



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

**SISTEMAS FINITOS DE BOSONES
RESTRINGIDOS ESPACIALMENTE**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:

SAÚL TAPIA REYNOSO

DIRECTOR DE TESIS: DR. MIGUEL ANGEL SOLÍS ATALA



posgrado en ciencias físicas
u n a m

MÉXICO, D.F.

AGOSTO

2007



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.

Dedicatoria

A mis padres **Doña Aurora y Don Chava.....Gracias**

A mis hermanos **Mago, Miguel y Chava.**

Agradecimientos

Quiero agradecer a los Drs. Manuel de Llano de la Garza, Dr. Mauricio Fortes Besprosvani y Miguel Ángel Solís Atala, la oportunidad de trabajar bajo su dirección, la confianza y apoyo recibido para la realización de mi tesis de maestría, la dedicación, motivación y su disposición académica tan profesional que los distingue.

Al Jurado integrado por: Dr. Miguel Ángel Solís Atala, Dra. Rosario Paredes Gutiérrez y Dr. Mauricio Fortes Besprosvani del IF-UNAM; Dr. Luis Felipe del Castillo Dávila del IIM-UNAM; Dra. Jacqueline Quintana Hinojosa del IQ-UNAM, por sus comentarios, sugerencias y críticas (siempre positivas) que han enriquecido la presentación final de este trabajo.

Al Posgrado en Ciencias Físicas, UNAM.

Al Instituto de Física, UNAM, que como estudiante asociado me permitió disponer de sus instalaciones y servicios durante la elaboración de esta tesis.

Al CONACyT agradezco la beca completa de Maestría que disfruté seis meses, y los apoyos económicos que recibí a través del proyecto No. 43234-F

Índice

Dedicatoria	ii
Agradecimientos	iii
Colaboración en artículos publicados	iv
Resumen	1
1 Introducción	2
2 Sistema finito de bosones ideales	9
2.1 Bosones en tres dimensiones	9
2.2 Bosones en dos dimensiones	14
2.3 Bosones en una dimensión	18
3 Sistema finito de bosones atrapados por potenciales armónicos	21
3.1 Sistema infinito de bosones	21
3.1.1 Bosones en 2D atrapados por 2 osciladores armónicos con aproximación	25
3.1.2 Bosones en 1D atrapados por 1 oscilador armónicos con aproximación	31
3.2.1 Bosones en 2D atrapados por 2 osciladores armónicos usando sumas	34
3.2.2 Bosones en 2D atrapados por un oscilador armónico usando sumas	36
3.2.3 Bosones en 1D atrapados por un oscilador armónico usando sumas	40
4 Conclusiones	43
Apéndice A. Gas ideal	45
Apéndice B. Programas de fortran usados	50
Referencias	63

Resumen

En el presente trabajo estudiamos un gas compuesto de un número finito N de bosones en 2D y 1D, restringidos espacialmente por potenciales externos de oscilador armónico, donde evitamos aproximar las sumas por integrales. Por un lado queremos avanzar en entender la superconductividad de sistemas de dimensiones menores que tres, como una Condensación de Bose-Einstein (CBE) de pares de Cooper, pero por otro lado, queremos describir las propiedades termodinámicas del gas de bosones en 2D restringido espacialmente por un potencial armónico, sistema que podemos pensar como un hilo cuántico (“quantum wire”); mientras que al gas de bosones en 1D y 2D atrapados por uno y dos osciladores armónicos, respectivamente, lo podemos pensar como un punto cuántico (“quantum dot”). Para poner las bases, primero analizamos un gas ideal de un número finito de bosones en una “caja” en 3D, 2D y 1D, sin aproximar las sumas por integrales y mostramos el efecto del número finito de partículas sobre las propiedades termodinámicas tales como la energía interna y el calor específico.

Posteriormente analizamos el comportamiento termodinámico de estos mismos sistemas finitos restringidos por potenciales externos, procurando no realizar aproximación alguna manteniendo las sumas en lugar de aproximarlas por integrales. Reportamos las principales propiedades termodinámicas tales como la energía interna y el calor específico, mostrando las diferencias y acercamiento al límite termodinámico conforme aumentamos el número de partículas manteniendo la densidad constante.

De los resultados vemos que la importancia de la finitud del número de partículas en las propiedades del sistema, se hace más notoria conforme disminuimos la dimensión espacial del sistema, en donde las sumas no se pueden aproximar por integrales sin perder precisión.

Capítulo 1

Introducción

Albert Einstein auguró en 1924 [1], a partir de cálculos teóricos basados en la nueva estadística propuesta por el físico indio Satyendranath Bose, que el enfriamiento a bajísimas temperaturas de los átomos de un gas podría llevarles a moverse muy lentamente, aproximarse entre sí y dar lugar a un nuevo “estado de la materia.” El proceso era similar a la formación de gotas de un líquido en un gas, de ahí que su resultado se bautizara como “condensación Bose-Einstein.”

Casi 77 años después, tres científicos dos estadounidenses y un alemán han sido premiados con el Nobel de Física por haber creado en el laboratorio ese nuevo estado de la materia, cuyas “revolucionarias aplicaciones están a la vuelta de la esquina,” según la Real Academia Sueca de Ciencias. El logro se remonta a hace doce años cuando trabajando en dos equipos independientes, los galardonados hicieron realidad lo vaticinado por Bose y Einstein. El 5 de junio de 1995, en su laboratorio de la Universidad de Colorado, Carl Wieman y Eric Cornell [2] enfriaron átomos de rubidio hasta milmillonésimas de grado sobre el cero absoluto (-273.15C). A esa temperatura, 2000 átomos se condensaron en un “superátomo” que se comportaba como una sola “entidad.” Cuatro meses después en el Instituto Tecnológico de Massachusetts (MIT), el físico alemán Wolfgang Ketterle [3] obtuvo similares resultados con sodio. Cornell y Weiman compartieron el Premio Nobel de Física 2001 con Ketterle “por lograr la condensación de Bose-Einstein en gases diluidos de átomos alcalinos, y por los primeros estudios fundamentales de las propiedades de los condensados.”

Los átomos de un gas se mueven a temperatura ambiente a unos 1,600 kilómetros por hora y lo hacen más lentamente según desciende la temperatura, explicaba en 1995 Eric Cornell. Él y Wieman consiguieron temperaturas tan bajas que frenaron los átomos de rubidio hasta tal punto que eran “demasiado lentos como para medir su velocidad.” Las temperaturas logradas por Wieman y Cornell y posteriormente por Ketterle [4] eran mucho menores que las existentes incluso en las más inhóspitas regiones del espacio interestelar, donde a pesar de que la temperatura es muy baja no llega a esos extremos debido a que la radiación de fondo -el rescoldo del Big Bang- “templa el vacío.”

Los primeros estudios teóricos de sistemas de gases bosónicos en 2D [5] 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 armónico 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 [6] 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 ω la frecuencia de oscilación. Teóricamente, es bien conocido [7] que la CBE para un gas de ideal de bosones libres 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 .

La descripción teórica de la CBE en las trampas magneto-ópticas anisotrópicas en una dirección, se puede realizar modelando al sistema como uno de bosones en 2D débilmente interactuante afectado exteriormente por un potencial de oscilador armónico bidimensional e isotrópico .

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 de un número finito N de bosones [8, 9, 10] donde evitamos aproximar las sumas por integrales. Por un lado queremos avanzar en entender la superconductividad de sistemas de dimensiones menores que tres, como una CBE [11].

Los pares de Cooper como bosones

Debido al hecho de que los pares de BCS, mal llamados pares de Cooper, no satisfacen las reglas de conmutación, Ecs. (2.11) a (2.13) Ref.[12]

$$[b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}'}^\dagger]_- = (1 - n_{-\mathbf{k}\downarrow} - n_{\mathbf{k}\uparrow})\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (1.1)$$

$$[b_{\mathbf{k}}^\dagger, b_{\mathbf{k}'}^\dagger]_- = [b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}'}]_- = 0 \quad (1.2)$$

$$[b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}'}]_+ = 2b_{\mathbf{k}}b_{\mathbf{k}'}(1 - \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}). \quad (1.3)$$

donde $n_{\pm\mathbf{k} s} \equiv a_{\pm\mathbf{k} s}^\dagger a_{\pm\mathbf{k} s}$ es el operador de número de fermiones, con $a_{\mathbf{k}_1s}^\dagger$ $a_{\mathbf{k}_1s}$ los operadores de creación y aniquilación de fermiones respectivamente, se concluye que éstos no son bosones y por lo tanto la teoría BCS y la Condensación Bose-Einstein no están de algún modo relacionadas. Estas afirmaciones son consecuencia del trabajo de BCS donde textualmente se dice “*our transition is not analogous to a Bose-Einstein condensation (BEC)*” (ver pie de página 18 en Ref. [12]). Posteriormente también Bardeen escribió [13] “*...the picture by Schafroth (1955)...of electron pairs...which at low temperature undergo a BEC, is not valid.*”

Ahora demostraremos cuantitativamente que mientras los pares de BCS no satisfacen las reglas de conmutación de Bose, los pares de Cooper sí, pues estos últimos consisten sólo de aquellos términos que tienen una correspondencia uno a uno con operadores de

pares de BCS que sí las satisfacen. Sean $a_{\mathbf{k}_1 s}^\dagger$ $a_{\mathbf{k}_1 s}$ los operadores de creación y aniquilación de fermiones respectivamente, que satisfacen las reglas de anticonmutación de Fermi

$$\{a_{\mathbf{k}_1 s}^\dagger, a_{\mathbf{k}'_1 s'}^\dagger\} = \{a_{\mathbf{k}_1 s}, a_{\mathbf{k}'_1 s'}\} = 0 \quad (1.4)$$

$$\{a_{\mathbf{k}_1 s}, a_{\mathbf{k}'_1 s'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}'_1} \delta_{s s'}. \quad (1.5)$$

Los operadores de aniquilación y creación de pares de BCS están, respectivamente, definidos como

$$b_{\mathbf{kK}} \equiv a_{\mathbf{k}_2 \downarrow} a_{\mathbf{k}_1 \uparrow} \quad y \quad b_{\mathbf{kK}}^\dagger \equiv a_{\mathbf{k}_1 \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 \downarrow}^\dagger \quad (1.6)$$

donde

$$\mathbf{k} \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \quad y \quad \mathbf{K} \equiv \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 \quad (1.7)$$

son los vectores de onda relativo y de centro de masa, respectivamente, asociados con los vectores de onda de dos fermiones

