

Aplicaciones del gas de Bose

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 $\xi_i = x_i - x_i^e$

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

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

En coordenadas normales,

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

NB: El número de modos está fijado por el número de sitios de la red, en 3D son $3N$ modos.

Cuantización & estadística

Dado un $\{n_i\}$,

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

$$Z = \prod_{i=1}^{3N} Z_i = \prod_{i=1}^{3N} \sum_{n_i=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega_i (n_i + 1/2)} = \prod_{i=1}^{3N} \frac{e^{-\beta \hbar \omega_i / 2}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_i}}$$

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

» Calor específico

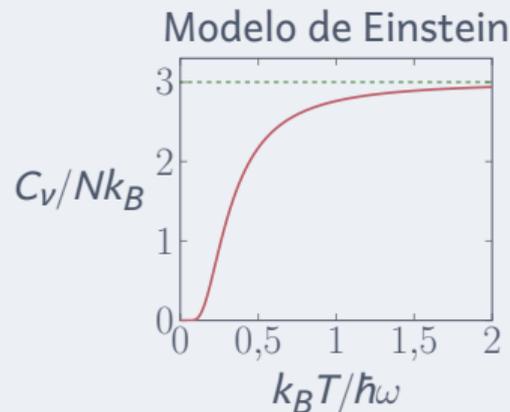
$$C_V(T) = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V = k_B \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\hbar \omega_i}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\beta \hbar \omega_i}}{(e^{\beta \hbar \omega_i} - 1)^2}$$

En 1907, Einstein propuso que $\omega_i = \omega_0, \forall i$. Con eso,

$$C_V = 3Nk_B (\beta \hbar \omega_0)^2 \frac{e^{\beta \hbar \omega_0}}{(e^{\beta \hbar \omega_0} - 1)^2}$$

Con lo cual, a alta T ($\beta \hbar \omega_0 \rightarrow 0$), recuperamos Dulong-Petit $C_V = 3Nk_B$ mientras que a baja T decrece demasiado fuertemente, que no corresponde con la observación experimental.

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,



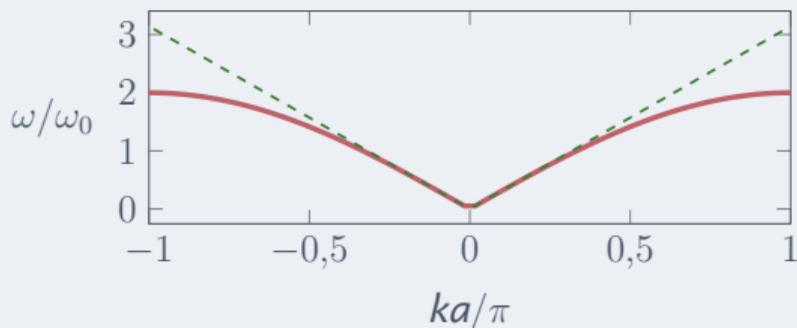
$$H_{1D} = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} m \dot{\xi}_j^2 + \sum_{j=1}^N \frac{m\omega_0^2}{2} (\xi_j - \xi_{j-1})^2 \Rightarrow m\ddot{\xi}_j = -m\omega_0^2 (2\xi_j - \xi_{j-1} - \xi_{j+1})$$

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

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

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

$\omega \simeq c_s k$ con c_s la velocidad del sonido.



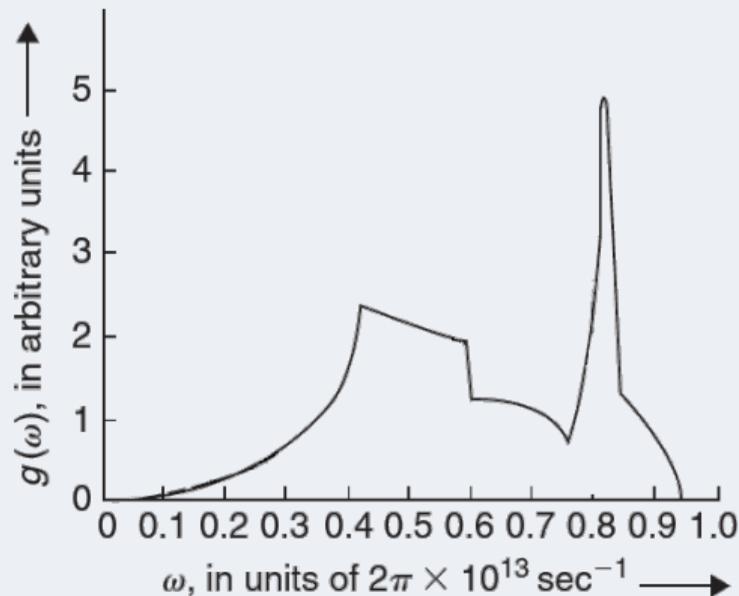
» En 3D

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

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

conduce a un sistema de autovalores y autovectores,

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



» Modelo de Debye en 3D (1912)

