Física Teórica 3 — primer cuatrimestre de 2024

Guía 6: *estadística cuántica 2*

1. a) En el ensamble gran canónico, calcular $\log \mathcal{Z}$ para bosones no interactuantes de espín s contenidos en una caja cúbica de volumen V en d dimensiones y con una relación de dispersión $\epsilon(\mathbf{p}) = \alpha p^n$, donde α y n son mayores que cero y $d \geqslant 1$. Asumir condiciones de contorno periódicas. Por analogía con el caso usual, conviene definir una longitud térmica λ proporcional a $\beta^{1/n}$.

   b) Encontrar la relación entre la energía media y PV.

   c) Cuanto mayor es z, mayor es el número medio de partículas en cada estado. Teniendo esto en cuenta, si el número medio de partículas es N, ¿cuál es el valor máximo de z? La respuesta no es $z_{\max} = 1$.

   d) Encontrar la ecuación que define z en términos de N, V y T.

   e) Demostrar que si $N \gg 1$ (pero no infinito) para que haya una fracción $f = N_0/N$ de partículas en el estado fundamental, con $1/N \ll f \leqslant 1$, debe ser $z \approx 1 - 1/fN$.

   f) Suponer que vale lo anterior. Entonces, fijada f, encontrar una ecuación para v/λ^d.

   g) El valor de v/λ^d determinado por la ecuación anterior depende de N y de f. Si al hacer $N \to \infty$ ocurre que $v/\lambda^d \to 0$, entonces, para tener una fracción $f > 0$ de partículas en el estado fundamental, o bien la densidad requerida es infinita (i.e. $v = 0$), o bien la temperatura debe tender a cero (i.e. $\lambda \to \infty$). Analizar lo que ocurre con v/λ^d cuando $N \to \infty$ y dar las condiciones para que pueda existir condensado a temperaturas mayores que cero y densidades finitas. Las funciones $g_\nu(z)$ divergen cuando $z \to 1^-$ si $\nu \leqslant 1$.

   h) Primera aplicación: ¿puede haber condensado en el límite termodinámico para un gas bidimensional con $\epsilon = p^2/2m$?

   i) Siguiendo con el caso anterior: límite termodinámico significa estrictamente $N \to \infty$. Escribir de manera explícita a/λ^2 como función de N y de f y argumentar que, en el caso bidimensional, el resultado de que no hay condensación en el límite termodinámico no dice mucho acerca de situaciones experimentales reales, donde N está acotado, digamos, por el número de nucleones que forman el planeta Tierra.

   j) Asumiendo que se está en un caso en donde puede haber condensado: en el límite termodinámico, ¿cuál es el valor crítico del parámetro v/λ^d a partir del cual es $f > 0$?

   k) Asumiendo que se está en un caso en donde puede haber condensado en el límite termodinámico, encontrar la fracción de partículas en el estado fundamental como función del parámetro v/λ^d. Suponer que v está fijo y escribir función de la temperatura. Graficar para $d = 3$ y $n = 2$.

l) En la mayoría de los libros se encuentran las siguientes fórmulas, válidas en tres dimensiones y para $\epsilon = p^2/2m$,

$$\frac{C_V}{kN} = \begin{cases} \dfrac{15}{4}\dfrac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - \dfrac{9}{4}\dfrac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)}, & \dfrac{\nu}{\lambda^3} > \left(\dfrac{\nu}{\lambda^3}\right)_{\text{crit}}, \\[2ex] \dfrac{15}{4}\dfrac{\nu}{\lambda^3}\, g_{5/2}(1), & \dfrac{\nu}{\lambda^3} < \left(\dfrac{\nu}{\lambda^3}\right)_{\text{crit}}. \end{cases}$$

Encontrar la generalización para bosones en una caja de d dimensiones y con $\epsilon = \alpha p^n$, asumiendo que se está en un caso en donde puede haber condensado.

2. Suponga que la función de partición de un sistema bosónico es tal que

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

Esto no pretende ser la ecuación de ningún sistema real, pero se ajusta al objetivo del problema: ver cómo aparecen las singularidades en las funciones termodinámicas cuando $N \to \infty$. 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.

a) Demuestre que la ecuación que determina z en términos de N, ν y T es una cuadrática.

b) Encuentre el valor crítico del parámetro $\nu T^{3/2}$.