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{K}/2 + \mathbf{k} \quad y \quad \mathbf{k}_2 = \mathbf{K}/2 - \mathbf{k}. \quad (1.8)$$

Los operadores $b_{\mathbf{kK}}$ y $b_{\mathbf{kK}}^\dagger$ satisfacen: a) las reglas de conmutación de pseudobosones

$$[b_{\mathbf{kK}}, b_{\mathbf{k}'\mathbf{K}}^\dagger] = (1 - n_{\mathbf{K}/2 - \mathbf{k} \downarrow} - n_{\mathbf{K}/2 + \mathbf{k} \uparrow}) \delta_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} \quad (1.9)$$

$$[b_{\mathbf{kK}}^\dagger, b_{\mathbf{k}'\mathbf{K}}^\dagger] = [b_{\mathbf{kK}}, b_{\mathbf{k}'\mathbf{K}}] = 0 \quad (1.10)$$

donde

$$n_{\mathbf{K}/2 \pm \mathbf{k} s} \equiv a_{\mathbf{K}/2 \pm \mathbf{k} s}^\dagger a_{\mathbf{K}/2 \pm \mathbf{k} s} \quad (1.11)$$

es el operador de número de fermiones; y b) la reglas de anticonmutación de pseudofermiones

$$\{b_{\mathbf{kK}}, b_{\mathbf{k}'\mathbf{K}}\} = 2b_{\mathbf{kK}} b_{\mathbf{k}'\mathbf{K}} (1 - \delta_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}). \quad (1.12)$$

La única restricción que se tiene es $\mathbf{K} \equiv \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2$.

Claramente, los pares de BCS *no son* bosones pues (1.9) hace imposible que se satisfagan [14] las reglas ordinarias de conmutación de Bose

$$[b_{\mathbf{k}\mathbf{K}}, b_{\mathbf{k}'\mathbf{K}}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (1.13)$$

$$[b_{\mathbf{k}\mathbf{K}}^\dagger, b_{\mathbf{k}'\mathbf{K}}^\dagger] = [b_{\mathbf{k}\mathbf{K}}, b_{\mathbf{k}'\mathbf{K}}] = 0. \quad (1.14)$$

En el caso $\mathbf{K} = \mathbf{0}$ (de tal modo que $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}$, el único caso considerado por BCS), y definiendo $b_{\mathbf{k}\mathbf{K}=\mathbf{0}} \equiv b_{\mathbf{k}}$, etc., (1.9), (1.10) y (1.12) se transforman en las ecuaciones (2.11)-(2.13) de la Ref. [12].

Ahora bien, en pleno contraste con los pares de BCS que obedecen (1.9)-(1.12), los pares de Cooper, por otro lado, pueden ocupar estados de energía η_K con el valor de \mathbf{K} definido que involucra muchos valores de \mathbf{k} distintos. Así, en un par de Cooper con \mathbf{K} definida, sólo términos con $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ pueden ocurrir (principio de exclusión de Pauli), de tal forma que $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = 0$ y entonces tanto (1.9) como (1.10) se convierten en las reglas de conmutación (1.13) y (1.14), respectivamente, y (1.12) se vuelve simplemente una identidad. El caso $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ puede ocurrir sólo para pares de BCS pero nunca para pares de Cooper pues estos no tienen un valor definido de \mathbf{k} .

Aunque los eigenvalores de $b_{\mathbf{k}\mathbf{K}}^\dagger b_{\mathbf{k}\mathbf{K}}$ son 0 o 1 en perfecta concordancia con el principio de exclusión de Pauli, los eigenvalores de $\sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}\mathbf{K}}^\dagger b_{\mathbf{k}\mathbf{K}}$ son 0, 1, 2, ..., [15] en concordancia con la estadística de Bose-Einstein y esto corrobora la demostración cualitativa dada arriba. Nótese que lo anterior es válido para cualquier acoplamiento, es decir, no importa el tamaño del par de Cooper ni su traslape mútuo.

Hasta donde sabemos, si bien no se han podido deducir los operadores de creación y aniquilación de pares de Cooper (que en el CBFM postulamos bosónicos en base a los experimentos de cuantización de flujo magnético, que establecen que hay tanto portadores

con carga e como con carga $2e$ en todos los tipos de superconductores) a partir de los operadores fermiónicos del hamiltoniano no perturbado que define al estado normal y por tanto mostrar que obedecen las reglas de conmutación de Bose, si es un hecho que los pares de Cooper obedecen la estadística de Bose pues *no* dependen de \mathbf{k} sino sólo de \mathbf{K} .

Por otro lado, el gas de bosones en 2D atrapado por un oscilador armónico lo podemos pensar como un hilo cuántico (“quantum wire”) mientras que al gas de bosones en 2D y 1D atrapados por dos y un oscilador armónico repectivamente lo podemos pensar como un punto cuántico (“quantum dot”), y de esta forma dar las propiedades termodinámicas de estos sistemas. La tabla 1.0 muestra algunos átomos bosónicos que se han condensado hasta la elaboración de este trabajo.

En el Capítulo 2 analizamos un gas ideal de un número finito de bosones en una “caja” en 3D, 2D y 1D, usando sumas en lugar de integrales [16] reportando propiedades termodinámicas tales como la energía interna y el calor específico.

En el Capítulo 3 analizamos el comportamiento termodinámico del gas de un número finito de N bosones en dos y una dimensión, atrapados por potenciales externos tipo oscilador armónico usando sumas en lugar de integrales y reportamos las principales propiedades termodinámicas tales como la energía interna y el calor específico.

El Capítulo 4 contiene nuestras conclusiones.

Boson	$^{87}_{37}\text{Rb}$	^7_3Li	$^{23}_{11}\text{Na}$	^1_1H	$^{85}_{37}\text{Rb}$	^4_2He	$^{41}_{19}\text{K}$	$^{133}_{55}\text{Cs}$	$^{50}_{24}\text{Cr}$
Año/Ref.	1995 [17]	1995 [19]	1995 [18]	1998 [20]	2000 [21]	2001 [22]	2001 [23]	2003 [24]	2005 [25]
N	2×10^4	2×10^5	5×10^5	-	-	8×10^6	-	2×10^4	
N_0	2×10^3	-	-	10^9	10^4	5×10^5	10^4	1.6×10^4	5×10^4
$T_c(\mu\text{K})$	0.17	0.4	2	50	0.015	4.7	0.16	0.46	0.7
$n(\text{cm}^{-3})$	2.5×10^{12}	2×10^{12}	1.5×10^{14}	4.8×10^{15}	1×10^{12}	3.8×10^{13}	6×10^{11}	1.3×10^{13}	

Tabla 1.0. Algunos parámetros experimentales asociados con gases bosónicos atrapados en los cuales se ha observado BEC. N y N_0 son números de átomos en el estado inicial y condensado, respectivamente; T_c la temperatura de transición; n la densidad de número de bosones [26].

Capítulo 2

Sistemas finitos de bosones ideales

2.1 Propiedades termodinámicas para el gas ideal de bosones en tres dimensiones para una relación de dispersión cuadrática

En este capítulo consideramos un gas de bosones dentro de una “caja tridimensional” de lado L y un número finito N de bosones. Los autores que han tratado este caso terminan aproximando sumas con integrales [16] mientras que nosotros obtenemos las propiedades termodinámicas usando solamente sumas, los bosones no interactúan entre sí, ni con las paredes de la caja [27, 28, 29]. El espectro de energías de cada partícula bosónica se obtiene resolviendo la ecuación de Schrödinger de una partícula libre con condiciones periódicas en las paredes, es decir

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2),$$

con

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

donde k_x, k_y, k_z , son tres números de onda independientes. Notemos que la relación de dispersión (energía ε como función del momento traslacional $\hbar k$) 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 temperatura¹ T_c , una *fracción apreciable* del total N de bosones empieza a ocupar el nivel más bajo. A este

¹Ver Apéndice A

fenómeno se le denomina *condensación de Bose-Einstein*. Sustituyendo los valores de las $k_{x,y,z}$ en términos de las $n_{x,y,z}$ tenemos que la energía por bosón toma la forma

$$\varepsilon_{n_{x,y,z}} = \frac{4(\pi\hbar)^2}{2mL^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2). \quad (2.1)$$

Número de bosones

De esta manera los N bosones se distribuyen energéticamente según la distribución de Bose-Einstein

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

con ε la energía de la partícula y $\mu(T)$ el potencial químico del sistema. El número total N de bosones está dado por

$$\begin{aligned} N &= \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \sum_{n_z=-\infty}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{n_{x,y,z}}-\mu)} - 1} \\ &= \frac{1}{z^{-1} - 1} + \sum'_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum'_{n_y=-\infty}^{\infty} \sum'_{n_z=-\infty}^{\infty} \frac{1}{z^{-1} e^{b(n_x^2+n_y^2+n_z^2)} - 1}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

donde la suma primada significa que se excluyen los valores $(n_x, n_y, n_z) = (0, 0, 0)$, hemos usado (A.1) para obtener (A.2) con $z = e^{\beta\mu}$ la fugacidad y $\beta = 1/k_B T$. Con $b = [\pi(g_{3/2}(1)/N)^{2/3}]/\tilde{T}$ con $\tilde{T} = T/T_0$ y $T_0 = 2\pi\hbar^2/mk_B[N/L^3 g_{3/2}(1)]^{2/3}$ es la temperatura del gas ideal en 3D con la misma densidad de partículas en el límite termodinámico, $g_{3/2}(1) \equiv \xi(3/2)$ la función zeta de Riemann de orden 3/2. Es fácil ver que para un gas de bosones este potencial químico debe ser no positivo en caso contrario al menos la expresión para el número de partículas perdería sentido, así que en un gas de Bose se gana energía al perder partículas y se disminuye energía al tomarlas.

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

$$\begin{aligned}
 U &= \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \sum_{n_z=-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon_{n_x,y,z}}{e^{\beta(\varepsilon_{n_x,y,z}-\mu)} - 1} \\
 &= b \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \sum_{n_z=-\infty}^{\infty} \frac{(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)}{z^{-1}e^{b(n_x^2+n_y^2+n_z^2)} - 1}.
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

En la fig. 2.1 mostramos las curvas de energía interna entre $k_B T$ como función de la temperatura normalizada a la temperatura del gas ideal en el límite termodiámico, la figura representa la variación de la energía interna del sistema cuando variamos el número N de partículas y el número de estados $k_{x,y,z}$ respectivamente.

