Gas de Bose

Lectura: R. K. Pathria & P. D. Beale, Cap. 7.

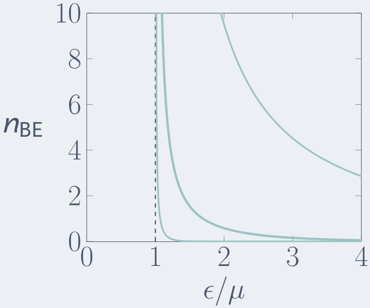
» Gas de partículas idénticas

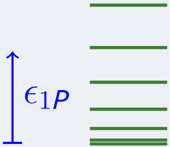
Para bosones,i.e., spin entero, idénticos, la función de partición

$$\ln Z_{GC} = -\sum_{1P} \ln\left[1 - \underbrace{z e^{-\beta\epsilon_{1P}}}_{<1 \Rightarrow \mu \leq \epsilon_{1P}}\right]$$

Gran Potencial $\quad -\beta\Omega = \ln Z_{GC} \qquad \beta p V = \ln Z_{GC}$

$$n_{\mathrm{BE}}(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1}$$





» Ocupación del estado fundamental

Llamamos $N_0 = n_{\mathrm{BE}}(\epsilon = \epsilon_0)$

$$N_0 = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_0 - \mu)} - 1} = \frac{1}{\widetilde{z}^{-1} - 1} = \frac{\widetilde{z}}{1 - \widetilde{z}} \quad \Rightarrow \quad \widetilde{z} = \frac{N_0}{N_0 + 1} = 1 - \frac{1}{N_0 + 1} < 1$$

Dado que n_{BE} crece muy fuertemente cerca de $\epsilon = \mu$, alcanzando valores que pueden ser macroscopicos, no siempre válido/preciso hacer el reemplazo $\sum_{1P}() \to \int()$. Sin embargo, excluyendo del reemplazo el estado fundamental ϵ_0, logramos una mucho mejor aproximación. Es decir, para un gas de Bose tomamos la prescripción de

$$\sum_{1P}() = ()_{\epsilon_0} + \sum_{\epsilon > \epsilon_0}{}' = ()_{\epsilon_0} + \int_{\epsilon > \epsilon_0} ()$$

Veamos como funciona

» El gas en 3D con $H = p^2/(2m)$

En este caso, $\epsilon_0 = 0$ y $\tilde{z} = z$. La ecuación de estado,

$$\beta p V = \ln Z_{GC} = -\ln(1-z) - \sum_{p}{}' \ln\left(1 - z\,e^{-\beta\,p^2/(2m)}\right)$$

El término de la suma lo integramos,

$$-\sum_{p,s}{}' \ln\left(1 - ze^{-\beta p^2/(2m)}\right) = -\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} g_s \int d^3p \ln\left(1 - z\,e^{-\beta p^2/(2m)}\right)$$

$$= -\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} g_s \int_0^\infty 4\pi p^2 dp \ln\left(1 - z\,e^{-\beta\,p^2/(2m)}\right)$$

$$= \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} g_s \int_0^\infty 4\pi \frac{p^3}{3} \frac{ze^{-\beta p^2/(2m)}}{1 - ze^{-\beta p^2/(2m)}} \frac{\beta p}{m}$$

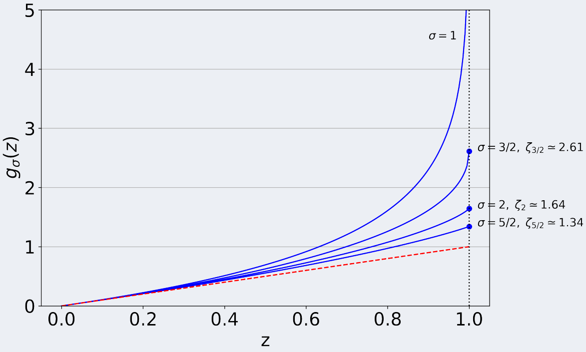
$$= \boxed{g_s \frac{V}{\lambda^3}\, g_{5/2}(z)}$$

