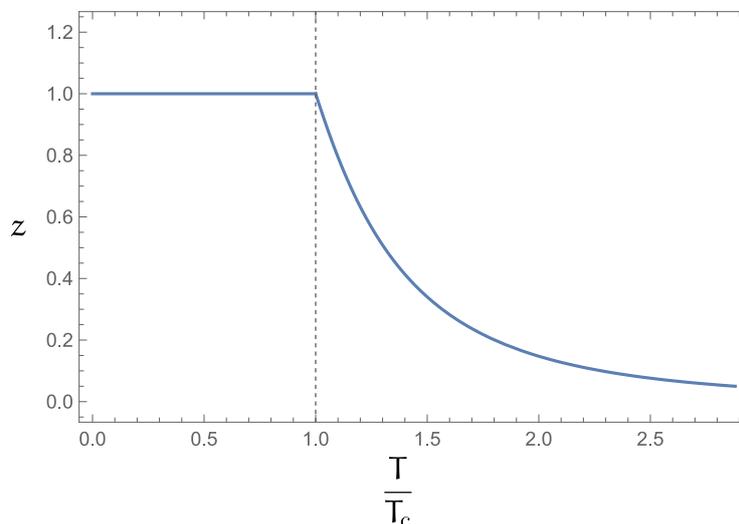
$$N = \frac{(kT)^3}{(\hbar\omega)^3} g_3(z), \quad (47)$$

podemos escribir

$$\frac{T}{T_c} = \left[ \frac{\zeta(3)}{g_3(z)} \right]^{1/3}. \quad (48)$$

Esta ecuación es útil porque expresa la cantidad adimensional  $T/T_c$  en función de  $z$ .

Para casi todos los fines prácticos, por debajo de la temperatura crítica,  $z = 1$ . Para graficar la fugacidad en función de la temperatura, en lugar de calcular numéricamente la inversa de la función  $g_3$ , lo más práctico es graficar  $T$  en función de  $z$  y voltear la figura.



Por debajo de la temperatura crítica, el número de partículas en los estados excitados es

$$N_e = \frac{g_3(1)}{(\beta\hbar\omega)^3} = \frac{\zeta(3)}{(\beta\hbar\omega)^3}. \quad (49)$$

A partir de la Ec. (45), podemos escribir

$$\frac{\zeta(3)}{(\hbar\omega)^3} = \frac{N}{(kT_c)^3}. \quad (50)$$

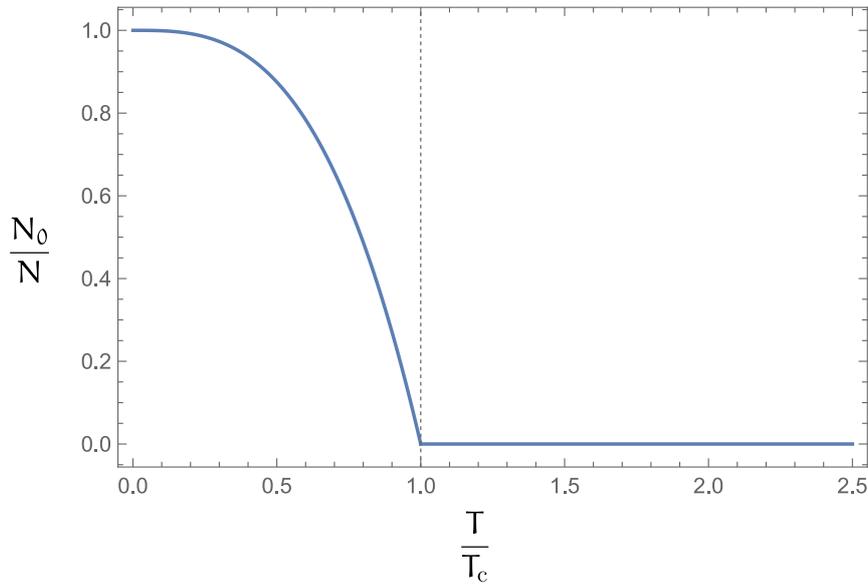
Luego, por debajo de la temperatura crítica,

$$N_e = \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 N. \quad (51)$$

Así, el número de partículas en el condensado es

$$N_0 = N - N_e = N \left[ 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \right]. \quad (52)$$

Por encima de la temperatura crítica,  $N_0 = 0$ . La figura muestra la fracción de partículas en el condensado.