Calor específico

El calor específico a volumen constante $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{N,V}$ se obtiene derivando con respecto a la temperatura la expresión (2.3) para la energía interna.

$$\begin{aligned}
 C_V &= \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \sum_{n_z=-\infty}^{\infty} \frac{(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) z^{-1} e^{b(n_x^2+n_y^2+n_z^2)}}{(z^{-1}e^{b(n_x^2+n_y^2+n_z^2)} - 1)^2} \left[b^2(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) - b \ln z \right] \\
 &+ \frac{4\pi\hbar^2}{2mL^2} \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \sum_{n_z=-\infty}^{\infty} \frac{(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) z^{-1} e^{b(n_x^2+n_y^2+n_z^2)}}{(z^{-1}e^{b(n_x^2+n_y^2+n_z^2)} - 1)^2} \frac{\mu'(T)}{k_B T},
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

donde la prima significa la derivada respecto a T . Para encontrar $\mu'(T)$ usamos la Ec. (A.2) sabiendo que N es constante y entonces $\partial N / \partial T = 0$. Realizando la derivada y despejando $\mu'(T)$ tenemos

$$\begin{aligned}
 \frac{\mu'(T)}{k_B T} &= -2 \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \sum_{n_z=0}^{\infty} \frac{z^{-1} e^{b(n_x^2+n_y^2+n_z^2)}}{(z^{-1}e^{b(n_x^2+n_y^2+n_z^2)} - 1)^2} \left[\frac{b}{T}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) - \frac{\ln z}{T} \right] / \\
 &\left[2 \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \sum_{n_z=0}^{\infty} \frac{z^{-1} e^{b(n_x^2+n_y^2+n_z^2)}}{(z^{-1}e^{b(n_x^2+n_y^2+n_z^2)} - 1)^2} - \frac{z^{-1}}{(z^{-1} - 1)^2} \right].
 \end{aligned}$$

sustituyendo la expresión para $\mu'(T)$ en (2.4) tenemos

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{1}{N} \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \sum_{n_z=-\infty}^{\infty} \frac{(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) z^{-1} e^{b(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)}}{(z^{-1} e^{b(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)} - 1)^2} \left[b^2(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) - b \ln z \right] \\
&- \frac{4}{N} \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \sum_{n_z=0}^{\infty} \frac{(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) z^{-1} e^{b(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)}}{(z^{-1} e^{b(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)} - 1)^2} \left\{ \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \sum_{n_z=0}^{\infty} \frac{z^{-1} e^{b(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)}}{(z^{-1} e^{b(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)} - 1)^2} \times \right. \\
&\left. \left[b^2(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) - b \lg z \right] / \left[2 \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \sum_{n_z=0}^{\infty} \frac{z^{-1} e^{b(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)}}{(z^{-1} e^{b(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)} - 1)^2} - \frac{z^{-1}}{(z^{-1} - 1)^2} \right] \right\} \quad (2.5)
\end{aligned}$$

En la fig. 2.2 mostramos las curvas del calor específico a volumen constante, por partícula en 3D como función de la temperatura, la figura representa la variación del calor específico del sistema cuando variamos el número N de partículas y el número de estados $k_{x,y,z}$ respectivamente.

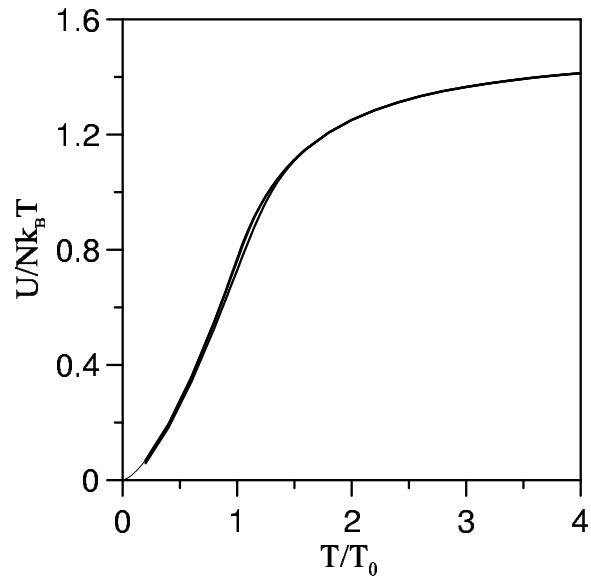


Fig. 2.1 Energía interna U entre $k_B T$ por partícula en 3D como función de la temperatura para $N = 100, 1000, 10000$ partículas y $k_{x,y,z} = 30, 100, 200$ estados respectivamente.

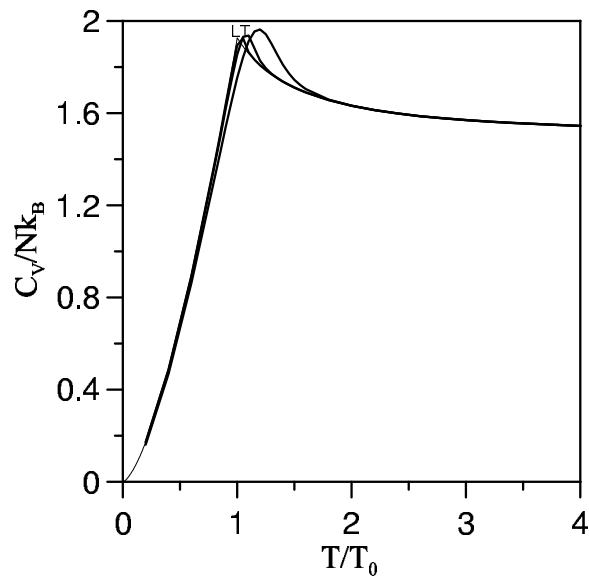


Fig. 2.2 Calor específico a $V=\text{cte}$, por partícula en 3D como función de la temperatura para $N = 100, 1000, 10000$ partículas y $k_{x,y,z} = 30, 100, 200$ estados respectivamente. LT (límite termodinámico).

2.2 Propiedades termodinámicas para el gas ideal de un número N finito de bosones en dos dimensiones

La energía de cada partícula bosónica corresponde a la energía de una partícula libre en dos dimensiones, es decir

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2),$$

con

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

sustituyendo k_x y k_y en la penúltima ecuación tenemos que la energía por bosón toma la forma

$$\varepsilon_{n_x, n_y} = \frac{4(\pi\hbar)^2}{2mL^2}(n_x^2 + n_y^2). \quad (2.6)$$

Número de bosones

El número total N de bosones está dado por

$$\begin{aligned} N &= \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{n_x, n_y} - \mu)} - 1} \\ &= \frac{1}{z^{-1} - 1} + \sum'_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum'_{n_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{z^{-1} e^{b(n_x^2 + n_y^2)} - 1}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

donde donde la suma primada significa que se excluyen los valores $(n_x, n_y) = (0, 0)$, hemos usado (2.6) para obtener (2.7) con $z = e^{\beta\mu}$ la fugacidad, $\mu(T)$ el potencial químico, $b = 4(\pi\hbar)^2/2mL^2 k_B T$, y $T_0 = 4(\pi\hbar)^2 N/2mL^2 k_B$.

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

$$U = \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon_{n_x, n_y}}{e^{\beta(\varepsilon_{n_x, n_y} - \mu)} - 1}$$

$$= b \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \frac{(n_x^2 + n_y^2)}{z^{-1}e^{b(n_x^2+n_y^2)} - 1}. \quad (2.8)$$

En la fig. 2.3 mostramos las curvas de energía interna entre $k_B T$ como función de la temperatura para un sistema en dos dimensiones, la figura representa la variación de la energía interna del sistema cuando variamos el número N de partículas y el número de estados $k_{x,y}$ respectivamente.

Calor específico

El calor específico a volumen constante $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{N,V}$ se obtiene derivando la expresión (2.8) para la energía interna, donde la prima significa la derivada respecto a T .

$$C_V = \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \frac{(n_x^2 + n_y^2) z^{-1} e^{b(n_x^2+n_y^2)}}{(z^{-1} e^{b(n_x^2+n_y^2)} - 1)^2} \left[b^2 (n_x^2 + n_y^2) - b \ln z \right] + \frac{4\pi \hbar^2}{2mL^2} \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \frac{(n_x^2 + n_y^2) z^{-1} e^{b(n_x^2+n_y^2)} \mu'(T)}{(z^{-1} e^{b(n_x^2+n_y^2)} - 1)^2 k_B T}. \quad (2.9)$$

para encontrar $\mu'(T)$ usamos la Ec. (2.7) sabiendo que N es constante y entonces $\partial N / \partial T = 0$ realizando la derivada y despejando $\mu'(T)$ tenemos

$$\frac{\mu'(T)}{k_B T} = -2 \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \frac{z^{-1} e^{b(n_x^2+n_y^2)}}{(z^{-1} e^{b(n_x^2+n_y^2)} - 1)^2} \left[\frac{b}{T} (n_x^2 + n_y^2) - \frac{\ln z}{T} \right] / \left[2 \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \frac{z^{-1} e^{b(n_x^2+n_y^2)}}{(z^{-1} e^{b(n_x^2+n_y^2)} - 1)^2} - \frac{z^{-1}}{(z^{-1} - 1)^2} \right].$$

sustituyendo la expresión para $\mu'(T)$ en (2.9) tenemos

$$\frac{C_V}{k_B} = \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \frac{(n_x^2 + n_y^2) z^{-1} e^{b(n_x^2+n_y^2)}}{(z^{-1} e^{b(n_x^2+n_y^2)} - 1)^2} \left[b^2 (n_x^2 + n_y^2) - b \ln z \right] - 4 \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \frac{(n_x^2 + n_y^2) z^{-1} e^{b(n_x^2+n_y^2)}}{(z^{-1} e^{b(n_x^2+n_y^2)} - 1)^2} \left\{ \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \frac{z^{-1} e^{b(n_x^2+n_y^2)}}{(z^{-1} e^{b(n_x^2+n_y^2)} - 1)^2} \times \left[b^2 (n_x^2 + n_y^2) - b \ln z \right] / \left[2 \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \frac{z^{-1} e^{b(n_x^2+n_y^2)}}{(z^{-1} e^{b(n_x^2+n_y^2)} - 1)^2} - \frac{z^{-1}}{(z^{-1} - 1)^2} \right] \right\} \quad (2.10)$$

En la fig. 2.4 mostramos las curvas del calor específico a volumen constante, por partícula en 2D como función de la temperatura, la figura representa la variación del calor específico del sistema cuando variamos el número N de partículas y el número de estados $k_{x,y}$ respectivamente.

