

Física Estadística

Relación 7: Gases cuánticos

Problema 1. Consideremos un sistema formado por dos partículas, cada una de las cuales puede estar en tres estados cuánticos de energías respectivas 0 , ε y 3ε . El sistema está en equilibrio a temperatura T . Escriba todos los términos de la función de partición canónica cuando las partículas satisfacen:

1. La estadística clásica de Maxwell-Boltzmann
2. La estadística Bose-Einstein
3. La estadística Fermi-Dirac

La función de partición canónica es

$$Z(T, V, N) = \sum_{\alpha} e^{-\beta H(\alpha)} = \sum_{\varepsilon} \Omega(\varepsilon) e^{-\beta \varepsilon}$$

i.e. la suma (discreta o continua, dependiendo del problema) sobre posibles microestados α del sistema de $e^{-\beta H(\alpha)}$, siendo $H(\alpha)$ el hamiltoniano del sistema en el microestado α y $\beta = 1/k_B T$, o equivalentemente la suma sobre posibles energías ε de $e^{-\beta \varepsilon}$ por el número de microestados $\Omega(\varepsilon)$ con energía ε . Para resolver este problema hemos de tener en cuenta las características de cada tipo de estadística, y en particular cómo se define el microestado en cada caso. De este modo:

1. Clásicamente, en el caso de la estadística de Maxwell-Boltzmann (MB), el microestado viene dado por el estado de cada partícula (las partículas se tratan como distinguibles), por lo que podemos encontrar en un mismo estado un número cualquiera de partículas.
2. A nivel cuántico, el microestado vendrá dado por los números de ocupación de los diferentes niveles de energía. En el caso de la estadística de Bose-Einstein (BE), debido a la simetría de la función de onda bajo intercambio de partículas, sabemos que el número de partículas en cada estado cuántico es arbitrario ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$).
3. En la estadística de Fermi-Dirac (FD), las partículas cumplen el principio de exclusión de Pauli debido a la antisimetría de la función de onda bajo intercambio de partículas, de forma que sólo puede haber una partícula, como mucho, en cada estado cuántico ($n = 0, 1$).

La siguiente tabla muestra cómo podemos colocar las partículas en los distintos estados energéticos, contando la degeneración de cada nivel de energía, i.e. el número de microestados posibles compatibles con cada energía total (y que dependerá del tipo de estadística que tengamos):

POSIBLES ESTADOS (Energía)			Número de estados		
0	ε	3ε	MB	BE	FD
xx			1	1	-
	xx		1	1	-
		xx	1	1	-
x	x		2	1	1
x		x	2	1	1
	x	x	2	1	1

Las primeras tres entradas de la tabla se refieren a microestados donde tenemos a las dos partículas conviviendo en el mismo estado cuántico (la energía total es 0, 2ε o 6ε). Dichos microestado están prohibidos por el principio de exclusión de Pauli para fermiones, mientras que son posibles en el caso de bosones y partículas clásicas. Las siguientes tres entradas de la tabla (con energía total ε , 3ε o 4ε) se refieren a microestados donde las dos partículas están distribuidas en estados diferentes, y son compatibles con los tres tipos de estadística que estamos tratando. Desde el punto de vista cuántico cada uno de estos microestados tiene degeneración 1, mientras que clásicamente podemos intercambiar las partículas dando lugar a un microestado diferente, por lo que la degeneración en este caso es 2. Puesto que la función de partición canónica se escribe como

$$Z = \sum_{\varepsilon} \Omega(\varepsilon) e^{-\beta\varepsilon}$$

a partir de la tabla podemos escribir para cada tipo de estadística

$$\begin{aligned} Z_{\text{MB}} &= 1 + e^{-2\beta\varepsilon} + e^{-6\beta\varepsilon} + 2e^{-\beta\varepsilon} + 2e^{-3\beta\varepsilon} + 2e^{-4\beta\varepsilon} \\ Z_{\text{BE}} &= 1 + e^{-2\beta\varepsilon} + e^{-6\beta\varepsilon} + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-3\beta\varepsilon} + e^{-4\beta\varepsilon} \\ Z_{\text{FD}} &= e^{-\beta\varepsilon} + e^{-3\beta\varepsilon} + e^{-4\beta\varepsilon} \end{aligned}$$

Problema 2. Se tiene un sistema formado por N moléculas ($N \gg 1$) con tres niveles de energía para cada molécula dados por $\varepsilon_1 = 0$, $\varepsilon_2 = \varepsilon$ y $\varepsilon_3 = 10\varepsilon$.

1. Suponiendo que la temperatura es muy baja, demuestre que únicamente los niveles 1 y 2 están poblados cuando $T < T_c$, donde $T_c \approx \frac{10\varepsilon}{k_B \ln N}$ define una temperatura umbral de población para el nivel 3.
2. Demuestre que la capacidad calorífica por molécula, c_V , es proporcional a T^{-2} para temperaturas muy altas, mientras que para temperaturas muy bajas es proporcional a $T^{-2}e^{-\beta\varepsilon}$.

Apartado 1. La función de partición canónica para una molécula es

$$Z_1 = 1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-10\beta\varepsilon}$$

Por tanto, la probabilidad de encontrar una molécula en cada nivel (suponiéndolas independientes) se escribe como

$$P_1 = \frac{1}{1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-10\beta\varepsilon}}, \quad P_2 = \frac{e^{-\beta\varepsilon}}{1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-10\beta\varepsilon}}, \quad P_3 = \frac{e^{-10\beta\varepsilon}}{1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-10\beta\varepsilon}}$$

A partir de aquí podemos escribir el número medio de partículas en el tercer nivel de energía como será,

$$\langle n_3 \rangle = NP_3 = \frac{Ne^{-10\beta\varepsilon}}{1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-10\beta\varepsilon}}$$

En general, la probabilidad de ocupación P_3 del tercer nivel excitado será mucho más baja que la probabilidad de ocupación de los otros dos niveles, debido a la gran diferencia en energía, y consecuentemente el número medio de ocupación del tercer nivel estará muy por debajo de los otros dos. Definimos la temperatura umbral de población para el nivel 3, T_c , como aquella temperatura para la cual $\langle n_3 \rangle = 1$, i.e. la temperatura a la cual el tercer nivel tiene al menos una partícula en promedio. Definiendo $\beta_c = 1/k_B T_c$, la ecuación para hallar T_c es

$$\frac{Ne^{-10\beta_c\varepsilon}}{1 + e^{-\beta_c\varepsilon} + e^{-10\beta_c\varepsilon}} = 1 \quad \Rightarrow \quad N = e^{10\beta_c\varepsilon} (1 + e^{-\beta_c\varepsilon} + e^{-10\beta_c\varepsilon})$$

De esta ecuación vemos que el valor de β_c será del orden de $\ln N$. En un sistema macroscópico, con $N \gg 1$, tendremos por tanto que $\beta_c \gg 1$, por lo que podemos aproximar la ecuación anterior como $N \approx e^{10\beta_c\varepsilon}$, de donde

$$T_c \approx \frac{10\varepsilon}{k_B \ln N}$$

Apartado 2. Para calcular el calor específico, debemos hallar primero la energía media por molécula

$$\langle e \rangle = \frac{\langle E \rangle}{N} = - \left(\frac{\partial \ln Z_1}{\partial \beta} \right) = \varepsilon \frac{e^{-\beta\varepsilon} + 10e^{-10\beta\varepsilon}}{1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-10\beta\varepsilon}}$$

