

# UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

### FACULTAD DE CIENCIAS

# GAS DE BOSONES EN BAJAS DIMENSIONES ATRAPADO POR POTENCIALES ARMONICOS









Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

### DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



2011/21 (1 - 1 × 7 + 12)] 21 × 24 × 24 × 24 24 × 24

#### M. EN C. ELENA DE OTEYZA DE OTEYZA Jefa de la División de Estudios Profesionales de la

Facultad de Ciencias Presente

Comunicarnos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis: "Gas de bosones en bajas dimensiones atrapado por potenciales armónicos"

realizado por TAPIA REYNOSO SAUL

con número de cuenta 9455753-0 , pasante de la carrera de Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

### Atentamente

Director de Te Propietario	esis
DR. Propietario	MIGUEL ANGEL SOLIS ATALA
DR-	MANUEL DE LLANO DE LA GARZA A Contrario
Propietario DR.	GERARDO CARMONA RUIZ
Suplente DR.	MARCELO DEL CASTILLO MUSSOT Haub de Calle Tur
Suplente DR.	ADRIAN REYES CERVANTES



DRA. PATRICIA BOEDSTELN MENACHE CLAS Coordinadora de Licenciatuna e Hace

# Dedicatoria

Papá, Mamá, demos gracias al Señor, nuestro Dios. El Dios fuerte, que me colmó de fortaleza e iluminó mis caminos.

No es fácil para mi decir en pocas líneas lo mucho que agradezco la dedicación, cariño y apoyo que mi madre la Señora Aurora Reynoso Torres me ha dado para que yo llegara a la terminación de mi licenciatura. Siempre marcándome el buen camino, con su oraciones y paciencia logró sacarme de las situaciones defíciles de la vida. Gracias Mamá... Gracia Doña Aurora.

Me es grato en esta etapa de mi vida agradecer a mi Padre el Señor Salvador Tapia Alcantar por su apoyo incondicional, su buen ejemplo, su honestidad y dedicación al trabajo. Es por ello que pido a la vida me permita trasmitir a mis hijos los valores que él me dio. Sé que no es fácil ser padre y reconozco el esfuerzo tan grande que hiciste para que yo terminara mi licenciatura. Gracias Papá...Gracias Don Chava.

A mis hermanos Salvador, Miguel y Mago quienes simpre me mostraron su cariño y animaron en todo momento.

A toda mi familia.

A mi tía Otilia.

A mis Amigos.

## Agradecimientos

A mis directores de tesis Drs. Manuel de Llano de la Garza y Miguel Ángel Solís Atala, les agradezco su paciencia, entusiasmo, interés y apoyo que fueron decisivos durante mis estudios y mi trabajo de tesis.

A los sinodales, Dr. Gerardo Carmona Ruiz, Dr. Marcelo del Castillo Mussot y Dr. Adrián Reycs Cervantes, les doy las gracias por invertir su tiempo en la lectura, corrección y crítica, contribuyendo así a elevar la calidad de esta tesis.

Al Departamento de Física que me asignó tan distinguido Jurado.

Al Instituto de Física e Instituto de Investigaciones en Materiales de la UNAM el haberme aceptado como estudiante Asociado, disponer de sus instalaciones y servicios durante la elaboración de esta tesis.

Finalmente, agradezco a Fundación UNAM y CONACyT por el apoyo económico que me otorgaron a través de becas de tesis de licenciatura.

# Índice

	Dedicatoria		
	Agr	iii	
	Res	umen	iv
1	Introducción		1
<b>2</b>	Gas	Ideal de Bosones	6
	<b>2.</b> 1	Temperatura crítica	9
	2.1	Fracción condensada	10
	2.2	Energía interna	10
	<b>2.3</b>	Calor específico	13
	2.4	Ecuación de estado	14
	2.5	Entropía	15
3	Bos	ones con relación energía-momento generalizada	17
	3.1	Temperatura crítica	19
	3.1	Fracción condensada	19
	3.2	Energía interna	20
	3.3	Calor específico	20
	3.4	Ecuación de estado	22
	3.5	Entropía	23
4	Bosones atrapados por potenciales armónicos		24
	4.1	Bosones 2D atrapados por 1 osciladores armónicos	24
	4.2	Bosones 2D atrapados por 2 osciladores armónicos	34
	4.3	Bosones 1D atrapados por 1 oscilador armónico	42
	4.4	Masa efectiva	50
5	Cor	clusiones	52
	Ape	éndice A. Función de Bose	54
	Ape	Endice B. Integral de volumen sobre la esfera d-dimensional	55
	Apéndice C. Integral de volumen en el espacio k		57
	Apéndice D. Ecuación de Estado		59
	Lista de figuras		62
	Lista de Tablas		63
	Ref	erencias	64

•

#### RESUMEN

Un gas de N bosones sin interacción entre ellos, en dimensión d = 2 6 1, es restringido a moverse en casi una o casi cero dimensiones atrapados por potenciales externos de oscilador armónico, unidireccionales y mutuamente perpendiculares entre sí

Previo a la solución de este problema y a manera de sistema de referencia, resumimos las propiedades termodinámicas de un gas ideal de bosones en 3D.

Posteriormente estudiamos el comportamiento del gas de bosones sin interacción entre ellos, en *d* dimensiones y con una relación de dispersión generalizada. La dependencia de las propiedades termodinámicas calculadas nos pemitió identificar analogías entre este sistema y el de los bosones atrapados.

Pudimos identificar que el gas de bosones en 2D o 1D (atrapado por 1 o 2 osciladores armónicos) muestra propiedades termodinámicas similares a las de un gas ideal de bosones en  $d + \delta$  dimensiones, con una masa equivalente  $m^*$  la cual tiende a cero en el límite termodinámico. Para el gas de bosones en 2D la temperatura de condensación Bose-Einstein  $T_c$  es proporcional a la densidad de partículas  $N/L^d$  elevada a la potencia  $2/(d + \delta)$ ; la fracción de partículas condensadas es  $N_0/N = 1 - (T/T_c)^{(d+\delta)/2}$  y el calor específico no desarrolla discontinuidad en el sistema bidimensional restringido, pero sí su derivada. En 1D el gas atrapado tiene una temperatura crítica  $T_c = 0$  por lo que la fracción de partículas condensadas es uno si  $T_c = 0$  y es cero si  $T_c \neq 0$ .

# Capítulo 1 Introducción

El día 2 de julio de 1924 el editor de la revista Zeitschrft für Physik recibió una comunicación bastante inusual; era un trabajo breve, titulado "Planck Gwsetz und Lichtquatenhypothese" (La Ley de Planck y la Hipótesis de los Cuantos de Luz), escrito por el físico bengalí (nacido en Calcuta el 1 de enero de 1894), Satyendranath Bose, y enviado por Albert Einstein [1].

El artículo de Bose, que tanto impresionó a Einstein, contiene una deducción de la ley de Planck sin hacer referencia a la Electrodinámica Clásica. Tan sólo unos días después del envío del artículo de Bose, el 10 de julio de 1924, Einstein presentó una comunicación ante la Academia de Ciencias de Prusia que llevaba por título "Quantentheorie des einatomigen idealen Gases" (Teoría Cuántica de los Gases Ideales Monoatómicos). Einstein usa la relación momento-energía para partículas no relativistas de masa finita y condiciones de ligadura que expresan la constancia de la energía y del número de partículas en el sistema. Durante el otoño de 1924 Einstein continuó trabajando sobre las propiedades de este gas y particularmente, en su comportamiento a bajas temperaturas y nota que las moléculas se *condensan* en el estado de energía más bajo en ausencia de fuerzas atractivas entre ellas. Esto sucede a temperaturas menores a la que hoy se conoce como temperatura crítica de condensación. Algún día de ese otoño Einstein debió leer la tesis doctoral de Louis de Broglie e inmediatamente reconoció las conexiones con el problema en cuestión. Había encontrado el primer ejemplo de cambio de fase que hoy conocemos como condensación de Bose-Einstein, deducido mediante métodos puramente estadísticos. En otros apartados de este segundo trabajo trata las fluctuaciones como comprobación de sus hipótesis y da algunas precisiones sobre el fenómeno de condensación, mencionando como los mejores condidatos para este fenómeno al hidrógeno, al helio y al gas de *electrones*. En los años 1930 surgió una nueva fuente de interés en la relación entre la condensación de Bose-Einstein y la transición superfluida en el isótopo 4 del helio líquido. Esta superfluidez fue descubierta experimentalmente en 1928 por W.H Keeson pero identificada como tal por Kapitza [2] en 1937 y en 1938 London [3] usó la condensación de Bose-Eistein como un modelo para dicha transición. La historia de la física ha dejado claro que uno de los más importantes objetos de estudio de la física estadística es el gas ideal. Por este nombre se entiende un sistema de N partículas idénticas ( $N \gg 1$ ) cuyas interacciones mutuas son tan débiles que se pueden despreciar.

La presencia de la condensación de Bose-Einstein había sido *inferida*, aunque *no directamente observada*, en toda una variedad de fenómenos físicos. La superfluidez del helio es quizás el ejemplo prototipo. También existe una fuerte evidencia experimental de la presencia de condensación en un gas de excitones [4]. Estos excitones, se condensan a temperaturas del orden de 50 K, dando un superfluido que no trasporta materia ni carga. Se ha sugerido también que en el universo primordial la condensación de Bose-Einstein pudo jugar un papel esencial, puesto que los bosones de Higgs debieron condensarse dando lugar a las masa de las partículas.

El esfuerzo experimental para observar la condensación de Bose-Einstein en sistemas diluidos ha sido una labor larga. Durante los últimos veinte años el grupo del M.I.T (Massachussets Institute of Technology), lidercado por Daniel Kleppner, se concentró en el hidrógeno polarizado. La estrategia diseñada fue enfriar esos átomos y luego confinarlos en una trampa magnética y permitir que los más calientes escapen de la trampa (una técnica bautizada como enfriamiento evaporativo).

En 1995, Carl Wieman (antiguo alumno de Kleppner) y Eric Cornell, al frente de un grupo en el JILA (Joint Institute for Laboratory Astrophysics) de la Universidad de Boulder en Colorado, anunciaron la primera observación experimental de la condensación. Se trata de un descubrimiento realmente espectacular y una demostración clara y convincente del fenómeno [5]. La descripción teórica de la CBE en las trampas magneto-ópticas requieren modelar al sistema como uno de bosones en 3D débilmente interactuante afectado exteriormente por un potencial de oscilador armónico tridimensional e isotrópico. Muchos trabajos han aparecido avocándose a resolver este problema. En particular, en la tesis de licenciatura de F.J. Sevilla [6] se discute las propiedades termodinámicas de un gas de bosones 3D sin interacción entre ellos sujetos a 1, 2 y 3, osciladores.

Un premio Nobel de física otorgado en 1987 a Bednorz y Müller [7] por su contribución al estudio de la transición superconductora de alta  $T_c$  y la actividad e interés en el tema de *cuatro* premios Nobel, nos habla del gran interés que ha generado en la comunidad científica el fenómeno de la condensación de Bose-Einstein (CBE).

En 1985 von Klitzin Won [8] recibió el premio Nobel por el descubrimiento del efecto Hall cuántico el cual se piensa está relacionado con el fenómeno de la superconductividad según la teoría del bosón compuesto, donde los electrones se mueven en 2D. Los primeros estudios teóricos de sistemas de gases bosónicos en 2D [9] concluyen que la temperatura de transición del gas de bosones está caracterizada por la presencia de un cuasi-condensado con fluctuaciones de fase, aunque si el gas de bosones en 2D es atrapado por un potencial las fluctuaciones de fase se reducen teniendo lugar una CBE. Más aún, para un gas ideal de bosones en 2D atrapado por un potencial armónico Bagnato y Kleppner [9] encontraron una ocupación macroscópica en el estado base referida al sistema (CBE) para  $T < T_c \simeq N^{1/2} \hbar \omega$ , donde N es número de partículas, y  $\omega$  la frecuencia de oscilación. Teóricamente, es bien conocido [10] que la CBE para un gas de bosones con ideales puede ocurrir sólo en sistemas con dimensión espacial d > 2. Esto, sin embargo, *excluye* de una posible interpretación como una CBE a ciertos superconductores orgánicos descubiertos a fines de los años setenta y que pueden considerarse de estructura casi unidimensional.

Además en lo que a tecnología se refiere el confinamiento de partículas ha permitido obtener sistemas de cero, una y dos dimensiones, ha dichos sistemas se les ha dado el nombre de nanocstructuras a las cuales se les ha encontrado una aplicación directa en la creación de microchips para computadoras [11]. La creación de estas nanoestructuras permite tener microchips que almacenan mucha pero mucha más información que los microchips convencionales, es por ello que grupos como IBM, AT&T, Universidades tales como la universidad de Hamburgo, Munich, el Instituto Max Planck y el MIT, destinan grandes recursos en el estudio y creación de nanoestructuras [12].