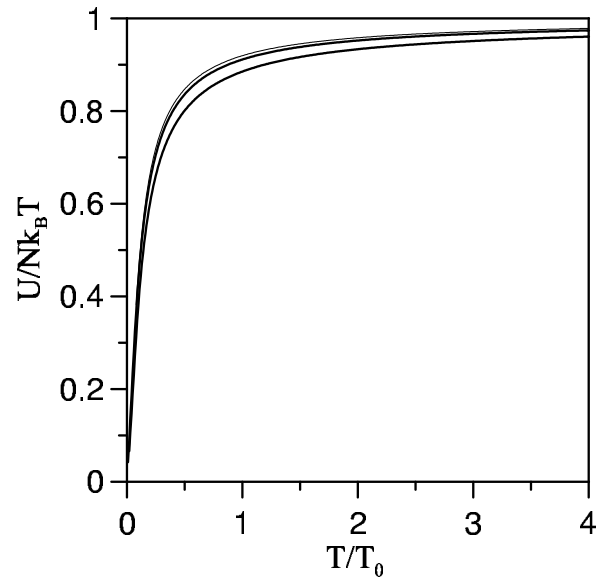


Fig. 2.3 Energía interna entre $k_B T$ por partícula en 2D como función de la temperatura para $N = 100, 1000, 10000$ partículas y $k_{x,y} = 100, 600, 2000$ estados respectivamente.

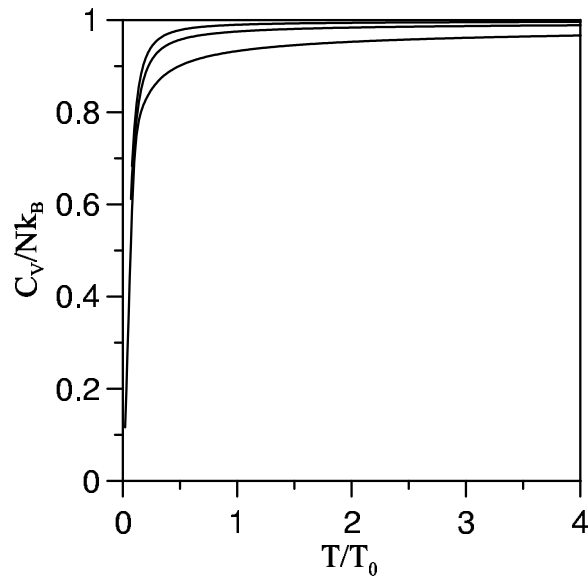


Fig. 2.4 Calor específico por partícula en 2D como función de la temperatura para $N = 100, 1000, 10000$ partículas y $k_{x,y} = 100, 600, 2000$ estados respectivamente.

2.3 Propiedades termodinámicas para el gas ideal de un número N finito de bosones en una dimensión

La energía de cada partícula bosónica corresponde a la energía de una partícula libre en una dimensión, es decir

$$\varepsilon_k = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} k_x^2,$$

con

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

sustituyendo k_x en la penúltima ecuación tenemos que la energía por bosón toma la forma

$$\varepsilon_{n_x} = \frac{4(\pi\hbar)^2}{2mL^2} n_x^2 \quad (2.11)$$

Número de bosones

El número total N de bosones está dado por

$$\begin{aligned} N &= \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{n_x}-\mu)} - 1} \\ &= \frac{1}{z^{-1} - 1} + \sum'_{n_x=-\infty}^{\infty} \frac{1}{z^{-1} e^{b(n_x^2)} - 1}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

donde la suma primada significa que se excluye el valor $n_x = 0$, hemos usado (2.11) para obtener (2.12) con $z = e^{\beta\mu}$ la fugacidad, $\mu(T)$ el potencial químico, $b = 4(\pi\hbar)^2/2mL^2 k_B T$, y $T_0 = 4(\pi\hbar)^2 N^2/2mL^2 k_B$.

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

$$U = \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon_{n_x,y}}{e^{\beta(\varepsilon_{n_x}-\mu)} - 1} = b \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \frac{(n_x^2)}{z^{-1}e^{b(n_x^2)} - 1}. \quad (2.13)$$

Calor específico

El calor específico a volumen constante $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{N,V}$ se obtiene derivando la expresión (2.13) para la energía interna, donde la prima significa la derivada respecto a T .

$$C_V = \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \frac{(n_x^2)z^{-1}e^{b(n_x^2)}}{(z^{-1}e^{b(n_x^2)} - 1)^2} [b^2(n_x^2) - b \ln z] + \frac{4\pi\hbar^2}{2mL^2} \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \frac{(n_x^2)z^{-1}e^{b(n_x^2)}}{(z^{-1}e^{b(n_x^2+n_y^2)} - 1)^2} \frac{\mu'(T)}{k_B T}. \quad (2.14)$$

Para encontrar $\mu'(T)$ usamos la Ec. (2.12) sabiendo que N es constante y entonces $\partial N/\partial T = 0$ realizando la derivada y despejando $\mu'(T)$ tenemos

$$\frac{\mu'(T)}{k_B T} = -2 \sum_{n_x=0}^{\infty} \frac{z^{-1}e^{b(n_x^2)}}{(z^{-1}e^{b(n_x^2)} - 1)^2} \left[\frac{b}{T}(n_x^2) - \frac{\ln z}{T} \right] / \left[2 \sum_{n_x=0}^{\infty} \frac{z^{-1}e^{b(n_x^2)}}{(z^{-1}e^{b(n_x^2)} - 1)^2} - \frac{z^{-1}}{(z^{-1} - 1)^2} \right].$$

sustituyendo la expresión para $\mu'(T)$ en (2.14) tenemos

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{k_B} &= \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \frac{(n_x^2 + n_y^2)z^{-1}e^{b(n_x^2)}}{(z^{-1}e^{b(n_x^2)} - 1)^2} [b^2(n_x^2) - b \ln z] \\ &- 4 \sum_{n_x=0}^{\infty} \frac{(n_x^2 + n_y^2)z^{-1}e^{b(n_x^2)}}{(z^{-1}e^{b(n_x^2)} - 1)^2} \left\{ \sum_{n_x=0}^{\infty} \frac{z^{-1}e^{b(n_x^2)}}{(z^{-1}e^{b(n_x^2)} - 1)^2} \times \right. \\ &\left. [b^2(n_x^2) - b \ln z] / \left[2 \sum_{n_x=0}^{\infty} \frac{z^{-1}e^{b(n_x^2)}}{(z^{-1}e^{b(n_x^2)} - 1)^2} - \frac{z^{-1}}{(z^{-1} - 1)^2} \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.15)$$

Como resumen de este capítulo podemos señalar a partir de las figuras tanto para 3D como para 2D, al bajar la dimensión del sistema, aumenta el número de estados a considerar. El criterio usado en cada caso para determinar el número de estados considerados es que las series que aparecen en las expresiones para la energía interna y el calor específico, debían converger, es decir, para una temperatura dada los valores de la energía o el calor específico no cambian si aumentamos el número de estados. En el límite $T \rightarrow \infty$, la energía interna cumple con el teorema de la equipartición de la energía en 3D y 2D respectivamente. Análogamente para el calor específico se cumple la Ley de Dulong y Petit en 3D y 2D. Las figuras para la energía interna y el calor específico para el caso de un gas de bosones en una dimensión (1D) no aparecen debido a que el número de estados a considerar era muy grande y el programa usado para realizar los cálculos tomaba demasiado tiempo, cuando no nos indicaba memoria insuficiente, para proporcionarnos los datos necesarios para hacer las respectivas curvas. En las figuras para la energía interna en 3D y 2D podemos ver que prácticamente no hay diferencia si se usan sumas o integrales para hacer el cálculo de la energía interna. Sin embargo sí hay diferencia al usar sumas o integrales para calcular el calor específico como lo muestra la figura 2.2 para el calor específico, alrededor de la temperatura crítica.

Capítulo 3

Sistemas finitos de bosones atrapados en dimensiones

$$d < 3$$

El estudio del comportamiento de sistemas de muchas partículas, sea en fase gaseosa o condensada, sujetos a la influencia de potenciales externos tipo oscilador armónico, no sólo es de mucho interés conceptual si no que también ofrece muchas perspectivas de carácter práctico. Por ejemplo, con estos sistemas podemos describir las propiedades de los átomos atrapados en trampas magneto ópticas anisotrópicas, las propiedades de pares de Cooper cargados y bidimensionales dentro de un campo magnético [30] o a un gas de excitones dentro de un pequeño semiconductor [31]. Su descripción a partir de modelos microscópicos cae dentro del dominio de la mecánica estadística y es a través de dichos modelos que podemos apreciar el alcance y las limitaciones que todavía hoy prevalecen en el estudio de dichas propiedades. En este capítulo queremos estudiar el comportamiento de un gas de N bosones atrapados por potenciales tipo oscilador armónico, privilegiando las sumas en lugar de integrales para obtener las propiedades termodinámicas del sistema. Los resultados que obtenemos permiten visualizar con bastante amplitud la naturaleza esencial del problema y en algunos casos mostrarán lo pequeño del porcentaje de error cometido al confinar un sistema finito de N bosones independientes. Antes de comenzar el cálculos de las propiedades termodinámicas del sistema finito de bosones, mostraremos a manera de resumen las propiedades termodinámicas cuando se considera un número N infinito de partículas formando el sistema.

3.1 Sistema infinito de bosones

En el caso de un sistema de bosones en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$

pero $\rho = cte$, el gas de N bosones sin interacción entre ellos, en dimensión $d = 2$ ó 1 , es restringido a moverse en casi una o casi cero dimensiones cuando son restringidos espacialmente por $d \geq \delta$ potenciales externos del tipo oscilador armónico.

Pudimos identificar que el gas de bosones en 2D o 1D (atrapado por $\delta = 1$ 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^* (ver expresión en Tabla III.2) 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 sujeto al potencial parabólico externo 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 $T_c \neq 0$. A manera de referencia, en las tablas III.1 y III.2, resumimos las propiedades termodinámicas de los sistemas bosónicos en 1D y 2D, restringidos espacialmente en una o en ambas direcciones por potenciales externos tipo oscilador armónico. Cabe señalar que los sistemas se encuentran en el límite termodinámico.

