Aplicaciones del gas de Bose & más

Lectura: R. K. Pathria & P. D. Beale, Cap. 7., K. Huang Cap. 12, M. Kardar Cap. 6

» Gas de Fonones

El calor específico de sólidos cristalinos a baja T, se distanciaba de la Ley de Dulong-Petit $C_v^{\text{clásico}} = 3NK_B$ En general, $H = K + \Phi$ de un sólido, donde

$$K = \frac{1}{2} m \sum_i \dot{x}_i^2, \quad \text{y} \quad \Phi(\{x_i\}) \quad \text{es la energía potencial}$$

Estudiamos las vibraciones alrededor del equilibrio descrito $\{x_i^e\}$, en términos de $\xi_i = x_i - x_i^e$

$$K = \frac{1}{2} m \sum_{i=1}^{3N} \dot{\xi}_i^2, \quad \Phi = \Phi(\{x_i^e\}) + \cancel{\sum_i \frac{\partial \Phi}{\partial x_i}\Big|_{x_i^e} (\xi_i)} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i \partial x_j}\Big|_{x_i^e} \xi_i \xi_j$$

$$\boxed{H = \Phi_0 + \sum_{i=1}^{3N} \frac{1}{2} m \dot{\xi}_i^2 + \sum_{ij} \alpha_{ij} \xi_i \xi_j}$$

En coordenadas normales,

$$H = \Phi_0 + \sum_{i=1}^{3N} \frac{1}{2} m \left(\dot{q}_i^2 + \omega_i^2 q_i^2 \right)$$

NB: El número de modos está fijado por el número de sitios de la red.

Cuantización & estadística

Dado un $\{n_i\}$,

$$E[\{n_i\}] = \Phi_0 + \sum_{i=1}^{3N} \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_i \qquad 3N \text{ osciladores independientes}$$

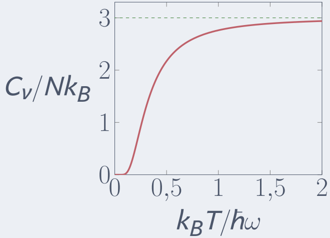
$$Z = \prod_{i=1}^{3N} Z_i = \prod_{i=1}^{3N} \sum_{n_i} e^{-\beta\hbar\omega_i (n_i + 1/2)} = \prod_{i=1}^{3N} \frac{e^{-\beta\hbar\omega_i/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_i}}$$

$$U = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z = U_0 + \sum_{i=1}^{3N} \left[\frac{\hbar\omega_i}{e^{\beta\hbar\omega_i} - 1} \right]$$

» Calor específico

$$C_v(T) = \frac{\partial U}{\partial T}\bigg|_V = k_B \sum_i \left(\frac{\hbar\omega_i}{k_B T}\right)^2 \frac{e^{\beta\hbar\omega_i}}{(e^{\beta\hbar\omega_i}-1)^2}$$

En 1907, Einstein propuso que $\omega = \omega_i, \forall i$



En general, podemos introducir una densidad de modos $g(\omega)$, tal que $\int_0^\infty g(\omega)\, d\omega = 3N$. ¿Pero qué forma tiene sentido?

» Red unidimensional de átomos idénticos

Supongamos N osciladores,

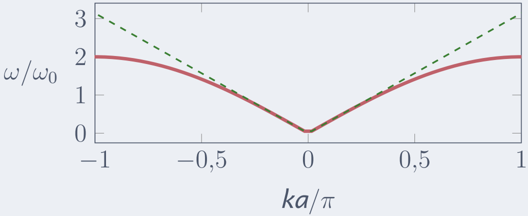
$$H_{1D} = \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{2} m \dot{\xi}_j^2 + \sum_{j=1}^{N} \frac{m\omega_0^2}{2} \left(\xi_j - \xi_{j-1}\right)^2 \quad \Rightarrow \quad m\ddot{\xi}_j = -m\omega_0^2 \left(2\xi_j - \xi_{j-1} - \xi_{j+1}\right)$$