La capacidad calortífica por molécula será por tanto

$$c_V = \left(\frac{\partial \langle e \rangle}{\partial T} \right)_V = -\frac{1}{k_B T^2} \left(\frac{\partial \langle e \rangle}{\partial \beta} \right)_V$$

Haciendo ahora la derivada de la expresión para $\langle e \rangle$, obtenemos

$$c_V = \frac{1}{k_B T^2} \left[\varepsilon^2 \frac{100e^{-10\beta\varepsilon} + e^{-\beta\varepsilon}}{1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-10\beta\varepsilon}} + \varepsilon^2 \frac{(e^{-\beta\varepsilon} + 10e^{-10\beta\varepsilon})^2}{(1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-10\beta\varepsilon})^2} \right]$$

de donde llegamos a

$$c_V = \frac{\varepsilon^2}{k_B T^2} e^{-\beta\varepsilon} \frac{1 + 100e^{-9\beta\varepsilon} + 81e^{-10\beta\varepsilon}}{(1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-10\beta\varepsilon})^2}$$

A partir de esta expresión, es fácil ver que en el límite de altas temperaturas, cuando $\beta\varepsilon \ll 1$, tendremos que

$$c_V \propto T^{-2}$$

mientras que en el límite de bajas temperatura, donde $\beta\varepsilon \gg 1$, encontramos

$$c_V \propto T^{-2} e^{-\beta\varepsilon}$$

Problema 3. Calcule la densidad de estados $D(\varepsilon)$ con energía entre ε y $\varepsilon + d\varepsilon$, considerando partículas de espín 0 y por tanto, degeneración $g = 1$. Considere los casos de un gas ideal y un gas ultra-relativista.

Para sistemas macroscópicos ($L \rightarrow \infty$), los valores consecutivos de los niveles de energía están lo suficientemente pegados como para poder considerar una «densidad» de estados $D(\varepsilon)$ en el espacio de las fases. Esta densidad de estados se define sabiendo que $D(\varepsilon)d\varepsilon$ no es más que el número de estados cuánticos de mi sistema (caracterizados por un conjunto de números cuánticos que denotamos en general como \mathbf{k}) con energía en el intervalo $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$. Para realizar el conteo de microestados que nos permita obtener la densidad de estados, podemos usar la fórmula semiclásica de paso al continuo basada en la integral sobre el espacio de las fases (\mathbf{q}, \mathbf{p}) de mi partícula, apropiadamente adimensionado dividiendo por h^d , siendo d la dimensión física de mi sistema. En el caso particular $d = 3$, tendremos por ejemplo

$$\sum_{\mathbf{k}} f(|\mathbf{p}|) \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{g}{h^3} \int_V d\mathbf{r} \int d\mathbf{p} f(|\mathbf{p}|) = \frac{4\pi g V}{h^3} \int_0^\infty dp p^2 f(p) = \int_0^\infty dp D(p) f(p)$$

donde g es la degeneración de los estados cuánticos (por ejemplo, $g = 2s + 1$ en el caso de partículas con espín total s), y estamos suponiendo (como es el caso en este problema) que el integrando es cierta función arbitraria que dependerá exclusivamente del módulo del momento, $f(|\mathbf{p}|)$. Comparando las últimas dos expresiones tenemos que

$$D(p) = \frac{4\pi g V}{h^3} p^2$$

$D(p)dp$ es el número de estados cuánticos de mi partícula con módulo del momento en el intervalo $[p, p + dp]$. Si queremos conocer la densidad de estados en energía, $D(\varepsilon)$, tan sólo debemos usar ahora la relación energía-momento $\varepsilon(p)$ del sistema de interés, así como su inversa $p(\varepsilon)$, para realizar un cambio de variable en la integral anterior. Así

$$\sum_{\mathbf{k}} f(|\mathbf{p}|) \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \int_0^\infty dp D(p) f(p) = \int_0^\infty d\varepsilon \frac{D[p(\varepsilon)]}{\varepsilon'[p(\varepsilon)]} f[p(\varepsilon)] \equiv \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon)$$

donde hemos definido $\varepsilon'(p) = d\varepsilon(p)/dp$. Por tanto deducimos la relación (para $d = 3$)

$$D(\varepsilon) = \frac{4\pi g V}{h^3} \frac{p(\varepsilon)^2}{\varepsilon'[p(\varepsilon)]}$$

Particularizando esta expresión ya podemos resolver las dos preguntas de este problema.

Una vez que tenemos la densidad de estados, ya sea en términos del momento, $D(p)$, o de la energía, $D(\varepsilon)$, cualquier valor medio podrá calcularse integrando sobre momentos o

energías el observable de interés, pesándolo con la densidad correspondiente. Por ejemplo, para el número medio de partículas

$$\langle N \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \langle n(\mathbf{k}) \rangle \stackrel{L \rightarrow \infty}{=} \int_0^\infty dp \frac{D(p)}{e^{\beta(\varepsilon(p)-\mu)} - \theta} = \int_0^\infty d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - \theta}$$

donde hemos usado que el número medio de ocupación de un estado con momento p o energía $\varepsilon(p)$ viene dado por $\langle n(p) \rangle = 1/[e^{\beta(\varepsilon(p)-\mu)} - \theta]$, que no es más que la distribución de Bose-Einstein para $\theta = +1$ (bosones) o la distribución de Fermi-Dirac para $\theta = -1$ (fermiones). Para la energía media

$$\langle E \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \langle n(\mathbf{k}) \rangle \varepsilon(\mathbf{k}) \stackrel{L \rightarrow \infty}{=} \int_0^\infty dp \frac{\varepsilon(p) D(p)}{e^{\beta(\varepsilon(p)-\mu)} - \theta} = \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon D(\varepsilon)}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - \theta}$$

Apartado 1. En este caso tenemos partículas no relativistas de un gas ideal, por lo que la relación energía-momento es del tipo $\varepsilon(p) = p^2/2m$, con inversa $p(\varepsilon) = +\sqrt{2m\varepsilon}$ y derivada $\varepsilon'(p) = p/m$, o en términos de la energía $\varepsilon'[p(\varepsilon)] = +\sqrt{2\varepsilon/m}$. Teniendo en cuenta que según el enunciado la degeneración es $g = 1$, tenemos por tanto que

$$D(\varepsilon) = \frac{4\pi gV}{h^3} \frac{p(\varepsilon)^2}{\varepsilon'[p(\varepsilon)]} = \frac{4\pi V}{h^3} \frac{2m\varepsilon}{\sqrt{2\varepsilon/m}} = \frac{\pi 2^{5/2} m^{3/2} V}{h^3} \sqrt{\varepsilon}$$