Antes escribimos que, por debajo de la temperatura crítica, a todos los fines prácticos  $z$  es igual a uno. “Todos los fines prácticos” no puede incluir al nivel fundamental. La población de partículas en ese nivel es extremadamente sensitiva al valor de  $z$  cuando  $z$  se aproxima a uno. Si  $N \gg 1$  y hay una fracción  $f$  de partículas en el condensado, entonces

$$z \approx 1 - \frac{1}{fN}. \quad (53)$$

Para los niveles excitados, es totalmente indiferente si  $z$  es igual a uno o igual a  $1 - 1/(fN)$ ,

debido a que  $g_3$  está acotada cuando  $z \rightarrow 1^-$ ,

$$g_3\left(1 - \frac{1}{fN}\right) \simeq g_3(1). \quad (54)$$

En la práctica, cuando hay condensado, lo más sencillo es expresar  $N_0$  usando la ecuación  $N_0 = N - N_e$ , en lugar de resolver con todo detalle cuál es el valor que toma  $z$ .

Pasemos al cálculo de la energía y del calor específico. La energía media es

$$E = \sum_{n=0}^{\infty} \Omega(n) \frac{\hbar\omega n}{z^{-1}e^{\beta\hbar\omega n} - 1} = \hbar\omega \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+2)(n+1)}{2} \frac{n}{z^{-1}e^{\beta\hbar\omega n} - 1}. \quad (55)$$

La contribución del nivel fundamental es nula, de modo que no necesitamos escribirla separadamente. Aproximando la suma por una integral, queda

$$\begin{aligned} E &= \hbar\omega \int_0^{\infty} dx \left[ \frac{x^3}{2(\beta\hbar\omega)^4} + \frac{3x^2}{2(\beta\hbar\omega)^3} + \frac{x}{(\beta\hbar\omega)^2} \right] \frac{1}{z^{-1}e^x - 1} \\ &= \hbar\omega \left[ \frac{3g_4(z)}{(\beta\hbar\omega)^4} + \frac{3g_3(z)}{(\beta\hbar\omega)^3} + \frac{g_2(z)}{(\beta\hbar\omega)^2} \right]. \end{aligned} \quad (56)$$

En contraste con el cálculo del número de partículas en los niveles excitados, aquí no hay problemas de divergencias cuando  $z \rightarrow 1^-$ . En el límite termodinámico, el único término que importa es el primero,

$$E = \frac{3kT}{(\beta\hbar\omega)^3} g_4(z). \quad (57)$$

Resultará cómodo reescribir esta ecuación teniendo en cuenta la Ec. (50). Entonces, queda

$$E = 3NkT_c \left( \frac{kT}{kT_c} \right)^4 \frac{g_4(z)}{\zeta(3)}. \quad (58)$$

Por debajo de la temperatura crítica, la Ec. (58) se lee como

$$E = 3NkT_c \left( \frac{T}{T_c} \right)^4 \frac{\zeta(4)}{\zeta(3)}. \quad (59)$$

Por encima de la temperatura crítica,

$$N = \frac{g_3(z)}{(\beta\hbar\omega)^3}. \quad (60)$$

Por lo tanto, la Ec. (57) implica

$$E = 3NkT \frac{g_4(z)}{g_3(z)}. \quad (61)$$

Para  $z \ll 1$ , deberíamos obtener el límite clásico. En efecto, cuando  $z \ll 1$ ,

$$g_\nu(z) \simeq z, \quad (62)$$

luego

$$E \simeq 3NkT, \quad (63)$$

que es el resultado que se obtiene por el teorema de equipartición.

Para calcular el calor específico por encima de la temperatura crítica, derivemos la expresión (61) respecto de  $T$ , manteniendo  $N$  y  $\omega$  constantes:

$$\frac{c}{k} = \frac{1}{Nk} \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_{N,\omega} = \frac{3g_4}{g_3} + 3T \left( \frac{g'_4}{g_3} - \frac{g_4 g'_3}{g_3^2} \right) \left( \frac{\partial z}{\partial T} \right)_{N,\omega}. \quad (64)$$

