

Física Teórica 3 – primer cuatrimestre de 2024
Condensado de Bose–Einstein en un campo gravitatorio*

El problema

(Pathria 7.10) Un gas de bosones de espín cero y masa m está contenido en una caja en forma de prima recto, de base cuadrada de lado L , y altura ℓ . El eje vertical de la caja coincide con la dirección de un campo gravitatorio uniforme de aceleración g . Cuando $g = 0$, la temperatura crítica es $T_c^{(0)}$.

- a) Demostrar que este sistema tiene una transición de fase a una temperatura crítica determinada por la ecuación

$$\lambda_c^3 = \frac{V}{N\alpha_c} \left[\zeta\left(\frac{5}{2}\right) - g_{5/2}(e^{-\alpha_c}) \right], \quad (1)$$

donde $\alpha = \beta mg\ell$.

- b) Demostrar que, si el campo es lo suficientemente débil, de modo que $T_c \approx T_c^{(0)}$, $\alpha_c^{(0)} \ll 1$ y $[\alpha_c^{(0)}]^{1/2} \ll 1$, entonces la temperatura crítica está dada por

$$T_c \simeq T_c^{(0)} \left\{ 1 + \frac{8\sqrt{\pi}}{9\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} [\beta_c^{(0)} mg\ell]^{1/2} \right\}. \quad (2)$$

- c) Demostrar que la energía es

$$E = \frac{V}{\lambda^3 \alpha} kT \left\{ \frac{5}{2} \left[g_{7/2}(z) - g_{7/2}(ze^{-\alpha}) \right] - \alpha g_{5/2}(ze^{-\alpha}) \right\}. \quad (3)$$

- d) Demostrar que el calor específico tiene una discontinuidad en la temperatura crítica:

$$\lim_{T \rightarrow T_c^-} \left(\frac{c_V}{k} \right) - \lim_{T \rightarrow T_c^+} \left(\frac{c_V}{k} \right) \simeq \frac{9\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}{8\sqrt{\pi}} [\beta_c^{(0)} mg\ell]^{1/2}. \quad (4)$$

Fórmulas útiles

Las funciones $g_\nu(z)$ no son infinitamente diferenciables en $z = 1^-$. Por lo tanto, no se puede hacer ahí un desarrollo de Taylor (Pathria, Apéndice D). Cuando ν no es entero,

$$g_\nu(e^{-\alpha}) = \frac{\Gamma(1-\nu)}{\alpha^{1-\nu}} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \zeta(\nu-k) \alpha^k. \quad (5)$$

Si ν es entero positivo, el desarrollo tiene una forma distinta:

$$g_\nu(e^{-\alpha}) = \frac{(-1)^{\nu-1}}{(\nu-1)!} \left(\sum_{k=1}^{\nu-1} \frac{1}{k} - \log \alpha \right) \alpha^{\nu-1} + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq \nu-1}}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \zeta(\nu-k) \alpha^k. \quad (6)$$

*zanellaj@df.uba.ar

Solución

Para saber si puede haber condensado en el límite termodinámico, lo primero que hay que determinar es si el número de partículas en los niveles excitados está acotado cuando $z \rightarrow 1^-$. Elijamos coordenadas cartesianas de modo que la base de la caja esté en el plano xy . Convendrá llamar u a la tercera coordenada, para no interferir con la fugacidad. Usando la aproximación semiclásica, el número de partículas en los niveles excitados es

$$\begin{aligned} N_e(z) &= \frac{1}{h^3} \int d^3p \int d^3r \frac{1}{z^{-1} e^{\beta H(r,p)} - 1} \\ &= \frac{1}{h^3} \int d^3p \int_0^L dx \int_0^L dy \int_0^\ell du \frac{1}{z^{-1} \exp \left[\beta \left(\frac{p^2}{2m} + mgu \right) \right] - 1}. \end{aligned} \quad (7)$$

Antes de avanzar, conviene hacer un cambio de variables que extraiga la dependencia con mg fuera de la integral. Definiendo

$$w = \beta mgu, \quad (8)$$

e integrando lo que es inmediato integrar, resulta

$$N_e(z) = \frac{L^2 \ell}{h^3 \alpha} \int d^3p \int_0^\alpha dw \frac{1}{z^{-1} \exp \left(\beta \frac{p^2}{2m} + w \right) - 1}, \quad (9)$$

donde

$$\alpha = \beta mg\ell. \quad (10)$$

Este es el parámetro pequeño del problema. La integral en los impulsos puede hacerse por comparación con el problema usual del gas en la caja. En el problema del gas en una caja sin gravedad,

$$\frac{1}{h^3} \int d^3p \frac{1}{z^{-1} e^{\beta p^2/2m} - 1} = \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2}(z). \quad (11)$$

Comparando con la expresión (9), resulta

$$N_e(z) = \frac{L^2 \ell}{\lambda^3 \alpha} \int_0^\alpha du g_{3/2}(ze^{-u}). \quad (12)$$

Si definimos la variable

$$s = ze^{-u}, \quad (13)$$

queda

$$N_e(z) = \frac{L^2 \ell}{\lambda^3 \alpha} \int_{ze^{-\alpha}}^z ds \frac{g_{3/2}(s)}{s}. \quad (14)$$

Ahora bien,

$$\frac{g_\nu(z)}{z} = g'_{\nu+1}(z). \quad (15)$$

(De aquí les viene el nombre de funciones polilogarítmicas). Entonces,

$$N_e(z) = \frac{L^2 \ell}{\lambda^3 \alpha} \left[g_{5/2}(z) - g_{5/2}(ze^{-\alpha}) \right]. \quad (16)$$

También podríamos haber hecho primero la integral en w , que se escribe en términos de un logaritmo,

$$\begin{aligned} N_e(z) &= \frac{L^2 \ell}{h^3 \alpha} \int d^3 p \int_0^\alpha dw \frac{1}{z^{-1} \exp\left(\beta \frac{\beta p^2}{2m} + w\right) - 1} \\ &= \frac{L^2 \ell}{h^3 \alpha} \int d^3 p \left[\log\left(1 - ze^{-\beta p^2/2m} e^{-\alpha}\right) - \log\left(1 - ze^{-\beta p^2/2m}\right) \right]. \end{aligned} \quad (17)$$

Aquí podemos reconocer las mismas integrales que aparecen al calcular el logaritmo de la función de partición:

$$-\frac{1}{h^3} \int d^3 p \log\left(1 - ze^{-\beta p^2/2m}\right) = \frac{1}{\lambda^3} g_{5/2}(z). \quad (18)$$

Así, la Ec. (17) se lee como

$$N_e(z) = \frac{L^2 \ell}{\lambda^3 \alpha} \left[g_{5/2}(z) - g_{5/2}(ze^{-\alpha}) \right]. \quad (19)$$

Que es el mismo resultado de antes.