Análogamente a las funciones de Fermi, definimos las funciones de Bose

$$g_\sigma(z) = \frac{1}{\Gamma(\sigma)} \int_0^\infty \frac{x^{\sigma-1}}{z^{-1}e^x - 1} = \sum_{l\geq 1} \frac{z^l}{l^\sigma}$$

Propiedades

- $g_\sigma(z) \simeq z$ para $z \ll 1$ (límite clásico).
- $g'_\sigma(z) = g_{\sigma-1}(z)/z$.
- $g_\sigma(z) < g_{\sigma-1}(z)$.



$$\beta p V = g_s \frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - g_s \ln(1-z)$$

como $z = 1 - /(N_0+1)$, el término $-g_s \ln(1-z) = g_s \ln(N_0+1)$ y por lo tanto la presión

$$p = g_s \frac{k_B T}{\lambda^3} g_{5/2}(z) + g_s k_B T \frac{\ln(N_0+1)}{V}.$$

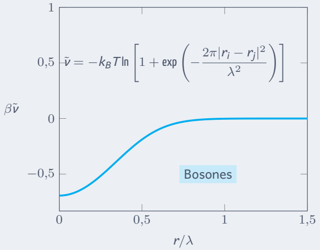
Así, en el límite termodinámico ($V \to \infty, N \to \infty$, n finito), $\ln(N_0+1)/V \to 0$ y alcanza con quedarse con la presión de los estados excitados. En general, en función de T, podemos decir

A alta T, $g_\sigma \sim z$

$$\frac{pV}{N} = k_B T \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \sim k_B T$$

A baja T, $z \lesssim 1$ $\quad \dfrac{pV}{N k_B T} = \dfrac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} < 1$

consistente con la interpretación de un potencial estadístico atractivo para bosones.



» La condensación de Bose-Einstein

$$N = N_0 + g_s \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(z) < N_0 + g_s \frac{V}{\lambda^3} \zeta_{3/2} \qquad \text{con} \quad \zeta_\sigma = g_\sigma(z=1) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^\sigma}$$

Donde acotamos la $g_{3/2}(z)$ por $\zeta_{3/2}$ ya que $0 \leq z \lesssim 1$. Así, observamos que

$$\frac{N_0}{N} \geq 1 - \frac{g_s V}{\lambda^3 N} \zeta_{3/2}$$

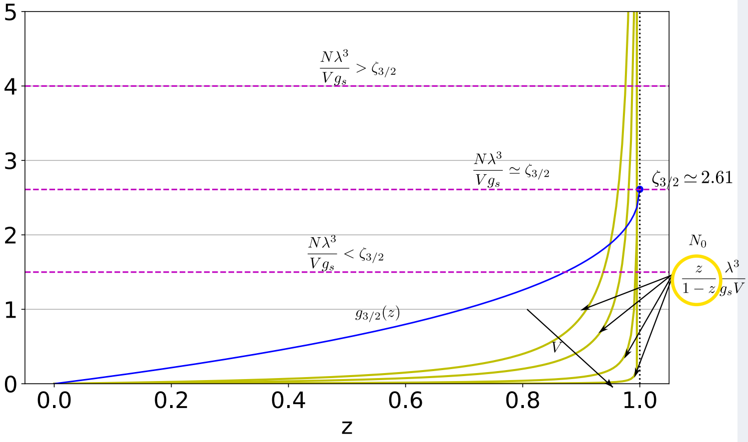
» La condensación de Bose-Einstein (cont.)

Esto ya muestra que a medida que baje la temperatura (o aumente n), la fracción N_0/N se acerca a 1. En el límite termodinámico, esa cota se vuelve igualdad.
Veamos mejor, reescribamos la ecuación de N

$$\frac{n\lambda^3}{g_s} = g_{3/2}(z) + \frac{\lambda^3}{V}\frac{N_0}{g_s}$$

La solución, z, de esta ecuación se puede analizar gráficamente.