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 estado fundamental como función de T para ν y N constantes. Observe qué ocurre al tomar valores cada vez mayores de N.

e) Grafique la $P\nu$ como función de ν 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 ν 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. Este es otro problema que puede resolverse exactamente pero que adquiere mucho más significado si se hacen los gráficos en la computadora para valores crecientes del número de partículas, como en el problema anterior. Se trata de un sistema de dos niveles. El nivel fundamental tiene energía cero y es no degenerado. El nivel excitado tiene energía $\epsilon > 0$ y una degeneración proporcional al volumen, $g = \alpha V$.

a) Demuestre que la ecuación que determina z en términos de N, ν y T es una cuadrática.

b) Siguiendo el procedimiento del problema 1, demuestre que es posible tener una fracción $0 \leqslant f \leqslant 1$ de partículas en el nivel fundamental en el límite termodinámico para valores no nulos de T y v.

c) Escriba la condición crítica que deben satisfacer T y v para que haya fase condensada.

d) Tomando $\epsilon = 1$, $\alpha \sim 10$ y $v \sim 1$, resuelva numéricamente z en función de N y T. Grafique, en función de T y para valores fijos y crecientes de N: i) la fracción de partículas en el nivel excitado, ii) la energía por partícula, iii) el calor específico a volumen constante y iv) la presión. Incluya en los gráficos la línea de referencia en el valor de la temperatura crítica para el valor elegido de v. ¿Qué comportamiento espera para valores mayores o menores de α y v? Verifíquelo en sus gráficos.

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,

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

Fórmulas útiles:

$$g_\nu(z) = z + \frac{z^2}{2^\nu} + \ldots; \qquad g_\nu(e^{-\alpha}) = \frac{\Gamma(1-\nu)}{\alpha^{1-\nu}} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!}\,\zeta(\nu - n)\,\alpha^n, \quad \text{si } \nu \notin \mathbb{Z}.$$

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 $-Hm_0 s$, 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 $z_s = \exp[\beta(\mu + Hm_0 s)] = ze^{sx}$.

b) Escribir la ecuación de estado en forma paramétrica: βPV y N como funciones de z y T. Tener en cuenta que puede haber una fase condensada. Interpretar los límites $x \to 0$ y $x \to \infty$.

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 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

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

La suma sobre $\mathbf{n}$ puede reorganizarse del siguiente modo: i) calcule el número $\Omega(n)$ de estados de una partícula con una dada energía, $E_n = n\hbar\omega$, 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 estado fundamental y, para los estados excitados, aproxime las sumas por integrales. El número medio de partículas en los estados 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 ω. 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

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

donde λ es la longitud de onda térmica.

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

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

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

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

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

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

g) ¿Cuál es la temperatura crítica?

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

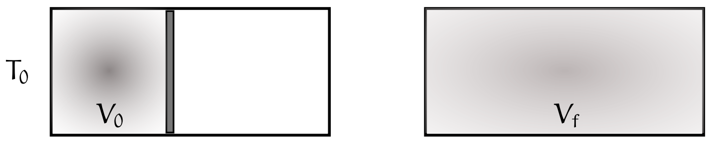
7. En cuatro dimensiones, el problema de un gas ideal de bosones de espín cero y masa m, con energía

$$\epsilon(\mathbf{p}) = \sqrt{\epsilon_0^2 + (pc)^2},$$

donde $\epsilon_0 = mc^2$, puede resolverse en términos de las funciones de Bose–Einstein.

   a) Demuestre que es posible la existencia del condensado de Bose–Einstein y escriba la ecuación que determina la temperatura crítica.
   b) Tomando los límites adecuados, recupere la temperatura crítica del gas no relativista y del gas ultrarrelativista.
   c) Encuentre la primera corrección relativista para la temperatura crítica del gas no relativista y la primera corrección no relativista para la temperatura crítica del gas ultrarrelativista.

8. N bosones de espín cero y masa m ocupan un volumen V_0 dentro de un cilindro aislado térmicamente. Inicialmente el gas está a temperatura T_0. Una fracción $x_0 > 0$ de las partículas está en la fase condensada. Se remueve el tabique, el gas se expande libremente y alcanza un nuevo equilibrio, ocupando el volumen V_f.



   a) Escribir la ecuación que relaciona m, x_0, T_0, V_0 y N.
   b) Asumiendo que en el estado final aún hay fase condensada, ¿cuánto vale la temperatura final T_f? El resultado debe escribirse únicamente en términos de V_0, V_f y T_0.
   c) ¿Cuál es el valor máximo del volumen final, V_{max}, tal que si $V_f \geqslant V_{max}$ entonces en el estado final no hay condensado? V_{max} debe escribirse sólo en términos de V_0 y x_0.
   d) Para $V_f \leqslant V_{max}$, ¿cuál es la fracción final x_f de partículas en la fase condensada? x_f debe quedar escrita únicamente en términos de V_f y V_{max}.

9. Para un gas de partículas de espín cero, encuentre las primeras correcciones cuánticas a la energía, al calor específico a volumen constante, a la presión y a la entropía. Exprese todas estas funciones en términos del número de partículas, de la densidad y de la temperatura.

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

$$\frac{s}{k} = (d+1)\frac{\zeta(d+1)}{\zeta(d)}.$$

Pruebe que, si los fotones obedecieran la estadística de Boltzmann, la respuesta hubiera sido $d+1$.