Las ideas anteriormente expuestas fue lo que nos motivó a realizar el presente trabajo que es el de estudiar un gas de bosones en 2D y 1D, atrapados por potenciales de oscilador armónico. Por un lado queremos avanzar en entender la superconductividad de sistemas de dimensiones mayores que 1, como una CBE. Por otro lado, el gas de bosones en 2D atrapado por por un oscilador armónico lo podemos pensar como un alambre cuántico (Quantum wire) mientras que al gas de bosones en 2D y 1D atrapados por dos y un oscilador armómino repectivamente lo podemos pensar como un punto cuántico (Quantum dot), y de esta forma dar las propiedades termodinámicas de estos sistemas.

En el Capítulo 2 hemos resumido las propiedades termodinámicas de un gas ideal bosones en 3D. En el Capítulo 3 se estudio el comportamiento del gas de bosones en d dimensiones con una relación de dispersión generalizada. En el Capítulo 4 analizamos

el comportamiento termodinámico del gas de N bosones en dos y una dimensión, atapados por potenciales externos unidireccionales mutuamente perpendiculares tipo oscilador armónico y reportamos las principales propiedades termodinámicas tales como la energía interna, el calor específico, etc, así como la temperatura crítica  $T_c$  de condensación BE y la fracción del condensado, para los sistemas con  $T_c$  diferente de cero.

Finalmente, en los Apéndices A, B, C y D sc detallan los cálculos matemáticos de algunos resultados que se usaron en los capítulos.

# Capítulo 2 Gas ideal de bosones

En este capítulo estudiamos a un gas de N bosones dentro de una "caja tridimensional" de lado L, los bosones no interactúan entre sí, ni con las paredes de la caja, es decir trabajaremos con un gas ideal [13, 14, 15]. La energía de cada partícula bosónica corresponde a la energía de una partícula en una caja, es decir

$$\varepsilon_{k} = \frac{p^{2}}{2m} = \frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m} = \frac{\hbar^{2}}{2m}(k_{x}^{2} + k_{y}^{2} + k_{z}^{2}), \qquad (2.1)$$

con

$$k_x = \frac{2\pi}{L}n_x, \ k_y = \frac{2\pi}{L}n_y, \ k_z = \frac{2\pi}{L}n_z, \ n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

donde  $k_x, k_y, k_z$  son tres números de onda independientes. Notemos que la relación de dispersión entre el momento  $\hbar k$  y la energía  $\varepsilon_k$  de las partículas es cuadrática. Cuando un gas de bosones a temperatura T se empieza a enfriar, los bosones tienden a ocupar los niveles más bajos de energía. Para cierta temperatura  $T_c$ , una fracción apreciable del total N de bosones empieza a ocupar el nivel más bajo. A este fenómeno se le denomina condensación de Bose-Eintein.

### 2.1 Temperatura crítica y fracción condensada

Dado que el número total N de bosones se conserva, a N la podemos escribir como la suma de partículas en el estado base  $N_0$  más las partículas que están en los estados excitados  $N_{er}$ , es decir,

$$N = N_0 + N_{ex} \tag{2.2}$$

donde

$$N_0 = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1}$$
(2.3)

con  $\mu$  el potencial químico, y

$$N_{ex} = \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \boldsymbol{\mu})} - 1},\tag{2.4}$$

donde sumamos sobre todos los estados, el número promedio

$$n_k = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} - 1},$$

de partículas bósonicas en el nivel de energía definido por k. De la ecuación anterior es fácil ver que para un gas de bosones el potencial químico debe satisfacer  $\varepsilon_k - \mu \ge 0$  o  $\mu \le \varepsilon_k$  en caso contrario el número promedio de partículas !sería negativo ! Aquí el valor más bajo de la energía es  $\varepsilon_k = 0 \equiv \varepsilon_0 = 0$  por lo que el requerimiento sobre  $\mu$  se traduce a no ser positivo. En el límite termodinámico  $(L \to \infty, N \to \infty \text{ pero } N/L^3 \equiv n = cte)$ la suma de la ecuación (2.4) se puede aproximar mediante la siguiente integral

$$N_{ex} = \frac{1}{\Omega} \int dk_x \int dk_y \int dk_x \frac{1}{e^{\beta(e-\mu)} - 1}$$
(2.5)

con  $\Omega = (2\pi/L)^3$  el volumen de la celda unitaria en el espacio de k. Sustituyendo (2.1) en (2.5) nos queda

$$N_{ex} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int dk_x \int dk_y \int dk_x \frac{1}{e^{\beta(\frac{\Lambda^2}{2\pi}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - \mu)} - 1}.$$
 (2.6)

La integral anterior puede evaluarse en el espacio k usando coordenadas esféricas mediante los cambios de variables

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{1/2} k_x = k\sin\theta\cos\varphi \tag{2.7}$$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{1/2} k_y = k\sin\theta\sin\varphi \tag{2.8}$$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{1/2}k_x = k\cos\theta \tag{2.9}$$

donde  $k\in[0,\infty),\;\theta\in[0,\pi]\,y\,\varphi\in[0,2\pi],$  obteniéndose, en términos de la energía  $\varepsilon$ 

$$N_{ex} = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1}.$$
 (2.10)

Si recordamos que  $N_{ex} = \int_0^\infty d\varepsilon f(\varepsilon) g(\varepsilon)$  donde

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

es la función de distribución de Bose-Einstein, podemos identificar a

$$g(\varepsilon) = \frac{L^3}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}}$$
(2.11)

como la densidad de estados, es decir, el número de estados por unidad de energía. En la Fig. 2.1 mostramos como depende la densidad de estados en unidades de  $(2mL^2/\hbar^2)(1/4\pi)$ , de la energía de las partículas en unidades de  $\hbar^2/2mL^2$ .

Ahora la ecuación (2.10) toma la siguiente forma si hacemos el cambio de variable  $x \equiv \beta \varepsilon$ 

$$N_{ex} = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\beta\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty dx \frac{x^{\frac{1}{2}}}{e^x z^{-1} - 1},$$
(2.12)

con  $z = e^{\beta \mu}$  la fugacidad. La integral en la ecuación anterior es la función de Bose  $g_{\frac{3}{2}}(z)$ (ver Apéndice A) multiplicada por la función  $\Gamma(\frac{3}{2})$ 

$$N_{\rm ex} = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\beta\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} g_{\frac{3}{2}}(z) \Gamma(\frac{3}{2}).$$

Recordando que  $\Gamma(\frac{3}{2}) = \sqrt{\pi}/2$  y usando el hecho de que  $\beta = 1/k_BT$  nos queda que el número de partículas excitadas como función de la temperatura está dado por

$$N_{ex} = V \left(\frac{mk_B T}{2\pi \hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} g_{\frac{3}{2}}(z) \qquad \forall \ T.$$
 (2.13)



Fig. 2.1 Densidad de estados  $g(\varepsilon)$  como función de la energía  $\varepsilon$  para un gas ideal de bosones en 3D.

Para temperaturas altas y mayores que la temperatura crítica  $\mu$  se comporta clásicamente, es decir,  $\mu < 0$  y  $N_{ex} = N$ . Es decir, todas las partículas del sistema se encuentran en los estados excitados de energía. Sin embargo, cuando se disminuye la temperatura del sistema  $\mu \rightarrow 0$ , el estado base de energía comienza a poblarse "significativamente" y los estados excitados disminuyen su número de partículas de tal manera que N permanece constante. La temperatura a la que ocurre  $\mu = 0$  y  $N = N_{ex}$  o  $N_0 = 0$  se le llama temperatura crítica  $T_c$ .

### Temperatura crítica

Como para  $T = T_c$  se tiene que  $N_{ex} = N$  y  $\mu = 0$  o z = 1, entonces la Ec. (2.13) se convierte

$$N = V \left(\frac{mk_B T_c}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} g_{\frac{3}{2}}(1), \qquad (2.14)$$

que es una constante para cualquier temperatura. De la ecuación (2.14) podemos despejar la temperatura crítica  $T_c$ 

$$T_{c} = \frac{2\pi\hbar^{2}}{mk_{B}} \left( \frac{N}{Vg_{\frac{3}{2}}(1)} \right)^{\frac{2}{3}} \simeq 3.31 \frac{\hbar^{2}}{mk_{B}} n^{2/3}.$$
(2.15)

#### Fracción del condensado

La fracción del número total N de partículas que se encuentran poblando los estados excitados en términos de la temperatura crítica se obtiene combinando las Ec. (2.13) y (2.14), es decir

$$\frac{N_{ex}}{N} = \left(\frac{T}{T_c}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{g_{\frac{3}{2}}(z)}{g_{\frac{3}{2}}(1)}.$$
(2.16)

De igual forma podemos calcular la fracción del condensado, es decir, la fracción de partículas que se encuentran en el estado base  $N_0/N$  a  $T \leq T_c$ . De la Ec. (2.2)

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{N_{ez}}{N},$$
(2.17)

y por tanto sustituyendo (2.16) en (2.17) y considerando que z = 1 para  $T \leq T_c$  nos queda

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{\frac{3}{2}}.$$
(2.18)

En la Fig. 2.2 mostramos la fracción de partículas condensadas Ec. (2.18) como función de la temperatura.

### 2.2 Energía interna

Teniendo en cuenta que la energía del sistema es la suma de las energías de cada bosón, entonces la energía para nuestro sistema se calcula de la siguiente manera

$$U = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} - 1},$$
(2.19)



Fig. 2.2 Fracción de partículas condensadas como función de la temperatura para un gas ideal de bosones en 3D.

que en el límite termodiámica<br/>o $V \to \infty$  la suma anterior la podemos aproximar por la integral

$$U = \frac{1}{\Omega} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{\varepsilon_k}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1},$$
(2.20)

en donde sustituyendo  $\epsilon_k$  dada por la ecuación (2.1), haciendo el cambio de variable dados por las ecuaciones (2.7), (2.8), (2.9) y usando la densidad de estados Ec. (2.11), la energía nos queda como

$$U = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1}.$$
 (2.21)

Haciendo el cambio de variable  $x = \beta \epsilon$ , usando el hecho de que  $\Gamma(\frac{5}{2}) = \frac{3}{4}\sqrt{\pi}$ , que  $\beta = 1/k_BT$  y escribiendo la integral resultante en términos de la función de Bose correspondiente,

$$U = \frac{3}{2} k_B T V \left(\frac{m k_B T}{2 \pi \hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} g_{\frac{5}{2}}(z) \qquad \forall T.$$

$$(2.22)$$



Fig 2.3 Energía interna como función de la temperatura para un gas ideal 3D de bosones

En términos de la temperatura crítica la ecuación anterior se puede reescribir de la siguiente manera

$$U = \frac{3}{2} N k_{B} T \frac{g_{\frac{5}{2}}(z)}{g_{\frac{3}{2}}(1)} \left(\frac{T}{T_{c}}\right)^{\frac{3}{2}} \qquad \forall T.$$
 (2.23)

En la Fig. 2.3 mostramos el comportamiento de la energía interna como función de la temperatura.

### 2.3 Calor específico

El calor específico a volumen constante  $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{N,V}$  se obtiene derivando la expresión (2.23) para la energía interna,

$$C_{V} = \frac{3}{2} \frac{N k_{B}}{g_{\frac{3}{2}}(1)} \left(\frac{T}{T_{e}}\right)^{\frac{3}{2}} \left[\frac{5}{2} g_{\frac{5}{2}}(z) + T g_{\frac{5}{2}}(z) \frac{\partial z}{\partial T}\right], \qquad (2.24)$$

donde la prima significa la derivada respecto a z.

Para  $T > T_c$ , se tiene que  $N_{ex} = N$  y la Ec. (2.16) se trasforma en

$$1 = \left(\frac{T}{T_c}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{g_{\frac{3}{2}}(z)}{g_{\frac{3}{2}}(1)},\tag{2.25}$$

de donde podemos calcular  $\frac{\partial z}{\partial T}$ , és decir

$$\frac{\partial z}{\partial T} = -\frac{3}{2} \frac{1}{T} \frac{g_{\frac{3}{2}}(z)}{g_{\frac{1}{2}}(z)}.$$
(2.26)

Sustituyendo la ecuación (2.26) en (2.24) tenemos que

$$C_V = \frac{3}{2} N k_B \frac{g_{\frac{3}{2}}(z)}{g_{\frac{3}{2}}(1)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{\frac{3}{2}} \left[\frac{5}{2} \frac{g_{\frac{5}{2}}(z)}{g_{\frac{3}{2}}(z)} - \frac{3}{2} \frac{g_{\frac{5}{2}}'(z)}{g_{\frac{1}{2}}'(z)}\right],$$

donde hemos usado la expresión (2.25). Finalmente  $C_V$  para el caso  $T > T_c$  es

$$C_{V} = \frac{3}{2} N k_{B} \left[ \frac{5}{2} \frac{g_{\frac{5}{2}}(z)}{g_{\frac{3}{2}}(z)} - \frac{3}{2} \frac{g_{\frac{5}{2}}(z)}{g_{\frac{5}{2}}(z)} \right] = \frac{3}{2} N k_{B} \left[ \frac{5}{2} \frac{g_{\frac{5}{2}}(z)}{g_{\frac{3}{2}}(z)} - \frac{3}{2} \frac{g_{\frac{3}{2}}(z)}{g_{\frac{1}{2}}(z)} \right],$$
(2.27)

donde la prima indica la derivada respecto a z.