» La condensación de Bose-Einstein (cont.)



Las líneas rayadas horizontales representan el valor que deben sumar la línea azul ($g_{3/2}(z)$) más una línea amarilla (para distintos V).
Así vemos que cuanto más grande sea V, la solución para $N\lambda^3/(Vg_s) < \zeta_{3/2}$ se aproxima muy bien con la igualdad

$$N = g_s \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(z) \quad \text{y} \quad N_0 \simeq 0$$

Mientras que para $N\lambda^3/(Vg_s) > \zeta_{3/2}$, la contribución de $g_{3/2}(z)$ está clavada en $\zeta_{3/2}$ y entonces

$$N = N_0 + g_s \frac{V}{\lambda^3} \zeta_{3/2}$$

Entonces, en el límite termodinámico la condición crítica donde N_0 comienza a aumentar sustancialmente es,

$$N = g_s \frac{V}{\lambda^3} \zeta_{3/2}$$

Dependiendo si T o N/V se mantienen constantes, esto define una densidad o temperatura crítica.

A T constante

Podemos aumentar el N del sistema,

$$n_c(T) = \frac{\zeta_{3/2} g_s}{\lambda^3} \propto T^{3/2}$$

A N constante

Podemos bajar T del sistema,

$$T_c(n) = \frac{h^2}{2\pi\, m\, k_B} \left(\frac{n}{\zeta_{3/2}\, g_s} \right)^{2/3} \propto n^{2/3}$$

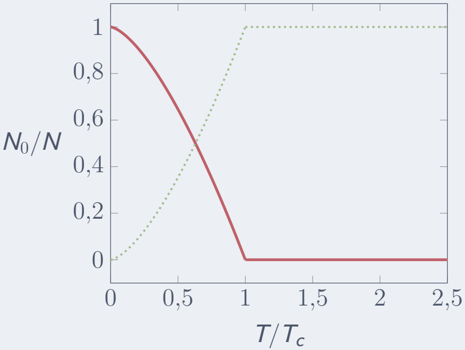
» En resumen: La fracción condensada

En general,

$$N = N_0 + N_{\text{ex}}, \qquad N_{\text{ex}} = g_s \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(z), \qquad \frac{N_0}{N} = 1 - \frac{g_{3/2}(z)}{n\lambda^3/g_s}$$

Para un sistema macroscópico,

$$\frac{N_0}{N} = \begin{cases} 1 - \left[\dfrac{T}{T_c(n)}\right]^{3/2} & T < T_c \\ 0 & T > T_c \end{cases}$$



» El calor específico

Veamos el calor específico para N grande, en donde $U = \frac{3}{2}pV$ (mostrarlo!)

Si hay condensado importante ($T \ll T_c$)

$$z = 1 - \frac{1}{N_0 + 1} \simeq 1$$

$p = \frac{g_s}{\lambda^3} k_B T \zeta_{5/2} \propto T^{5/2}$ $\Rightarrow$ $U/N \propto T^{5/2}$ Por lo tanto $C_v^{\mathrm{BE}} \propto T^{3/2}$.

Si no hay condensado

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{2} k_B T \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)}$$

Derivando a N fijo y recordando que $z = z(T, N)$

$$\left.\frac{\partial(U/N)}{\partial T}\right|_N = \frac{3}{2}k_B\frac{g_{5/2}}{g_{3/2}} + \frac{3}{2}k_B T\left(\frac{g'_{5/2}}{g_{3/2}} - \frac{g_{5/2}}{g_{3/2}^2}g'_{3/2}\right)\frac{\partial z}{\partial T}$$