Apartado 2. En este caso tenemos partículas ultra-relativistas, con una relación energía-momento del tipo $\varepsilon(p) = pc$, con inversa $p(\varepsilon) = \varepsilon/c$ y derivada $\varepsilon'(p) = c$ constante. Tenemos por tanto que ($g = 1$)

$$D(\varepsilon) = \frac{4\pi gV}{h^3} \frac{p(\varepsilon)^2}{\varepsilon'[p(\varepsilon)]} = \frac{4\pi V}{h^3} \frac{(\varepsilon/c)^2}{c} = \frac{4\pi V}{h^3 c^3} \varepsilon^2$$

Problema 4. Se considera un gas ideal relativista formado por bosones, con degeneración g y una relación entre energía y momento del tipo $\varepsilon = pc$. Además, para este tipo de gas se cumple que el potencial químico es cero, $\mu = 0$. Se pide:

1. Demostrar que la densidad de estados $D(\varepsilon)$ viene dada por

$$D(\varepsilon) = \frac{4\pi g V}{h^3 c^3} \varepsilon^2$$

2. Demostrar que para este tipo de gas se verifica $\langle P \rangle V = \langle E \rangle / 3$.
3. Demostrar, sin necesidad de calcular explícitamente ninguna integral, que la energía media es proporcional a T^4 , y que la capacidad calorífica a volumen constante es proporcional a T^3 .

Apartado 1. El gas ideal de bosones ultra-relativistas con potencial químico cero que propone estudiar este problema es formalmente similar al gas de fotones que hemos estudiado en el capítulo 8. Para obtener la densidad de estados, realizamos el conteo semi-clásico que ya hemos hecho en otros casos. Si $f(|\mathbf{p}|)$ es una función arbitraria que depende exclusivamente del módulo del momento de una partícula, tenemos en tres dimensiones que

$$\sum_{\mathbf{k}} f(|\mathbf{p}|) \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{g}{h^3} \int_V d\mathbf{r} \int d\mathbf{p} f(|\mathbf{p}|) = \frac{4\pi g V}{h^3} \int_0^\infty dp p^2 f(p) = \int_0^\infty dp D(p) f(p)$$

de donde deducimos la función densidad de estados en términos del momento

$$D(p) = \frac{4\pi g V}{h^3} p^2$$

tal y como ya hicimos en el problema anterior. $D(p)dp$ es el número de estados cuánticos de mi partícula con módulo del momento en el intervalo $[p, p + dp]$. Para escribir esta densidad de estados en términos de la energía, usamos la relación energía-momento en este caso, $\varepsilon = pc$, de donde trivialmente $p = \varepsilon/c$ y $dp = d\varepsilon/c$. Por tanto, usando que $D(p)dp = D(\varepsilon)d\varepsilon$, obtenemos

$$D(\varepsilon) = \frac{4\pi g V}{h^3 c^3} \varepsilon^2$$

que es el mismo resultado que ya obtuvimos en el Apartado 2 del problema anterior.

Apartado 2. Calculemos en primer lugar el potencial macrocanónico $J = k_B T \ln \Xi(T, V, \mu)$. La función de partición macrocanónica para un gas ideal de bosones es

$$\Xi(T, V, \mu) = \prod_{\mathbf{k}} \left[\frac{1}{1 - e^{\beta(\mu - \varepsilon(\mathbf{k}))}} \right]$$

donde \mathbf{k} es el conjunto de números cuánticos que definen el estado microscópico de la partícula de interés (un bosón ultra-relativista en este caso), y $\varepsilon(\mathbf{k}) = cp(\mathbf{k})$ es la energía de la partícula

en ese estado. Tenemos por tanto que

$$\begin{aligned}
\ln \Xi(T, V, \mu) &= - \sum_{\mathbf{k}} \ln(1 - e^{\beta(\mu - \varepsilon(\mathbf{k}))}) \stackrel{L \rightarrow \infty}{\underset{\mu=0}{\approx}} - \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) \ln(1 - e^{-\beta\varepsilon}) \\
&= - \frac{4\pi gV}{h^3 c^3} \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon^2 \ln(1 - e^{-\beta\varepsilon}) = \left[\begin{array}{l} u = \ln(1 - e^{-\beta\varepsilon}), \quad dv = \varepsilon^2 d\varepsilon \\ du = \frac{\beta}{e^{\beta\varepsilon} - 1}, \quad v = \frac{\varepsilon^3}{3} \end{array} \right] \\
&= - \frac{4\pi gV}{h^3 c^3} \left[\left(\frac{\varepsilon^3}{3} \ln(1 - e^{-\beta\varepsilon}) \right)_0^\infty - \frac{\beta}{3} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta\varepsilon} - 1} \right] = \frac{4\pi gV}{h^3 c^3} \frac{\beta}{3} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta\varepsilon} - 1}
\end{aligned}$$

donde en la segunda igualdad de la primera línea ya hemos realizado el límite al continuo y aplicado que, en este problema concreto, $\mu = 0$, habiendo realizado también una integración por partes en la segunda línea. Por tanto, tenemos para el potencial macrocanónico

$$J = \langle P \rangle V = k_B T \ln \Xi(T, V, \mu) = \frac{4\pi gV}{3h^3 c^3} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta\varepsilon} - 1}$$

Por otro lado, podemos calcular la energía media de nuestro sistema a partir de la energía $\varepsilon(\mathbf{k})$ de los diferentes niveles \mathbf{k} y del número de ocupación medio $\langle n(\mathbf{k}) \rangle$ de cada nivel, que viene dado por la distribución de Bose-Einstein en este caso, i.e.

$$\langle E \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) \langle n(\mathbf{k}) \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon(\mathbf{k})}{e^{\beta(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)} - 1} \stackrel{L \rightarrow \infty}{\underset{\mu=0}{\approx}} \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) \frac{\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon} - 1} = \frac{4\pi gV}{h^3 c^3} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta\varepsilon} - 1}$$

Comparando las expresiones para el potencial macrocanónico y la energía media deducimos por tanto que

$$\langle P \rangle V = \frac{1}{3} \langle E \rangle$$

Apartado 3. Para estudiar el comportamiento de la energía media con la temperatura, partimos de la expresión integral del apartado anterior para la energía y hacemos el cambio de variable $x = \beta\varepsilon$, obteniendo

$$\langle E \rangle = \frac{4\pi gV}{h^3 c^3} \frac{1}{\beta^4} \int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1} = \frac{4\pi gV I}{h^3 c^3} (k_B T)^4 \Rightarrow \langle E \rangle \propto T^4$$

tal y como queríamos demostrar. No obstante, como ya sabemos, la integral I puede calcularse de manera sencilla en términos de la función zeta de Riemann $\zeta(s)$, siendo su valor $I = \Gamma(4)\zeta(4) = \frac{\pi^4}{15}$. Una vez calculada la dependencia con la temperatura de la energía media, es inmediato calcular que, para la capacidad calorífica,

$$C_V = \left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \right)_V \propto T^3$$

Problema 5. Se considera un gas de fermiones ultra-relativista en un volumen V , de manera que la energía esta relacionada con el momento por la ecuación $\varepsilon = pc$, donde c es la velocidad de la luz. Suponiendo que el gas está completamente degenerado, se pide:

1. Calcular la energía de Fermi ε_F del gas.
2. Demostrar que la energía media total del gas es $\langle E \rangle = \frac{3}{4} \langle N \rangle \varepsilon_F$
3. Demostrar que la presión del gas es proporcional a la potencia $\frac{4}{3}$ de la densidad de partículas.
4. Demostrar que, en el caso general en el que el gas no está completamente degenerado, se verifica que $\langle P \rangle V = \langle E \rangle / 3$.