Para 
$$T \leq T_c$$
,  $\mu = 0$  y  $z = 1$  por lo que  $U = \frac{3}{2}Nk_BT\frac{g_{\frac{3}{2}}(1)}{g_{\frac{3}{2}}(1)}\left(\frac{T}{T_c}\right)^{\frac{3}{2}}$  y  $C_V$  está dado por

$$C_{V} = \frac{15}{4} N k_{\mathcal{B}} \frac{g_{\frac{5}{2}}(1)}{g_{\frac{3}{2}}(1)} \left(\frac{T}{T_{c}}\right)^{\frac{3}{2}} \qquad T \le T_{c}.$$
(2.28)

De las Ecs. (2.27) y (2.28) podemos calcular la discontinuidad del calor específico en  $T_c$  por medio de la diferencia

$$\Delta C_{\mathbf{V}} = C_{\mathbf{V}}^{-} - C_{\mathbf{V}}^{+},$$



Fig. 2.4 Calor específico  $C_V/Nk_B$  como función de la temperatura T para un gas ideal de bosones en 3D.

donde  $C_V^-$  y  $C_V^+$  son los calores específicos poco antes y poco después de  $T_c$ , respectivamente. Por lo tanto,

$$\left[\frac{\Delta CV}{Nk_B}\right]_{T=T_c} = \frac{9}{4} \frac{g_{3/2}(1)}{g_{1/2}(1)} = 0$$
(2.29)

pues  $g_{\frac{1}{2}}(1) \to \infty$ , la ecuación anterior muestra que no hay salto en el calor específico, es decir, no hay discontinuidad en el calor específico, como puede observarse en la Fig. 2.4, la cual muestra como varía el calor específico al variar la temperatura.

### 2.4 Ecuación de estado

Para encontrar la couación de estado, es decir la ecuación que relaciona la energía interna U, el volumen V y la presión P del sistema, hacemos uso de un resultado de la Mecánica

Estadística [15]

$$\frac{PV}{k_BT} = \ln \Xi(T, V, \mu) \tag{2.30}$$

con  $\Xi(T, V, \mu)$  la función de partición para un gas de bosones (ensamble gran canónico) la cual está dada por

$$\Xi(T, V, \mu) = \prod_{\mathbf{k}} \left[ \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}} \right].$$
(2.31)

Así,

$$\frac{PV}{k_BT} = -\sum_{\mathbf{k}} \ln(1 - ze^{-\beta \varepsilon_{\mathbf{k}}})$$
(2.32)

donde  $z \equiv c^{\beta\mu}$ . En el límite termodinámico la suma la aproximamos por la integral

$$\frac{PV}{k_BT} = -\int_0^\infty d\varepsilon(\varepsilon) \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon}), \qquad (2.33)$$

donde la densidad de estados  $g(\varepsilon)$  está dada por la ecuación (2.11). Usando ésta y haciendo una integración por partes tenemos que

$$\frac{PV}{k_BT} = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{2}{3}\beta \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\epsilon^{\frac{3}{2}}}{(z^{-1}e^{\beta\varepsilon}-1)},\tag{2.34}$$

0

$$\frac{PV}{k_BT} = V \left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} g_{\frac{5}{4}}(z).$$
(2.35)

En términos de la energía interna (2.23), la ecuación anterior queda

$$PV = \frac{2}{3}U\tag{2.36}$$

que es la ecuación de estado.

### 2.5 Entropía

Para calcular la entropía S usamos el siguiente resultado de la termodinámica, es la expresión para la energía libre de Gibbs [16] para un sistema monoatómico,

$$G = N\mu = U + PV - TS \tag{2.37}$$



Fig. 2.5 Entropía como función de la temperatura en unidades de  $T_c$ , para un gas ideal de bosones en 3D.

Incorporando la ecuación de estado (2.36) en la ecuación anterior tenemos que

$$TS = \frac{5}{2}U - N\mu,$$

en donde sustituimos la expresión (2.23) de la energía interna y despojamos S

$$S = \frac{5}{2} N k_B \left(\frac{T}{T_c}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{g_{\frac{5}{2}}(z)}{g_{\frac{3}{2}}(1)} - \frac{N\mu}{T} \qquad \forall T.$$
(2.38)

Para  $T < T_c$  se tiene  $\mu = 0$  y por tanto z = 1 así que el segundo término de (2.38) se hace cero y la entropía toma el siguiente valor

$$S = \frac{5}{2} N k_B \left( \frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{g_{\frac{1}{2}}(1)}{g_{\frac{3}{2}}(1)} \qquad T < T_c.$$
(2.39)

En la Fig. 2.5 graficamos la entropía S como función de la temperatura normalizada  $T/T_c$ , se observa que S es continua en  $T = T_c$ .

## Capítulo 3

# Bosones con relación energía-momento generalizada

En este capítulo consideraremos un gas de bosones en d > 0 dimensiones moviéndose cada partícula según la relación de dispersión  $\varepsilon_k = c_s k^s$ , con s > 0 [17]. es decir con una relación energía-momento generalizada

### 3.1 Temperatura crítica y fracción condensada

Para calcualar la temperatura crítica  $T_c$  y la fracción del condensado  $N_0/N$ , hemos de calcular primero el número de bosones como función de la temperatura, es decir

$$N = N_0 + N_{ex} \tag{3.1}$$

con

$$N_0 = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1}$$

У

$$N_{ex} = \sum_{\mathbf{k}\neq\mathbf{0}} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1},\tag{3.2}$$

donde N es el número total de bosones,  $N_0$  es el número de bosones que están en el estado base y  $N_{ex}$  los bosones que están en los estados excitados. En el límite termodinámico el miembro derecho de la ecuación (3.2) se calcula aproximando las sumas por las siguientes intregrales

$$N_{ex} = \frac{1}{\Omega} \int_{-\infty}^{\infty} dk_1 \int_{-\infty}^{\infty} dk_2 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dk_d n_k$$
(3.3)

con  $\Omega = (2\pi/L)^d$  el volumen de la celda unitaria en el espacio k y encontrando el volumen de una hiperesfera de radio R en  $0 \le d$  dimensiones [22]. La ecuación (3.3) se puede escribir como (ver Apéndice C)

$$N_{ex} = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \int_0^\infty dk \, n_k \, k^{d-1}.$$
 (3.4)

De la ecuación anterior se tiene que la densidad de estados  $g(\varepsilon)$  la podemos obtener al identificar

$$g(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d k^{d-1}dk$$
(3.5)

de donde

$$g(\varepsilon) = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d k^{d-1} \frac{dk}{d\varepsilon},$$
(3.6)

pero como

$$\frac{dk}{d\varepsilon} = \frac{1}{c_s s} \left(\frac{\varepsilon}{c_s}\right)^{1/s - 1}$$

y además

$$k^{d+1} = \left(\frac{\varepsilon}{c_s}\right)^{d-1/s}$$

Sustituyendo estas expresiones en la ecuación (3.6) tenemos que

$$g(\varepsilon) = \frac{V}{\Gamma(d/2)\pi^{d/2}2^{d-1}} \left(\frac{1}{sc_s^{d/s}}\right) \varepsilon^{d/s-1}$$
(3.7)

es la densidad de estados en d-dimensiones. Por lo tanto el número de partículas en los estados excitados es

$$N_{ex} = \frac{V}{\Gamma(d/2)\pi^{d/2}2^{d-1}} \left(\frac{1}{sc_s^{d/s}}\right) \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{d/s-1}}{e^{\beta \varepsilon} z^{-1} - 1}.$$

Haciendo ahora el siguiente cambio de variable  $x\equiv\beta\epsilon$ y definiendo  $z=e^{\beta\mu}$ la ecuación anterior toma la forma

$$N_{ex} = \frac{V}{\Gamma(d/2)\pi^{d/2}2^{d-1}} \left(\frac{1}{sc_{\sigma}^{d/s}}\right) \frac{1}{\beta^{d/s}} \int_0^\infty dx \frac{x^{d/s-1}}{z^{-1}c^x - 1}$$

o simplemente

$$N_{ex} = \frac{V}{s} \frac{\Gamma(d/s)}{\Gamma(d/2)\pi^{d/2}2^{d-1}} \left(\frac{k_B T}{c_s}\right)^{d/s} g_{d/s}(z).$$
(3.8)

#### Temperatura crítica

Partiendo de la última ecuación podemos calcular la temperatura crítica a la cual empieza a ocurrir la condensación de Bose-Einstein. La temperatura crítica  $T_c$  se define como la temperatura a la cual el potencial químico  $\mu$  es igual a cero es decir z = 1 y también que  $N_{ex} = N$  o  $N_0 = 0$ . Sustituyendo  $T = T_c$  en la Ec. (3.8) obtenemos la siguiente igualdad

$$N = \frac{V}{s} \frac{\Gamma(d/s)}{\Gamma(d/2)\pi^{d/2} 2^{d-1}} \left(\frac{k_B T_c}{c_s}\right)^{d/s} g_{d/s}(1)$$
(3.9)

de donde despejamos la temperatura crítica

$$T_{c} = \frac{c_{s}}{k_{B}} \left[ \frac{\Gamma(d/2) s \pi^{d/2} 2^{d-1}}{\Gamma(d/s) g_{d/s}(1)} \right]^{s/d} \left[ \frac{N}{V} \right]^{s/d}.$$
 (3.10)

#### Fraccción del condensado

La fracción del número de partículas del total N que se encuentran poblando el nivel de energía más baja, es decir, la fracción condensada es

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{g_d/s(z)}{g_d/s(1)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{d/s}.$$
(3.11)

### 3.2 Energía interna

Para obtener la energía interna sumamos la energía de cada una de las partículas sobre todos los estados k

$$U = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}$$

la cual en el límite termodinámico podemos aproximar con la siguiente integral

$$U = \int_0^\infty d\varepsilon \, n(\varepsilon) \, g(\varepsilon) \, \varepsilon.$$

Así, sustituyendo  $g(\varepsilon)$  dada por la Ec. (3.7) tenemos que

$$U = \frac{V}{\Gamma(d/2)2^{d-1}s} \left(\frac{1}{c_s \pi^{s/2}}\right)^{d/s} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{d/s}}{z^{-1}e^{\beta \varepsilon} - 1}$$

Haciendo el cambio de variable  $x = \beta \epsilon$  y sustituyendo la integral por la respectiva función de Bose multiplicada por la función Gamma tenemos que

$$U = \frac{V}{\Gamma(d/2)2^{d-1}s} \left(\frac{1}{c_s \pi^{s/2}}\right)^{d/s} \frac{1}{\beta^{d/s+1}} g_{d/s+1}(z) \Gamma(d/s+1)$$

donde reacomodando términos y usando la ecnación (3.9) se tiene finalmente que

$$U = \frac{d}{s} N k_{B} T \frac{g_{d/s+1}(z)}{g_{d/s}(1)} \left(\frac{T}{T_{c}}\right)^{d/s} \qquad \forall T.$$
(3.12)

Nótese que para el gas ideal de bosones trídimensional s = 2 y d = 3, se recupera la Ec. (2.23) y además en el límite cuando  $T \to \infty$ , y entonces  $g_{d/s+1}(z)/g_{d/s}(z) \to 1$  pues  $(1/g_{d/s-1}(1))(T/T_c)^d/s = (1/g_{d/s-1}(z))$  y por lo tanto

$$U = \frac{d}{s}Nk_BT$$

### 3.3 Calor específico

El calor específico de un gas ideal de bosones se calcula a partir de su definición en términos de la energía interna

$$C_{V} = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{N,V}.$$

De la Ec. (3.12) para U tenemos que para  $T > T_c$ .

$$C_{V} = \frac{\partial}{\partial T} \left[ \frac{d}{s} N k_{B} T \frac{g_{d/s+1}(z)}{g_{d/s}(1)} \left( \frac{T}{T_{c}} \right)^{d/s} \right]$$

$$= \frac{d}{s} \frac{Nk_B}{g_{d/s}(1)} \left[ \left( \frac{d}{s} + 1 \right) g_{d/s+1}(z) + \mathcal{T}g'_{d/s+1}(z) \frac{\partial z}{\partial T} \right] \left( \frac{T}{T_c} \right)^{d/s}$$
(3.13)

donde la prima significa la derivada respecto a la temperatura. Ahora, de la Ec. (3.12) cuando  $T > T_c$ ,  $N = N_{ex}$  por tanto

$$\frac{1}{g_{d/s}(z)} = \frac{1}{g_2(1)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{d/s},$$

además

$$\frac{\partial z}{\partial T} = -\frac{d}{s} \frac{1}{T} \frac{g_{d/s}(z)}{g'_{d/s}(z)}.$$

Así para este caso tenemos que el calor específico

$$C_{\mathbf{V}} = \frac{d}{s} N k_{B} \left[ (\frac{d}{s} + 1) \frac{g_{d/s+1}(z)}{g_{d/s}(z)} - \frac{d}{s} \frac{g_{d/s}(z)}{g_{d/s-1}(z)} \right] \qquad T_{c} \le T.$$
(3.14)

Encontremos ahora el calor específico cuando  $T < T_c$ . En este caso  $\mu \to 0$  y z = 1, la ecuación para la energía tiene entonces la siguiente forma

$$U = \frac{d}{s} N k_{\mathcal{B}} T \frac{g_{d/s+1}(1)}{g_{d/s}(1)} \left(\frac{T}{T_{c}}\right)^{d/s}$$

y el calor específico es

$$C_V = \frac{d}{s} (\frac{d}{s} + 1) N k_B \frac{g_{d/s+1}(1)}{g_{d/s}(1)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{d/s}, \qquad T < T_c.$$
(3.15)

Dado que forma funcional para  $C_V$  es diferente en ambos intervalos de temperatura en  $T = T_c$  calculamos el posible salto  $\Delta C_V$  definido como la diferencia de la Ec. (3.14) y (3.15) evaluadas en  $T_c$ , es decir,  $\Delta C_V = C_V(T_c^-) - C_V(T_c^+)$ . Haciendo la diferencia encontramos

$$\frac{\Delta C_V}{Nk_B} = \frac{g_{d/s}(1)}{g_{d/s-1}(1)} \left(\frac{d}{s}\right)^2.$$
 (3.16)

Ahora, como para  $d/s - 1 \le 1$   $g_{d/s-1}(1)$  diverge, mientras que para d/s - 1 > 1 $g_{d/s-1}(1)$  converge entonces si  $d/s \le 2$  el salto  $\Delta C_V = 0$ , existiendo un salto finito distinto de cero si d/s > 2.