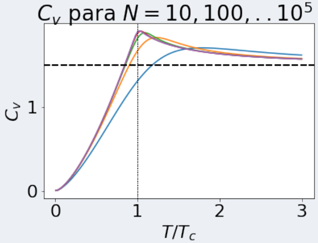
$$= \frac{3}{2}k_B\frac{g_{5/2}}{g_{3/2}} + \frac{3}{2}k_B T\left(1 - \frac{g_{5/2}}{g_{3/2}^2}g_{1/2}\right)\frac{1}{z}\frac{\partial z}{\partial T}$$

Para encontrar $\partial z/\partial T$ usamos la ecuación de N (teniendo en cta $N_0 \simeq 0$).

$$\lambda^3 n = g_{3/2}(z) \rightarrow \frac{\partial}{\partial T}(\lambda^3 n) = g'_{3/2}(z)\frac{\partial z}{\partial T} = \frac{g_{1/2}(z)}{z}\frac{\partial z}{\partial T}$$

y además

$$\frac{\partial(\lambda^3 n)}{\partial T} = -\frac{3}{2}\frac{\lambda^3}{T}n = -\frac{3}{2T}g_{3/2}(z)$$



Juntando todo

$$c_v = \left.\frac{\partial(U/N)}{\partial T}\right|_N = \frac{3}{2}k_B\frac{g_{5/2}}{g_{3/2}} - \frac{9}{4}k_B\frac{g_{3/2}}{g_{1/2}} + k_B\frac{9}{4}\frac{g_{5/2}}{g_{3/2}}$$

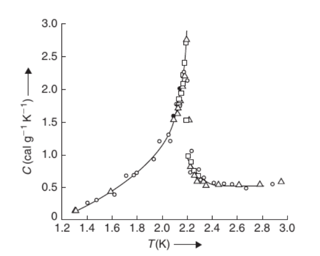
Para $T \gtrsim T_c$ todavía puedo tomar $z = 1^-$, así

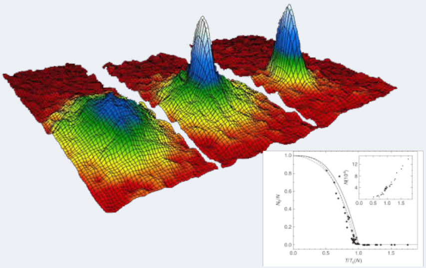
$$\frac{c_v(T = T_c^+)}{k_B} = \frac{3}{2}\frac{\zeta_{5/2}}{\zeta_{3/2}} + \frac{9}{4}\frac{\zeta_{5/2}}{\zeta_{3/2}} = \frac{15}{4}\frac{\zeta_{5/2}}{\zeta_{3/2}} \simeq 1{,}9 > 3/2 \quad \text{límite clásico}$$

Lo cual demuestra que el c_v tiene un pico.

Experimentos en ^{4}He alrededor 1930-1940.

- Similitud en la forma del C_v
- Relación entre superfluidez y condensación de Bose-Einstein.
- El ^{4}He es un líquido cuántico (interactuante!).





Experimentos en gases de átomos ultra fríos (1995+)

- Interacciones débiles (pero con efectos visibles).
- Sistemas confinados, $V_{\mathrm{ext}} = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$.
- Condensados casi puros.

» ¿Cómo lo tratamos en general?

Si tenemos un sistema de partículas (bosones o fermiones), con un $H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$ podemos realizar una aproximación del continuo para la densidad de estados de 1P $g(\epsilon)$

$$\frac{d^3p\, d^3r}{h^3} = g(\epsilon)d\epsilon \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{g(\epsilon) = \int \frac{d^3p\, d^3r}{h^3}\, \delta\left(\epsilon - H(r,p)\right)}$$

Usando la forma de H puedo integrar explícitamente en p y obtenemos

$$g(\epsilon) = \frac{4\pi m}{h^3} \int \sqrt{2m(\epsilon - V(r))}\Theta(\epsilon - V(r))d^3r$$