Las derivadas de las funciones  $g_\nu$  satisfacen la relación

$$g'_\nu = \frac{g_{\nu-1}}{z}. \quad (65)$$

Luego,

$$\frac{c}{k} = \frac{3g_4}{g_3} + \frac{3T}{z} \left( 1 - \frac{g_4 g_2}{g_3^2} \right) \left( \frac{\partial z}{\partial T} \right)_{N,\omega}. \quad (66)$$

A su vez, para calcular la derivada de la fugacidad respecto de  $T$ , diferenciamos la Ec. (60) a  $N$  y  $\omega$  constantes:

$$0 = 3g_3(z) \frac{dT}{T} + \frac{g_2(z)}{z} dz. \quad (67)$$

Esto implica

$$\frac{T}{z} \left( \frac{\partial z}{\partial T} \right)_{V,\omega} = -\frac{3g_3}{g_2}. \quad (68)$$

Reemplazando en la Ec. (66),

$$\frac{c}{k} = 12 \frac{g_4(z)}{g_3(z)} - 9 \frac{g_3(z)}{g_2(z)}. \quad (69)$$

Cuando  $z \ll 1$ , recuperamos el resultado clásico

$$\frac{c}{k} \simeq 3. \quad (70)$$

Por debajo de la temperatura crítica, hay que derivar la expresión (59),

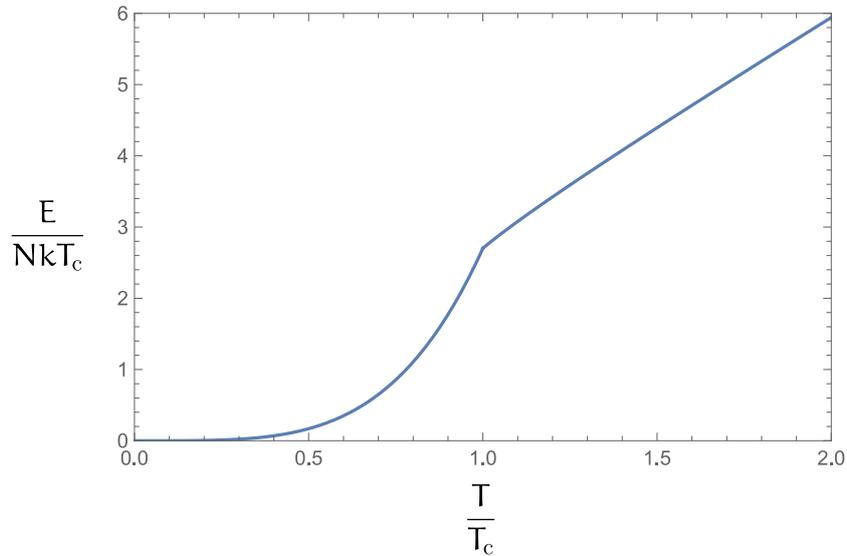
$$\frac{c}{k} = 12 \left( \frac{kT}{kT_c} \right)^3 \frac{\zeta(4)}{\zeta(3)}. \quad (71)$$

El calor específico es discontinuo en  $T_c$ ,

$$\lim_{T \rightarrow T_c^+} \frac{c}{k} = \frac{12\zeta(4)}{\zeta(3)} - \frac{9\zeta(3)}{\zeta(2)}, \quad \lim_{T \rightarrow T_c^-} \frac{c}{k} = \frac{12\zeta(4)}{\zeta(3)}. \quad (72)$$

Por debajo de la temperatura crítica, las Ecs. (59) y (71) dan directamente la energía y el calor específico como funciones de la temperatura. Por encima de la temperatura crítica, los gráficos de la energía y del calor específico en función de la temperatura pueden ser obtenidos paramétricamente. A partir de las Ecs. (48) y (61), tenemos

$$\frac{T}{T_c} = \left[ \frac{\zeta(3)}{g_3(z)} \right]^{1/3}, \quad \frac{E}{NkT_c} = 3 \left[ \frac{\zeta(3)}{g_3(z)} \right]^{1/3} \frac{g_4(z)}{g_3(z)}. \quad (73)$$



Para graficar de manera paramétrica el calor específico para  $T > T_c$ , tenemos

$$\frac{T}{T_c} = \left[ \frac{\zeta(3)}{g_3(z)} \right]^{1/3}, \quad \frac{c}{k} = 12 \frac{g_4(z)}{g_3(z)} - 9 \frac{g_3(z)}{g_2(z)} \quad (74)$$