### 3.4 Ecuación de estado

Usando un resultado de la Mécanica Estadística encontramos que la ecuación de estado está dada por

$$\frac{PV}{k_BT} \equiv \ln \Xi(T, V, \mu)$$

donde  $\Xi(T, V, \mu)$  es la función de partición para un gas de bosones (ensamble gran canónico). La cual está dada por

$$\Xi(T,V,\mu) = \prod_{\mathbf{k}} \left[ \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}} \right].$$
(3.17)

Por lo tanto,

$$\frac{PV}{k_BT} = -\sum_{\varepsilon} \ln(1 - z e^{-\beta \varepsilon}),$$

donde  $z = e^{\beta \mu}$ . En el lúnite tormodinámico la anterior sumatoria la podemos escribir como una integral de tal forma que

$$\frac{PV}{k_BT} = -\int_0^\infty d\varepsilon g(\varepsilon) \ln(1 - z e^{-\beta\varepsilon}).$$
(3.18)

Usando la densidad de estados  $g(\varepsilon)$  dada por la ecuación (3.7) y haciendo una integración por partes (ver Apéndice D) tenemos que la ecuación de estado queda

$$PV = \frac{s}{d}U,\tag{3.19}$$

la cual es una generalización de la Ec. (2.36).

### 3.5 Entropía

Para el cálculo de la entropía utilizaremos la expresión para la energía libre de Gibbs [16] para un sistema monoatómico

$$G \equiv N\mu = U + PV - ST$$

Q

$$ST = U + PV - N\mu$$
,

sustituyendo la ecuación de estado (3.19), la ecuación anterior nos queda

$$ST = \left(\frac{s}{d} + 1\right)U - N\mu$$

en donde utilizando la ecuación (3.12) tenemos

$$S = \left(\frac{s}{d} + 1\right) \left[\frac{d}{s} N k_B \frac{g_{d/s+1}(z)}{g_{d/s}(1)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{d/s}\right] - N k_B \ln z, \qquad \forall T. \qquad (3.20)$$

Si $T \leq T_{\sf c},$ tenemos que

$$S = \left(\frac{d}{s} + 1\right) N k_{\beta} \frac{g_{d/s+1}(1)}{g_{d/s}(1)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{d/s}.$$

Ahora, para  $T \gg T_c$  (límite clásico) como  $(1/g_{d/s}(1))(T/T_c)^{d/s} = (1/g_{d/s}(z))$  y  $g_{d/s+1}(z)/g_{d/s}(z) \rightarrow$ 1, de la Ec.(3.20) llegamos a que

$$S = \left(\frac{d}{s} + 1\right) Nk_B - Nk_B \ln z.$$

# Capítulo 4

# Bosones bidimensionales atrapados por potenciales armónicos

# 4.1 Gas de bosones en dos dimensiones atrapado por un potencial armónico unidimensional

Consideremos un gas de bosones que inicialmente se mueve libremente en dos dimensiones Fig. 4.1A, al cual restringiremos su movimiento en una dirección que tomamos como y, mediante un potencial de oscilador armónico, mientras que los bosones podrán moverse libremente en la dirección perpendicular x. Fig. 4.1B.

El Hamiltoniano para un bosón en este sistema es,

$$H = H_x + H_y$$

con

$$H_x = \frac{p_x^2}{2m}$$
$$H_y = \frac{1}{2}\kappa y^2 + \frac{p_y^2}{2m},$$

donde  $p_x$  y  $p_y$  son las componentes del momento lineal **p**, de las partículas. Resolviendo la ecuación de Schrödinger,  $H\Psi = \varepsilon \Psi$ , podemos separar el problema en el de una partícula libre en una "caja" unidimensional de lado L, para la cual se encuentra que los valores propos de la energía son



Fig. 4.1 Gas de bosones: À) libres en dos dimesiones, B) de bosones atrapados por un potencial tipo oscilador armónico.

$$\varepsilon_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} = \frac{4\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2)$$

donde

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x, \qquad n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

más el de un oscilador armónico cuántico unidimensional cuyos eigenvalores de la energía son

$$\varepsilon_{y} = \left(n_{y} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega; \qquad n_{y} = 0, 1, 2, \dots$$

por lo tanto la energía por bosón será

$$\epsilon_k = \epsilon_x + \epsilon_y = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \hbar k_y v + \frac{1}{2}\hbar\omega, \qquad (4.1)$$

con

$$k_y = \frac{\omega}{v} n_y$$

con v una cantidad con dimensiones de velocidad.

### 4.1.1 Temperatura crítica y fracción condensada

El número total de bosones N se conserva tal que  $N_0$  estarán en el estado de energía más baja y  $N_{ex}$  distribuidos en los estados excitados, es decir

$$N = N_0 + \sum_{k \neq 0} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1},$$
(4.2)

donde  $\varepsilon$  está dada por (4.1). En el límite termodinámico el segundo término del miembro derecho de la ecuación (4.2) al cual se designa por  $N_{ex}$  se calcula mediante

$$N_{ex} = \frac{1}{\Omega} \int dk_x \int dk_y \frac{1}{e^{\theta(\varepsilon - \mu)} - 1},\tag{4.3}$$

con  $\Omega = (2\pi/L) (\omega/v)$  el volumen de la celda unitaria en el espacio k. Sustituyendo la ecuación (4.1) en la ecuación (4.3)

$$N_{ex} = \left(\frac{L}{2\pi}\right) \left(\frac{v}{\omega}\right) \int dk_x \int dk_y \; \frac{1}{e^{\beta \left(\frac{\hbar^2}{2m}k_x^2 + \hbar v k_y + \frac{\hbar \omega}{2} - \mu\right)} - 1}.$$
(4.4)

La anterior integral puede evaluarse haciendo los cambios de variables

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\frac{1}{2}}k_x = k\cos\theta \tag{4.5}$$

$$\hbar v k_y = k^2 \sin^2 \theta \tag{4.6}$$

donde  $k \in [0, \infty)$   $y \theta \in [0, \pi]$ . Después de sustituir las ecuaciones (4.5) y (4.6) en la ecuación (4.4), nos queda

$$N_{ex} = \frac{L}{\pi} \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty dk \frac{k^2}{e^{\beta(k^2 + \frac{\hbar\omega}{2} - \mu)} - 1}.$$
 (4.7)

Para poner  $N_{ex}$  de la Ec. (4.7) en términos de  $\epsilon$  definamos  $\mu = \mu_0 + \mu_1 \operatorname{con} \mu_0 = \hbar \omega/2$  y sea  $\epsilon = k^2$ . Así la ecuación (4.7) para  $N_{ex}$  toma la siguiente forma

$$N_{ex} = \frac{L}{\pi} \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{e^{\beta(\epsilon-\mu_1)} - 1}.$$
 (4.8)

De la ecuación (4.8) podemos identificar la densidad de estados  $g(\varepsilon)$  ya que está escrita en la forma  $\int_0^\infty d\varepsilon f(\varepsilon)g(\varepsilon)$  donde

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu_1)} - 1}$$

es la función de distribución de Bose-Einstein y la densidad de estados [18] es

$$g(\varepsilon) = \frac{L}{\pi} \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \epsilon^{1/2}; \qquad (4.9)$$

Haciendo el cambio de variable  $x = \beta \epsilon$  y definiendo  $z = e^{\beta \mu_1}$  tenemos que la ecuación (4.8) toma la forma

$$N_{ex} = \frac{L}{\pi} \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} (k_B T)^{3/2} \int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{z^{-1}e^x - 1}$$
(4.10)

donde la integral en la ecuación anterior es la función de Bose (ver Apéndice A) multiplicada por la función Gamma, es decir

$$N_{\rm ex} = \frac{L}{\pi} \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} (k_B T)^{3/2} g_{3/2}(z) \Gamma(3/2). \tag{4.11}$$

Recordando que  $\Gamma(\frac{3}{2}) = \sqrt{\pi}/2$  nos queda que el número de partículas excitadas como función de la temperatura está dado por

$$N_{ex} = \frac{L}{2} \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{2m}{\pi\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} (k_B T)^{3/2} g_{3/2}(z).$$
(4.12)

Nótese que aquí la energía del estado base es  $\hbar\omega/2$  diferente de cero y los resultados equivalen a haber trasladado nuestro origen  $\hbar\omega/2$ . Respecto a este nuevo origen el potencial químico parte de cero en lugar de su valor más grande  $\hbar\omega/2$ .

#### Temperatura crítica

A  $T = T_c$  todas las partículas están en los estados excitados es decir,  $N = N_{ex}(T = T_c)$ , el potencial químico  $\mu = \mu_0$  o  $\mu_1 = 0$  y z = 1. Haciendo estos cambios en la Ec. (4.11) tenemos

$$N = \frac{L}{2} \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{2m}{\pi\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} (k_B T_c)^{3/2} g_{3/2}(1), \qquad (4.13)$$

despejando la temperatura crítica obtenemos

$$T_{c} = \frac{1}{k_{B}} \left[ \frac{2N}{L} \frac{\hbar^{2} \omega}{g_{2}(1)} \right]^{\frac{2}{3}} \left( \frac{\pi}{2m} \right)^{\frac{1}{3}}.$$
 (4.14)

Nótese que la temperatura crítica es directamente proporcional a la densidad de partículas elevadas a la potencia 2/3, por lo que podemos pensar que los bosones en este sistema se comportan de la misma manera que los bosones de un gas ideal de bosones en 3D.

#### Fracción del condensado

La fracción del número de partículas total N que se encuentran poblando los estados excitados se obtiene combinando las ecuaciones (4.12) y (4.13)

$$\frac{N_{ex}}{N} = \frac{g_{3/2}(z)}{g_{3/2}(1)} \left(\frac{T}{T_e}\right)^{3/2} \tag{4.15}$$

y la fracción del número de partículas que están en el estado base para  $T < T_{\rm c}$  es

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_e}\right)^{3/2},$$
(4.16)

comportamiento que reconocemos igual al de un gas ideal en 3D.

#### 4.1.2 Energía interna.

Teniendo en cuenta que la energía del sistema es la suma de las energías de cada bosón, entonces la energía para nuestro sistema se calcula de la siguiente manera

$$U = U_0 + \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} - 1},$$
(4.17)

donde  $U_0$  es la energía de los bosones que se encuentran en el estado base con  $U_0 = N_0 \varepsilon_0$ . En el límite termodinámico la sumatoria [19] de la ecuación (4.17) la podemos aproximar con una integral de la siguiente forma

$$\frac{1}{\Omega} \int_0^\infty dk_x \int_0^\infty dk_y \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}}-\mu)} - 1}$$
(4.18)

donde sustituyendo  $\varepsilon_k$  dada por la ecuación (4.1), haciendo los cambios de variable dados por las ecuaciones (4.5), (4.6) y definiendo  $\mu$  como se hizo para encontrar  $N_{ex}$  tenemos

$$U = \frac{1}{2}\hbar\omega N + \frac{3}{2}Nk_B T \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(1)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \qquad \forall T.$$
(4.19)

En la figura 4.2 mostramos la variación de la energía interna con la temperatura para uno y dos osciladores. Puede notarse que el efecto de introducir un oscilador más, aumenta la energía interna del sistema en una cantidad que es proporcional a la temperatura; cs igual a  $k_B T/2$  para  $T \to \infty$  y cero para T = 0.