Apartado 1. En primer lugar debemos calcular la densidad de estados en función de la energía. Al igual que en el problema anterior

$$D(p)dp = \frac{4\pi gV}{h^3} p^2 dp \Rightarrow \left[\begin{array}{l} p = \varepsilon/c \\ dp = d\varepsilon/c \end{array} \right] \Rightarrow D(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{4\pi gV}{h^3 c^3} \varepsilon^2 d\varepsilon$$

Para obtener la energía de Fermi, escribimos primero el número medio de partículas en el sistema en términos del número medio de ocupación de los diferentes niveles,

$$\langle N \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \langle n(\mathbf{k}) \rangle \underset{L \rightarrow \infty}{\approx} \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) n(\varepsilon)$$

donde $n(\varepsilon)$ viene dado por la distribución de Fermi-Dirac

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1}$$

En el límite de bajas temperaturas $T \rightarrow 0$, donde los fermiones se encuentran completamente degenerados, sabemos que el número de ocupación medio de los niveles converge a una función paso de Heaviside, $n(\varepsilon) \xrightarrow{T \rightarrow 0} \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon)$, con todos los niveles ocupados por un fermión hasta un nivel umbral cuya energía se denomina energía de Fermi, ε_F . Esto es así porque, por un lado, a bajas temperaturas los fermiones buscan minimizar su energía cayendo al estado fundamental, pero por otro lado el principio de exclusión de Pauli prohíbe que dos fermiones ocupen el mismo estado, por lo que el estado de menor energía para un gas de fermiones degenerado se corresponde con la imagen de llenado de niveles consecutivos que ya hemos estudiado. En este límite tenemos por tanto que

$$\langle N \rangle = \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon) = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon D(\varepsilon) = \frac{4\pi gV}{h^3 c^3} \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \varepsilon^2 = \frac{4\pi gV}{h^3 c^3} \frac{\varepsilon_F^3}{3}$$

de donde, definiendo la densidad del gas de fermiones como $\rho = \langle N \rangle / V$, obtenemos la energía de Fermi

$$\varepsilon_F = \left(\frac{3h^3 c^3}{4\pi g} \right)^{1/3} \rho^{1/3}$$

Apartado 2. La energía media del gas de fermiones se puede escribir en el límite completamente degenerado ($T \rightarrow 0$) como

$$\langle E \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) \langle n(\mathbf{k}) \rangle \underset{L \rightarrow \infty}{=} \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) \varepsilon n(\varepsilon) = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \varepsilon D(\varepsilon) = \frac{\pi g V}{h^3 c^3} \varepsilon_F^4$$

En el apartado anterior hemos visto que $\langle N \rangle = \frac{4\pi g V}{h^3 c^3} \frac{\varepsilon_F^3}{3}$, por lo que

$$\langle E \rangle = \frac{3}{4} \langle N \rangle \varepsilon_F$$

como queríamos demostrar.

Apartado 3. La presión del gas de fermiones la podemos obtener a partir del potencial macrocanónico $J = \langle P \rangle V = k_B T \ln \Xi(T, V, \mu)$. De manera similar a lo que hemos hecho en el apartado 2 del problema 4, y teniendo en cuenta que ahora tenemos fermiones en vez de bosones, podemos escribir

$$\begin{aligned} \ln \Xi(T, V, \mu) &= \sum_{\mathbf{k}} \ln(1 + e^{\beta(\mu - \varepsilon(\mathbf{k}))}) \underset{L \rightarrow \infty}{=} \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) \ln(1 + e^{-\beta(\varepsilon - \mu)}) \\ &= \frac{4\pi g V}{h^3 c^3} \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon^2 \ln(1 + e^{-\beta(\varepsilon - \mu)}) = \left[\begin{array}{l} u = \ln(1 + e^{-\beta(\varepsilon - \mu)}), \quad dv = \varepsilon^2 d\varepsilon \\ du = \frac{-\beta}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1}, \quad v = \frac{\varepsilon^3}{3} \end{array} \right] \\ &= \frac{4\pi g V}{h^3 c^3} \left[\left(\frac{\varepsilon^3}{3} \ln(1 + e^{-\beta(\varepsilon - \mu)}) \right) \Big|_0^\infty + \frac{\beta}{3} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1} \right] \\ &= \frac{4\pi g V}{h^3 c^3} \frac{\beta}{3} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1} = \frac{4\pi g V}{h^3 c^3} \frac{\beta}{3} \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon^3 n(\varepsilon) \end{aligned}$$

En el límite completamente degenerado tenemos que $n(\varepsilon) = \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon)$ y por tanto

$$J = k_B T \ln \Xi(T, V, \mu) = \frac{4\pi g V}{3h^3 c^3} \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \varepsilon^3 = \frac{\pi g V}{3h^3 c^3} \varepsilon_F^4 = \langle P \rangle V$$

y por tanto

$$\langle P \rangle = \frac{\pi g}{3h^3 c^3} \varepsilon_F^4$$

En el Apartado 1 hemos visto que

$$\varepsilon_F = \left(\frac{3h^3 c^3}{4\pi g} \right)^{1/3} \rho^{1/3}$$

Sustituyendo en la expresión de la presión, obtenemos

$$\langle P \rangle = \frac{\pi g}{3h^3 c^3} \left(\frac{3h^3 c^3}{4\pi g} \right)^{4/3} \rho^{4/3} = \frac{1}{4} \left(\frac{3h^3 c^3}{4\pi g} \right)^{1/3} \rho^{4/3} \propto \rho^{4/3}$$

Otra forma de llegar al mismo resultado es usando argumentos termodinámicos. En particular, partiendo de la expresión de la presión a partir de la energía libre de Helmholtz (colectividad canónica),

$$P = - \left(\frac{\partial A}{\partial V} \right)_{T,N}$$

De termodinámica sabemos que $A = U - TS$, con $U = \langle E \rangle$ la energía interna del gas y S la entropía. En el límite $T \rightarrow 0$ tenemos que $A = \langle E \rangle$, por lo que en ese límite

$$P = - \left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial V} \right)_{T,N}$$

Teniendo en cuenta que $\langle E \rangle = \frac{3}{4} \langle N \rangle \varepsilon_F$, y puesto que mantenemos $\langle N \rangle$ constante,

$$P = - \left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial V} \right)_{T,N} = - \frac{3}{4} \langle N \rangle \left(\frac{\partial \varepsilon_F}{\partial V} \right)_{T,N}$$

Por último, sabemos del primer apartado que $\varepsilon_F = \left(\frac{3h^3 c^3}{4\pi g} \right)^{1/3} \rho^{1/3} = C \langle N \rangle^{1/3} V^{-1/3}$, con C constante, de donde

$$\left(\frac{\partial \varepsilon_F}{\partial V} \right)_{T,N} = - \frac{C}{3} \langle N \rangle^{1/3} V^{-4/3}$$

y por tanto

$$P = \frac{C}{4} \langle N \rangle^{4/3} V^{-4/3} = \frac{1}{4} \left(\frac{3h^3 c^3}{4\pi g} \right)^{1/3} \rho^{4/3} \propto \rho^{4/3}$$

