

Trabajo práctico N° 9
Gas de Bose - 27/06/19

Estudiaremos en esta guía sistemas de partículas indistinguibles, no interactuantes, de spin entero. Los mismos son descriptos por la distribución de Bose que estudiamos en una práctica anterior. Viene dada por:

$$\langle n_s \rangle = \frac{1}{\exp[\beta(\epsilon_s - \mu)] - 1}.$$

Acá, n_s es el número de ocupación de un estado con números cuánticos s ; μ y β fijan el valor medio del número de partículas $\langle N \rangle = \sum_s \langle n_s \rangle$ y el valor medio de la energía $\langle E \rangle$ respectivamente. Cuando la distancia entre números s se hace muy pequeña (como sucede con los impulsos para un gas encerrado en un volumen V macroscópico) podemos escribir las sumatorias anteriores como integrales:

$$\langle N \rangle \approx \int \frac{1}{\exp[\beta(\epsilon_s - \mu)] - 1} g(s) ds$$

Dado que la distribución de Bose incluye ahora un denominador que puede anularse, habrá que tener mucho cuidado al tomar el límite continuo, como ha sido ya discutido en la teoría. (*Importante:* el paso al continuo no debe ser confundido de ninguna manera con el límite clásico –que también incluye integrales– en el que los números cuánticos son reemplazados por posiciones e impulsos, y el operador densidad \hat{D} por la densidad de probabilidad $D_N(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N)$).

Bibliografía sugerida: R. K. Pathria, K. Huang, R. Balian. Si no recordara bien la teoría para modos normales puede recurrirse a un libro de mecánica clásica, o al Cohen-Tanoudji.

Gas de partículas de Bose. Comenzamos estudiando gases de bosones convencionales, donde las partículas materiales que los componen son bosones.

Problema 1. [*Gas de Bose en 2D*] Es posible obtener un gas de Bose constreñido a moverse en dos dimensiones adsorbiendo (como en el último ejercicio de la práctica de ensamble Gran Canónico) átomos de ^4He en la superficie de otro material (por ejemplo, grafito).

a) Muestre que en este caso bidimensional, la densidad media de partículas puede escribirse como:

$$\frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty \frac{ze^{-x}}{1 - ze^{-x}} dx$$

b) La integral anterior puede hacerse con facilidad haciendo una sustitución sencilla. Resuelva esta integral (obteniendo que $\frac{\langle N \rangle}{V} = -\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \log(1 - z)$) y muestre a partir de ella que un gas ideal bidimensional de bosones no presenta condensación de Bose–Einstein.

Problema 2. Considere un gas ideal de Bose–Einstein en tres dimensiones, compuesto de moléculas independientes de masa m que tienen un grado interno de libertad. Los bosones en el estado fundamental tienen energía $\epsilon_0 = p^2/2m$ y en el estado excitado $\epsilon_1 = p^2/2m + \Delta$. Calcule la temperatura de condensación para $\Delta \gg kT_c^0$ y para $\Delta \ll kT_c^0$, donde T_c^0 es la temperatura de condensación del gas sin considerar el grado de libertad interno. La existencia de un grado interno de libertad, ¿aumenta o disminuye la temperatura de condensación? *Ayuda:* en un apéndice del Pathria puede encontrar formas asintóticas para $g_{\frac{3}{2}}(z)$ que serán de utilidad.

Problema 3. *La condensación de Bose como una transición de fase* La condensación de Bose suele ser entendida como una transición de fase —muy especial, dado que no hay interacciones entre partículas— de primer orden. Vista desde las ecuaciones de estado, esta no es muy distinta de la que sucede durante la condensación de un gas (g , en este caso el gas de Bose) en un líquido (l , el *condensado* conformado por partículas de impulso nulo).

a) Aún siendo cierto lo anterior, explique por qué suele decirse que la condensación sucede en el espacio de impulsos, y no necesariamente en el de posiciones.

b) Muestre que, para temperaturas $T < T_c$ (o volúmenes específicos $v = V/N < v_c$) la presión depende solamente de la temperatura.