Aún hay una tercera alternativa, para los fanáticos de la función densidad de estados. Consiste en usar como variables de integración ϵ y u , o ϵ y p , y dejar escrita una integral de la forma

$$\int_0^\infty d\epsilon g(\epsilon) f(\epsilon), \quad (20)$$

donde $g(\epsilon)$ es la densidad de estados. El ejercicio es instructivo y se recomienda, pero no es la forma más sencilla de resolver la integral. Está hecho al final de todo.

Es importante notar que el límite termodinámico en este problema se obtiene haciendo tender L y N a infinito, manteniendo finito el número de partículas por unidad de área,

$$\frac{N}{L^2}. \quad (21)$$

La altura de la caja debe permanecer finita, de otro modo no tendría sentido asumir que $\beta m g l \ll 1$. El problema del gas en una caja de altura infinita debe tratarse de una manera por completo distinta. Dicho esto, definiremos $V = L^2 \ell$. Sigue siendo cierto que N/V se mantiene finito en el límite termodinámico.

La cuestión ahora es ver si el número de partículas en los estados excitados,

$$N_e(z) = \frac{V}{\lambda^3 \alpha} \left[g_{5/2}(z) - g_{5/2}(ze^{-\alpha}) \right], \quad (22)$$

está acotado cuando $z \rightarrow 1^-$. Es fácil verificar que $N_e(z)$ es una función creciente,

$$N_e'(z) = \frac{V}{z\lambda^3 \alpha} \left[g_{3/2}(z) - g_{3/2}(ze^{-\alpha}) \right] > 0. \quad (23)$$

Si $z = 0$, $N_e = 0$. Si $z \rightarrow 1^-$, N_e tiende a un valor finito,

$$N_e(1) = \frac{V}{\lambda^3 \alpha} \left[g_{5/2}(1) - g_{5/2}(e^{-\alpha}) \right]. \quad (24)$$

Entonces, llegamos a la conclusión de que este sistema va a tener una transición de fase. La condición crítica se encuentra igualando el número de partículas al número máximo de partículas en los estados excitados,

$$1 = \left\{ \frac{V}{N\lambda^3 \alpha} \left[g_{5/2}(1) - g_{5/2}(e^{-\alpha}) \right] \right\}_c. \quad (25)$$

Esto define una curva crítica en el plano νT . Si mantenemos fija la densidad, obtenemos una condición para la temperatura crítica,

$$\lambda_c^3 = \frac{V}{N\alpha_c} \left[g_{5/2}(1) - g_{5/2}(e^{-\alpha_c}) \right] = \frac{V}{N\alpha_c} \left[\zeta\left(\frac{5}{2}\right) - g_{5/2}(e^{-\alpha_c}) \right]. \quad (26)$$

No podemos resolver explícitamente esta ecuación, porque la temperatura crítica aparece en el miembro de la derecha como argumento de una de las funciones g_ν .

Se trata de analizar la condición crítica en el caso $\alpha_c \ll 1$, es decir, cuando los efectos del campo gravitatorio son pequeños. Para eso, usaremos el desarrollo de las funciones $g_\nu(e^{-\alpha})$ cuando ν no es entero:

$$g_\nu(e^{-\alpha}) = \frac{\Gamma(1-\nu)}{\alpha^{1-\nu}} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \zeta(\nu-k) \alpha^k. \quad (27)$$

Este desarrollo permite obtener una buena aproximación para $\alpha \ll 1$. Si $\nu = \frac{5}{2}$,

$$g_{5/2}(e^{-\alpha}) \simeq \Gamma\left(-\frac{3}{2}\right) \alpha^{3/2} + \zeta\left(\frac{5}{2}\right) - \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \alpha. \quad (28)$$

Aquí $\Gamma\left(-\frac{3}{2}\right) = \frac{4}{3}\sqrt{\pi}$. Si sustituimos esta expresión en la Ec. (26), queda

$$\lambda_c^3 = \frac{V}{N} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \left[1 - \frac{4\sqrt{\pi}}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \alpha_c^{1/2} \right]. \quad (29)$$

Cuando $g = 0$, recuperamos la condición crítica del gas en la caja,

$$[\lambda_c^{(0)}]^3 = \frac{V}{N} \zeta\left(\frac{3}{2}\right). \quad (30)$$

Entonces, podemos reescribir la Ec. (29) como

$$\frac{T_c}{T_c^{(0)}} = \left[1 - \frac{4\sqrt{\pi}}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \alpha_c^{1/2} \right]^{-2/3}. \quad (31)$$

Cuando $g \rightarrow 0$, T_c tiende a $T_c^{(0)}$. Luego, para g suficientemente pequeña, $\alpha_c^{1/2} \simeq [\alpha_c^{(0)}]^{1/2}$. Por hipótesis, $[\alpha_c^{(0)}]^{1/2} \ll 1$. Entonces, será cierto que $\alpha_c^{1/2} \ll 1$. Por lo tanto, podremos expandir el segundo miembro de la Ec. (31) hasta primer orden en $\alpha_c^{1/2}$.

$$\frac{T_c}{T_c^{(0)}} \simeq 1 + \frac{8\sqrt{\pi}}{9\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \alpha_c^{1/2}. \quad (32)$$

Pero el propio $\alpha_c^{1/2}$ va a ser igual a $[\alpha_c^{(0)}]^{1/2}$ más correcciones de orden $\alpha_c^{(0)}$. Entonces, hasta orden $[\alpha_c^{(0)}]^{1/2}$,

$$\frac{T_c}{T_c^{(0)}} = 1 + \frac{8\sqrt{\pi}}{9\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} [\alpha_c^{(0)}]^{1/2} = 1 + \frac{8\sqrt{\pi}}{9\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} [\beta_c^{(0)} m g \ell]^{1/2}. \quad (33)$$

La siguiente corrección es de orden g . La temperatura crítica es mayor comparada con la del gas en la caja sin gravedad, lo que resulta intuitivo. Pero ¿cuál es la explicación?

