2021-1, "STATPHYS", AULA 21

OBJETIVO: ESTUDAR A CONDENSAÇÃO DE BOSE-EINSTEIN.

* CONDENSAÇÃO DE BOSE-EINSTEIN

VIMOS QUE, EM UM GÁS IDEAL DE BÓSONS,

$$\boxed{\log \Xi = -\sum_i \log\left(1 - z \cdot e^{-\beta \varepsilon_i}\right)}$$

E

$$\boxed{\overline{n_i} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} - 1} = \frac{1}{z^{-1} \cdot e^{\beta \varepsilon_i} - 1}} \; .$$

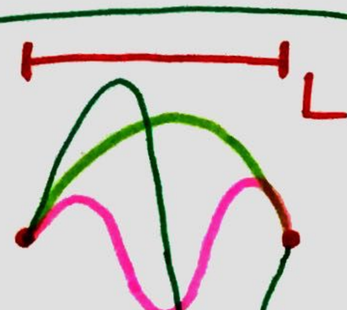
ESSES RESULTADOS DEPENDEM DA CONDIÇÃO $\boxed{\mu < \varepsilon_0 \to 0}$. UM FENÔMENO ESPETACULAR, INTRINSECAMENTE QUÂNTICO, OCORRE QUANDO $\mu \to 0^-$: UMA CONCENTRAÇÃO "ANÔMALA" DE PARTÍCULAS NO ESTADO

FUNDAMENTAL. VEREMOS QUE, PARA BÓSONS EM 3D E DADOS T, V E μ, HÁ UM LIMITE SUPERIOR PARA O NÚMERO N_x DE PARTÍCULAS NOS ESTADOS EXCITADOS.

PARA PROGREDIRMOS, PRECISAMOS ESTUDAR OS ORBITAIS (AUTOESTADOS DE PARTÍCULA ÚNICA) E ENTENDER COMO E QUANDO UMA APROXIMAÇÃO DE CONTÍNUO VIABILIZA SUA ENUMERAÇÃO.

UMA PARTÍCULA QUÂNTICA EM UMA CAIXA UNIDIMENSIONAL DE COMPRIMENTO L SATISFAZ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) = \varepsilon\,.\,\phi(x) \Leftrightarrow \boxed{\phi''(x) = -K^2\phi(x)},$$



ONDE

$$\boxed{K \equiv \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}}.$$

COM AS NATURAIS CONDIÇÕES DE CONTORNO

$$\boxed{\phi(0) = 0 = \phi(L)},$$

HÁ INFINITAS SOLUÇÕES,

$$\boxed{\phi_n(x) \propto \sin(k_n x)},$$

ONDE

$$\boxed{k_n = \frac{n\pi}{L}}, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \, .$$

EM 3D, CADA AUTOESTADO "DA BASE" É UM PRODUTO DE 3 SOLUÇÕES 1D CARACTERIZADO PELO VETOR DE ONDA

$$\boxed{\vec{k} \leftarrow \vec{k}_{\vec{n}} = \left(\frac{n_x \pi}{L_x}, \frac{n_y \pi}{L_y}, \frac{n_z \pi}{L_z} \right)} = (k_{n_x}, k_{n_y}, k_{n_z}).$$

PORTANTO, n_i É APENAS UMA NOTAÇÃO SIMPLIFICADA PARA A OCUPAÇÃO DE UM ORBITAL, $n_{\vec{k}}$. E NEM FALAMOS DE SPIN!

COMO CALCULAR $\sum_{\vec{k}}$ DE TERMOS DEPENDENTES DE $\vec{k}$? VOLTEMOS A 1D:

$$\Delta k_n \equiv k_n - k_{n-1} = \frac{\pi}{L} \underbrace{\Delta n}_{=1} = \frac{\pi}{L} \to \Delta k$$

$$\sum_{n>0} f(n) = \sum_{n>0} f(n)\,\Delta n = \sum_{\substack{K_n \\ (n>0)}} f\left(\frac{LK_n}{\pi}\right)\frac{L}{\pi}\,\Delta K_n \approx$$

$$\approx \frac{L}{\pi}\int_0^{\infty} \tilde{f}(K)\,dK$$

$$= \frac{L}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{f}(K)\,dK \, .$$