Apartado 4. Para el caso general en el que $T \neq 0$, partimos de la expresión integral general para $\ln \Xi(T, V, \mu)$ que hemos obtenido al principio del apartado anterior

$$\ln \Xi(T, V, \mu) = \frac{4\pi g V \beta}{h^3 c^3} \frac{1}{3} \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon^3 n(\varepsilon)$$

Puesto que $J = k_B T \ln \Xi(T, V, \mu)$ y $D(\varepsilon) = \frac{4\pi g V}{h^3 c^3} \varepsilon^2$, tenemos que

$$J = \langle P \rangle V = \frac{1}{3} \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) \varepsilon n(\varepsilon)$$

pero esa integral no es más que la energía media del gas de fermiones (ver Apartado 2),

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) \varepsilon n(\varepsilon)$$

de donde deducimos que

$$\langle P \rangle V = \frac{1}{3} \langle E \rangle$$

Problema 6. Consideramos un gas bidimensional de electrones totalmente degenerado y de área A . Se pide:

1. Determinar la densidad de estados $D(\varepsilon)$, i.e. el número de estados permitidos con energía en el intervalo $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$.
2. Calcular el número total de electrones en función de la energía de Fermi ε_F .
3. Demostrar que el valor de la densidad de energía interna del gas de electrones para $T = 0$ es igual a $\rho\varepsilon_F/2$.

Apartado 1. En primer lugar, puesto que estamos tratando con electrones, que son partículas elementales con espín total $1/2$, son fermiones y debemos considerar la estadística de Fermi-Dirac para estudiar sus propiedades macroscópicas. Para calcular la densidad de estados del sistema, debemos tener en cuenta además que es un sistema bidimensional. Por tanto, si $f(|\mathbf{p}|)$ es una función arbitraria que depende exclusivamente del módulo del momento de una partícula, en el límite al continuo para 2 dimensiones tenemos que

$$\sum_{\mathbf{k}} f(|\mathbf{p}(\mathbf{k})|) \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{g}{h^2} \int_A d\mathbf{r} \int d\mathbf{p} f(|\mathbf{p}|) = \frac{2\pi g A}{h^2} \int_0^\infty dp p f(p) = \int_0^\infty dp D(p) f(p)$$

donde hemos utilizado coordenadas polares (en dos dimensiones) en la integral sobre momentos, $d\mathbf{p} = 2\pi p dp$ en dos dimensiones. De aquí deducimos por tanto la función densidad de estados en términos del momento

$$D(p) = \frac{2\pi g A}{h^2} p$$

Usando ahora la relación energía-momento clásica $\varepsilon = p^2/2m$, de donde vemos que $p = \sqrt{2m\varepsilon}$ y $dp = \sqrt{m/2\varepsilon} d\varepsilon$, y teniendo en cuenta que $D(p)dp = D(\varepsilon)d\varepsilon$, llegamos a

$$D(\varepsilon) = \frac{2\pi m g A}{h^2}$$

que es simplemente una constante independiente de la energía ε .

Apartado 2. Para calcular el número medio de partículas en el sistema, partimos de la expresión

$$\langle N \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \langle n(\mathbf{k}) \rangle \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) n(\varepsilon)$$

donde $n(\varepsilon)$ es la distribución de Fermi-Dirac, que en el límite completamente degenerado toma la forma de una función paso, $n(\varepsilon) \xrightarrow{T \rightarrow 0} \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon)$. Por tanto

$$\langle N \rangle = \int_0^\infty d\varepsilon n(\varepsilon) D(\varepsilon) = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon D(\varepsilon) = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \frac{2\pi m g A}{h^2} = \frac{2\pi m g A}{h^2} \varepsilon_F$$

Invirtiendo esta relación obtenemos $\varepsilon_F = \frac{h^2}{2\pi m g} \frac{\langle N \rangle}{A}$

Apartado 3. Por último, para calcular la energía interna usamos su expresión integral y las propiedades de la distribución de Fermi-Dirac en el límite completamente degenerado

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) \varepsilon n(\varepsilon) = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon D(\varepsilon) \varepsilon = \frac{2\pi m g A}{h^2} \frac{\varepsilon_F^2}{2}$$

Del apartado anterior, hemos visto que

$$\varepsilon_F = \frac{h^2}{2\pi m g} \rho$$

donde $\rho = \langle N \rangle / A$ es la densidad de partículas en nuestro sistema bidimensional de área A . Por tanto, sustituyendo un ε_F de la expresión para $\langle E \rangle$ por su valor en términos de la densidad, deducimos para la densidad de energía

$$\langle e \rangle = \frac{\langle E \rangle}{A} = \frac{1}{2} \rho \varepsilon_F$$

tal y como queríamos demostrar.

Problema 7. Un gas cuántico está constituido por fermiones de espín $\frac{3}{2}$ que no interactúan entre sí. Suponiendo que la energía de cada fermión viene dada por $\varepsilon = p^n$, con $n > 0$, y que el gas se encuentra completamente degenerado ($T = 0$), calcule:

1. La función densidad de estados $D(\varepsilon)$.
2. El valor de la energía de Fermi en función de la densidad de partículas.

Apartado 1. En primer lugar debemos notar que, para que la relación energía-momento sea dimensionalmente correcta, hay que incluir una constante de proporcionalidad α con las dimensiones correctas (que dependerá del valor del exponente n). Por tanto escribimos la relación energía-momento en este problema como $\varepsilon = \alpha |\mathbf{p}|^n$. Puesto que el enunciado no dice nada, suponemos también que tenemos un sistema tridimensional. Teniendo en cuenta que, puesto que tenemos fermiones con espín $3/2$, la degeneración será $g = 2s + 1 = 4$, podemos escribir la densidad de estados en términos del momento como

$$D(p) = \frac{16\pi V}{h^3} p^2$$

Puesto que $\varepsilon = \alpha |\mathbf{p}|^n$, tenemos que $p = (\varepsilon/\alpha)^{1/n}$ y $dp = \frac{1}{n} \alpha^{-1/n} \varepsilon^{(1-n)/n} d\varepsilon$, de donde usando que $D(p)dp = D(\varepsilon)d\varepsilon$ obtenemos que

$$D(\varepsilon) = \frac{16\pi V}{h^3} (\varepsilon/\alpha)^{2/n} \frac{1}{n} \alpha^{-1/n} \varepsilon^{(1-n)/n} = \frac{16\pi V}{nh^3 \alpha^{3/n}} \varepsilon^{(3-n)/n}$$

Apartado 2. Para calcular la energía de Fermi, partimos de la expresión integral para el número medio de partículas y usamos que en el límite completamente degenerado el número de ocupación medio de un nivel con energía ε es simplemente $n(\varepsilon) \xrightarrow{T \rightarrow 0} \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon)$, de donde obtenemos

$$\langle N \rangle = \int_0^\infty d\varepsilon n(\varepsilon) D(\varepsilon) = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon D(\varepsilon) = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \frac{16\pi V}{nh^3 \alpha^{3/n}} \varepsilon^{(3-n)/n} = \frac{16\pi V}{nh^3} \frac{\varepsilon_F^{3/n}}{3/n} = \frac{16\pi V}{3h^3} \varepsilon_F^{3/n}$$