La energía

La energía del gas es

$$E = \frac{L^2}{h^3} \int d^3p \int_0^\ell du \frac{1}{z^{-1} \exp\left[\beta\left(\frac{p^2}{2m} + mgu\right)\right] - 1} \left(\frac{p^2}{2m} + mgu\right). \quad (34)$$

Mediante las mismas identificaciones que hicimos antes, es fácil ver que

$$E = \frac{L^2 \ell}{\lambda^3 \alpha} kT \left[\frac{3}{2} \int_0^\alpha dw g_{5/2}(ze^{-w}) + \int_0^\alpha dw w g_{3/2}(ze^{-w}) \right]. \quad (35)$$

La primera integral se resuelve mediante el cambio de variables $s = ze^{-w}$,

$$\int_0^\alpha dw g_{5/2}(ze^{-w}) = \int_{ze^{-\alpha}}^z ds \frac{g_{5/2}(s)}{s} = g_{7/2}(z) - g_{7/2}(ze^{-\alpha}). \quad (36)$$

La segunda integral puede resolverse por partes,

$$\begin{aligned} \int_0^\alpha dw w g_{3/2}(ze^{-w}) &= -w g_{5/2}(ze^{-w}) \Big|_0^\alpha + \int_0^\alpha dw g_{5/2}(ze^{-w}) \\ &= -\alpha g_{5/2}(ze^{-\alpha}) + g_{7/2}(z) - g_{7/2}(ze^{-\alpha}). \end{aligned} \quad (37)$$

Finalmente,

$$E = \frac{V}{\lambda^3 \alpha} kT \left\{ \frac{5}{2} \left[g_{7/2}(z) - g_{7/2}(ze^{-\alpha}) \right] - \alpha g_{5/2}(ze^{-\alpha}) \right\}. \quad (38)$$

Para verificar que esto tiende al límite esperado cuando $\alpha \rightarrow 0$, expandamos el término entre llaves,

$$f(\alpha) = \frac{5}{2} \left[g_{7/2}(z) - g_{7/2}(ze^{-\alpha}) \right] - \alpha g_{5/2}(ze^{-\alpha}). \quad (39)$$

Evaluada en $\alpha = 0$, $f(\alpha)$ es cero. Su primera derivada es

$$f'(0) = \frac{5}{2} z g'_{7/2}(z) - g_{5/2}(z) = \frac{3}{2} g_{5/2}(z). \quad (40)$$

Entonces, hasta orden lineal en α ,

$$f(\alpha) = \frac{3}{2} \alpha g_{5/2}(z) + \dots \quad (41)$$

Volviendo a la Ec. (38), recuperamos la expresión prevista,

$$E = \frac{3}{2} \frac{V}{\lambda^3} kT g_{5/2}(z). \quad (42)$$

Notar que el desarrollo de Taylor alrededor de $\alpha = 0$ sólo es válido si $z < 1$. En otro caso hay que usar el desarrollo (27).

El calor específico

Por debajo de la temperatura crítica, la fugacidad es igual a uno. Entonces, la energía es

$$E = \frac{V}{\lambda^3 \alpha} kT \left\{ \frac{5}{2} \left[\zeta\left(\frac{7}{2}\right) - g_{7/2}(e^{-\alpha}) \right] - \alpha g_{5/2}(e^{-\alpha}) \right\}. \quad (43)$$

Usando la expansión de las funciones $g_\nu(e^{-\alpha})$ alrededor de $\alpha = 0$, resulta

$$\begin{aligned} E &\simeq \frac{V}{\lambda^3 \alpha} kT \left\{ \frac{5}{2} \zeta\left(\frac{7}{2}\right) - \frac{5}{2} \left[\zeta\left(\frac{7}{2}\right) - \zeta\left(\frac{5}{2}\right) \alpha + \frac{1}{2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \alpha^2 \right] - \alpha \left[\zeta\left(\frac{5}{2}\right) - \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \alpha \right] \right\} \\ &= \frac{V}{\lambda^3} kT \left[\frac{3}{2} \zeta\left(\frac{5}{2}\right) - \frac{1}{4} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \alpha \right]. \end{aligned} \quad (44)$$

Hasta este orden en la aproximación,

$$\frac{C_V}{k} = \frac{5}{2} \frac{E}{kT} + \frac{V}{4\lambda^3} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \alpha. \quad (45)$$

Cuando $T \rightarrow T_c^-$, podemos evaluar el último término en la temperatura crítica del gas sin gravedad,

$$\lim_{T \rightarrow T_c^-} \frac{C_V}{k} \simeq \frac{5}{2} \left(\frac{E}{kT} \right)_c + \frac{V}{4 \left[\lambda_c^{(0)} \right]^3} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \alpha_c^{(0)} = \frac{5}{2} \left(\frac{E}{kT} \right)_c + \frac{N}{4} \alpha_c^{(0)}. \quad (46)$$

El valor de la energía cuando $T \rightarrow T_c^-$ está dado por

$$E \rightarrow \frac{V}{\lambda_c^3} kT_c \left[\frac{3}{2} \zeta\left(\frac{5}{2}\right) - \frac{1}{4} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \alpha_c \right]. \quad (47)$$

Si quisiéramos ser rigurosos en exceso, aquí tendríamos que reemplazar α_c por $\alpha_c^{(0)}$ y T_c por su desarrollo (33). Nos conviene dejar escrita la energía en esta forma.

