Física Teórica 3 – segundo cuatrimestre de 2024

Guía 7: *estadística de Bose–Einstein*

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

2. Escribir las funciones de partición canónicas de 1, 2, 3, 4 y 5 bosones en una trampa armónica de frecuencia angular ω.

3. El objetivo de este problema es razonar en qué condiciones puede haber condensado de Bose–Einstein para el problema de un gas ideal. Una vez obtenido este criterio, no es necesario copiar el modelo de este problema a todos los problemas de Bose–Einstein, simplemente apliquen el criterio deducido aquí. La regla heurística para hacer sumas sobre estados en un sistema de bosones no interactuantes es la siguiente:

$$\sum_{\text{estados}} = \text{término del fundamental} + \text{aproximación semiclásica}.$$

Pueden encontrar una justificación rigurosa en el libro de Pathria y Beale. Adoptaremos esta regla sin mayores escrúpulos, pero reconociendo que esos escrúpulos existen.

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 $d \geqslant 1$. Por analogía con el caso usual, conviene definir una longitud térmica λ proporcional a $\beta^{1/n}$.

b) Cuanto mayor es z, mayor es el número de partículas en cada estado. Si el número de partículas es N, ¿cuál es el valor máximo de z? La respuesta no es $z_{\max} = 1$.

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

d) 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 $z \approx 1 - 1/fN$.

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

f) 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 es infinita, o bien la temperatura debe ser cero. 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.

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

h) 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.

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

j) 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 υ/λ^d. Suponer que υ está fijo y escribir función de la temperatura. Graficar para $d = 3$ y $n = 2$.

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

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

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.

4. 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.

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

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

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 υ y N constantes. Observe qué ocurre al tomar valores de N cada vez mayores.

e) Grafique la $P\upsilon$ como función de υ 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 υ 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.

5. 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,

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

Ver las fórmulas útiles al final de la guía.

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

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

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

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

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

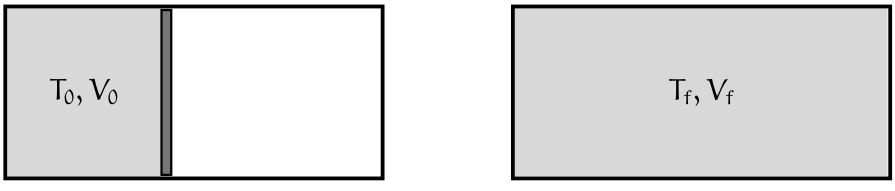
donde $\epsilon_0 = mc^2$, puede resolverse en términos de las funciones de Bose–Einstein.

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. (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 $T_c^{(0)}$. Se define $\alpha = \beta m g \ell$.

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

   $$\lambda_c^3 = \frac{V}{N\alpha_c}\Big[\zeta\big(\tfrac{5}{2}\big) - g_{5/2}(e^{-\alpha_c})\Big],$$

   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 $\big[\alpha_c^{(0)}\big]^{1/2} \ll 1$, entonces la temperatura crítica está dada por

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

   c) Demostrar que la energía es

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

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

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

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,

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

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

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