Por tanto, si definimos la densidad de partículas en el sistema como $\rho = \langle N \rangle / V$, tenemos que

$$\varepsilon_F = \left(\frac{3h^3}{16\pi} \right)^{n/3} \rho^{n/3}$$

Problema 8. Los fotones constituyen un caso particular de gas ideal cuántico, pues no interactúan entre sí. Además, puede considerarse sin perder generalidad que un gas de fotones aislado y en equilibrio tiene potencial químico $\mu = 0$ y consecuentemente fugacidad $\lambda = 1$. Considerando que los fotones son bosones con espín $s = 1$ y energía $\varepsilon = pc = h\nu$, se pide:

1. Demostrar que la ecuación de estado del gas de fotones en el límite al continuo viene dada por

$$PV = \frac{4}{3} \frac{V}{c} \sigma T^4.$$

donde $\sigma = \frac{2\pi^5 k_B^4}{15c^2 h^3}$ es la constante de Stefan-Boltzmann.

2. A partir de la energía interna, obtener la ecuación de Stefan-Boltzmann para la radiación R emitida por la cavidad, $R = \sigma T^4$. Para ello, tenga en cuenta que, en general, $R = \frac{1}{4} \rho_E \langle v \rangle$, donde ρ_E es la energía por unidad de volumen y $\langle v \rangle$ la velocidad media de las partículas del gas.
3. Calcular la densidad espectral de fotones $\rho_\nu(T)$, i.e. el número medio medio de fotones por unidad de volumen con frecuencia comprendida entre $(\nu, \nu + d\nu)$. A partir de ella calcule la densidad espectral de energía $u_\nu(T)$, y deduzca la ley de Rayleigh-Jeans y la ley del desplazamiento de Wien, correspondientes a los límites de bajas y altas frecuencias de $u_\nu(T)$, respectivamente.

(La solución de este problema se corresponde con la sección 8.3 de teoría, "Gas de fotones y termodinámica de la radiación del cuerpo negro", perteneciente al tema 8, "Sistemas bosónicos degenerados")

Problema 9. Considere un gas de N bosones sin interacción y espín 0 en un contenedor de dimensión d arbitraria e (hiper-)volumen total V . La relación de dispersión del gas de bosones (i.e. la relación entre la energía y el momento de un bosón) es $\varepsilon(\mathbf{p}) = \alpha|\mathbf{p}|^s$, donde la constante α y el exponente s son ambos positivos. Se pide:

1. Encontrar expresiones para el número medio de partículas por unidad de volumen en el estado fundamental y el número medio total de partículas en estados excitados, en función de la temperatura T y la fugacidad $\lambda = e^{\beta\mu}$ del gas.
2. Encontrar las condiciones que han de cumplir el exponente s y la dimensión d para que el sistema muestre condensación de Bose-Einstein. Calcular la temperatura crítica cuando esto suceda.
3. Encontrar la ecuación de estado del gas bosónico.
4. Encontrar la población relativa del estado fundamental N_0/N en función de la temperatura del sistema, suponiendo que la densidad $n = N/V$ está fija.

Apartado 1. En primer lugar, debemos obtener la densidad de estados del gas de bosones d -dimensional al que hace referencia el problema. Si definimos $f(|\mathbf{p}|)$ como una función arbitraria que depende exclusivamente del módulo del momento de una partícula, en el límite al continuo para d dimensiones tenemos que

$$\sum_{\mathbf{k}} f(|\mathbf{p}(\mathbf{k})|) \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{g}{h^d} \int_V d\mathbf{r} \int d\mathbf{p} f(|\mathbf{p}|) = \frac{\nu_d g V}{h^d} \int_0^\infty dp p^{d-1} f(p) = \int_0^\infty dp D(p) f(p)$$

donde V es el (hiper)volumen del contenedor del gas de bosones, $\nu_d = 2\pi^{d/2}/\Gamma(d/2)$ es la (hiper)superficie de una (hiper)esfera de dimensión d y radio unidad, y hemos utilizado coordenadas hipersféricas (en d dimensiones) en la integral sobre momentos, integrando todas las variables angulares, $d\mathbf{p} = \nu_d p^{d-1} dp$. De esta manera, $\nu_d p^{d-1}$ es la (hiper)superficie de una (hiper)esfera de dimensión d y radio p (como ejemplo aclaratorio, en tres dimensiones $\nu_d p^{d-1} = 4\pi p^2$). De aquí, y usando que la degeneración es $g = 1$ puesto que tenemos partículas de espín 0, deducimos por tanto la función densidad de estados en términos del momento

$$D(p) = \frac{\nu_d V}{h^d} p^{d-1}$$

Usando ahora la relación energía-momento $\varepsilon = \alpha p^s$, vemos que $p = (\varepsilon/\alpha)^{1/s}$ y $dp = \frac{1}{s} \alpha^{-1/s} \varepsilon^{(1-s)/s} d\varepsilon$, de donde usando que $D(p)dp = D(\varepsilon)d\varepsilon$ obtenemos que

$$D(\varepsilon) = \frac{\nu_d V}{h^d} \left(\frac{\varepsilon}{\alpha} \right)^{(d-1)/s} \frac{1}{s} \alpha^{-1/s} \varepsilon^{(1-s)/s} = \frac{\nu_d V}{s h^d \alpha^{d/s}} \varepsilon^{d/s-1}$$

Una vez que hemos deducido la densidad de estados, ya podemos escribir los diferentes promedios en el límite al continuo a partir del número medio de ocupación de los diferentes niveles, que vendrá dado por la distribución de Bose-Einstein en este caso,

$$\langle n(\mathbf{k}) \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon(\mathbf{k})-\mu)} - 1} = \frac{1}{\lambda^{-1} e^{\beta\varepsilon(\mathbf{k})} - 1}$$

donde hemos introducido la fugacidad $\lambda = e^{\beta\mu}$ del gas de bosones. Por ejemplo, el número medio de partículas en el sistema se escribirá como

$$\langle N \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \langle n(\mathbf{k}) \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\lambda^{-1} e^{\beta\epsilon(\mathbf{k})} - 1} \stackrel{???}{\underset{L \rightarrow \infty}{\approx}} \int_0^\infty d\epsilon D(\epsilon) \frac{1}{\lambda^{-1} e^{\beta\epsilon} - 1}$$