Por encima de la temperatura crítica,

$$E = \frac{V}{\lambda^3 \alpha} kT \left\{ \frac{5}{2} \left[g_{7/2}(z) - g_{7/2}(ze^{-\alpha}) \right] - \alpha g_{5/2}(ze^{-\alpha}) \right\}. \quad (48)$$

Es fácil ver que, cuando $T \rightarrow T_c^+$, la energía tiende al mismo valor que calculamos del otro lado de la transición, Ec. (47). Para calcular el calor específico debemos derivar la expresión (48) teniendo en cuenta que z es una función de la temperatura:

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{k} &= \frac{7}{2} \frac{E}{kT} + \frac{V}{\lambda^3 \alpha} \frac{Tz'}{z} \left\{ \frac{5}{2} \left[g_{5/2}(z) - g_{5/2}(ze^{-\alpha}) \right] - \alpha g_{3/2}(ze^{-\alpha}) \right\} \\ &\quad - \frac{V}{\lambda^3} \left[\frac{3}{2} g_{5/2}(ze^{-\alpha}) + \alpha g_{3/2}(ze^{-\alpha}) \right]. \end{aligned} \quad (49)$$

Para evaluar z' , partimos de la ecuación que determina la fugacidad, Ec. (22),

$$N = \frac{V}{\lambda^3 \alpha} \left[g_{5/2}(z) - g_{5/2}(ze^{-\alpha}) \right]. \quad (50)$$

Derivando implícitamente esta ecuación respecto de T con N y V constantes, y luego de algunas simplificaciones triviales,

$$0 = \frac{5}{2} \left[g_{5/2}(z) - g_{5/2}(ze^{-\alpha}) \right] + \frac{Tz'}{z} \left[g_{3/2}(z) - g_{3/2}(ze^{-\alpha}) \right] - \alpha g_{3/2}(ze^{-\alpha}). \quad (51)$$

Entonces,

$$\frac{Tz'}{z} = \frac{\alpha g_{3/2}(ze^{-\alpha}) - \frac{5}{2} \left[g_{5/2}(z) - g_{5/2}(ze^{-\alpha}) \right]}{g_{3/2}(z) - g_{3/2}(ze^{-\alpha})}. \quad (52)$$

Si reemplazamos este resultado en la Ec. (49), obtenemos el calor específico por encima de la temperatura crítica. No vale mucho la pena hacer ese reemplazo.

Para analizar el calor específico en el límite $T \rightarrow T_c^+$, tenemos que evaluar la expresión (49) en $z = 1$ y desarrollar alrededor de $\alpha = 0$. Empecemos por el término Tz'/T , que es el que tenemos más a la vista. Luego de evaluarlo en $z = 1$ y de aplicar el desarrollo (27) hasta la primera corrección no nula,

$$\left(\frac{Tz'}{z} \right)_{T \rightarrow T_c^+} \simeq -\frac{3}{4\sqrt{\pi}} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \alpha_c^{1/2}. \quad (53)$$

Cuando $\alpha_c \rightarrow 0$, $z' \rightarrow 0$, que es el resultado usual. En efecto, para el gas en d dimensiones, con relación de dispersión $\epsilon(\mathbf{p}) = ap^n$,

$$\lim_{T \rightarrow T_c^+} \frac{Tz'}{z} = -\nu \frac{g_\nu(1^-)}{g_{\nu-1}(1^-)}, \quad (54)$$

donde $\nu = d/n$. En el caso usual, $\nu = \frac{3}{2}$; la función $g_{1/2}(z)$ diverge cuando $z \rightarrow 1^-$, de forma que $z' \rightarrow 0$.

Por otro lado, volviendo a la Ec. (49) y expandiendo la expresión dentro de las llaves

$$\frac{5}{2} \left[g_{5/2}(1) - g_{5/2}(e^{-\alpha_c}) \right] - \alpha_c g_{3/2}(e^{-\alpha_c}) \simeq \frac{3}{2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \alpha_c. \quad (55)$$

Finalmente, el término entre corchetes en la segunda línea de la Ec. (49) es

$$\frac{3}{2} g_{5/2}(e^{-\alpha_c}) + \alpha_c g_{3/2}(e^{-\alpha_c}) \simeq \frac{3}{2} \zeta\left(\frac{5}{2}\right) - \frac{1}{2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \alpha_c. \quad (56)$$

Reuniendo todos estos resultados, cuando $T \rightarrow T_c^+$,

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{k} &\rightarrow \frac{7}{2} \left(\frac{E}{kT} \right)_c + \frac{V}{\lambda_c^3 \alpha_c} \left[-\frac{3}{4\sqrt{\pi}} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \alpha_c^{1/2} \right] \frac{3}{2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \alpha_c - \frac{V}{\lambda_c^3} \left[\frac{3}{2} \zeta\left(\frac{5}{2}\right) - \frac{1}{2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \alpha_c \right] \\ &\simeq \frac{7}{2} \left(\frac{E}{kT} \right)_c - \frac{9V}{8\lambda_c^3} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \frac{\zeta\left(\frac{3}{2}\right) \alpha_c^{1/2}}{\sqrt{\pi}} - \frac{3V}{2\lambda_c^3} \zeta\left(\frac{5}{2}\right). \end{aligned} \quad (57)$$

Un punto discutible es haber conservado la expresión exacta de λ_c . Lo cierto es que no se está cometiendo ningún error. Veremos que conviene esperar hasta último momento antes de aproximar λ_c . Hasta este orden en la aproximación, en el segundo término de la expresión (57), podemos usar la relación usual para el gas en la caja,

$$\frac{V}{\lambda_c^3} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) = N. \quad (58)$$

Así, cuando $T \rightarrow T_c^+$,

$$\frac{C_V}{k} \rightarrow \frac{7}{2} \left(\frac{E}{kT} \right)_c - \frac{9N \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \alpha_c^{1/2}}{8\sqrt{\pi}} - \frac{3V}{2\lambda_c^3} \zeta\left(\frac{5}{2}\right). \quad (59)$$

Además, la Ec. (47) implica

$$\left(\frac{E}{kT} \right)_c = \frac{3V}{2\lambda_c^3} \zeta\left(\frac{5}{2}\right) + \mathcal{O}(\alpha_c). \quad (60)$$

Finalmente,

$$\frac{C_V}{k} \rightarrow \frac{5}{2} \left(\frac{E}{kT} \right)_c - \frac{9N \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \left[\alpha_c^{(0)} \right]^{1/2}}{8\sqrt{\pi}}. \quad (61)$$

Comparando con la expresión (46) para el calor específico a la izquierda de la temperatura crítica, notamos que hay una discontinuidad:

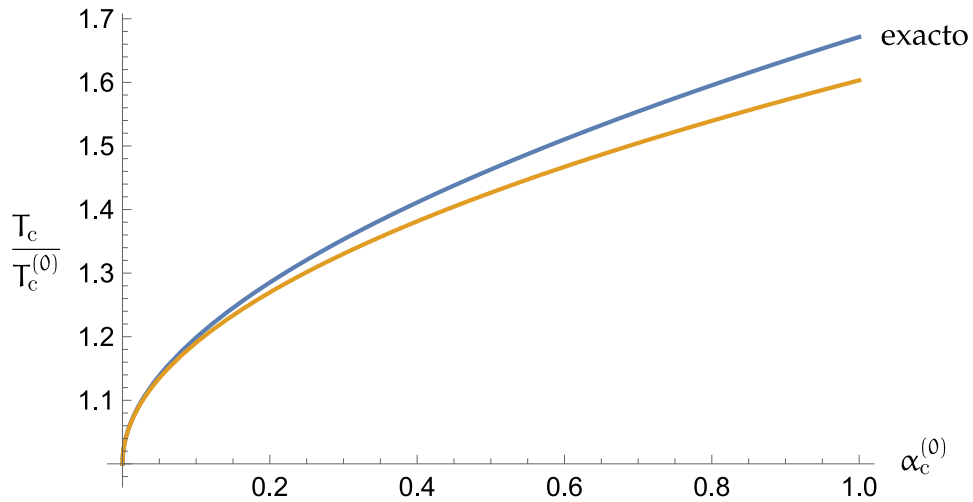
$$\Delta = \lim_{T \rightarrow T_c^-} \left(\frac{c_V}{k} \right) - \lim_{T \rightarrow T_c^+} \left(\frac{c_V}{k} \right) = \frac{9\zeta(\frac{3}{2})}{8\sqrt{\pi}} [\alpha_c^{(0)}]^{1/2} + \mathcal{O}(\alpha_c^{(0)}). \quad (62)$$

Es curioso que aparezca nuevamente la misma combinación de constantes que en la expresión (33) para la temperatura,

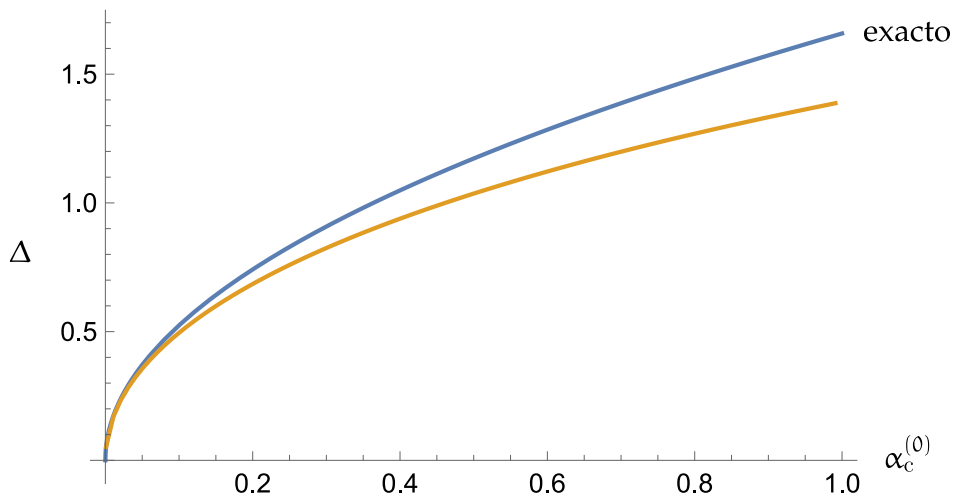
$$\gamma = \frac{8\sqrt{\pi}}{9\zeta(\frac{3}{2})} \approx 0,6. \quad (63)$$

Algunos gráficos

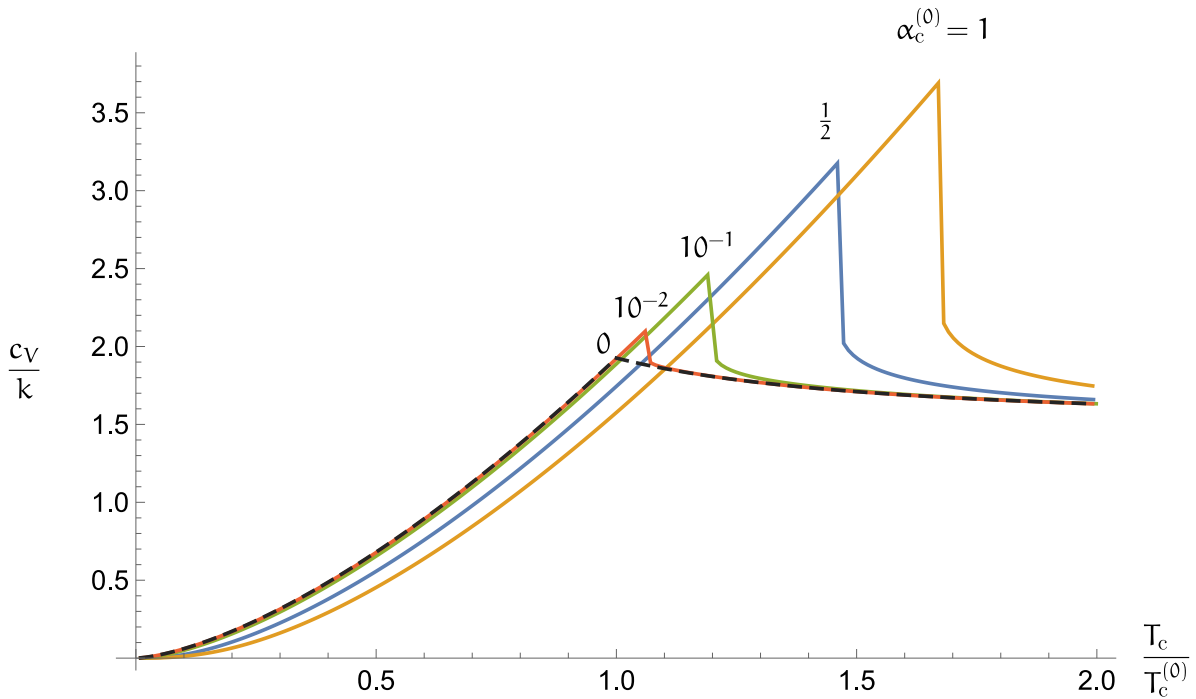
Primero, la temperatura crítica calculada exactamente, comparada con la aproximación (33). Notar que el origen del eje vertical está en $T_c/T_c^{(0)} = 1$.



