Física Teórica 3 — 1er. cuatrimestre de 2019

Guía 6: *Estadística cuántica II*

1. *a*) Calcular $\log Z_{\mathrm{GC}}$ para bosones no interactuantes de espín s, contenidos en una caja de volumen V, en d dimensiones y con una relación entre la energía y el impulso $\epsilon(\mathbf{p}) = \alpha p^n$, 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) Encontrar la relación entre la energía media y PV.

   c) Encontrar el máximo valor permitido de z.

   d) Demostrar que la contribución P_0 del nivel fundamental a la presión, que es una función creciente de z, tiende a cero en el límite termodinámico. Es decir, mostrar que $P_0(z) < P_0(z_{\max}) \to 0$ cuando $N \to \infty$ y $\nu = V/N$ se mantiene constante.

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

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

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

   h) El valor de ν/λ^d determinado por la ecuación anterior depende de N y de f. Si al hacer $N \to \infty$ ocurre que $\nu/\lambda^d \to 0$, entonces, para tener una fracción f de partículas en el nivel fundamental, o bien la densidad requerida es infinita (i.e. $\nu = 0$), o bien la temperatura debe tender a cero (i.e. $\lambda \to \infty$). En tales casos, no hay condensado en el límite termodinámico. Analizar lo que ocurre con ν/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 $\nu \leqslant 1$.

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

   j) Siguiendo con el caso anterior: límite termodinámico significa estrictamente $N \to \infty$. Escribir de manera explícita ν/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.

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

   l) Asumiendo que se está en un caso en donde puede haber condensado, encontrar, en el límite termodinámico, la fracción de partículas en el nivel fundamental: i) como función del parámetro ν/λ^d, ii) como función de la temperatura, asumiendo ν constante, iii) como función de ν, asumiendo T constante. Graficar para $d = 3$ y $n = 2$.

   m) Un tratamiento alternativo al anterior para determinar si hay o no condensado consiste en analizar gráficamente la forma que toma la ecuación que determina λ^d/ν como función de z. A partir de la ecuación que determina N como función de z, despejar una ecuación de la forma

$$\frac{\lambda^d}{v} = F(\lambda, N, z), \tag{1}$$

y analizar la gráfica de F, considerada función de z, a medida que el parámetro N se hace más y más grande. En el límite $N \to \infty$, F no es una función propiamente dicha, pero el problema gráfico de encontrar la solución de la ec. (1) continúa estando bien definido. Encontrar la condición para que haya condensado y el valor crítico de λ^d/v en caso de que lo haya.

n)* En la mayoría de los libros se encuentran las siguientes fórmulas, válidas en 3 dimensiones y para $\epsilon = p^2/2m$,

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

Encontrar la generalización de estas fórmulas 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.

ñ)* Encontrar la generalización de las ecs. 12.62 a 12.66 de la 2da. ed. del libro de Huang.

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

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

Esto no pretende ser la ecuación de ningún sistema real, pero se ajusta al objetivo del problema, a saber: ver cómo aparecen las discontinuidades en las funciones termodinámicas (o en sus derivadas) 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, v y T es una cuadrática.

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

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

e) Grafique la Pv como función de v 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 v y N constantes y analice lo que ocurre al tomar valores cada vez mayores de N.

g) *Idem* 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, v 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:

$$g_\nu(z) = z + \frac{z^2}{2^\nu} + \ldots, \qquad g_\nu\left(e^{-\alpha}\right) = \frac{\Gamma(1-\nu)}{\alpha^{1-\nu}} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \zeta(\nu - n)\, \alpha^n.$$

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 experimentalmente obtenida por primera vez en 1995, confinando a las partículas mediante potenciales armónicos. Suponga que las partículas están atrapadas 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 3 números, n_x, n_y y n_z, enteros mayores o iguales que cero, y la energía de cada estado es

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

(El cero de energía se ha redefinido para anular la energía del nivel fundamental.) Los primeros *items* analizan el paso en la suma a una integral; los últimos, la formación del condensado.