c) Dibuje la curva crítica P vs. v_c , y una isoterma P vs. v en el intervalo $(0, v_c)$. Compare a esta última con las isotermas que se obtienen para una transición líquido-gas en la región de coexistencia.

ch) Pese a que el volumen por partícula v puede variar continuamente a lo largo de una isoterma en una transición de fase primer orden, lo que sucede en realidad es que $v = xv_l + (1-x)v_g$, siendo las $x_i = N_i/N$ las fracciones, y los v_i los volúmenes específicos (distintos) de cada fase. ¿Cuánto valdrían en el caso de la transición de Bose v_g (el volumen específico del gas de Bose usual) y v_l (el correspondiente a las partículas en el condensado)? Vincular esto último con lo encontrado en el punto b) Evaluar el cambio discontinuo que sufre el volumen específico, $\Delta v = v_l - v_g$.

d) Mostrar que por debajo de T_c la concentración de la fase condensada varía con la temperatura (a densidad fija) como $x \equiv \langle \frac{N_0}{N} \rangle = 1 - (\frac{T}{T_c})^{3/2}$; graficar.

e) Utilizando la ecuación de Clausius–Clapeyron sobre la curva de coexistencia $P_c(T)$ de un gas ideal de Bose–Einstein y conociendo Δv del punto anterior, encuentre la discontinuidad en la entropía ΔS al cruzar la línea de transición $P_c(T)$. (Este cambio en la entropía coincide con el que calculamos en la teoría a partir de la entropía, con lo que la interpretación de la condensación de Bose como una transición de fase de primer orden es consistente).

Modos de vibración en un sólido. En este ejemplo, no son las partículas que conforman el sistema (los átomos del cristal) las que obedecen la estadística de Bose, sino las *excitaciones* de ese sistema. Serán entidades (llamadas a veces *cuasipartículas*) cuyo número no se conserva, sin masa y sin existencia fuera de la red que les da origen; son una consecuencia del comportamiento colectivo del cristal. Es una idea que se utiliza recurrentemente en sistemas de muchas partículas interactuantes: las partículas reales (que interactúan entre sí) son reemplazadas por otras *no interactuantes*, más complicadas que las anteriores, pero que permiten describir al sistema de una forma más sencilla.

Problema 4. Un cristal formado por N átomos tiene $d \times N$ modos normales, donde d es la dimensión del espacio. En la aproximación armónica, la energía vibracional es $E = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{\mathbf{k}} + E_0$, donde E_0 es la energía del estado fundamental y $\omega_{\mathbf{k}}$ son las frecuencias de los modos normales. Estos modos se corresponden a ondas planas propagándose en el cristal (es decir, no localizadas en el espacio), caracterizadas por $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}(m_x, m_y, m_z)$ (el número de ondas de las vibraciones), con $m_i = 0, 1, \dots$ (en $d = 3$); $n_{\mathbf{k}}$ es el número cuántico asociado a esas oscilaciones armónicas (cuenta el número de *fonones* con energía $\hbar \omega_{\mathbf{k}}$ e “impulso cristalino” $\hbar \mathbf{k}$); L es la longitud del sistema y se han impuesto condiciones periódicas de contorno.

a) Calcule la función de partición canónica \mathcal{Z}_N . Muestre que \mathcal{Z}_N es la función de partición de un gas ideal de bosones de energía $\hbar \omega_{\mathbf{k}}$ (llamaremos *fonones* a estas partículas), con $\mu = 0$. Quizá valga la pena repetir que N es el número de átomos que conforman al cristal (y no el número de bosones). *Ayuda:* Comience preguntándose cómo es en este sistema una configuración (que fija o especifica completamente el microestado del sistema), y luego encuentre \mathcal{Z}_N sumando sobre todas estas configuraciones.