Tabla III.1 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_c	0
$U/Nk_B T$	$\frac{\hbar\omega}{2k_B T} + \frac{g_2(z)}{g_1(z)}$
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	$2\frac{g_2(z)}{g_1(z)} - \ln z$
m^*	$\frac{2\pi\hbar}{\omega L^2}$

Tabla III.2 Resumen de algunas propiedades termodinámicas para los bosones en dos dimensiones atrapados por uno y dos osciladores.

2D	$\delta = 2$	$\delta = 1$
$g(\varepsilon)$	$(\hbar\omega)^{-2} \varepsilon$	$\frac{L}{\pi} (\hbar\omega)^{-2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \varepsilon^{1/2}$
N_0/N	$1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^2$	$1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}$
T_c	$\frac{\hbar\omega}{k_B} \left[\frac{N}{g_2(1)}\right]^{1/2}$	$\frac{1}{k_B} \left[\frac{2\hbar^2\omega N}{g_2(1)}\right]^{2/3} \left(\frac{\pi}{2m}\right)^{1/3}$
$U/Nk_B T$	$\frac{\hbar\omega}{k_B T} + 2 \frac{g_3(z)}{g_2(1)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^2$	$\frac{1}{2} \frac{\hbar\omega}{k_B T} + \frac{3}{2} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(1)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}$
C_V/Nk_B	$6 \frac{g_3(z)}{g_2(z)} - 4 \frac{g_2(z)}{g_1(z)}$	$\frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - \frac{9}{4} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)}$
PV	$\frac{1}{2}(U - N\hbar\omega)$	$\frac{2}{3}\left(U - \frac{N\hbar\omega}{2}\right)$
S/Nk_B	$3 \frac{g_3(z)}{g_2(1)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 - \ln z$	$\frac{15}{6} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(1)} - \ln z$
m^*	$\frac{2\pi\hbar}{L^2\omega}$	$(m)^{1/3} \left(\frac{2\pi\hbar}{L^2\omega}\right)^{2/3}$

3.1.1 Gas de bosones en dos dimensiones atrapado por un potencial bidimensional tipo oscilador armónico aproximando sumas con integrales

Aquí consideramos un sistema bidimensional de un número finito de N bosones no interactuantes entre sí, restringidos en ambas direcciones por potenciales armónicos. Los resultados que obtenemos son muy parecidos a los que reportan en las referencias [8, 9, 10], aún cuando nosotros atacamos el problema de una manera ligeramente diferente. Para una partícula sujeta a un potencial de oscilador armónico isotrópico bidimensional los valores para la energía son

$$\begin{aligned}\varepsilon_n &= \varepsilon_x + \varepsilon_y = (n_x + 1/2)\hbar\omega + (n_y + 1/2)\hbar\omega; \quad n, n_y = 0, 1, 2, \dots \\ \varepsilon_n &= (n + 1)\hbar\omega \qquad \qquad \qquad n = 0, 1, 2, \dots\end{aligned}\tag{3.1}$$

Número de partículas

Si consideramos N partículas sin interacción entre ellas, sujetas al mismo potencial armónico externo, los niveles de energía disponibles para cada una de las partículas es la misma e igual a (3.1). Las partículas bosónicas se distribuyen en los niveles de energía según la distribución Bose-Einstein, es decir,

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

El número de partículas en el sistema está dado por

$$N = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{g_n}{e^{\beta(\varepsilon_n - \mu)} - 1},\tag{3.2}$$

donde μ es el potencial químico y $g_n = (n + 1)$, es un factor que mide la degeneración del sistema es decir, el número de formas que podemos obtener n sumando dos enteros

no negativos n_x y n_y . (3.2) puede ser reescrita en la siguiente forma

$$N = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} g_n e^{-j\beta(\varepsilon_n - \mu)} \quad (3.3)$$

donde hemos usado $(1-x)^{-1} = \sum_{j=0}^{\infty} x^j$ para $-1 < x < 1$, con $x = e^{-\beta(\varepsilon_n - \mu)}$.

Ahora, introduciendo los valores para n en la suma de (3.3) tenemos

$$\begin{aligned} N &= \sum_{j=1}^{\infty} (g_0 e^{-j\beta(\varepsilon_0 - \mu)} + g_1 e^{-j\beta(\varepsilon_1 - \mu)} + g_2 e^{-j\beta(\varepsilon_2 - \mu)} + g_3 e^{-j\beta(\varepsilon_3 - \mu)} + \dots) \\ &= \sum_{j=1}^{\infty} e^{-j\beta(\hbar\omega - \mu)} (g_0 + g_1 e^{-j\beta\hbar\omega} + g_2 e^{-2j\beta\hbar\omega} + g_3 e^{-3j\beta\hbar\omega} + \dots), \end{aligned}$$

tomando el valor de la respectiva degeneración tenemos finalmente

$$N = \sum_{j=1}^{\infty} e^{-j\beta(\hbar\omega - \mu)} (1 - e^{-j\beta\hbar\omega})^{-2}, \quad (3.4)$$

con μ el potencial químico del sistema y $\mu_0 \equiv \hbar\omega$ el valor límite de μ cuando $T \rightarrow 0$.

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_e , es decir,

$$N = N_0 + N_e \quad (3.5)$$

donde

$$N_0 = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \quad (3.6)$$

$$N_e = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{g_n}{e^{\beta(\varepsilon_n - \mu)} - 1}. \quad (3.7)$$

Por el momento trabajemos solamente la Ec. (3.7). Sustituyendo g_n y ε_n en la (3.7), nos queda

$$N_e = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(n+1)}{e^{-\beta\mu} e^{\beta\hbar\omega} e^{\beta\hbar\omega n} - 1}.$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n+1}{e^{-\beta\mu} e^{\beta\hbar\omega} e^{\beta\hbar\omega n} e^{\beta\hbar\omega} e^{-\beta\hbar\omega} - 1} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n}{e^{-\beta\mu} e^{2\beta\hbar\omega} e^{\beta\hbar\omega(n-1)} - 1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{e^{-\beta\mu} e^{2\beta\hbar\omega} e^{\beta\hbar\omega(n-1)} - 1}.
\end{aligned}$$

Haciendo $m = n - 1$ para que el índice corra desde cero tenemos

$$\begin{aligned}
N_e &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{m+1}{e^{-\beta\mu} e^{2\beta\hbar\omega} e^{\beta\hbar\omega m} - 1} + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{e^{-\beta\mu} e^{2\beta\hbar\omega} e^{\beta\hbar\omega m} - 1} \\
N_e &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{m}{e^{-\beta\mu} e^{2\beta\hbar\omega} e^{\beta\hbar\omega m} - 1} + 2 \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{e^{-\beta\mu} e^{2\beta\hbar\omega} e^{\beta\hbar\omega m} - 1}. \tag{3.8}
\end{aligned}$$

La serie (3.8) se aproxima con la suma de Euler-Maclaurin [32]

$$\begin{aligned}
\sum_{n=a}^{n=b} f(n) &= \int_{x=a}^{x=b} dx f(x) + \frac{1}{2}[f(a) + f(b)] + \frac{1}{12}[f'(b) - f'(a)].. \\
&+ \sum_{n=a}^{n=b} \frac{B_{2n}}{(2k)!} [f^{2n-1}(a) + f^{2n-1}(b)] + \dots \tag{3.9}
\end{aligned}$$

con B_{2n} los números de Bernoulli, por tanto

$$N_e = \int_0^{\infty} \frac{x dx}{e^{-\beta\mu} e^{2\beta\hbar\omega} e^{\beta\hbar\omega x} - 1} + 2 \int_0^{\infty} \frac{dx}{e^{-\beta\mu} e^{2\beta\hbar\omega} e^{\beta\hbar\omega x} - 1} + \dots \tag{3.10}$$

Para identificar las integrales anteriores con las funciones de Bose

$$g_{\sigma}(z) = \frac{1}{\Gamma(\sigma)} \int_0^{\infty} \frac{y^{\sigma-1} dy}{z^{-1} e^y - 1}$$

hagamos $y = \beta\hbar\omega x$ y $z' = e^{\beta(\mu - \hbar\omega)}$, entonces

$$\begin{aligned}
N_e &= \frac{1}{(\beta\hbar\omega)^2} g_2(e^{\beta(\mu - \hbar\omega)} e^{-\beta\hbar\omega}) + \frac{2}{\beta\hbar\omega} g_1(e^{\beta(\mu - \hbar\omega)} e^{-\beta\hbar\omega}) + \frac{11}{12} g_0(e^{\beta(\mu - \hbar\omega)} e^{-\beta\hbar\omega}) \\
&+ \frac{\beta\hbar\omega}{6} g_{-1}(e^{\beta(\mu - \hbar\omega)} e^{-\beta\hbar\omega}) \tag{3.11}
\end{aligned}$$

Para un gas en dos dimensiones atrapado por dos osciladores en el límite termodinámico, la temperatura de condensación T_0 es

$$T_0 = \frac{\hbar\omega}{k_B} \left[\frac{N}{g_2(1)} \right]^{1/2}, \tag{3.12}$$

la cual usaremos para adimensionar la temperaturas y las energías.

Finalmente, incorporando las partículas del estado base, el número total de partículas queda

$$N = N_0 + \frac{1}{(\beta\hbar\omega)^2} g_2(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \frac{2}{\beta\hbar\omega} g_1(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \frac{11}{12} g_0(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \frac{\beta\hbar\omega}{6} g_{-1}(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}). \quad (3.13)$$

Cuando $T \rightarrow T_0$ entonces $\mu \rightarrow \hbar\omega$ y por lo tanto

$$g_1(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) \rightarrow g_1(e^{-\beta\hbar\omega})$$

la cual no diverge.

Energía Interna

La siguiente ecuación muestra como está dada la energía interna para este sistema

$$U = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varepsilon_n g_n}{e^{\beta(\varepsilon_n - \mu)} - 1}. \quad (3.14)$$

Usando (3.1), (3.13) y la expresión para g_n , tenemos

$$U = N\hbar\omega + \hbar\omega \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n^2 + n}{e^{\beta(\varepsilon_n - \mu)} - 1}. \quad (3.15)$$

Nuevamente, aproximando la serie anterior para cada término con la suma de Euler-Maclaurin tenemos que la energía interna es

$$U = U_0 + \hbar\omega \left[\frac{2}{(\beta\hbar\omega)^3} g_3(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \frac{3}{(\beta\hbar\omega)^2} g_2(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \frac{2}{\beta\hbar\omega} g_1(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \frac{3}{4} g_0(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \frac{\beta\hbar\omega}{6} g_{-1}(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \dots \right] \quad (3.16)$$

Calor específico

El calor específico a volumen constante $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{N,V}$ se obtiene derivando con respecto a la temperatura la energía interna U (3.16).