#### 4.1.3 Calor específico

Dado que el calor específico nos proporciona informacion de una posible transición de fase, el calor específico a volumen constante se obtiene de la siguiente identidad

$$C_{\boldsymbol{V}} = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{N,\boldsymbol{V}}.$$


Fig. 4.2 Energía interna para un gas de bosones en 2D atrapado por

 $\delta=1,2$  potenciales armónicos.

Derivando la ecuación (4.19) respecto de T a volumen y número de partículas constante

$$C_{V} = \frac{15}{4} N k_{B} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(1)} \left(\frac{T}{T_{c}}\right)^{3/2} + \frac{3}{2} N k_{B} T \frac{g_{5/2}'(z)}{g_{3/2}(1)} \frac{\partial z}{\partial T} \left(\frac{T}{T_{c}}\right)^{3/2},$$

donde la prima significa derivada respecto a z.

Ahora, para  $T > T_c$ ,  $N = N_{ex}$  entonces de (4.15) tenemos

$$\frac{1}{g_{3/2}(z)} = \frac{1}{g_{3/2}(1)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}$$

además 
$$\frac{\partial z}{\partial T} = -\frac{3}{2} \frac{1}{T} \frac{g_{3/2}(z)}{g'_{3/2}(z)}$$

por lo tanto

$$C_V = Nk_B \left[ \frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - \frac{9}{4} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)} \right] \qquad T \ge T_c.$$
(4.20)

Para $T < T_c, \, \mu_1 = 0 \; \ \, {\rm y} \; z = 1, \, {\rm asi}$ 

$$U = \frac{1}{2}\hbar\omega N + \frac{3}{2}Nk_BT\frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)}\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}$$



Fig. 4.3 Calor específico para un gas de bosones en 2D atrapado por  $\delta = 1, 2$  potenciales armónicos Ec. (4.20).

y derivando esta última expresión respecto de T obtenemos

$$C_{V} = \frac{15}{4} N k_{B} \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)} \left(\frac{T}{T_{c}}\right)^{3/2} \qquad T < T_{c}.$$
(4.21)

Examinemos el comportamiento del sistema cerca de la temperatura crítica, para ello evaluaremos las ecuaciones (4.20) y (4.21) para el calor específico en  $T = T_c$  y haremos su diferencia, es decir, calcularemos la discontinuidad de  $C_V$  en  $T_c$ , la cual está dado por

$$\Delta C_V = C_V(T_c^-) - C_V(T_c^+)$$

$$\Delta C_V = \frac{9}{4} N k_B \frac{g_{3/2}(1)}{g_{1/2}(1)},$$
(4.22)

y como  $g_{1/2}(1) \rightarrow \infty$  entonces  $\Delta C_V = 0$  por lo tanto no tenemos salto. La figura 4.3 representa la variación del calor específico con la temperatura para uno y dos osciladores.

#### 4.1.4 Ecuación de estado

Para encontrar la ecuación de estado, es decir la ecuación que relaciona la energía internaU, el volumen V y la presión P del sistema, hacemos uso de un resultado de la Mecánica Estadística

$$\frac{PV}{k_B T} \equiv \ln \Xi(T, V, \mu) \tag{4.23}$$

con  $\Xi(T, V, \mu)$  la gran función de partición para un gas de bosones (ensamble gran canónico) la cual está dada por

$$\Xi(T, V, \mu) = \prod_{\mathbf{k}} \left[ \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}} \right].$$
(4.24)

Por la manera que definimos  $\epsilon_{-}$  y  $\mu_1$  en la Sec. 1 de este capítulo, podemos escribir la ecuación anterior como

$$\Xi(T, V, \mu) = \prod_{\mathbf{k}} \left[ \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_{\mathbf{1}})}} \right]$$
(4.25)

la cual sustituimos en (4.23) para obtener

$$\frac{PV}{k_BT} = -\sum_{\mathbf{k}} \ln(1 - ze^{-\beta\epsilon_{\mathbf{k}}}), \qquad (4.26)$$

donde  $z \equiv e^{\beta \mu_1}$ ,  $\mu_1 = \mu - 1/2\hbar\omega$  y  $\mu$  el potencial químico. En el límite termodinámico la suma la aproximamos por una integral que transforma a (4.26) en

$$\frac{PV}{k_BT} = -\int_0^\infty d\epsilon g(\epsilon) \ln(1 - z e^{-\beta\epsilon}), \qquad (4.27)$$

donde la densidad de estados  $g(\epsilon)$  está dada por la ecuación (4.9). Usando ésta y haciendo una integración por partes (ver Apéndice D) tenemos que la ecuación de estado es

$$PV = \frac{2}{3} \left[ U - \frac{N\hbar\omega}{2} \right]. \tag{4.28}$$



Fig. 4.4 Entropía para un gas de bosones en 2D atrapado por  $\delta = 1, 2$ potenciales armónicos Ec. (4.31).

#### 4.1.5 La entropía

Partiendo de la expresión para la energía libre de Gibbs [16] para un gas monoatómico la cual está dada por

$$G = N\mu = U + PV - TS, \tag{4.29}$$

incorporando la ecuación de estado en la ecuación anterior tenemos

$$TS = U + \frac{2}{3} \left[ U - \frac{N\hbar\omega}{2} \right] - N\mu, \qquad (4.30)$$

por lo tanto la entropía queda como

$$S = \frac{15}{6} N k_B \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - N k_B \ln z.$$
(4.31)

Nótese que esta expresión es igual a la de un gas de bosones ideales en 3D La figura 4.4 representa la variación de la entropía con la temperatura para cuando consideramos uno y dos osciladores.

# 4.2 Gas de bosones en dos dimensiones atrapado por un potencial armónico bidimensional

Nuestro sistema de estudio es un gas de bosones moviéndose en dos dimensiones pero, ahora el movimiento de estos bosones será restringido por un potencial de oscilador armónico bidimensional, es decir, los bosones son atrapado por dos osciladores unidimensionales mutuamente perpendículares entre sí.

El Hamiltoniano para un bosón en este sistema es,

$$H = H_x + H_y$$

con

$$H_x = \frac{1}{2}\kappa x^2 + \frac{p_x^2}{2m},$$
$$H_y = \frac{1}{2}\kappa y^2 + \frac{p_y^2}{2m}.$$

Como el gas no podrá moverse libremente en ninguna de las dos dimensiones, al resolver la ecuación de Schrödinger  $H\Psi = e\Psi$  los eingenvalores para la energía de cada boson serán simplemente los valores de la energía para un oscilador armónico cuántico bidimensional [20]. Así

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar\omega(n_{\mathbf{x}} + \frac{1}{2}) + \hbar\omega(n_{\mathbf{y}} + \frac{1}{2}).$$

Si definimos

$$k_{\mathbf{x}} \equiv \frac{n_{\mathbf{x}}\omega}{v}$$
$$k_{\mathbf{y}} \equiv \frac{n_{\mathbf{y}}\omega}{v}$$

con  $n_x, n_y = 0, 1, 2, \dots$  donde v tiene unidades de velocidad. Entonces

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar\omega + v\hbar(k_x + k_y). \tag{4.32}$$

#### 4.2.1 Temperatura crítica y fracción condensada

El número total de bosones N se conserva tal que  $N_0$  estarán en el estado de energía más baja y  $N_{ex}$  distribuidos en los estados excitados, es decir

$$N = N_0 + \sum_{k \neq 0} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} - 1}$$
(4.33)

donde  $\varepsilon$  esta dada por (4.32). En el límite termodinámico el segundo término del miembro derecho de la ecuación (4.33) al cual se designa por  $N_{ex}$  se calcula mediante

$$N_{ex} = \frac{1}{\Omega} \int_0^\infty dk_x \int_0^\infty dk_y \frac{1}{e^{\beta(e-\mu)} - 1},$$
 (4.34)

con  $\Omega = (\omega/v)^2$  el volumen de la celda unitaria en el espacio k. Sustituyendo la ecuación (4.32) en la (4.34) tenemos

$$N_{ex} = \left(\frac{v}{\omega}\right)^2 \int_0^\infty dk_x \int_0^\infty dk_y \frac{1}{e^{\beta(h\omega + vh(k_x + k_y) - \mu)} - 1}.$$
(4.35)

La integral anterior puede evaluarse haciendo los cambios de variables

$$v\hbar k_x = k^2 \cos^2\theta \tag{4.36}$$

$$v\hbar k_y = k^2 \sin^2\theta \tag{4.37}$$

donde  $k \in [0, \infty]$  y  $\theta \in [0, \frac{\pi}{2}]$ . Después de sustituir (4.36) y (4.37) en (4.35), nos queda

$$N_{ex} = 2\left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^2 \int_0^\infty dk \frac{k^3}{e^{\beta(k^2 + \hbar\omega - \mu)} - 1}.$$
(4.38)

Pongamos  $N_{ex}$  de la Ec. (4.38) en términos de  $\varepsilon$ , para ello definimos  $\mu = \mu_0 + \mu_t$  con  $\mu_0 = h\omega$  y sea  $\epsilon = k^2$ . Así la ecuación (4.38), para  $N_{ex}$ , toma la siguiente forma

$$N_{ex} = \left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^2 \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu_1)} - 1}.$$
(4.39)

De la ecuación anterior podemos identificar  $g(\varepsilon)$  ya que está escrita en la forma  $\int_{0}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon)g(\varepsilon) \text{ donde}$ 

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu_1)} - 1}$$

es la función de distribución de Bose-Einstein, y la densidad de estados es

$$g(\varepsilon) = \left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^2 (\varepsilon - \hbar\omega), \qquad (4.40)$$

es decir, el número de estados por unidad de energía. Haciendo el cambio de variable  $x = \beta \epsilon$  y definiendo  $z = e^{\beta \mu_1}$  tenemos que la ecuación (4.38) se trasforma a

$$N_{ex} = \frac{1}{\hbar\omega}^2 (k_B T)^2 \int_0^\infty dx \frac{x}{z^{-1} e^x - 1},$$
(4.41)

con z la fugacidad donde el potencial químico ha sido trasladado  $\hbar \omega$ . La integral en la ecuación anterior es la función de Bose multiplicada por la función Gamma, es decir,

$$N_{ex} = \frac{1}{\hbar\omega}^{2} (k_{B}T)^{2} g_{2}(z) \Gamma(2).$$
(4.42)

Recordando que  $\Gamma(2) = 1$ , nos queda que el número de partículas excitadas como función de la temperatura está dado por

$$N_{ex} = \left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^2 (k_B T)^2 g_2(z). \tag{4.43}$$

#### Temperatura crítica

Como todas las partículas están en los estados excitados cuando  $T = T_c$  y el potencial químico  $\mu = \hbar \omega$  ó  $\mu_1 = 0$  con z = 1, de la ecuación (4.43) tenemos

$$N = \left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^2 (k_B T_c)^2 g_2(1),$$
 (4.44)

donde despejando la temperatura crítica obtenemos

$$T_{c} = \frac{1}{k_{B}} \left[ \frac{N(\hbar \omega)^{2}}{g_{2}(1)} \right]^{\frac{1}{2}}.$$
(4.45)

#### Fracción del condensado

La fracción del número de partículas total N que se encuentran poblando los estados excitados se obtiene combinando las ecuaciones (4.43) y (4.44)

$$\frac{N_{er}}{N} = \left(\frac{T}{T_e}\right)^2 \frac{g_2(z)}{g_2(1)}.$$
(4.46)

Para  $T < T_c z = 1$  y la ecuación anterior queda

$$\frac{N_e}{N} = \left(\frac{T}{T_e}\right)^2$$

La fracción del número de partículas que están en el estado base para  $T < T_c$  se calcula recordando que  $N = N_0 + N_{cx}$  obteniéndose

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^2.$$
 (4.47)

#### 4.2.2 Energía interna

En el límite termodinámico la suma de la expresión (4.17), la podemos aproximar por la siguiente integral

$$\frac{1}{\Omega} \int_0^\infty dk_x \int_0^\infty dk_y \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}}-\mu)}-1},\tag{4.48}$$

donde sustituyendo  $\varepsilon_k$  dada por la ecuación (4.32), haciendo los cambios de variable dados por las ecuaciones (4.36) y (4.37), definiendo  $\mu$  como se hizo para encontrar  $N_{ex}$  (Ec. (4.42)) tenemos

$$U = \hbar\omega N + 2Nk_B T \frac{g_3(z)}{g_2(1)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 \qquad \forall T.$$
(4.49)

Nótese que para  $T/T_c \gg 1$ 

$$\frac{(U-N\hbar\omega)}{Nk_BT} \to 2$$

como sucede para un gas ideal en cuatro dimensiones.