SIMBOLICAMENTE, $\sum_{K_{n_x}} \longrightarrow \frac{L_x}{2\pi}\int dK_x$ E

$$\sum_{\vec{K}} \longrightarrow \frac{L_x L_y L_z}{(2\pi)^3}\int d^3K = \frac{V}{(2\pi)^3}\int dK\, 4\pi K^2$$

$$\therefore \boxed{\sum_{\vec{K}} \rightarrow \frac{V}{2\pi^2}\int dK\, K^2 = \int dK\, g(K)}$$

ONDE

$$\boxed{g(K) \equiv \frac{V}{2\pi^2} K^2}$$

É A <u>DENSIDADE</u> <u>DE</u> <u>ESTADOS</u> (DE PARTÍCULA ÚNICA) NO K-ESPAÇO, OU ESPAÇO DE MOMENTO (TRIDIMENSIONAL). PORÉM, $\vec{K}$ NA EQ. DE SCHRÖDINGER É EXATAMENTE O VETOR DE ONDA NA RELA

ÇÃO DE DE BROGLIE

$$\boxed{\vec{p} = \hbar \vec{k}}\ , \quad p = \hbar k\ , \quad p^2 = 2m\varepsilon\ ,$$

DE MODO QUE TAMBÉM VALEM

$$\sum_{\vec{k}} \longrightarrow \int d\varepsilon\, g(\varepsilon)$$

E

$$\sum_{\vec{k}} \longrightarrow \int dp\, g(p)$$

PARA OUTRAS FORMAS FUNCIONAIS DOS g's.

MINHA FORMA FAVORITA:

$$\boxed{\sum_{\vec{k}} \longrightarrow \frac{V}{h^3} \int d^3p}$$

ESPERAMOS QUE, NO LIMITE TERMODINÂMICO, O ESPAÇAMENTO ENTRE OS NÍVEIS ENERGÉTICOS POSSA SER IRRELEVANTE. PORÉM, O ESPAÇAMENTO ENTRE μ E $\varepsilon_0 = 0$ PODE SER MUITO MENOR

DO QUE $\varepsilon_1 - \varepsilon_0$ E A APROXIMAÇÃO DE CONTÍNUO PODE "COLAPSAR" NA REGIÃO DO ESTADO FUNDAMENTAL. DE FORMA AD HOC (VER [HONERKAMP] E, PRINCIPALMENTE, O APÊNDICE F DA 3ª EDIÇÃO DE PATHRIA & BEALE), SEPARAMOS ESSA CONTRIBUIÇÃO NO CÁLCULO DE $\bar{N}$.

$$\bar{N} = \sum_i \frac{1}{z^{-1} \cdot e^{\beta \varepsilon_i} - 1} = \sum_{\vec{k}} \frac{1}{z^{-1} \cdot e^{\beta \varepsilon_{\vec{k}}} - 1} \rightarrow$$

$$\rightarrow \frac{1}{z^{-1} \cdot e^{\beta \underset{0}{\underset{\parallel}{\varepsilon_0}}} - 1} + \frac{V}{h^3} \int d^3p \, \frac{1}{z^{-1} e^{\beta p^2/2m} - 1} =$$

$$= \frac{z}{1-z} + \frac{V}{h^3} \int_0^\infty dp \, 4\pi p^2 \, \frac{1}{z^{-1} \cdot e^{\beta p^2/2m} - 1} =$$

$$x = \frac{\beta p^2}{2m} \, ; \; dx = \frac{\beta}{m} p \, dp \, ; \; dp = \sqrt{\frac{m}{2\beta}} \, x^{-1/2} dx$$

$$= \frac{z}{1-z} + \frac{V}{h^3} \cdot \frac{1}{\frac{\sqrt{\pi}}{2}} (2\pi m k_B T)^{3/2} \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{z^{-1} e^x - 1} dx =$$

$$= \frac{z}{1-z} + V\lambda^{-3} \cdot g_{3/2}(z),$$

ONDE DEFINIMOS O COMPRIMENTO DE ONDA TÉRMICO DE DE BROGLIE,

$$\boxed{\lambda \equiv \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}},$$

QUE É "ESSENCIALMENTE" O COMPRIMENTO DE ONDA DE UMA PARTÍCULA DE DE BROGLIE COM ENERGIA $\sim k_B T$, E AS FUNÇÕES DE BOSE-EINSTEIN,

$$\boxed{g_\nu(z) \equiv \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}}{z^{-1} \cdot e^x - 1} dx = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^\nu}}.$$