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{k_B} = & \frac{6}{(\beta\hbar\omega)^2} g_3(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \frac{6}{(\beta\hbar\omega)} g_2(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + 2g_1(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) \\
& - \frac{(\beta\hbar\omega)^2}{6} g_1(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \left[\frac{2}{(\beta\hbar\omega)} g_2(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + 3g_1(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) \right. \\
& + 2(\beta\hbar\omega) g_0(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \frac{3}{4} (\beta\hbar\omega)^2 g_{-1}(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \\
& \left. \frac{(\beta\hbar\omega)^2}{6} g_1(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) \right] \left[2 - \frac{\ln(e^{\beta\mu})}{\beta\hbar\omega} \right] \\
& - \left[\frac{2}{(\beta\hbar\omega)^2} g_2(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \frac{3}{(\beta\hbar\omega)} g_1(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + 2g_0(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \right. \\
& \left. \frac{3}{4} (\beta\hbar\omega) g_{-1}(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \frac{(\beta\hbar\omega)^2}{6} g_{-2}(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) \right] \left[\frac{\beta\hbar\omega - \ln(e^{\beta\mu})}{(e^{-\beta\mu} e^{\beta\hbar\omega} - 1)^2} + \right. \\
& \left. \frac{2}{(\beta\hbar\omega)^2} g_2(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \frac{2}{(\beta\hbar\omega)} g_1(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) - \frac{(\beta\hbar\omega)}{6} g_{-1}(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \right. \\
& \left. \left[\frac{1}{(\beta\hbar\omega)} g_1(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + 2g_0(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \frac{11}{12} (\beta\hbar\omega) g_{-1}(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \right. \right. \\
& \left. \left. \frac{(\beta\hbar\omega)^2}{6} g_{-2}(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) \right] \left[2 - \frac{\ln(e^{\beta\mu})}{\beta\hbar\omega} \right] \right] / \left[\frac{1}{(e^{-\beta\mu} e^{\beta\hbar\omega} - 1)^2} + \right. \\
& \left. \frac{1}{(\beta\hbar\omega)^2} g_1(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \frac{2}{(\beta\hbar\omega)} g_0(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \right. \\
& \left. \frac{11}{12} g_{-1}(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) + \frac{(\beta\hbar\omega)}{6} g_{-2}(e^{\beta\mu} e^{-2\beta\hbar\omega}) \right], \tag{3.17}
\end{aligned}$$

con $z = e^{\beta(\mu)}$. En la Fig. 3.1 graficamos la energía interna entre $k_B T$ como función de la temperatura para un sistema en dos dimensiones (2D) atrapado por dos osciladores (2δ). La Fig. 3.2 muestra cómo depende el calor específico con la temperatura para un sistema de $2D + 2\delta$. En la Fig. 3.1 mostramos las curvas de energía interna para diferentes números de partículas, en donde notamos muy poca diferencia entre ellas. Pero en la Fig. 3.2 podemos apreciar claramente que al aumentar el número de partículas, las curvas respectivas tienden a la curva que esperaríamos en el límite termodinámico.

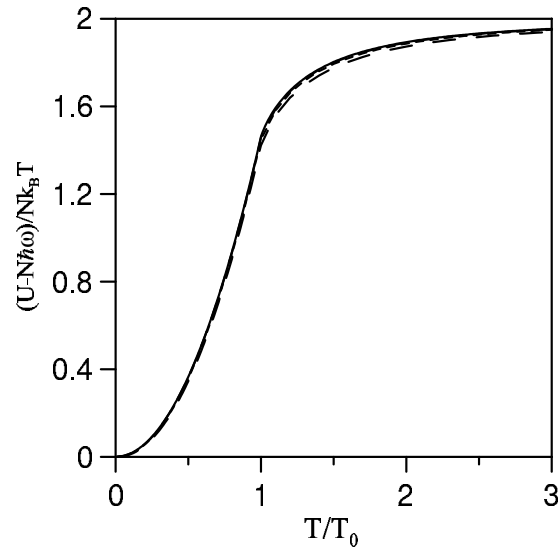


Fig.3.1 Energía interna U entre $k_B T$ por partícula en $2D+2\delta$ como función de la temperatura para $N = 1000$ (— —), 10000 (- -), 100000 (- -) partículas, LT(—).

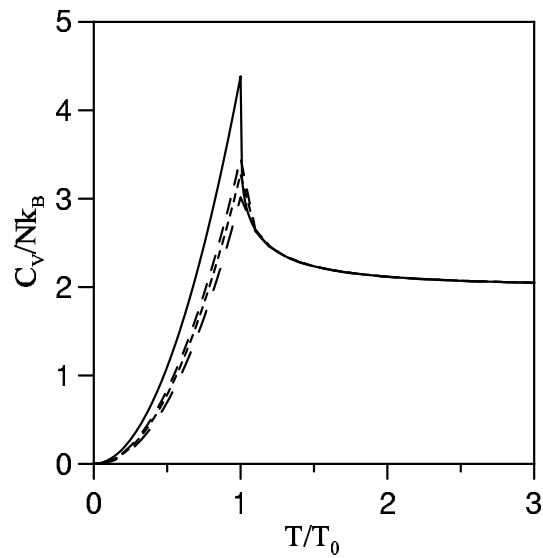


Fig. 3.2 Calor específico por partícula en $2D+2\delta$ como función de la temperatura para $N = 1000$ (— —), 10000 (- -), 100000 (- -) partículas, LT(—).

3.1.2 Gas de bosones en una dimensión atrapado por un oscilador aproximando sumas por integrales

La energía para un oscilador en una dimensión es

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.18)$$

La expresión para el número de partículas y la energía interna en el caso de una dimensión están dadas respectivamente por

$$N = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_n - \mu)} - 1} = N_0 + \frac{1}{(\beta\hbar\omega)} g_1(e^{\beta\mu} e^{-3\beta\hbar\omega/2}) + \frac{1}{2} g_0(e^{\beta\mu} e^{-3\beta\hbar\omega/2}) + \frac{\beta\hbar\omega}{12} g_{-1}(e^{\beta\mu} e^{-3\beta\hbar\omega/2}) \quad (3.20)$$

$$\frac{U}{\hbar\omega} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varepsilon_n}{e^{\beta(\varepsilon_n - \mu)} - 1} = U_0 + \frac{1}{(\beta\hbar\omega)^2} g_2(e^{\beta\mu} e^{-3\beta\hbar\omega/2}) + \frac{1}{(\beta\hbar\omega)} g_1(e^{\beta\mu} e^{-3\beta\hbar\omega/2}) + \frac{5}{12} g_0(e^{\beta\mu} e^{-3\beta\hbar\omega/2}) + \frac{\beta\hbar\omega}{12} g_{-1}(e^{\beta\mu} e^{-3\beta\hbar\omega/2}) \quad (3.21)$$

Calor específico

El calor específico a volumen constante $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{N,V}$ se obtiene derivando con respecto a la temperatura la energía interna U (3.21).

$$\frac{C_V}{k_B} = \frac{2}{b} g_2(e^{\beta\mu} e^{-3/2\beta\hbar\omega}) + g_1(e^{\beta\mu} e^{-3/2\beta\hbar\omega}) - \frac{b^2}{12} g_{-1}(e^{\beta\mu} e^{-3/2\beta\hbar\omega}) + \frac{1}{2} \frac{z^{-1} e^{b/2}}{(z^{-1} e^{b/2} - 1)^2} \left[\frac{b^2}{2} - b \ln(z) \right] + \left[\frac{g_1(e^{\beta\mu} e^{-3/2\beta\hbar\omega})}{b^2} + \frac{1}{b} g_0(e^{\beta\mu} e^{-3/2\beta\hbar\omega}) + \right.$$

$$\begin{aligned}
& \left[\frac{15}{12}g_{-1}(e^{\beta\mu}e^{-3/2\beta\hbar\omega}) + \frac{b}{12}g_{-2}(e^{\beta\mu}e^{-3/2\beta\hbar\omega}) \right] \left[\frac{3b^2}{2} - b\ln(z) \right] - \\
& \left[\frac{1}{b^2}g_1(e^{\beta\mu}e^{-3/2\beta\hbar\omega}) + \frac{1}{b}g_0(e^{\beta\mu}e^{-3/2\beta\hbar\omega}) + \frac{15}{12}g_{-1}(e^{\beta\mu}e^{-3/2\beta\hbar\omega}) + \frac{b}{12}g_{-2}(e^{\beta\mu}e^{-3/2\beta\hbar\omega}) \right. \\
& \left. + \frac{1}{2} \frac{z^{-1}e^{b/2}}{(z^{-1}e^{b/2} - 1)^2} \right] \left[g_1(e^{\beta\mu}e^{-3/2\beta\hbar\omega}) - \frac{b^2}{12}g_{-1}(e^{\beta\mu}e^{-3/2\beta\hbar\omega}) + \frac{z^{-1}e^{b/2}}{(z^{-1}e^{b/2} - 1)^2} \left[\frac{b^2}{2} - b\ln(z) \right] \right] \\
& + \left[\frac{1}{b}g_0(e^{\beta\mu}e^{-3/2\beta\hbar\omega}) + \frac{1}{2}g_{-1}(e^{\beta\mu}e^{-3/2\beta\hbar\omega}) + \frac{b}{12}g_{-2}(e^{\beta\mu}e^{-3/2\beta\hbar\omega}) \right] \left[\frac{3b^2}{2} - b\ln z \right] / \\
& \left[\frac{1}{b}g_0(e^{\beta\mu}e^{-3/2\beta\hbar\omega}) + \frac{1}{2}g_{-1}(e^{\beta\mu}e^{-3/2\beta\hbar\omega}) + \frac{b}{12}g_{-2}(e^{\beta\mu}e^{-3/2\beta\hbar\omega}) + \frac{z^{-1}e^{b/2}}{(z^{-1}e^{b/2} - 1)^2} \right] \quad (3.22)
\end{aligned}$$

Con $b = \hbar\omega/k_B T$, en las Figs. 3.3, 3.4 graficamos la energía interna entre $k_B T$ y el calor específico como función de la temperatura, para un sistema en una dimensión (1D) atrapado por un oscilador (1 δ). En este sistema no hay condensación de Bose-Einstein a temperatura diferente de cero.