Sin embargo, ya sabemos que el límite al continuo realizado en el último paso de la ecuación anterior debemos tener especial cuidado con el estado fundamental $\epsilon = 0$ de los bosones, cuya contribución singular a la suma del primer término de la igualdad anterior hay que particularizar antes de hacer el límite termodinámico $L \rightarrow \infty$ y el paso al continuo que éste implica. Este comportamiento singular del estado fundamental tiene que ver con la posibilidad de una acumulación *macroscópica* de bosones en el estado fundamental, un fenómeno que conocemos con el nombre de condensación de Bose-Einstein. Sacando el término asociado al estado fundamental $\langle n(\mathbf{k} = 0) \rangle = 1/(\lambda^{-1} - 1) = \lambda/(1 - \lambda)$ de la sumatoria antes de hacer el límite al continuo y dividiendo por el volumen, tenemos que

$$\frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{1}{V} \frac{\lambda}{1 - \lambda} + \frac{\nu_d}{sh^d \alpha^{d/s}} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{d/s-1}}{\lambda^{-1} e^{\beta\epsilon} - 1}$$

donde ya hemos usado la expresión de la densidad de estados antes calculada. Haciendo el cambio de variable $x = \beta\epsilon$, llegamos a

$$\frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{1}{V} \frac{\lambda}{1 - \lambda} + \frac{\nu_d}{sh^d \alpha^{d/s}} (k_B T)^{d/s} \int_0^\infty dx \frac{x^{d/s-1}}{\lambda^{-1} e^x - 1} = \frac{\langle N_0 \rangle}{V} + \frac{\langle N_{\text{ex}} \rangle}{V}$$

donde la densidad de partículas en el estado fundamental viene dada por

$$\frac{\langle N_0 \rangle}{V} = \frac{1}{V} \frac{\lambda}{1 - \lambda}$$

mientras que la densidad de bosones en estados excitados es

$$\frac{\langle N_{\text{ex}} \rangle}{V} = \frac{\nu_d}{sh^d \alpha^{d/s}} (k_B T)^{d/s} \int_0^\infty dx \frac{x^{d/s-1}}{\lambda^{-1} e^x - 1}$$

Para simplificar la notación, definimos ahora dos funciones

$$f_{d,s}(T) = \frac{\nu_d}{sh^d \alpha^{d/s}} \Gamma(d/s) (k_B T)^{d/s} \quad ; \quad I_{d/s}(\lambda) = \frac{1}{\Gamma(d/s)} \int_0^\infty dx \frac{x^{d/s-1}}{\lambda^{-1} e^x - 1}$$

con $\Gamma(z)$ la función gamma de Euler, de tal manera que

$$\frac{\langle N_{\text{ex}} \rangle}{V} = f_{d,s}(T) I_{d/s}(\lambda)$$

Apartado 2. Como hemos dicho anteriormente, la condensación de Bose-Einstein se corresponde con una acumulación *macroscópica* de partículas en el estado fundamental

del hamiltoniano de los bosones. Dicha acumulación macroscópica implica que, en caso de producirse, la densidad de partículas $\frac{\langle N_0 \rangle}{V}$ en el estado fundamental será un número finito no nulo. Puesto que la fugacidad para bosones está restringida a tomar valores en el intervalo $0 \leq \lambda \leq 1$ (ver teoría, capítulo 8), para cualquier valor de $\lambda < 1$ tendremos en el límite termodinámico que

$$\frac{\langle N_0 \rangle}{V} = \frac{1}{V} \frac{\lambda}{1 - \lambda} \xrightarrow[\lambda \rightarrow 1]{\lambda < 1} 0$$

Por tanto, sólo puede haber una densidad finita de partícula en el estado fundamental en el límite termodinámico (y por tanto condensación de Bose-Einstein) para $\lambda \approx 1$. En particular, si tomamos $\lambda = 1 - 1/(n_0 V) \xrightarrow[V \rightarrow \infty]{} 1$, con n_0 un número finito, tenemos que

$$\lambda = 1 - \frac{1}{n_0 V} \Rightarrow \frac{\lambda}{1 - \lambda} = n_0 V \Rightarrow \frac{\langle N_0 \rangle}{V} = n_0$$

En este caso podemos escribir por tanto

$$\frac{\langle N \rangle}{V} = n_0 + f_{d,s}(T) I_{d/s}(\lambda \approx 1)$$

La integral $I_{d/s}(\lambda)$ se puede solucionar en serie de potencias (ver teoría, capítulo 8) como

$$I_{d/s}(\lambda) = \sum_{m=1}^{\infty} \lambda^m m^{-d/s}$$

Vemos por tanto que $I_{d/s}(\lambda \approx 1)$ se puede escribir en términos de la función zeta de Riemann

$$I_{d/s}(\lambda = 1) = \sum_{m=1}^{\infty} m^{-d/s} = \zeta(d/s)$$

que diverge para cualquier $d/s < 1$. Tenemos por tanto que, en caso de condensación de Bose-Einstein,

$$\frac{\langle N \rangle}{V} = n_0 + f_{d,s}(T) \zeta(d/s)$$

Sabemos que, si hay condensación de Bose-Einstein, la densidad de partículas en el estado fundamental, n_0 , será cero para temperaturas por encima de cierta temperatura crítica T_c (trabajando a densidad constante), y empezará a crecer de manera continua desde 0 a $T = T_c$ hasta llegar a 1 a temperatura 0, lo que significa que a esa temperatura todos los bosones estarán en el estado fundamental. Para obtener el valor de la temperatura crítica T_c , vamos a hacer $n_0 \rightarrow 0$ en la ecuación anterior, i.e. vamos a mandar la densidad de partículas en el estado fundamental a cero desde la fase condensada. En este caso

$$\frac{\langle N \rangle}{V} = f_{d,s}(T_c) \zeta(d/s)$$

y esta ecuación define el valor de T_c , que dependerá de la densidad $n = \langle N \rangle/V$ de partículas en el sistema. Invirtiendo la función $f_{d,s}(T_c)$, obtenemos por tanto que

$$k_B T_c(n) = \alpha \left[\frac{s h^d}{\nu_d \Gamma(d/s) \zeta(d/s)} \right]^{s/d} n^{s/d}$$

Esta temperatura crítica será distinta de cero siempre y cuando $\zeta(d/s)$ sea finita. Puesto que la función zeta de Riemann diverge cuando su argumento es menor que la unidad, deducimos por tanto que

$$\frac{d}{s} > 1$$

es la condición necesaria y suficiente para observar condensación de Bose-Einstein (por debajo de cierta temperatura crítica no nula dada por la ecuación anterior) en un gas ideal de bosones en d dimensiones con relación de dispersión $\varepsilon = \alpha|\mathbf{p}|^s$.

La divergencia de la función $\zeta(d/s)$ o equivalentemente de la integral

$$\Gamma(d/s)I_{d/s}(1) = \int_0^\infty dx \frac{x^{d/s-1}}{e^x - 1}$$

se puede entender analizando el comportamiento asintótico del integrando en ambos límites de integración. En particular, cuando $x \rightarrow \infty$ el integrando va como $x^{d/s-1}e^{-x}$, una función suave y convergente en todos los casos. La única posible divergencia en la integral puede venir de la región $x \rightarrow 0$, donde $1/(e^x - 1) \rightarrow +\infty$. En el límite $x \rightarrow 0$ tenemos que $e^x - 1 \approx x$, por lo que el integrando se comporta como

$$\frac{x^{d/s-1}}{e^x - 1} \underset{x \rightarrow 0}{\approx} x^{d/s-2}$$

Integrando esto obtenemos que

$$\int x^{d/s-2} dx \sim x^{d/s-1} \xrightarrow{x \rightarrow 0} \begin{cases} 0 & \text{si } d/s > 1 \\ \infty & \text{si } d/s < 1 \end{cases}$$

lo que nos permite deducir la divergencia de la función zeta de Riemann $\zeta(d/s)$ para $d/s < 1$ sin necesidad de conocer explícitamente sus propiedades.