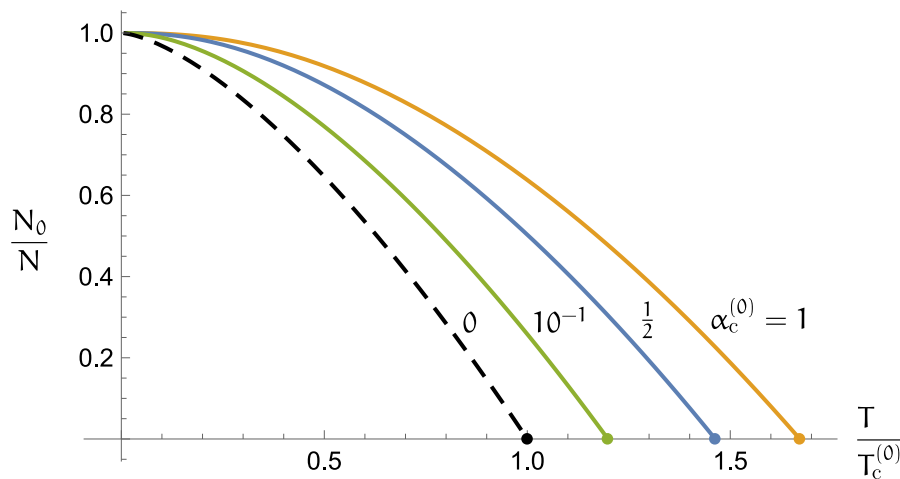
La discontinuidad en el calor específico calculada exactamente, comparada con la aproximación (62).



El calor específico calculado exactamente como función de la temperatura para distintos valores de $\alpha_c^{(0)}$. En línea de trazos, el caso $g = 0$.



La fracción de partículas en el condensado, por debajo de la temperatura crítica, calculada exactamente como función de la temperatura para distintos valores de $\alpha_c^{(0)}$.



Algunos números

Hemos visto que para un gas ideal de bosones cuyas partículas tuvieran la misma masa que los átomos de He^4 y su misma densidad a presión atmosférica y temperatura próxima a cero, la temperatura crítica es del orden de 3 K. Supongamos que el condensado esté en un recipiente cúbico de un milímetro de lado. Entonces, en el campo de gravedad en la superficie terrestre,

$$\alpha_c^{(0)} \approx 1,6 \times 10^{-6}. \quad (64)$$

Si $T_c^{(0)} \sim 1$ K, lo que se consigue subir la temperatura crítica es del orden de un mK. El salto en el calor específico (medido en unidades de k) es

$$\Delta \approx 2 \times 10^{-3}. \quad (65)$$

Esto debe compararse con el calor específico predicho para un gas ideal en la temperatura crítica y sin gravedad,

$$\frac{c_V}{k} = \frac{15}{4} \frac{\zeta(\frac{5}{2})}{\zeta(\frac{3}{2})} \approx 1,93. \quad (66)$$

De modo que

$$\frac{\Delta}{c_V/k} \approx 10^{-3}. \quad (67)$$

Más alternativas

Puesto que el problema requiere que calculemos tanto el número de partículas como la energía, antes resolvimos dos integrales, una para cada magnitud. Pero no es el único camino. Podríamos ahorrarnos una integral si calculáramos directamente el logaritmo de la función de partición. Sería una sola integral y después el resto, meras derivadas.

El logaritmo de la función de partición es

$$\begin{aligned} \log \mathcal{Z} &= -\log(1-z) - \frac{1}{h^3} \int d^3p \int d^3r \log \left\{ 1 - z \exp \left[-\beta \left(\frac{p^2}{2m} + mgu \right) \right] \right\} \\ &= -\log(1-z) - \frac{L^2 \ell}{h^3 \alpha} \int d^3p \int_0^\alpha dw \log \left\{ 1 - z \exp \left[-\beta \left(\frac{p^2}{2m} + w \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (68)$$

La integral en el impulso es la misma que ya hemos calculado para el problema del gas en una caja sin gravedad. Podemos usar el resultado:

$$-\frac{1}{h^3} \int d^3p \log \left(1 - z e^{-\beta p^2/2m} \right) = \frac{1}{\lambda^3} g_{5/2}(z). \quad (69)$$

Entonces,

$$\log \mathcal{Z} = -\log(1-z) + \frac{L^2 \ell}{\lambda^3 \alpha} \int_0^\alpha dw g_{5/2}(z e^{-w}). \quad (70)$$

Esta integral puede resolverse mediante el cambio de variables $s = z e^{-w}$,

$$\int_0^\alpha dw g_{5/2}(z e^{-w}) = \int_{z e^{-\alpha}}^z ds \frac{g_{5/2}(s)}{s} = \left[g_{7/2}(z) - g_{7/2}(z e^{-\alpha}) \right]. \quad (71)$$

Finalmente,

$$\log \mathcal{Z} = -\log(1-z) + \frac{V}{\lambda^3 \alpha} \left[g_{7/2}(z) - g_{7/2}(z e^{-\alpha}) \right]. \quad (72)$$

Para calcular el número de partículas y la energía sólo queda derivar el logaritmo de la función de partición. El número de partículas es

$$N = z \frac{\partial \log \mathcal{Z}}{\partial z} = \frac{z}{1-z} + \frac{V}{\lambda^3 \alpha} \left[g_{5/2}(z) - g_{5/2}(ze^{-\alpha}) \right], \quad (73)$$

que, para los niveles excitados, da el mismo resultado que obtuvimos en la Ec. (16). Por otro lado,

$$\begin{aligned} E &= -\frac{\partial \log \mathcal{Z}}{\partial \beta} = \frac{5}{2} \frac{V}{\lambda^3 \alpha} kT \left[g_{7/2}(z) - g_{7/2}(ze^{-\alpha}) \right] - \frac{V}{\lambda^3} kT g_{5/2}(ze^{-\alpha}) \\ &= \frac{V}{\lambda^3 \alpha} kT \left\{ \frac{5}{2} \left[g_{7/2}(z) - g_{7/2}(ze^{-\alpha}) \right] - \alpha g_{5/2}(ze^{-\alpha}) \right\}, \end{aligned} \quad (74)$$

que coincide con la expresión (38) que habíamos encontrado antes.