#### 4.2.3 Calor específico

El calor específico a volumen constante está dado por

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{N,V}.$$

Para encontrar  $C_V$  cuando  $T \ge T_c$  derivamos la ecuación (4.49) respecto de T a volumen y número de partículas constante

$$C_{V} = 6Nk_{B}\frac{g_{3}(z)}{g_{2}(1)}\left(\frac{T}{T_{c}}\right)^{2} + 2Nk_{B}T\frac{g_{3}'(z)}{g_{2}(1)}\left(\frac{T}{T_{c}}\right)^{2}\frac{\partial z}{\partial T}$$

Ahora, para  $T \ge T_c N = N_{ex}$  entonces de (4.46) tenemos que

$$\frac{1}{g_2(z)} = \frac{1}{g_2(1)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^2.$$

Además

$$\frac{\partial z}{\partial T} = -\frac{2}{T} \frac{g_2(z)}{g_2'(z)},$$

por lo tanto

$$C_{V} = 6Nk_{B}\frac{g_{3}(z)}{g_{2}(1)} \left(\frac{T}{T_{c}}\right)^{2} - 4Nk_{B}\frac{g_{2}(z)}{g_{1}(z)} \qquad T \ge T_{c}.$$
(4.50)

Encontremos ahora  $C_V$  cuando  $T < T_c$ , en este caso  $\mu_1 = 0$  y z = 1 la cual sustituimos en (4.49) que derivamos respecto de T

$$C_{V} = 6Nk_{B} \frac{g_{3}(1)}{g_{2}(1)} \left(\frac{T}{T_{c}}\right)^{2}.$$
(4.51)

Para ver si existe salto en el calor específico [21] el cual se define  $\Delta C_V$ , evaluaremos las ecuaciones (4.50) y (4.51) en  $T = T_c$ , es decir

$$\Delta C_{V} = C_{V}(T_{c}^{-}) - C_{V}(T_{c}^{+})$$

$$\Delta C_{V} = 4Nk_{B}\frac{g_{2}(1)}{g_{1}(1)},$$
(4.52)

como  $g_1(z) \to \infty$  concluimos que  $\Delta C_V = 0$  y por lo tanto no hay discontinuidad en el calor específico. Este comportamiento lo podemos observar en la Fig. 4.3 donde graficamos  $C_V/Nk_B$  vs.  $T/T_c$ .

#### 4.2.4 Ecuación de estado

La ecuación de estado, se deduce de la relación [15]

$$\frac{PV}{k_BT} \equiv \ln \Xi(T, V, \mu), \qquad (4.53)$$

con  $\Xi(T, V, \mu)$  la función de partición para un gas de bosones (ensamble gran canónico) la cual está dada por

$$\Xi(T,V,\mu) = \prod_{\mathbf{k}} \left[ \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}} \right].$$
(4.54)

Por la mancra que definimos  $\epsilon_{-}$  y  $\mu$  en la Sec. 1 de este Capítulo, podemos escribir la ecuación anterior como

$$\Xi(T, V, \mu) = \prod_{\mathbf{k}} \left[ \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_{\mathbf{l}})}} \right]$$
(4.55)

y la Ec. (4.53) nos queda

$$\frac{PV}{k_BT} = -\sum_{\mathbf{k}} \ln(1 - ze^{-\beta\epsilon_{\mathbf{k}}}), \qquad (4.56)$$

donde  $z \equiv e^{\beta \mu_1}$ . En el límite termodinámico la suma la aproximamos por la integral

$$\frac{PV}{k_BT} = -\int_0^\infty d\epsilon g(\epsilon) \ln(1 - ze^{-\beta\epsilon}), \qquad (4.57)$$

donde la densidad de estados  $g(\epsilon)$  está dada por la ecuación (4.40). Usando ésta y haciendo una integración por partes tenemos que la ecuación de estado es

$$PV = \frac{1}{2} \left[ U - N\hbar\omega \right]. \tag{4.58}$$

#### 4.2.5 La entropía

Partiendo de la expresión para la energía libre de Gibbs [16] para un gas monoatómico la cual está dada por

$$G = N\mu = U + PV - TS, \tag{4.59}$$

incorporando la ecuación de estado en la ecuación anterior tenemos

$$TS = U + \frac{1}{2} \left[ U - N\hbar\omega \right] - N\mu, \qquad (4.60)$$

y por lo tanto la entropía se muestra en la siguiente ecuación

$$S = 3Nk_B \frac{g_3(z)}{g_2(z)} - k_B N \ln z.$$
(4.61)

Nótese que está entropía es la misma para un sistema de bosones en tres dimensiones atrapados por un potencial de tipo oscilador [6]. De hecho las propiedades termodinámicas para el gas de bosones en 2D atrapados por dos osciladores son muy similares a las del gas de bosones en 3D atrapados por un oscilador.

Tabla	4.1 Resum	en de alg	unas	propiedades	termodinám	icas p	para	los	bosones	en	dos
dimension	es atrapado	s por une	эуdo	s osciladore:	5.						

2D	$\delta = 2$	$\delta = 1$
g(arepsilon)	$(\hbar\omega)^{-2}\varepsilon$	$rac{L}{\pi}(\hbar\omega)^{-2}(rac{2m}{\hbar^2})^{1/2}arepsilon^{1/2}$
$N_0/N$	$1-(rac{T}{T_{ m c}})^2$	$1-(rac{T}{T_c})^{3/2}$
$T_{c}$	$rac{\hbar\omega}{k_B} \left[ rac{N}{g_2(1)}  ight]^{1/2}$	$\frac{1}{k_B} \left[ \frac{2\hbar^2 \omega N}{g_2(1)} \right]^{2/3} \left( \frac{\pi}{2m} \right)^{1/3}$
$U/Nk_BT$	$\frac{\hbar\omega}{k_BT} + 2\frac{g_3(z)}{g_2(1)}(\frac{T}{T_c})^2$	$\frac{\frac{1}{2}\frac{\hbar\omega}{k_BT}+\frac{3}{2}\frac{g_{3/2}(z)}{g_{3/2}(1)}(\frac{T}{T_c})^{3/2}}{2}$
$C_V/Nk_\beta$	$6\frac{g_3(z)}{g_2(z)} - 4\frac{g_2(z)}{g_1(z)}$	$\frac{15}{4}\frac{g_{5/3}(z)}{g_{3/2}(z)} - \frac{9}{4}\frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)}$
PV	$rac{1}{2}(U-N\hbar\omega)$	$\frac{2}{3}(U-\frac{N\hbar\omega}{2})$
S/Nk <sub>B</sub>	$3rac{g_3(z)}{g_2(1)}(rac{T}{T_c})^2 - \ln z$	$rac{15}{6} rac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(1)} - \ln z$
<i>m</i> *	$\frac{2\pi\hbar}{L^2\omega}$	$(m)^{1/3} (\frac{2\pi\hbar}{L^2\omega})^{2/3}$

.

#### 4.3 Gas de bosones en 1D atrapado por un potencial armónico

Las propiedades termodinámicas para el gas de bosones en una dimensión atrapado por un oscilador armónico, las calculamos de una manera análoga a como lo hemos estado haciendo en los anteriores sistemas. En este caso nuestro sistema es un gas de bosones cuyo movimiento es en una dirección que tomamos como x, es restringido por un potencial de oscilador armónico de tal manera que el gas no podrá moverse libremente en la dirección x. La energía de cada bosón es la energía correspondiente a la de un oscilador armónico cuántico unidimensional, es decir,

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar\omega(n_x + \frac{1}{2}), \qquad n_x = 0, 1, 2, \dots$$

Si definimos

$$k_x = \frac{n_x \omega}{v}$$

donde v tiene unidades de velocidad, podemos escribir la energía de la siguiente manera

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar\omega}{2} + v\hbar k_x. \tag{4.62}$$

Nótese que el estado de mínima energía es  $\varepsilon_0 = \hbar \omega/2$ 

#### 4.3.1 Temperatura crítica y fracción condensada.

Dado que el número total N de bosones se conseva podemos escribir a N como

$$N = N_0 + N_{ex} \tag{4.63}$$

donde

$$N_0 = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_0 - \mu)} - 1} \tag{4.64}$$

y

$$N_{ex} = \sum_{\mathbf{k}\neq\mathbf{0}} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1},\tag{4.65}$$

con  $N_0$  el número de bosones en el estado base y  $N_{en}$  el número de bosones en los estados excitados. En el límite termodinámico la suma de la ecuación (4.65) la podemos aproximar con la integral

$$N_{ex} = \frac{1}{\Omega} \int_0^\infty dk \frac{1}{e^{\beta(z_k - \mu)} - 1},$$
 (4.66)

donde  $\Omega = \omega/v$  se define como el volumen de la celda unitaria en el espacio k, y  $\omega, v$  son la frecuencia y la velocidad de oscilación respectivamente, sustituyendo (4.62) en (4.66)

$$N_{ex} = \frac{v}{\omega} \int_0^\infty dk \frac{1}{e^{\beta(v\hbar k + \frac{1}{2}\hbar\omega - \mu)} - 1}$$
(4.67)

donde definiendo  $\mu = \mu_0 - \mu_1 \operatorname{con} \mu_0 = \hbar \omega/2$  y  $\epsilon = v \hbar k$ , entonces la ecuación (4.67) toma la siguiente forma

$$N_{ex} = \frac{1}{\hbar\omega} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu_1)} - 1}.$$
(4.68)

En la ecuación anterior podemos identificar la densidad de estados  $g(\epsilon)$  la cual es constante y ésta dada por

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{\hbar\omega}.$$
(4.69)

Si hacemos el cambio de variable  $x = \beta \epsilon$  y definimos  $z = e^{\beta \mu_1}$  tenemos que la ecuación (4.68) toma la siguiente forma

$$N_{ex} = \frac{1}{\hbar\omega} \frac{1}{\beta} \int_0^\infty dx \frac{x}{z^{-1} e^x - 1} = \frac{1}{\hbar\omega} k_B T g_1(z) \Gamma(1).$$
(4.70)

Así el número de partículas que se encuentran en los estados excitados como función de la temperatura es

$$N_{ex} = \frac{1}{\hbar\omega} k_B T g_1(z). \tag{4.71}$$

#### Temperatura crítica

La temperatura crítica  $T_c$ , es la temperatura a la cual el estado base con energía  $\varepsilon_0 = \hbar \omega/2$ empieza a poblarse, entonces de la ecuación (4.71) tenemos que cuando  $T = T_c$ ,  $N_{ex} = N$ ,  $u_1 = 0$  y z = 1, por lo tanto la temperatura crítica está dada por

$$T_{c} = \frac{N}{k_{B}h\omega} \frac{1}{g_{1}(1)}.$$
(4.72)

De la ecuación (4.72) podemos ver que  $T_c = 0$ , pues  $g_1(1)$  diverge.

#### Fracción del condensado

Aquí, la fracción de partículas que se encuentran poblando el estado base  $N_0/N$  vale uno si  $T = T_c = 0$  y vale cero para toda  $T > T_c$ .

#### 4.3.2 Energía interna

La energía del gas de bosones en una dimensión atrapado por un potencial de oscilador armónico se calcula de la siguiente manera

$$U = U_0 + \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} n_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \tag{4.73}$$

donde  $U_0 = N_0 \varepsilon_0$  es la energía de los bosones que se encuentran en el estado base. En el límite termodinámico la sumatoria de la ecuacion (4.73) la podemos aproximar con la siguiente integral

$$\frac{1}{\Omega} \int_0^\infty dk_x \frac{\varepsilon_k}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1}.$$
(4.74)

Sustituyendo (4.62) en (4.74), definiendo  $\epsilon = v\hbar k$  y  $\mu = \varepsilon_0 + \mu_1$  tenemos que la energía interna para el gas en este sistema es

$$U = \frac{1}{2}\hbar\omega N + Nk_{\mathcal{B}}\mathcal{T}\frac{g_2(z)}{g_1(z)} \qquad \forall T.$$
(4.75)



Fig. 4.5 Fugacidad  $z = e^{\beta \mu_1}$  y potencial químico  $\mu_1$  para un gas de bosones en 1D atrapado por un potencial armónico.

En figura 4.5 mostramos como varía la fugacidad z y el potencial químico  $\mu_1$  por partícula como función de la temperatura en unidades de  $\hbar\omega$ . La Energía interna referida al estado base  $N\hbar\omega/2$ , dividida por  $Nk_BT$  la graficamos en la figura 4.6, donde notamos que en el límite  $T \to \infty$ ,  $z \to 0$ , este cociente tiende a 1, es decir, la energía referida al estado base tiende a  $Nk_BT$  lo cual cumple con el teorema de la equipartición de la enegía en dos dimensiones, pues el gas de bosones en este sistema 1D con un oscilador lo podemos ver como un gas ideal de bosones en dos dimensiones. Analogamente si  $T \to 0, z \to 1$  y la energía de este sistema tiende a la energía del estado base  $N\hbar\omega\delta/2$  como esperabamos.

4.3.3 Calor específico

$$C_{V} = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{N,V}$$



Fig. 4.6 Energía interna para un gas de bosones en 1D atrapado por un potencial armónico.