Proponemos $\xi_j = e^{i(kja-\omega t)}$, condiciones periódicas ($k \in [-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$), $k = \frac{2\pi n}{Na}$ con $n \in [-\frac{N}{2}, \frac{N}{2}]$.

$$-m\omega^2 e^{ikja} = -m\omega_0^2 \left(2e^{ikja} - e^{ik(j-1)a} - e^{ik(j+1)a}\right) \quad \Rightarrow \quad \omega^2 = 2\omega_0^2(1-\cos ka) = 4\omega_0^2 \sin^2 \frac{ka}{2}$$

$$\boxed{\omega = 2\omega_0 \left|\sin \frac{ka}{2}\right|}$$

$$\omega \simeq c_s k$$



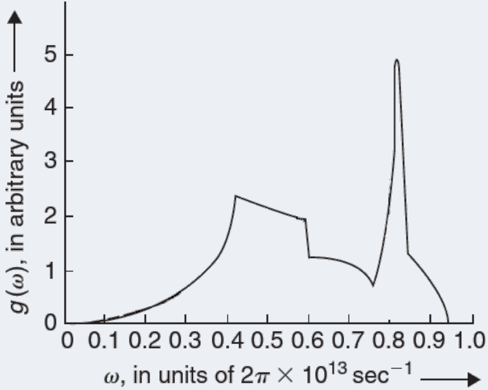
» En 3D

Si además de 3D, es general (m_j, ω_{jl})

$$\xi_j = A_j\, e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q}_j - \omega t)}$$

conduce a un sistema de autovalores y autovectores,

$$\omega^2 A_j = \sum_l \omega_{jl}^2 A_l e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{q}_l - \boldsymbol{q}_j)}$$



» Modelo de Debye

Supongamos que vibra como un continuo en donde $\omega_k = c_s k$, así podemos obtener la densidad de estados

» Energía y calor específico

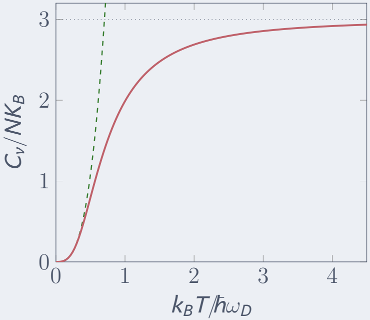
$$C_v(T) = 3Nk_B \frac{3}{(\beta\hbar\omega_D)^3} \int_0^{\beta\hbar\omega_D} \frac{x^4\, e^x}{(e^x-1)^2}\, dx, \quad \boxed{U(T) = \{\} + \frac{k_B T}{(\beta\hbar\omega_D)^3} 9N \int_0^{\beta\hbar\omega_D} \frac{x^3}{e^x-1}\, dx}$$

- Si $\beta\hbar\omega_D \gg 1$ (baja T).

$$U^* = \frac{k_B T}{(\hbar\omega_D)^3} (k_B T)^3 9N g_4(1)\Gamma(4)$$

- Si $\beta\hbar\omega_D \ll 1$ (alta T).

$$\frac{1}{e^x-1} \simeq 1/x \quad (x \ll 1)$$



» Gas de Fotones

Si tengo un campo EM en una cavidad, puedo tener fluctuaciones del campo.

$$H_{\text{clásico}} = \frac{1}{2}\sum_{k,\alpha}\left(\boldsymbol{p}_{k,\alpha}^2 + \omega_\alpha(k)^2|\boldsymbol{u}_{k,\alpha}|^2\right) \qquad \Rightarrow \qquad H_q = \sum_{k,\alpha}\hbar ck\left(n_\alpha(k) + \frac{1}{2}\right)$$

- Momento: $\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$
- Energía: $\hbar\omega = \hbar ck$
- polarizacion α; $\circlearrowright \; \circlearrowleft$