La incivil densidad de estados

Nos hemos visto en la necesidad de resolver integrales de la forma

$$I = \frac{4\pi L^2}{h^3} \int_0^\infty dp \int_0^\ell du p^2 f\left(\frac{p^2}{2m} + mgu\right). \quad (75)$$

Debido a que la función f sólo depende de la energía, no pareciera ser una muy mala estrategia hacer un cambio de variables en donde una de las nuevas variables sea, justamente, la energía. Es posible hacer eso, pero lo que se gana en elegancia se pierde en simplicidad. El precio reducir el problema a una sola integral en la energía es tener que trabajar con funciones definidas por tramos.

El objetivo es que las integrales de la forma (75) se escriban como

$$I = \int_0^\infty d\epsilon g(\epsilon) f(\epsilon), \quad (76)$$

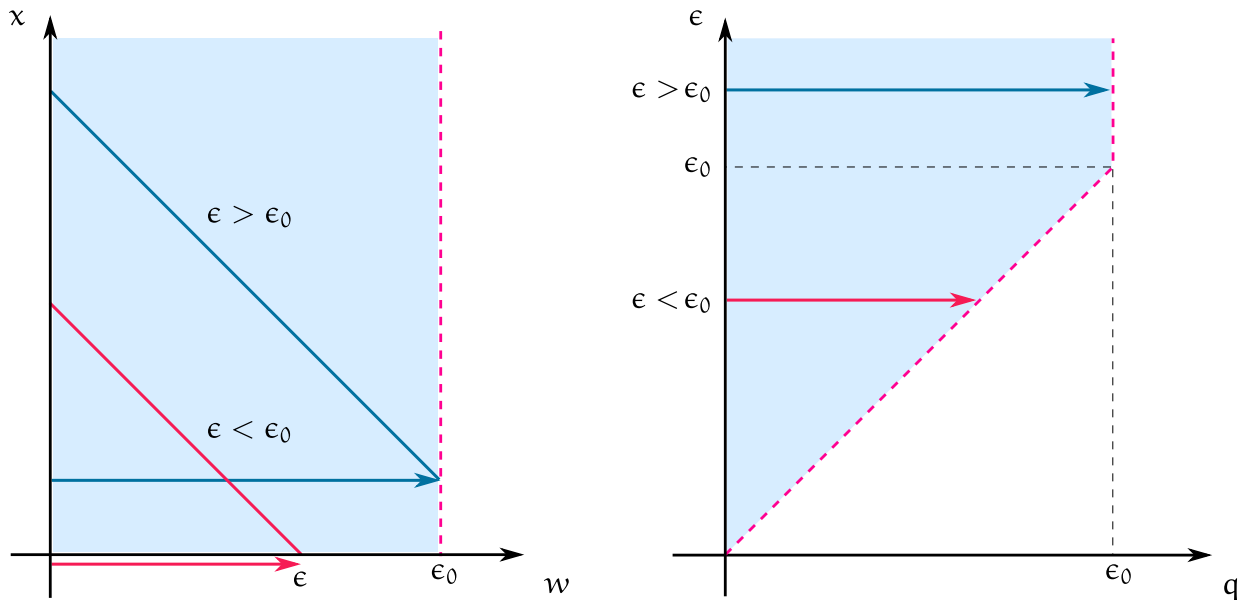
donde $g(\epsilon)$ es la llamada densidad de estados. Primero conviene definir $w = mgu$ y $x = p^2/2m$. Entonces,

$$I = \frac{2\pi V}{h^3 \epsilon_0} (2m)^{3/2} \int_0^\infty dx \int_0^{\epsilon_0} dw \sqrt{x} f(x+w), \quad (77)$$

donde $\epsilon_0 = mg\ell$. El cambio de variables

$$q = w, \quad \epsilon = x + w \quad (78)$$

tiene jacobiano igual a uno. La variable ϵ , que es la energía, varía entre cero e infinito. La variable q parte de cero, pero su valor máximo depende de ϵ . Debido a que $x \geq 0$, debe ser $\epsilon - q \geq 0$. Pero además, $q \leq \epsilon_0$. Esto significa que $q \leq \min(\epsilon_0, \epsilon)$. La figura muestra las regiones de integración en cada plano. En el plano wx la región tiene forma de banda. En el plano $q\epsilon$, es una banda trunca.



En la figura de la izquierda, los segmentos diagonales corresponden a un valor constante de ϵ . Cuando $\epsilon < \epsilon_0$, la coordenada w varía entre 0 y ϵ . Cuando $\epsilon > \epsilon_0$, w varía entre 0 y ϵ_0 .

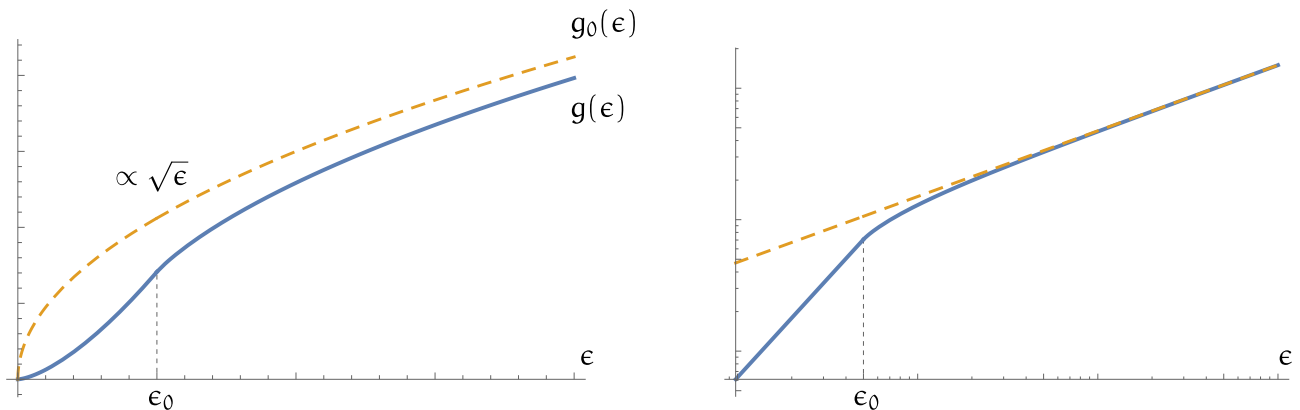
En definitiva,

$$I = \frac{2\pi V}{h^3 \epsilon_0} (2m)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon \int_0^{\min(\epsilon_0, \epsilon)} dq \sqrt{\epsilon - q} f(q) = \int_0^\infty d\epsilon g(\epsilon) f(\epsilon), \quad (79)$$

donde la densidad de estados es

$$g(\epsilon) = \frac{2\pi V}{h^3 \epsilon_0} (2m)^{3/2} \int_0^{\min(\epsilon_0, \epsilon)} dq \sqrt{\epsilon - q} = \frac{4\pi V}{3h^3 \epsilon_0} (2m)^{3/2} \left[\epsilon^{3/2} - \Theta(\epsilon - \epsilon_0) (\epsilon - \epsilon_0)^{3/2} \right]. \quad (80)$$

En la siguiente figura se muestra la densidad de estados para $\epsilon_0 = \frac{1}{2}$ (en unidades arbitrarias). El gráfico logarítmico de la derecha es más ilustrativo. La línea de trazos corresponde a la densidad usual, proporcional a $\sqrt{\epsilon}$.