Derivando (4.75) respecto de T a volumen y número de partículas constante

$$C_{V} = Nk_{B} \frac{g_{2}(z)}{g_{1}(z)} + Nk_{B}T \left[ \frac{g_{1}(z)g_{2}'(z) + g_{2}(z)g_{1}'(z)}{g_{1}^{2}(z)} \right] \frac{\partial z}{\partial T}$$
(4.76)

donde la prima significa derivada respecto a z. Para encontrar la parcial de z respecto a T, usamos el hecho de que el número N de bosones es constante por tanto

$$\frac{\partial z}{\partial T} = -\frac{1}{T} \frac{g_1(z)}{g_1'(z)}.$$

El calor específico es

$$C_{V} = Nk_{B} \left[ 2 \frac{g_{2}(z)}{g_{1}(z)} - \frac{g_{1}(z)}{g_{0}(z)} \right] \qquad \forall T.$$
(4.77)

Analizando la Ec. (4.77) podemos ver que cuando  $T \to \infty$ ,  $z \to 0$  y  $g_{\sigma}(z) \cong z$  por tanto  $C_V \to Nk_B$  que refleja la Ley de Dulong y Petit para un gas en 2D, pues el gas de bosones en 1D atrapado por un potencial de oscilador armónico, lo podemos ver como un gas ideal en dos dimensiones. Analogamente cuando  $T \to 0$ ,  $z \to 1$  y  $C_V \to 0$ .



Fig. 4.7 Calor específico para un gas de bosones en 1D atrapado por un potencial armónico.

#### 4.3.4 Ecuación de estado

Para encontrar la ecuación de estado, es decir la ecuación que relaciona la energía internaU, el volumen V y la presión P del sistema, hacemos uso de un resultado de la Mecánica Estadística

$$\frac{PV}{k_BT} \equiv \ln \Xi(T, V, \mu), \qquad (4.78)$$

con  $\Xi(T, V, \mu)$  la función de partición para un gas de bosones (ensamble gran canónico) la cual está dada por

$$\Xi(T, V, \mu) = \prod_{\mathbf{k}} \left[ \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}} \right].$$
(4.79)

la Ec. (4.78) nos queda

$$\frac{PV}{k_BT} = -\sum_{\mathbf{k}} \ln(1 - z e^{-\beta \epsilon_{\mathbf{k}}}), \qquad (4.80)$$

donde  $z \equiv e^{\beta \mu_1}$ . En el límite termodinámico la suma la aproximamos por la integral

$$\frac{PV}{k_BT} = -\int_0^\infty d\epsilon g(\epsilon) \ln(1 - z e^{-\beta\epsilon}), \qquad (4.81)$$

donde la densidad de estados  $g(\epsilon)$  está dada por la ecuación (4.69). Usando ésta y haciendo una integración por partes tenemos que la ecuación de estado es

$$PV = \left[U - \frac{1}{2}N\hbar\omega\right].$$
(4.82)

#### 4.3.5 Entropía

Partiendo de la expresión para la energía libre de Gibbs [16] para un gas monoatómico la cual está dada por

$$G = N\mu = U + PV - TS, \tag{4.83}$$

incorporando la ecuación de estado en la ecuación anterior tenemos

$$TS = U + \left[U - \frac{1}{2}N\hbar\omega\right] - N\mu, \qquad (4.84)$$

y por lo tanto la entropía se muestra en la siguiente ecuación

$$S = 2Nk_B \frac{g_2(z)}{g_1(z)} - Nk_B \ln z.$$
(4.85)



Fig. 4.8 Entropía para un gas de bosones en 1D atrapado por un potencial armónico.

 Tabla 4.2 Resumen de algunas propiedades termodinámicas para los bosones en una

 dimensión atrapados por un potencial de oscilador armónico unidimensional.

1D	$\delta = 1$
$g(\epsilon)$	$\frac{1}{\hbar\omega}$
T <sub>c</sub>	0
$U/Nk_BT$	$\frac{\hbar\omega}{2k_BT} + \frac{g_2(z)}{g_1(z)}$
$C_V/Nk_B$	$2\frac{g_2(z)}{g_1(z)} - \frac{g_1(z)}{g_0(z)}$
PV	$(U-\frac{N\hbar\omega}{2})$
$S/Nk_B$	$2rac{g_2(z)}{g_1(z)} - \ln z$
$m^*$	$\frac{2\pi\hbar}{\omega L^2}$

#### 4.4 MASA EFECTIVA

Para un gas libre de bosones con una relación de dispersión general dada por

$$\varepsilon = c_s k^s$$

con  $\varepsilon$  la energía, k la magnitud del vector de onda de las partículas y  $c_s$  una constante con dimensiones de energía multiplicada por una longitud a la potencia s, la densidad de estados en d-dimensiones es

$$g(\varepsilon) = \frac{L^d}{\Gamma(\frac{d}{2})\pi^{\frac{d}{2}}2^{d+1}s} \left(\frac{1}{c_s}\right)^{\frac{d}{s}} \varepsilon^{\frac{d}{s}-1}.$$
(4.86)

Las densidades de estados para los caso estudiados aquí las resumimos a continuación

$$g(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{L}{2\pi} \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \varepsilon^{1/2} & d = 2, \ \delta = 1 \\\\ \left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^2 \varepsilon & d = 2, \ \delta = 2 \\\\ \frac{1}{\hbar\omega} & d = 1, \ \delta = 1. \end{cases}$$

Notamos que la dependencia de la densidad de estados  $g(\varepsilon)$  con la energía  $\varepsilon$ , es análoga a la de un gas ideal en  $d+\delta$  dimensiones. La igualdad entre las densidades de estado se observa si identificamos a las partículas ideales con una masa efectiva  $m^*$ . Para encontrar lo que llamamos masa efectiva igualamos las respectivas densidades de estados encontradas para los sistemas en dimensiones d = 1, 2, y número de osciladores  $\delta = 1, 2$ , con la densidad de estados en  $d + \delta$ -dimensiones de un gas ideal de bosones. Por tanto la masa efectiva para

un bosón en el respectivo sistema es

$$m^* = \begin{cases} (m)^{1/3} \left(\frac{2\pi\hbar}{L^2\omega}\right)^{2/3} & d=2, \ \delta=1 \\\\ \frac{2\pi}{L^2\omega} & d=2, \ \delta=2 \\\\ \left(\frac{2\pi\hbar}{\omega L^2}\right) & d=1, \ \delta=1. \end{cases}$$

En los tres casos podemos observar que la masa efectiva tiende a cero conforme hacemos el límite termodinámico, es decir,  $L \to \infty$ .

.

# Capítulo 5 Conclusiones

En este trabajo hemos estudiado las propiedades termodinámicas de un sistema de bosones en 1D y 2D atrapados por uno y dos potenciales tipo oscilador armónico. La obtención de estas propiedades nos permite concluir en el caso 2D que tanto para el sistema de bosones con uno y dos osciladores se obtiene una  $T_c \neq 0$ , la cual es proporcional a la densidad de partículas elevadas a la potencia  $2/(d+\delta)$ , además de que no se encontró salto en el calor específico. Cuando  $\delta = 2$ , encontramos que la relación energía-momento es lineal, comportamiento que tienen los pares de Cooper [23], además de que la masa de los bosones tiende a cero en el límite termodinámico.

Trasladar el origen de las energías por una constante no afecta las propiedades termodinámicas del sistema fue lo que nos enseñó el gas de bosones atrapado por un potencial armónico donde la energía del estado base es notoriamente diferente de cero. Se obtiene que de las propiedades termodinámicas sólo la energía interna cambia por una constante.

En el caso del gas de bosones en 1D atrapado por un potencial la temperatura crítica de condensación BE es  $T_e = 0$ , lo cual es de muy poco interés práctico dado que, por ejemplo, si estamos interesados en explicar la superconductividad como un fenómeno de CBE es natural buscar modelos que presenten propiedades superconductoras a altas  $T_e \neq 0$ . Sin embargo, teóricamente el gas de bosones en 1D atrapado por un oscilador implicó obtener la información de sus propiedades termodinámicas de una manera diferente a como se obtuvo en el caso del gas en 2D. Analizamos las propiedades del gas de bosones 1D usando como parámetro la fugacidad z, la cual creemos se puede emplear en sistemas de bosones que presenten una temparatura crítica  $T_c = 0$ . Resumiendo podemos comentar que el mejor entendimiento del fenómeno de la condensación de Bose-Einstein en un sistema de baja dimensión podría darnos una nueva pista para interpretar el fenómeno de la superconductividad como una CBE.

Es importante mencionar que la dimensionalidad del sistema y la relación de dispersión de los bosones determina si existe  $T_c \neq 0$ . Así el sistema de bosones 3D atrapado por 1, 2, 3 osciladores es distinto del sistema de bosones 2D atrapado por 1, 2 osciladores.

Finalmente, para que el presente trabajo tenga aplicabilidad en la física de nancestructuras se requiere rehacerlo pero sin la aproximación de que  $\hbar\omega \ll k_B T$ .

# Apéndice A Función de Bose

Una de las de las funciones que más hemos usado a lo largo de esta tesis es sin duda ia función de Bose, es por ello que a continuación mostramos como se calcula. La forma de la función de Bose  $g_{\sigma}(z)$  está dada por la ecuación (2.12) la cual aquí reescribimos.

$$g_{\sigma}(z) \equiv rac{1}{\Gamma(\sigma)} \int_0^\infty rac{x^{\sigma-1}}{z^{-1} e^x + 1} dx.$$

Para z pequeña

$$\begin{split} \int_0^\infty \frac{x^{\sigma-1}}{z^{-1}e^x - 1} dx &= \int_0^\infty z x^{\sigma-1} e^{-x} (1 - z e^{-x})^{-1} dx \\ &= \int_0^\infty z x^{\sigma-1} e^{-x} \sum_{l=0}^\infty (z e^{-x})^l dx \\ &= \int_0^\infty x^{\sigma-1} \sum_{l=1}^\infty (z e^{-x})^l dx \\ &= \sum_{l=1}^\infty z^l \int_0^\infty x^{\sigma-1} e^{-x^l} dx \\ (\text{Haciendo el cambio } y = xl) &= \sum_{l=1}^\infty \frac{z^l}{l^\sigma} \int_0^\infty y^{\sigma-1} e^{-y^l} dy \\ (\text{por definición } \Gamma(\nu) \int_0^\infty e^l t^{\nu-1} dt) &= \Gamma(\sigma) \sum_{l=1}^\infty \frac{z^l}{l^\sigma}. \end{split}$$

Definimos la función de Bose

$$g_{\sigma}(z) \equiv \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^{l}}{l^{\sigma}} = \frac{1}{\Gamma(\sigma)} \int_{0}^{\infty} \frac{x^{\sigma-1}}{z^{-1}e^{x} - 1} dx$$

Cuando  $z \ll 1$  la función  $g_{\sigma}(z)$  se comporta como z para toda  $\sigma$ . Puede observarse que  $g_{\sigma}(z)$  es una función monótona creciente de z cuyo valor límite para nuestro interés es 1, así cuando  $z \to 1$   $g_{\sigma}(z)$  se comporta como la función zeta de Riemann  $\zeta(\sigma)$  [15] es decir

$$g_{\sigma}(1) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{\sigma}} = \zeta(\sigma) \quad (\sigma > 1).$$
(A.1)

# Apéndice B Integral de volumen sobre la esfera *d*-dimensional.

En este Apéndice mostramos como se calcula el volumen de una esfera en *d*-diemusiones[22], la cual hemos empleado en el capítulo 3 El número de partículas está dado por la ecuación (3.1)

$$N = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \tag{B.1}$$

con

$$n_{\mathbf{k}} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}}.\tag{B.2}$$

En el límite termodinámico la suma de la Ec. (B.1) se puede aproximar con una integral, por tanto

$$N = \frac{1}{\Omega} \int d\mathbf{k} n_{\mathbf{k}} \tag{B.3}$$

con  $\Omega$  el volumen de la celda unitaria en el espacio k. La energía está dada por

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$$

donde tenemos que  $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon(k)$  depende sólo de la magnitud de  $k = \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + ... + k_d^2}$ . La ecuación (B.3) puede escribirse como

$$N = \frac{1}{\Omega} \int_0^\infty dk \ n_k \ \int_{Sk} d\sigma = \int_0^\infty \ dk n_k \ \Omega_d(k) \tag{B.4}$$

donde  $\Omega_d(\mathbf{k}) = f_{S_k} d\sigma$  es el área de la hyperesfera  $S_k$  en el espacio (d-1) dimensional. El área del hemisferio de  $S_k$  es

$$\frac{1}{2}\Omega_d(\mathbf{k}) = k^{d-1} \int_{\mathbf{B}_u} \dots \int \frac{d\mathbf{k}_{d-1}}{k_d}$$
(B.5)

sobre la bola (d-1) dimensional.  $B_k$  está dada por

$$k_1^2 + k_2^2 + \dots + k_{d-1}^2 \le k$$
$$k_d = \sqrt{k^2 - k_1^2 - \dots - k_{d-1}^2}$$

Se puede demostrar que  $\Omega_d(\mathbf{k})$  es proporcional a  $k^{d-1}$  es decir

$$\Omega_d(\mathbf{k}) = \omega_d k^{d-1} \tag{B.6}$$

Para calcular  $\omega_d$  se elige un caso particular obteniéndose

$$\omega_d = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}.\tag{B.7}$$

.