a) Escriba el número medio de partículas en los niveles excitados como una suma sobre los estados de una partícula. Ignorando por ahora los problemas asociados al nivel fundamental, ¿qué condición debe pedirse para poder aproximar la suma por una integral?

b) Para pasar de la suma sobre estados a una integral, calcule el número $\Omega(n)$ de estados de una partícula con una dada energía, $E_n = n\hbar\omega$ (que equivale a distribuir n libros iguales en 3 cajas distinguibles), reescriba la suma sobre estados como una suma sobre n con multiplicidad $\Omega(n)$, y, por último, aproxime la suma por una integral, asumiendo que las contribuciones dominantes provienen de términos con $n \gg 1$. El número medio de partículas en los niveles excitados deberá quedar en términos de alguna de las funciones $g_\nu(z)$.

c) (Opcional.) Un método alternativo para transformar la suma en una integral consiste en escribir una integral para cada una de las sumatorias, sobre n_x, n_y y n_z, respectivamente. La integral tridimensional resultante involucra una función de $n_x + n_y + n_z$, y puede reescribirse de manera más sencilla observando que el integrando es constante sobre planos de la forma $n_x + n_y + n_z = c$. En el octante $n_x, n_y, n_z > 0$ estos planos definen triángulos equiláteros de lado c, con normal $(1,1,1)/\sqrt{3}$. Calcule el volumen infinitesimal que corresponde a cada triángulo en términos de c y dc y reescriba la integral como una integral sobre c. Reobtenga así el resultado del *item* anterior.

d) (Opcional.) Un método alternativo para transformar la suma en una integral consiste en aplicar directamente la aproximación semiclásica a la suma sobre estados, haciendo el reemplazo $\sum_{\text{estados}} \to \int \frac{d^3r\, d^3p}{h^3}$. Reobtenga así el resultado de los *items* anteriores.

e) Teniendo en cuenta la población del nivel fundamental y el resultado para el número de partículas en los niveles excitados, escriba la ecuación que relaciona N con z.

f) Aplicando los mismos criterios que en el problema 1 diga si hay o no condensado.

g) Halle la temperatura crítica y discuta el límite termodinámico.

h) Calcule la energía del gas para temperaturas por debajo de la crítica.

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

$$s = (d+1)\frac{\sum_{n=1}^{\infty} n^{-d-1}}{\sum_{n=1}^{\infty} n^{-d}} = (d+1)\frac{\zeta(d+1)}{\zeta(d)}.$$

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

8. Considere un sólido de n dimensiones con excitaciones que tienen una relación de dispersión $\omega = \alpha k^s$, donde ω es la frecuencia angular, k el módulo del vector de onda y α una constante. Cada excitación contribuye a la energía con $\epsilon = \hbar\omega$.

a) Calcule la densidad de estados $g(\omega)$ en la aproximación de Debye, es decir considerando al sólido como continuo. Escriba la expresión para la energía del sistema.

b) Demuestre que para temperaturas muy bajas la dependencia del calor específico con la temperatura es $C_V \sim T^{n/s}$.

c) ¿Cuál es la dependencia de C_V con la temperatura en el límite de temperaturas altas? En el mismo límite, ¿cómo depende de $\hbar$? No hace falta hacer cuentas.

9. En un monocristal de sodio metálico, cada átomo de sodio tiene un solo electrón que contribuye a la conducción. Asuma que los electrones no interactúan entre sí ni tampoco con el cristal, de forma tal que pueden considerarse como libres. La única contribución al calor específico será la proveniente de las vibraciones de la red y de la energía cinética de los electrones de conducción.

a) Encuentre la temperatura de Debye.

b) Encuentre la temperatura de Fermi.

c) ¿Cómo será la dependencia de C_V con la temperatura cuando $T \to 0$?

d) ¿Cuánto valdrá aproximadamente C_V a temperatura ambiente?

Datos:

Densidad del sodio metálico = $1{,}6 \times 10^{23}$ cm^{-3}. Velocidad del sonido en el sodio metálico = 5 km/s. $k = 1{,}4 \times 10^{-23}$J/K, $\hbar = 10^{-34}$ J s. Masa del electrón = $9{,}1 \times 10^{-31}$ kg.