Apartado 3. Nuestro siguiente objetivo consiste en obtener la ecuación de estado del gas de bosones. Para ello, recordamos que el potencial macrocanónico se escribe como

$$J = \langle P \rangle V = k_B T \ln \Xi(T, V, \lambda) = -k_B T \sum_{\mathbf{k}} \ln [1 - \lambda e^{-\beta \varepsilon(\mathbf{k})}]$$

Particularizando la contribución del estado fundamental antes de hacer el límite termodinámico y el paso al continuo que este implica, obtenemos para la presión

$$\begin{aligned} \langle P \rangle &= -\frac{k_B T}{V} \ln(1 - \lambda) - \frac{k_B T}{V} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \ln [1 - \lambda e^{-\beta \varepsilon(\mathbf{k})}] \\ &= -\frac{k_B T}{V} \ln(1 - \lambda) - \frac{k_B T}{V} \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) \ln (1 - \lambda e^{-\beta \varepsilon}) \end{aligned}$$

En el límite termodinámico $V \rightarrow \infty$ tendremos que

$$\frac{k_B T}{V} \ln(1 - \lambda) \xrightarrow{V \rightarrow \infty} 0$$

para todo valor de la fugacidad $0 \leq \lambda \leq 1$. Esto será así incluso en el caso límite $\lambda = 1 - (n_0 V)^{-1}$ en el que surge la condensación de Bose-Einstein para $d/s > 1$, ya que en este caso $\frac{1}{V} \ln(1 - \lambda) \sim \mathcal{O}(\frac{\ln V}{V}) \xrightarrow{V \rightarrow \infty} 0$. Vemos por tanto que la contribución del estado fundamental bosónico a la presión es nula en este límite incluso cuando haya condensación de Bose-Einstein. Usando la densidad de estados calculada en el Apartado 1, tenemos por tanto que

$$\begin{aligned}
\langle P \rangle &= -k_B T \frac{\nu_d}{s h^d \alpha^{d/s}} \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon^{d/s-1} \ln(1 - \lambda e^{-\beta\varepsilon}) = \left[\begin{array}{l} u = \ln(1 - \lambda e^{-\beta\varepsilon}), \quad dv = \varepsilon^{d/s-1} d\varepsilon \\ du = \frac{\beta}{\lambda^{-1} e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon, \quad v = \frac{\varepsilon^{d/s}}{d/s} \end{array} \right] \\
&= \frac{s}{d} \frac{\nu_d}{s h^d \alpha^{d/s}} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{d/s}}{\lambda^{-1} e^{\beta\varepsilon} - 1} = \left[\begin{array}{l} x = \beta\varepsilon \\ dx = \beta d\varepsilon \end{array} \right] \\
&= k_B T \underbrace{\left(\frac{\nu_d}{s h^d \alpha^{d/s}} \Gamma(d/s) (k_B T)^{d/s} \right)}_{f_{d,s}(T)} \underbrace{\left(\frac{1}{(d/s) \Gamma(d/s)} \int_0^\infty dx \frac{x^{d/s}}{\lambda^{-1} e^x - 1} \right)}_{I_{d/s+1}(\lambda)}
\end{aligned}$$

donde hemos identificado en el último paso la función $f_{d,s}(T)$ y la integral $I_{d/s+1}(\lambda)$ que hemos introducido antes. Por tanto, tenemos finalmente para la presión

$$\langle P \rangle = k_B T f_{d,s}(T) I_{d/s+1}(\lambda)$$

Esta ecuación para la presión, junto con la ecuación para la densidad $n = \langle N \rangle / V$ derivada en la sección anterior

$$n = \frac{1}{V} \frac{\lambda}{1 - \lambda} + f_{d,s}(T) I_{d/s}(\lambda)$$

constituyen la ecuación de estado paramétrica del gas de bosones. Para $T > T_c(n)$ tenemos que $\lambda < 1$ por lo que en el límite termodinámico la ecuación de estado paramétrica será

$$\begin{aligned}
\langle P \rangle &= k_B T f_{d,s}(T) I_{d/s+1}(\lambda) \\
n &= f_{d,s}(T) I_{d/s}(\lambda)
\end{aligned}$$

En cambio, por debajo de la temperatura crítica, $T < T_c(n)$, tendremos que $\lambda = 1 - (n_0 V)^{-1} \approx 1$ por lo que

$$\begin{aligned}
\langle P \rangle &= k_B T f_{d,s}(T) I_{d/s+1}(1) \\
n &= n_0 + f_{d,s}(T) I_{d/s}(1)
\end{aligned}$$

Apartado 4. El objetivo de este apartado es obtener la fracción de partículas del sistema que está en el estado fundamental en función de la temperatura. Para ello, partimos de la ecuación para la densidad

$$n = \frac{1}{V} \frac{\lambda}{1-\lambda} + f_{d,s}(T) I_{d/s}(\lambda) = n_0 + f_{d,s}(T) I_{d/s}(\lambda)$$

donde $n_0 = \frac{1}{V} \frac{\lambda}{1-\lambda}$ es la densidad de partículas en el estado fundamental, tal y como predice la distribución de Bose-Einstein. Ya hemos visto que para $T > T_c(n)$ tenemos que $\lambda < 1$, por lo que en el límite termodinámico $n_0 = \frac{1}{V} \frac{\lambda}{1-\lambda} \xrightarrow{V \rightarrow \infty} 0$. Por otro lado, para $T < T_c(n)$ tendremos que $\lambda = 1 - (n_0 V)^{-1} \approx 1$, lo que implica un valor de n_0 no nulo en el límite termodinámico y una densidad

$$n = n_0 + f_{d,s}(T) I_{d/s}(1)$$

Conforme nos acercamos a $T_c(n)$ por la izquierda (desde la fase condensada), sabemos que $n_0 \rightarrow 0$, de tal manera que para $T = T_c$

$$n = f_{d,s}(T_c) I_{d/s}(1)$$

A partir de la primera de las dos últimas ecuaciones, tenemos que

$$n_0 = n - f_{d,s}(T) I_{d/s}(1) \quad \Rightarrow \quad \frac{n_0}{n} = 1 - \frac{f_{d,s}(T) I_{d/s}(1)}{n}$$

y usando que $n = f_{d,s}(T_c) I_{d/s}(1)$ llegamos finalmente a que, para $T < T_c$,

$$\frac{n_0}{n} = 1 - \frac{f_{d,s}(T)}{f_{d,s}(T_c)}$$

Teniendo en cuenta que $f_{d,s}(T) \propto T^{d/s}$, y que como hemos visto antes $n_0 = 0$ para $T > T_c$, llegamos finalmente

$$\frac{\langle N_0 \rangle}{\langle N \rangle} = \begin{cases} 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{d/s} & \text{para } T < T_c \\ 0 & \text{para } T > T_c \end{cases}$$

donde $\langle N_0 \rangle = n_0 V$ es el número medio de bosones en el estado fundamental y $\langle N \rangle = nV$ es el número medio de partículas en el sistema.