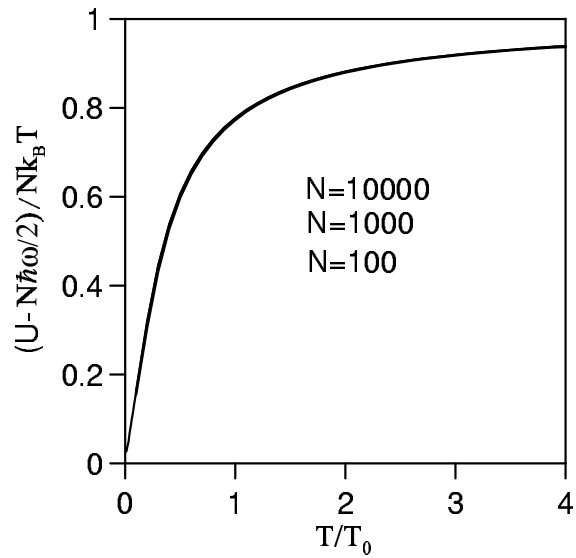


Fig. 3.3 Energía interna U entre $k_B T$ por partícula en como función de la temperatura para $N = 100, 1000, 10000$ partículas en un sistema $1D+1\delta$.

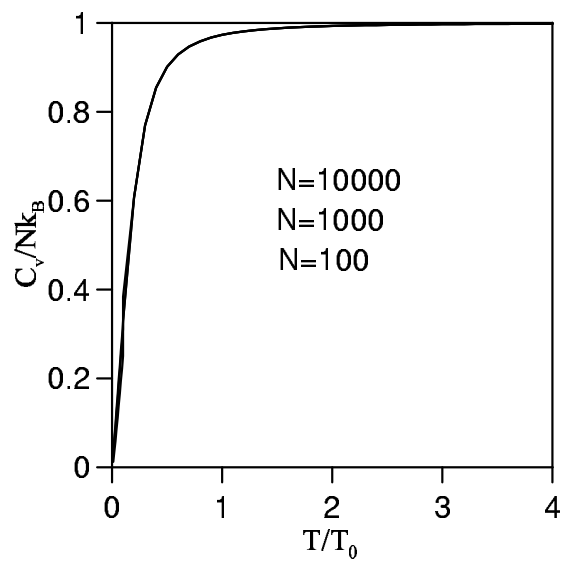


Fig. 3.4 Calor específico por partícula en como función de la temperatura para $N = 100, 1000, 10000$ partículas en un sistema $1D+1\delta$.

3.2.1 Gas de bosones en dos dimensiones atrapado por dos osciladores usando sumas

Número de partículas

$$N = \frac{1}{z'^{-1} - 1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{g_n}{z'^{-1} e^{bn} - 1} \quad (3.23)$$

donde $g_n = (n + 1)$, $z' = e^{\beta(\mu - \hbar\omega)}$, μ es el potencial químico y $b = \hbar\omega/k_B T$.

Energía Interna

Para este sistema la energía interna está dada por

$$U = N\hbar\omega + \hbar\omega \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n(n+1)}{z^{-1} e^{b(n+1)} - 1} \quad (3.24)$$

Calor específico

El calor específico a volumen constante $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{N,V}$ se obtiene derivando la expresión (3.24) para la energía interna, con respecto a la temperatura.

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{Nk_B} &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(n+1)^2 z^{-1} e^{b(n+1)}}{(z^{-1} e^{b(n+1)} - 1)^2} [b^2(n+1) - b \ln z] - \\ &\quad \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(n+1)^2 z^{-1} e^{b(n+1)}}{(z^{-1} e^{b(n+1)} - 1)^2} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(n+1) z^{-1} e^{b(n+1)}}{(z^{-1} e^{b(n+1)} - 1)^2} [b^2(n+1) - b \ln z] + \right. \\ &\quad \left. \frac{z^{-1}}{(z^{-1} - 1)^2} [b^2 - b \ln z] \right] / \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(n+1) z^{-1} e^{b(n+1)}}{(z^{-1} e^{b(n+1)} - 1)^2} + \frac{z^{-1}}{(z^{-1} - 1)^2} \right] \quad (3.25) \end{aligned}$$

En las Figs 3.5 y 3.6 graficamos la energía interna entre $k_B T$ y el calor específico respectivamente, como función de la temperatura, para un sistema en dos dimensiones (2D) atrapado por dos osciladores (2δ). Estas son sin lugar a duda las que mejor reflejan el objetivo del trabajo de esta tesis al usar sumas en lugar de integrales. Al usar las sumas podemos controlar la precisión de las propiedades termodinámicas del sistema estudiado tanto como queramos pues no hacemos ninguna aproximación.

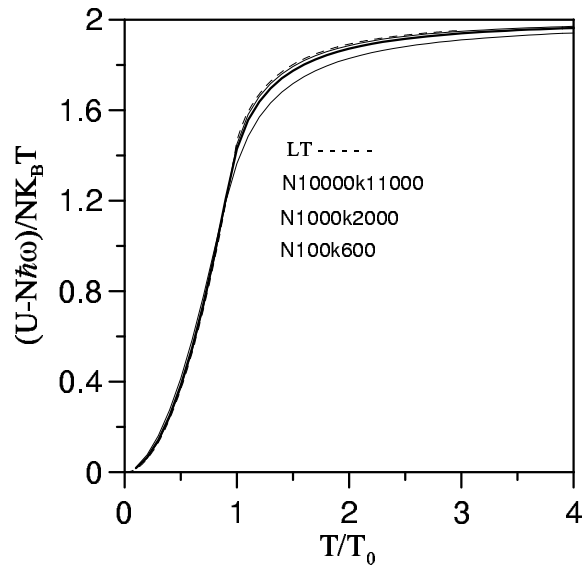


Fig. 3.5 Energía interna U entre $k_B T$ por partícula en como función de la temperatura para $N = 100, 1000, 10000$ partículas y $k = 600, 2000, 11000$ estados respectivamente. LT (límite termodinámico) en un sistema $2D+2\delta s$.

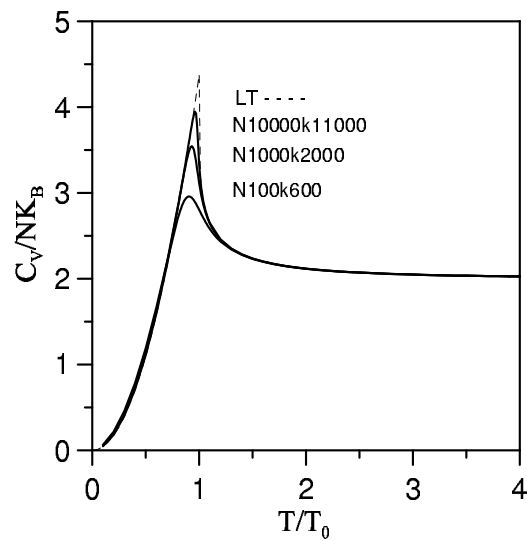


Fig. 3.6 Calor específico por partícula como función de la temperatura para $N = 100, 1000, 10000$ partículas y $k = 600, 2000, 11000$ estados respectivamente. LT (límite termodinámico) en un sistema $2D+2\delta s$.

3.2.2 Gas de bosones en dos dimensiones atrapado por un oscilador usando sumas

El Hamiltoniano para un bosón en este sistema es,

$$H = H_x + H_y$$

con

$$H_x = \frac{p_x^2}{2m}$$

$$H_y = \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega y^2,$$

donde p_x y p_y son las componentes del momento lineal \mathbf{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 propios de la energía son

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

donde

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

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

$$\varepsilon_y = \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega; \quad n_y = 0, 1, 2, \dots$$

por lo tanto la energía por bosón será

$$\varepsilon = \varepsilon_x + \varepsilon_y = \frac{4\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2) + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad (3.26)$$

introduciendo la constante $x_0^2 \equiv \hbar/m\omega$ y haciendo $L = x_0$, entonces los valores para la energía por bosón se puede escribir en términos de $\hbar\omega$

$$\varepsilon_n = (an_x^2 + n_y + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad (3.27)$$

Con $n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, n_y = 0, 1, 2, \dots$ y $a = 2\pi^2$ una constante.

Número de partículas

Las partículas bosónicas se distribuyen en los niveles de energía según la distribución Bose-Einstein, es decir,

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

El número de partículas en el sistema está dado por

$$N = \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_n-\mu)} - 1}, \quad (3.28)$$

con μ es el potencial químico. Sustituyendo (3.27) en (3.28) la ecuación anterior puede ser reescrita en la siguiente forma

$$N = \frac{1}{z'^{-1} - 1} + \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \frac{1}{z'^{-1} e^{b(an_x^2+n_y)} - 1} \quad (3.29)$$

donde $z' = e^{\beta(\mu-\hbar\omega/2)} = ze^{b/2}$, $b = \hbar\omega/k_B T$ y $T_0 = [2N\hbar^2\omega/Lg_{3/2}(1)]^{2/3}(\pi/2m)^{1/3}/k_B$ es la temperatura del gas ideal en $2D + 1\delta$ con la misma densidad de partículas en el límite termodinámico.

Energía Interna

Para este sistema la energía interna está dada por

$$U = \frac{N\hbar\omega}{2} + \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \frac{an_x^2 + n_y}{z^{-1} e^{b(an_x^2+n_y+0.5)} - 1} \quad (3.30)$$

Calor específico

El calor específico a volumen constante $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{N,V}$ se obtiene derivando con respecto a la temperatura la expresión (3.30) para la energía interna.