- b) Generalmente, la energía debida a las vibraciones de la red es la máxima contribución a la capacidad calorífica de un sólido. En cristales aislantes no magnéticos, es la única contribución. Conceptualmente, podemos pensar al cálculo de la energía debida a fonones como dividido en dos partes. En primer lugar, hay que calcular la contribución de cada modo de oscilación, definido por \mathbf{k} y $\omega_{\mathbf{k}}$. En este sentido, muestre que la energía y el calor específico están dados por

$$U = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{e^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}}} - 1}$$

$$C_V = \frac{1}{kT^2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2\omega_{\mathbf{k}}^2 e^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}}}}{(1 - e^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}}})^2}$$

En base a la expresión de U , especifique el número medio de ocupación de un dado modo, $\langle n_{\mathbf{k}} \rangle$

Para volúmenes grandes es posible escribir las sumatorias anteriores como integrales en el espacio de impulsos, recurriendo a la densidad de estados en este espacio. Si conocemos la relación de dispersión, estas, a su vez, pueden escribirse como integrales sobre las energías o frecuencias, recurriendo a la densidad de estados $g(\omega)$. En este caso, las ecuaciones anteriores se escriben,

$$U = E_0 + \int_0^{\omega_m} d\omega g(\omega) \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$$

$$C_V = \frac{1}{kT^2} \int_0^{\omega_m} d\omega g(\omega) \frac{\hbar^2\omega^2 e^{\beta\hbar\omega}}{(1 - e^{\beta\hbar\omega})^2}$$

donde ω_m es la frecuencia máxima dada por $\int_0^{\omega_m} g(\omega) d\omega = dN$.

- c) *Sólido de Einstein* La segunda etapa del cálculo consiste en realizar la suma sobre la distribución en frecuencia de los modos. Esto implica conocer a la relación de dispersión para poder calcular $g(\omega)$. El sólido de Einstein, que hemos visto ya en prácticas anteriores, consiste en simplificar al extremo esta segunda parte. Einstein supuso que los $d \times N$ modos del sólido oscilaban a la misma frecuencia ω_E . Encontrar, en esta aproximación, la energía media del sistema $\langle H \rangle$ y el calor específico C_V , y graficar éste último en función de T , destacando los límites de alta y baja temperatura. Notar que, a temperaturas lo suficientemente bajas ($T \ll T_E \equiv \hbar\omega_E/k_B$) el sistema se parecerá a un sistema de dos niveles (con un gap $\Delta = \hbar\omega_E$), por lo que C_V decrecerá exponencialmente con la temperatura. Esto contrasta con las medidas experimentales en las que se ve que $C_V \propto T^3$ a baja temperatura.
- d) *[Sólido de Debye]* De una manera más realista, Debye aproximó las vibraciones normales de los átomos del sólido con vibraciones elásticas de un cuerpo continuo isótropo (Pregunta: ¿por qué esto es solamente una aproximación?) Siguiendo esa idea, suponga ahora que la relación entre $\omega_{\mathbf{k}}$ y \mathbf{k} (*relación de dispersión*) es $\omega_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k}|$ hasta una frecuencia máxima ω_D , y que a partir de ella no hay más modos. (¿Con quién se relacionará c ? Comience determinando sus unidades).

Calcule $g(\omega)$ para $d = 1, 2$ y 3 . En el caso especial $d = 3$ utilice estos resultados en las fórmulas anteriores y encuentre

$$C_V = \frac{3Vk^4}{2\pi^2 c^3 \hbar^3} T^3 \int_0^{T/\Theta_D} dt \frac{t^4 e^t}{(e^t - 1)^2},$$

donde $\Theta_D = \omega_D/k\hbar$ y $\omega_D = (6\pi^2\rho)^{1/3}c$ (llamadas temperatura y frecuencia de Debye). Muestre que $C_V \rightarrow \text{cte}$ cuando $T \gg T_D$ y $C_V \sim T^3$ cuando $T \rightarrow 0$.

Nota 1: Si sus cuentas difieren en un factor del valor de C_V y θ_D , no desespere: recuerde que para cada modo de vibración (a diferencia de las ondas Hertzianas, que son transversales) hay dos modos transversales y uno longitudinal; la densidad de estados es entonces 3 veces más densa de lo que quizá supuso.

Nota 2: Elementos como el telurio y el selenio forman estructuras en las que los átomos se ordenan en cadenas atómicas. Lo mismo sucede con algunos tipos de moléculas. Similarmente, el grafito se comporta como un sistema bidimensional.