CLARO, VEMOS A FUNÇÃO GAMA

$$\boxed{\Gamma(\nu) \equiv \int_0^\infty e^{-x} x^{\nu-1} dx},$$

FAMOSA POR $\boxed{\Gamma(\nu+1) = \nu\Gamma(\nu)}$ PARA

QUALQUER ν E POR $\Gamma(n) = (n-1)!$ PARA $\nu \to n$ INTEIRO POSITIVO, EMBORA SEMI-INTEIROS POSITIVOS NOS INTERESSEM MAIS NESTA AULA. LEMBRE-SE DE QUE

$\boxed{\Gamma(1/2) =}$ [redacted] $\boxed{\sqrt{\pi}}$.

NOTE QUE O FANTÁSTICO RESULTADO (AINDA POR PROVAR!) $g_\nu(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^\nu}$

CONECTA AS FUNÇÕES DE BOSE-EINSTEIN COM A SENSACIONAL FUNÇÃO ZETA DE RIEMANN

$$\boxed{\zeta(s) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^s}}.$$

NOTE QUE, COMO $\mu < 0$, $0 < z = e^{\beta\mu} < 1$, E $\boxed{g_\nu(z) \leq \zeta(\nu)}$. TAMBÉM É FÁCIL VER QUE

$$\boxed{z \frac{\partial}{\partial z} g_\nu(z) = g_{\nu-1}(z)}.$$

POR QUE VALE $g_\nu(z) = \sum_{K=1}^{\infty} \frac{z^K}{K^\nu}$?

$$g_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}}{z^{-1} \cdot e^x - 1} dx =$$

$$= \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty dx \, . \, x^{\nu-1} \, z e^{-x} \underbrace{(1 - z e^{-x})^{-1}}_{= \sum_{j=0}^{\infty} \underbrace{\binom{-1}{j}}_{=(-1)^j} (-z e^{-x})^j} =$$

$$\binom{-n}{j} = (-1)^j \binom{n+j-1}{j}$$

$$= \frac{1}{\Gamma(\nu)} \sum_{j=0}^{\infty} z^{j+1} \int_0^\infty dx \, x^{\nu-1} e^{-x(j+1)} =$$

$$\boxed{y \leftarrow x(j+1)}$$

$$= \frac{1}{\Gamma(\nu)} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{z^{j+1}}{(j+1)^\nu} \underbrace{\int_0^\infty dy \, y^{\nu-1} e^{-y}}_{= \Gamma(\nu)}$$

$K \leftarrow j+1$ $\therefore$ $\boxed{g_\nu(z) = \sum_{K=1}^{\infty} \frac{z^K}{K^\nu}}$.

NUNCA DEIXAMOS A FÍSICA, MAS... VOLTEMOS! VIMOS QUE

$$\boxed{\bar{N} = \frac{z}{1-z} + V.\lambda^{-3} \cdot g_{3/2}(z)}.$$

MAS A POPULAÇÃO N_0 DO ESTADO FUNDAMENTAL É

$$\boxed{N_0 = \frac{z}{1-z}},$$

ENQUANTO A POPULAÇÃO N_x DE TODOS OS OUTROS ESTADOS É

$$\boxed{N_x = V.\lambda^{-3} g_{3/2}(z) \leq V\lambda^{-3}\zeta(3/2)}.$$

NÃO HÁ ESSE "TETO" P/ BÓSONS EM 2D!

NOTE QUE $\lambda \propto T^{-1/2}$, DE MODO QUE

$$\boxed{N_x \leq CTE.T^{3/2}},$$

ONDE A CONSTANTE DEPENDE DE V,

MAS NÃO DE T, N OU μ. PARA UMA DADA TEMPERATURA, A QUANTIDADE DE PARTÍCULAS DO SISTEMA PODE AUMENTAR "SUAVEMENTE" TODOS OS ESTADOS SÃO ACESSÍVEIS. PORÉM, UMA VEZ ATINGIDO

$$\boxed{N_x^c(T) = CTE. \, T^{3/2}},$$

TODAS AS NOVAS PARTÍCULAS SÓ PODEM POPULAR O ESTADO FUNDAMENTAL. DE FORMA ANÁLOGA, MAS MAIS "PRÓXIMA DO LABORATÓRIO", REDUZIR A TEMPERATURA DO SISTEMA COM N FIXO "ENCOLHE A SALA" DOS ESTADOS EXCITADOS E SEUS OCUPANTES PRECISAM "PULAR" PARA O ESTADO FUNDAMENTAL QUANDO "NÃO CABEM MAIS" ONDE ESTAVAM, ABAIXO DA <u>TEMPERATURA</u> <u>CRÍTICA</u>