Supongamos que vibra como un continuo en donde $\omega_k = c_s k$, así podemos obtener la densidad de modos $g(\omega)$. Pero, además de la dirección de propagación \mathbf{k} , las fluctuaciones tienen una polarización o dirección. Por lo tanto, el estado se caracteriza por \mathbf{k} y polarización,

$$3 \frac{V}{(2\pi)^3} d^3 k = g(\omega) d\omega$$
$$3 \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk = 3 \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \frac{\omega^2}{c_s^3} d\omega = g(\omega) d\omega$$

O sea, $g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{c_s^3}$, como además el número total de estados debe ser $3N$, esta aproximación impone una frecuencia máxima ω_D donde tiene validez.

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = 3N \quad \Rightarrow \quad \omega_D = c_s (6\pi^2 n)^{1/3}$$

Que nos permite escribir directamente $g(\omega) = 9N \frac{\omega^2}{\omega_D^3}$.

» Energía y calor específico

$$C_v(T) = 3Nk_B \frac{3}{(\beta\hbar\omega_D)^3} \int_0^{\beta\hbar\omega_D} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx,$$

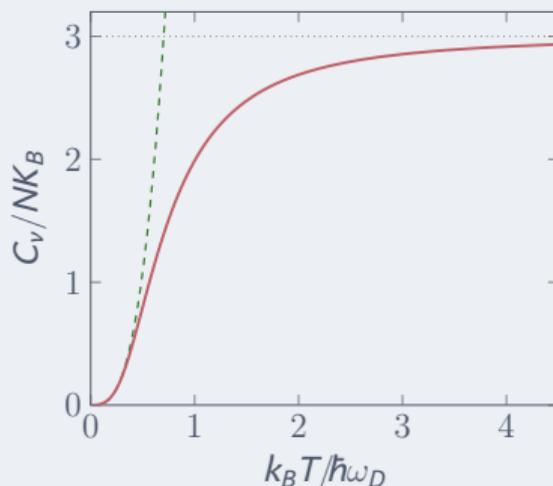
$$U(T) = \{ \} + \frac{k_B T}{(\beta\hbar\omega_D)^3} 9N \int_0^{\beta\hbar\omega_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

- 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. En sus modos normales,

$$H_q = \sum_{k,\alpha} \hbar c k \left(n_\alpha(k) + \frac{1}{2} \right)$$

- Momento: $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$
- Energía: $\hbar \omega = \hbar c k$
- polarización α ; 

Como en los fonones, calculamos la energía media y el calor específico 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

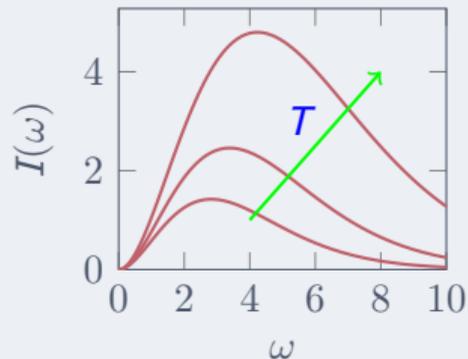
» La densidad de energía

La densidad de energía de los estados excitados es

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

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

$$\langle c_\perp \rangle = c \frac{\int_D d\Omega \cos \theta}{4\pi} = \frac{c}{4} \quad I = \sigma T^4, \quad \text{con} \quad \sigma = \frac{\pi^2 k_B^4}{60 \hbar^3 c^3} \quad \text{Ley de Stefan}$$



Rayleigh-Jeans ($\beta\hbar\omega \ll 1$)

$$u \sim k_B T \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}$$

Wien ($\beta\hbar\omega \gg 1$)

$$u \sim \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} e^{-\beta\hbar\omega}$$