Entonces la ecuación (3.3) se escribe como

$$N = \frac{2\pi^{d/2}}{\Omega\Gamma(d/2)} \int_0^\infty n_{\bf k} k^{d-1} dk.$$
(B.8)

# Apéndice C Integral de "volumen" en el espacio k

La integral dada en el capítulo 4 por (4.3)

$$N_{ex} = \frac{1}{\Omega} \int \int dk_x dk_y \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1}$$

donde

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m}k_x^2 + \hbar v k_y + \frac{\hbar\omega}{2}$$

У

$$\begin{split} \Omega &= \left(\frac{2\pi}{L}\right) \left(\frac{\omega}{v}\right) \\ N_{ex} &= \frac{1}{\Omega} \int \int dk_x dk_y \frac{1}{e^{\beta(z-\mu)} - 1} \\ &= \left(\frac{L}{2\pi}\right) \left(\frac{v}{\omega}\right) \int \int dk_x dk_y \frac{1}{e^{\beta(\frac{h^2}{2m}k_x^2 + \hbar v k_y + \frac{\hbar \omega}{2} - \mu)} - 1} \end{split}$$

~

La integral anterior puede valuarse si hacemos el siguiente cambio de variable

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\frac{1}{2}}k_x = k\cos\theta$$
$$\hbar v k_y = k^2 \sin^2\theta$$

cuyo jacobiano es

$$J = det \begin{pmatrix} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \cos\theta & -k \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \sin\theta \\ \left(\frac{2k}{v\hbar}\right) \sin^2\theta & \left(\frac{2k^2}{v\hbar}\right) \cos\theta \sin\theta \end{pmatrix} = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \frac{2k^2}{v\hbar} \sin\theta$$

por tanto

$$N_{ex} = \left(\frac{L}{2\pi}\right) \left(\frac{v}{\omega}\right) \frac{2}{vh} \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{1/2} \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^\infty dk \frac{k^2}{e^{\beta(k^2 + \frac{\lambda\omega}{2} - \mu)} - 1}$$

.

realizando la integral en teta

$$N_{ex} = \left(\frac{2L}{\pi}\right) \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \int_0^\infty dk \frac{k^2}{e^{\beta(k^2 + \frac{\hbar\omega}{2} - \mu)} - 1}$$

haciendo el cambio  $\epsilon = k^2$  y sea  $\mu = \mu_0 + \mu_1$ 

$$N_{ex} = \left(\frac{L}{\pi}\right) \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{e^{\beta(\epsilon-\mu_1)} - 1}$$
$$N_{ex} = \left(\frac{L}{\pi}\right) \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{e^{\beta(\epsilon-\mu_1)} - 1}$$

Finalmente, sca $x = \beta \epsilon$  y  $z = c^{\beta \mu_1}$  entonces

$$N_{ex} = \left(\frac{L}{\pi}\right) \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{e^{\beta(\epsilon-\mu_1)} - 1}$$
$$= \left(\frac{L}{\pi}\right) \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \beta^{-3/2} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{e^x z^{-1} - 1}$$

usando la función de Bose respectiva, y recordando que  $\beta = 1/k_BT$  tenemos

$$N_{ex} = \left(\frac{L}{\pi}\right) \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} (k_B T)^{3/2} g_{3/2}(z) \Gamma(3/2)$$
(C.1)

pero  $\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$  así que finalmente

$$N_{ex} = \frac{L}{2} \frac{1}{\hbar\omega^2} \left(\frac{2m}{\pi\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} (k_B T)^{3/2} g_{3/2}(z).$$
(C.2)

Para encontrar la Ec. (4.42) se procede de manera análoga.

# Apéndice D Ecuación de Estado

Para encontrar la ecuación de estado, es decir la ecuación que relaciona la energía nterna U, el volumen V y la presión P del sistema, hacemos uso de un resultado de la Mecánica Estadística

$$\frac{PV}{k_BT} \equiv \ln \Xi(T, V, \mu) \tag{D.1}$$

con  $\Xi(T, V, \mu)$  la función de partición para un gas de bosones (ensambe gran canónico) la cual está dada por

$$\Xi(\mathcal{T}, V, \mu) = \prod_{\mathbf{k}} \left[ \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}} \right].$$
(D.2)

por la manera que definimos  $\epsilon_{-}$  y  $\mu$  en la Sec. 1 de este capítulo, podemos escribir la ecuación anterior como

$$\Xi(T, V, \mu) = \prod_{\mathbf{k}} \left[ \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_1)}} \right].$$
(D.3)

$$\frac{PV}{k_{\mathcal{B}}T} = -\sum_{\mathbf{k}} \ln(1 - ze^{-\beta\epsilon_{\mathbf{k}}}) \tag{D.4}$$

donde  $z \equiv e^{\beta \mu_1}$ ,  $\mu_1 = \mu - 1/2\hbar\omega$  y  $\mu$  el potencial químico. En el límite termodinámico la suma la aproximamos por la integral

$$\frac{PV}{k_BT} = -\int_0^\infty d\epsilon g(\epsilon) \ln(1 - ze^{-\beta\epsilon}), \qquad (D.5)$$

donde la densidad de estados  $g(\epsilon)$  está dada por la ecuación (4.9). Usando ésta y haciendo una integración por partes tenemos que

sea

y

$$dv = \epsilon^{1/2} d\epsilon$$

realizando la integral por partes

$$\frac{PV}{k_BT} = -\frac{L}{2\pi} \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{2}{3}\ln(1-ze^{-\beta\epsilon})\epsilon^{3/2} \frac{z^{\infty}}{b^0} - \frac{2}{3} \int_0^\infty d\epsilon \frac{z\beta e^{-\beta\epsilon}}{1-ze^{-\beta\epsilon}} \epsilon^{3/2}\right].$$
(D.6)

el primer término dentro del paréntesis cuadrado es cero cuando se sustituyen los límites de integración por tanto

$$\frac{PV}{k_BT} = \frac{2L}{3\pi} \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \int_0^\infty d\epsilon \frac{z\beta e^{-\beta\epsilon}}{1 - ze^{-\beta\epsilon}} \epsilon^{3/2} \tag{D.7}$$

multiplicando el término de la integral por  $z^{-1}e^{\beta\epsilon}/z^{-1}e^{\beta\epsilon}$ 

$$\frac{PV}{k_BT} = \frac{2L}{3\pi} \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\beta \epsilon^{3/2}}{z^{-1} e^{\beta \epsilon} - 1} \tag{D.8}$$

haciendo un cambio de variable, se<br/>a $x=\beta\epsilon$ 

$$\frac{PV}{k_B T} = \frac{2L}{3\pi} \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} (k_B T)^{3/2} \int_0^\infty dx \frac{x^{3/2}}{z^{-1} e^x - 1}$$
$$= \frac{2L}{3\pi} \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} (k_B T)^{3/2} g_{5/2}(z) \Gamma(5/2)$$

$$= \frac{L}{2} \frac{1}{\hbar^2 \omega} \left(\frac{2m}{\pi}\right)^{1/2} (k_B T)^{3/2} g_{5/2}(z) \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}$$

donde  $\Gamma(5/2) = 3\pi^{1/2}/4$  además de la Ec. (4.13) tenemos que

$$(k_B T)^{3/2} = \frac{2N}{L} \frac{\hbar^2 \omega}{g_{3/2}(1)} \left(\frac{\pi}{2m}\right)^{1/2}$$

y por tanto

$$\frac{PV}{k_BT} = \frac{2N}{2} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(1)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}.$$

Pero de la Ec. (4.19)

$$-N\frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(1)}\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} = \frac{2U}{3k_BT} - \frac{N\hbar\omega}{3k_BT}.$$

teniendo finalmente

$$PV = \frac{2}{3} \left[ U - \frac{N\hbar\omega}{2} \right]. \tag{D.9}$$

.

٠

### Lista de figuras

- **Figura 2.1** Densidad de estados  $g(\varepsilon)$  para un gas ideal 3D de bosones.
- Figura 2.2 Fracción condensada para un gas ideal 3D de bosones.
- Figura 2.3 Energía interna de un gas ideal 3D de bosones.
- Figura 2.5 Entropía S de un gas ideal 3D de bosones.
- Figura 4.1 Fracción condensada para un gas de bosones 2D atrapados por  $\delta = 1, 2, 3$ osciladores armónicos.
- Figura 4.2 Energía interna para un gas 2D de bosones atrapados por  $\delta = 1$ , 2 osciladores armónicos.
- Figura 4.3 Calor específico  $C_V$  para un gas 2D de bosones atrapados por  $\delta = 1, 2$  osciladores armónicos.
- Figura 4.4 Entropía para un gas 2D de bosones atrapados por  $\delta = 1, 2$  potenciales armónicos.
- Figura 4.5 Potencial químico y fugacidad para un gas 1D de bosones atrapados por un potencial armónico.
- Figura 4.6 energía interna para un gas 1D de bosones atrapados por un potencial armónico.
- Figura 4.7 Calor específico para un gas 1D de bosones atrapados por un potencial armónico.
- Figura 4.8 Entropía para un gas 1D de bosones atrapados por un potencial armónico.

### Lista de tablas

- Tabla 4.1 Resumen de algunas de las propiedades termodinámicas para un gas bidimensional de bosones atrapados por  $\delta = 1, 2$  osciladores armónicos.
- Tabla 4.2Resumen de algunas de las propiedades termodinámicas para un gas unidi-<br/>mensional de bosones atrapado por un potencial armónico.

#### References

- C. Fernández-Pineda, L. L. Sánchez-Soto, "A la búsqueda de la condensación perdida: el gran sueño de Bose y Einstein," Rcv. Esp. Fís., 9 (3), (1995).
- [2] P. Kapitza, Nature 141, 74 (1938).
- [3] F. London, "On Bose-Einstein Condensation," Phys. Rev. 54, 947 (1938); F. London Nature 141, 74 (1938).
- [4] J. M. Blatt and K. W. Boer, "Bose-Einstein Condensation of excitons," Phys. Rev. 126, 1691 (1962); D. W. Snoke, J. P. Wolfe and A. Mysyrowicz, "Evidence for Bose-Einstein condensation of excitons in Cu<sub>2</sub>O," Phys. Rev. B 41, 11171 (1990); J.L. Lin and J.P. Wolfe, "Bose-Einstein Condensation of Paraexcitons in Stressed Cu<sub>2</sub>O," Phys. Rev. Lett. 71, 1222 (1993); A. V. Korolev, M. A. Liberman, "Bose condensation and superfluidity of excitons in a high magnetic field," Phys. Rev. B 50, 14077 (1994).
- [5] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. e. Wieman, E. A. Cornell, "Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor," Science 269, 198 (1995).
- [6] F.J Sevilla, "Gas de Bosones atrapados por potenciales armonicos," tesis profesional, Facultad de Ciencias, U.N.A.M (2000).
- [7] J. G. Bednorz and K. A. Müller, "Possible High T<sub>c</sub> Superconductivity in the Ba-La-Cu-O System," Z. Phys. B 64, 189 (1986)

- [8] S. Kivelson and S.C. Zhang, "Electrons in Flatland," Scientific American 274 (3), 64 (1996).
- [9] D.S Petrov, M. Holmann, and G.V Shlyapnikov, "Bose-Einstein Condensation in Quasi-2D Trapped Gases," Phys. Rev. A 84, 4188 (2000).
- [10] M. Casas, M. Fortes, S. Fujita, M. Getino, M. de Llano, O. Rojo, H. Rubio y M. A. Solís "Condensación Bose-Einstein y Superconductividad", Ciencia y Desarollo (1996)
- [11] M. A. Reed "Quantum Dots," Scientific American 268 (1), 118 (1993).
- [12] E. Corcoran, G. Zorpette, "Dimnishing dimensions," Scientific American 263 (5), 74 (1990).
- [13] K. Huang, Statistical Mechanics (Wiley, N.Y., 1963).
- [14] F. London, Superfluids II (Wiley, N.Y., 1954).
- [15] R.K. Pathria, Statistical Mechanics, 2nd Edition (Pergamon, Oxfor, 1996).
- [16] H.B. Callen, Thermodynamics and an introduction to thermostatistics, Second Edition (John Wiley, N.Y., 1972).
- [17] V. C. Aguilera, M. de Llano and M. A. Solís, "Bose-Einstein Condensation for general dispersion relations," Eur. J. Phys. 20, 177 (1999).
- [18] K. Kirsten, D. J. Toms, "Density of states for Bose-Einstein condensation in harmonic oscillator potentials," Phys. Lett. A 222, 148-151 (1996).
- [19] K. Kirsten, D. J. Toms, "Bose-Einstein condensation of atomic gases in a general harmonic-oscillator confining potential trap," Phys. Rev. A 54, 4188 (1996).
- [20] C. Cohen-Tannoudji, B. Din, F. Lalöe, Quantum Mechanics, Vol. 1 (John Wiley & sons).
- [21] R. K. Pathria, "Bose-Einstein condensation of a finite number of particles confined to harmonic traps," Phys. Rev. A 58, 1490 (1998).
- [22] R.K. Pathria, Statistical Mechanics (Pergamon Press, N.Y., 1985).
- [23] M. Casas, M de Llano, A. Puente, A. Rigo, M. A. Solís, "The Cooper pair dispersion realtion," Physica C 295, 93 (1998)