Como en los fonones, calculamos la energía media y el calor especifico a partir de la función de partición

$$Z = \sum_{\{n\}} e^{-\beta E[\{n\}]} = \prod_{k,\alpha}\frac{e^{-\beta\hbar\omega(k)/2}}{1 - e^{\beta\hbar\omega(k)}}$$

Podemos calcular la P y U como siempre

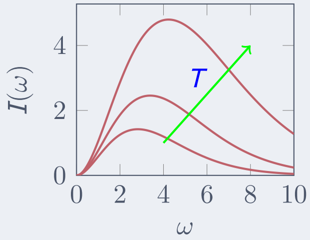
» La densidad de energía

$$\frac{U^*}{V} = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3}\int_0^\infty d\omega \frac{\omega^3}{e^{\beta\hbar\omega}-1} = \int_0^\infty d\omega\, u(\omega, T), \quad \text{con} \quad u(\omega, T) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3}\frac{\omega^3}{e^{\beta\hbar\omega}-1}$$

Si realizamos un agujero en la cavidad, el flujo de energía (por unidad de área y tiempo) de fotones que salen se puede calcular $I(\omega, T) = \langle c_\perp\rangle \frac{U^*}{V}$

$$\langle c_\perp\rangle = c\frac{\int_{\mathrm{D}} d\Omega \cos\theta}{4\pi} = \frac{c}{4} \qquad I = \sigma T^4, \quad \text{con} \quad \sigma = \frac{\pi^2 k_B^4}{60\hbar^3 c^3}$$

Ley de Stefan



Rayleigh-Jeans ($\beta\hbar\omega \ll 1$)	Wien ($\beta\hbar\omega \gg 1$)
$u \sim k_B T \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}$	$u \sim \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} e^{-\beta\hbar\omega}$

» Sistemas compuestos

En un sólido el C_v proviene de los electrones libres y las vibraciones de la red, i.e, $C_v = \alpha T + \gamma T^3$ a baja T

$$H = H_{\text{red}} + H_{e^-}$$

En gases es similar, pues si cada molécula tiene M átomos,

$$H_1 = \sum_{j=1}^{M} \frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{1}{2}\sum_{j\neq k=1}^{M} V_{int}(r_j - r_k) + H_{e^-} + H_n = H_t + H_R + H_v + H_{e^-} + H_n$$

$$Z = Z_t Z_R Z_v Z_{e^-} Z_n \qquad \Rightarrow \qquad C_v = C_t + C_R + C_v + C_e + C_n$$

Traslación del centro de masa

- Alta T, límite clásico, $U = \frac{3}{2} N K_B T$
- Baja T, $Z = e^{-\beta\epsilon_0} + 3e^{-\beta\epsilon_1} + \ldots$

Alta o baja T, según
$k_B \Theta_t = p_1^2/2m = h^2/(2mL^2)$

Rotaciones

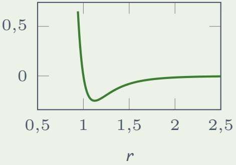
Depende fuertemente de la estructura e identidad de la molécula

$$\epsilon_j = \frac{\hbar^2}{2I} j(j+1)$$

$\Theta_R = \hbar^2/(2Ik_B) \sim 10^{-1} - 10^2 \mathrm{K}$

Vibraciones

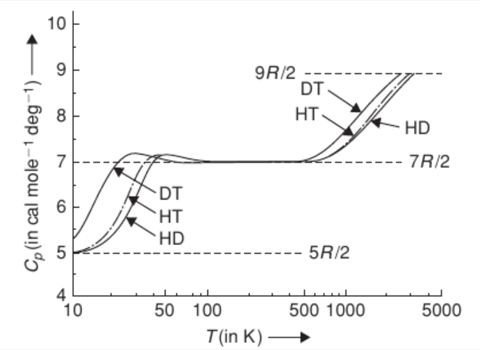
$$\epsilon_n = \hbar\omega(n + \tfrac{1}{2})$$



$$Z = \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}$$

- Alta T,

- Baja T



[R.K. Pathria]