$$\boxed{N = CTE. \, [T_c(N)]^{3/2}}.$$

É CLARO QUE, PARA QUAISQUER T E N,

$$\frac{N_x^c(T)}{T^{3/2}} = \frac{N}{[T_c(N)]^{3/2}} \iff \boxed{\frac{N_x^c(T)}{N} = \left[\frac{T}{T_c(N)}\right]^{3/2}}$$

QUANDO $T > T_c(N)$, $N_x \approx N$.

QUANDO $T < T_c$, $N_x = N_x^c(T)$ E $N_0 = N - N_x^c$,

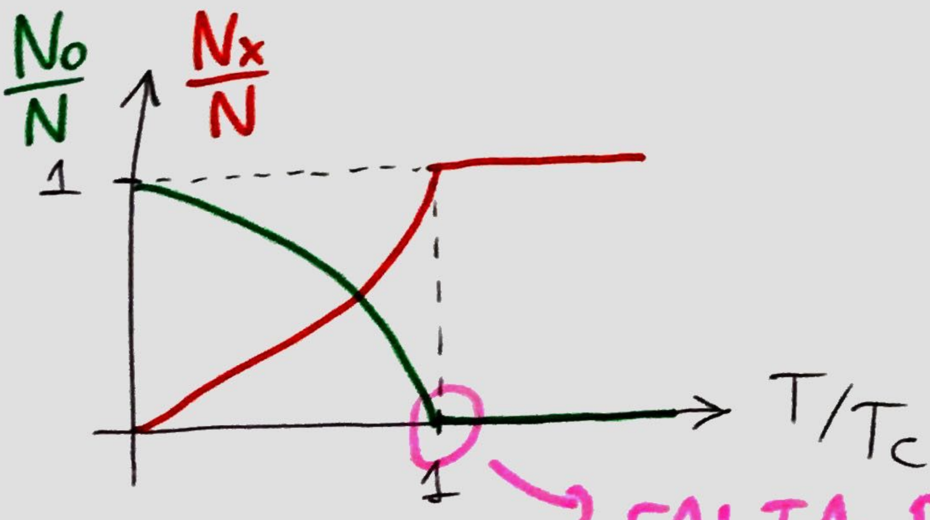
DE MODO QUE

$$\frac{N_0}{N} = \frac{N - N_x^c}{N} = 1 - \frac{N_x^c}{N}$$

$$\therefore \boxed{\frac{N_0}{N} = 1 - \left[\frac{T}{T_c(N)}\right]^{3/2}}$$

EXPOENTE CRÍTICO

NÃO APENAS NA VIZINHANÇA ("ESQUERDA") DE T_c.



FALTA DE ANALITICIDADE, SÓ NO LIMITE TERMODINÂMICO

VAMOS OBTER MAIS RESULTADOS!

$$\log \Xi = -\log(1-z) - \frac{V}{h^3}\int_0^\infty 4\pi p^2 \cdot$$

$$\cdot \log\left(1 - z e^{-\beta p^2/2m}\right) dp =$$

$$= -\log(1-z) - V\lambda^{-3}\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty \underbrace{x^{1/2}}_{} \overbrace{\log(1-ze^{-x})}^{u} \underbrace{dx}_{dv} =$$

$$= -\log(1-z) + V\lambda^{-3}\frac{2}{3}\cdot\frac{2}{1}\cdot\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty \frac{x^{3/2}}{z^{-1}e^{x}-1}dx$$

$$\therefore \boxed{\log \Xi = V\lambda^{-3}\cdot g_{5/2}(z) - \log(1-z)}$$

COMO $PV = -\Phi = k_B T \log \Xi$, MAS $\log(1-z)$ É IRRELEVANTE PARA QUALQUER z NO LIMITE TERMODINÂMICO,

$$PV = k_B T V \lambda^{-3} g_{5/2}(z) \Rightarrow \boxed{\frac{PV}{N k_B T} = \frac{1}{n\lambda^3} g_{5/2}(z)},$$

ONDE $n \equiv \frac{N}{V}$ É A DENSIDADE (VOLU-

MÉTRICA) DE PARTÍCULAS.