Veamos cómo se calcula el número de partículas usando la densidad de estados:

$$\begin{aligned}
N_e &= \int_0^\infty d\epsilon g(\epsilon) \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\epsilon} - 1} \\
&= \frac{4\pi V}{3h^3 \epsilon_0} (2m)^{3/2} \left[\int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{3/2}}{z^{-1}e^{\beta\epsilon} - 1} - \int_{\epsilon_0}^\infty d\epsilon \frac{(\epsilon - \epsilon_0)^{3/2}}{z^{-1}e^{\beta\epsilon} - 1} \right] \\
&= \frac{4\pi V}{3h^3 \epsilon_0} (2m)^{3/2} \left[\int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{3/2}}{z^{-1}e^{\beta\epsilon} - 1} - \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{3/2}}{z^{-1}e^{\beta(\epsilon + \epsilon_0)} - 1} \right] \\
&= \frac{4\pi V}{3h^3 \beta^{3/2} \alpha} (2m)^{3/2} \left[\int_0^\infty dx \frac{x^{3/2}}{z^{-1}e^x - 1} - \int_0^\infty dx \frac{x^{3/2}}{z^{-1}e^{x+\alpha} - 1} \right],
\end{aligned} \tag{81}$$

donde $\alpha = \beta\epsilon_0 = \beta m g l$. Estas integrales son, salvo un factor $\Gamma(\frac{5}{2})^{-1}$, las funciones $g_{5/2}$,

$$N_e = \frac{V}{\lambda^3 \alpha} \left[g_{5/2}(z) - g_{5/2}(ze^{-\alpha}) \right]. \tag{82}$$

Si bien no es terriblemente complicado, integrar usando la densidad de estados no resulta muy conveniente en este problema. Introducir una densidad de estados puede servir para demostrar ciertos resultados generales, como el que vimos cuando estudiamos el paramagnetismo de Pauli. No siempre es el método más eficaz para resolver las integrales.

Más acerca de la densidad de estados

Antes calculamos la densidad de estados cambiando explícitamente de variables. Una de las nuevas variables fue la energía y resolvimos la integral en la variable "irrelevante", con el efecto de que al final de todo quedó una sola integral en la energía. Este proceso puede, no diré simplificarse en el caso general, pero sí sistematizarse. No es necesario hacer el cambio de variables de manera explícita.

Definamos el volumen $\Gamma(\epsilon)$ como el volumen en el espacio de fase de la región definida por la ecuación

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \leq \epsilon. \tag{83}$$

Es decir,

$$\Gamma(\epsilon) = \left(\int d^3r \int d^3p \right)_{H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \leq \epsilon}. \tag{84}$$

No es difícil convencerse y, en todo caso, pueden consultar algún libro, que la densidad de estados es

$$g(\epsilon) = \frac{1}{h^3} \Gamma'(\epsilon). \tag{85}$$

En el problema de la partícula en la caja en un potencial gravitatorio uniforme,

$$\Gamma(\epsilon) = \left(\int d^3r \int d^3p \right)_{\frac{p^2}{2m} + mgu \leq \epsilon}. \quad (86)$$

Sobre la coordenada u hay dos restricciones: u tiene que ser menor o igual que ℓ , la altura de la caja, y $mgu \leq \epsilon$. Esto es,

$$u \leq \min\left(\ell, \frac{\epsilon}{mg}\right). \quad (87)$$

Fijado u , la región de integración en el impulso queda determinada por

$$\frac{p^2}{2m} \leq \epsilon - mgu, \quad (88)$$

lo que define una esfera de radio $(2m)^{1/2}(\epsilon - mgu)^{1/2}$. Entonces,

$$\begin{aligned} \Gamma(\epsilon) &= \frac{4\pi}{3}(2m)^{3/2}L^2 \int_0^{\min(\ell, \frac{\epsilon}{mg})} du (\epsilon - mgu)^{3/2} \\ &= \frac{8\pi}{15}(2m)^{3/2} \frac{L^2}{mg} \begin{cases} \epsilon^{5/2} - (\epsilon - mg\ell)^{5/2}, & \text{si } mg\ell \leq \epsilon; \\ \epsilon^{5/2}, & \text{si } mg\ell > \epsilon. \end{cases} \\ &= \frac{8\pi}{15}(2m)^{3/2} \frac{L^2}{mg} \left[\epsilon^{5/2} - \Theta(\epsilon - mg\ell) (\epsilon - mg\ell)^{5/2} \right]. \end{aligned} \quad (89)$$

Por lo tanto, la densidad de estados es

$$g(\epsilon) = \frac{1}{h^3} \Gamma'(\epsilon) = \frac{4\pi}{3}(2m)^{3/2} \frac{L^2}{h^3 mg} \left[\epsilon^{3/2} - \Theta(\epsilon - mg\ell) (\epsilon - mg\ell)^{3/2} \right]. \quad (90)$$

En acuerdo con el resultado (80), vía la identificación $mg\ell = \epsilon_0$. Si se están preguntando por qué no apareció una delta de Dirac al derivar la función escalón, la respuesta es que esa delta sí apareció, pero multiplicada por una función que se anula allí donde la delta es distinta de cero:

$$\delta(\epsilon - mg\ell)(\epsilon - mg\ell)^{5/2} = 0. \quad (91)$$

La densidad de estados no se necesita para los problemas de las guías, lo que no quiere decir que no se use en mecánica estadística. En otras materias, como Estructura 2, la densidad de estados tiene un rol fundamental, de modo que no es enteramente inútil que vean de qué se trata, aunque no vayamos a darle uso en nuestras prácticas.