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= 2 \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \frac{(an_x^2 + n_y)z^{-1}e^{b(an_x^2 - n_y + 0.5)}}{(z^{-1}e^{b(an_x^2 + n_y + 0.5)} - 1)^2} \left[b^2(an_x^2 + n_y + 0.5) - b \ln z \right] - \\
&2 \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \frac{(an_x^2 + n_y)z^{-1}e^{b(an_x^2 - n_y + 0.5)}}{(z^{-1}e^{b(an_x^2 + n_y + 0.5)} - 1)^2} \left[2 \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \frac{z^{-1}e^{b(an_x^2 + n_y + 0.5)}}{(z^{-1}e^{b(an_x^2 + n_y + 0.5)} - 1)^2} \left[\right. \right. \\
&b^2(an_x^2 + n_y + 0.5) - b \ln z \left. \left. + \left[\frac{z^{-1}}{(z^{-1} - 1)^2} \left[\frac{b^2}{2} - b \ln z \right] \right] \right] \right] / \\
&\left[2 \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \frac{z^{-1}e^{b(an_x^2 + n_y + 0.5)}}{(z^{-1}e^{b(an_x^2 + n_y + 0.5)} - 1)^2} + \frac{z^{-1}}{(z^{-1} - 1)^2} \right] \tag{3.31}
\end{aligned}$$

En las Figs 3.7 y 3.8 graficamos la energía interna y el calor específico respectivamente, para un sistema en dos dimensiones (2D) atrapado por un oscilador (1δ), en la figura 3.7 sólo se ven dos curvas las cuales corresponden a $N = 100$ partículas y $(k_x, k_y) = (50, 1000)$ estados y para $N = 1000, 10000$ partículas y $(k_x, k_y) = (100, 5000), (200, 60000)$ estados respectivamente las curvas son las mismas, para la figura 3.8 el caso es análogo. En este sistema es importante notar que, dado un número N finito de bosones, y el hecho de restringir el movimiento de los bosones en la dirección y con el potencial de oscilador armónico hace que los niveles de energía en esta dirección se vuelvan igualmente espaciados con separación entre niveles igual a $\hbar\omega$.

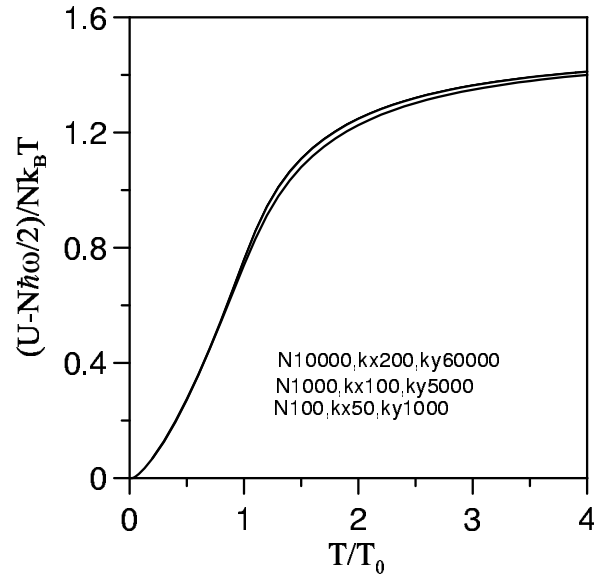


Fig. 3.7 Energía interna U entre $k_B T$ por partícula como función de la temperatura para $N = 100, 1000, 10000$ partículas y $(k_x, k_y) = (50, 1000), (100, 5000), (200, 60000)$ estados respectivamente, en un sistema $2D+1\delta s$.

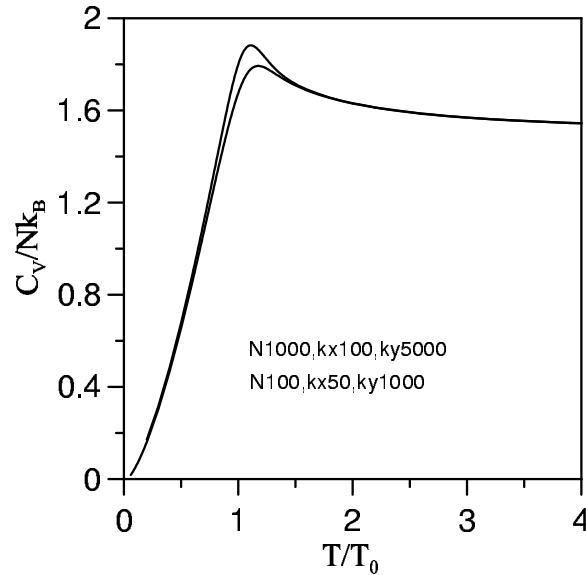


Fig. 3.8 Calor específico por partícula en como función de la temperatura para $N = 100, 1000, 10000$ partículas y $(k_x, k_y) = (50, 1000), (100, 5000), (200, 60000)$ estados respectivamente, en un sistema $2D+1\delta s$.

3.2.3 Gas de bosones en una dimensión atrapado por un oscilador usando sumas

Para una partícula sujeta a un potencial de oscilador armónico unidimensional, los valores para la energía son

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.32)$$

Número de partículas

El número de partículas en el sistema está dado por

$$N = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_n - \mu)} - 1}, \quad (3.33)$$

donde μ es el potencial químico ahora (3.33) puede ser reescrita en la siguiente forma

$$N = \frac{1}{z'^{-1} - 1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{z'^{-1} e^{bn} - 1} \quad (3.34)$$

donde $z' = e^{\beta(\mu - \hbar\omega/2)}$ y $b = \hbar\omega/k_B T$.

Energía Interna

Para este sistema la energía interna está dada por

$$U = \frac{N\hbar\omega}{2} + \hbar\omega \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n}{z'^{-1} e^{bn} - 1} \quad (3.35)$$

Calor específico

El calor específico a volumen constante $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{N,V}$ se obtiene derivando con respecto a la temperatura la energía interna U (3.35).

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} = & \sum_{n=1}^{\infty} \frac{nz'^{-1}e^{bn}}{(z'^{-1}e^{bn}-1)^2} [(n+1/2)b^2 - b \ln z] - \\
& \sum_{n=1}^{\infty} \frac{nz'^{-1}e^{bn}}{(z'^{-1}e^{bn}-1)^2} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{z'^{-1}e^{bn}}{(z'^{-1}e^{bn}-1)^2} [b^2(n+1/2) - b \ln z] + \right. \\
& \left. \frac{z'^{-1}}{(z'^{-1}-1)^2} \left[\frac{b^2}{2} - b \ln z \right] \right] / \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{z'^{-1}e^{bn}}{(z'^{-1}e^{bn}-1)^2} + \right. \\
& \left. \frac{z'^{-1}}{(z'^{-1}-1)^2} \right] \tag{3.36}
\end{aligned}$$

En las figuras 3.9 y 3.10 se muestran las curvas para la energía interna y el calor específico, respectivamente, para el sistema unidimensional, en figura 3.9 sólo se ven una curva la cual corresponde a $N = 100$ partículas y $k = 10000$ estados, y para $N = 1000$ partículas y $k = 70000$ estados, para la figura 3.10 el caso es análogo. En estas curvas podemos notar que haber disminuido la dimensionalidad del sistema y además confinado el movimiento de los bosones, hace que el número de estados a considerar sea mucho más grande que el número de estados que se ha utilizado para calcular las curvas correspondientes para el sistema $2D+2\delta$ que se muestran en las figs. 3.5 y 3.6.

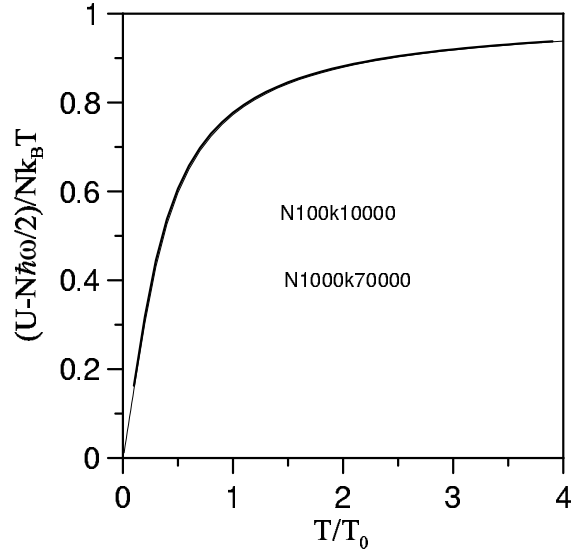


Fig. 3.9 Energía interna U entre $k_B T$ por partícula como función de la temperatura para $N = 100, 1000$ partículas y $k = 10000, 70000$ estados respectivamente, en un sistema $1D+1\delta s$.

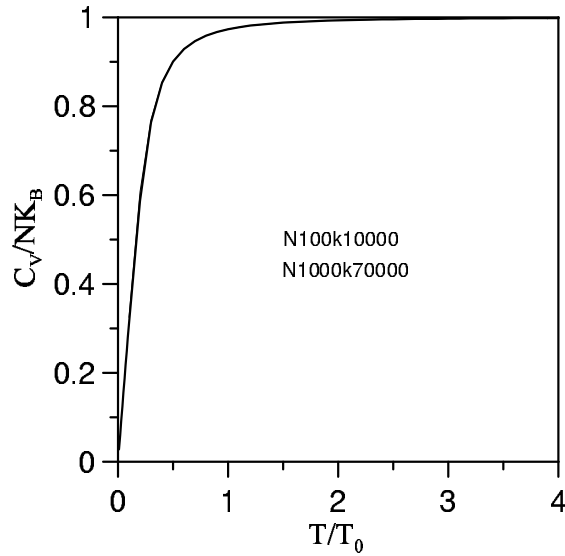


Fig. 3.10 Calor específico por partícula como función de la temperatura para $N = 100, 1000$ partículas y $k = 10000, 70000$ estados respectivamente, en un sistema $1D+1\delta s$.

Capítulo 4

Conclusiones

En este trabajo hemos estudiado las propiedades termodinámicas de un sistema formado por un número finito de bosones en 1D y 2D, restringidos espacialmente por uno o dos potenciales tipo oscilador armónico. Las sumas que aparecen en los cálculos de las propiedades, se mantuvieron y sólo en algunos caso específicos, a modo de comparación, se aproximaron con integrales. Las sumas nos permitieron manejar de manera directa el número de estados y no una densidad de estados para obtener las propiedades termodinámicas del sistema.

Aunque variamos el de número partículas en los sistemas estudiados en los Capítulos 2 y 3 de este trabajo, mantuvimos constante la densidad de partículas en el sistema lo que nos permitió comparar las propiedades termodinámicas calculadas aquí con las propiedades termodinámicas en el límite termodinámico. En el caso del gas de bosones en dos dimensiones atrapado por un oscilador, la frecuencia de oscilación ω del potencial armónico es el parámetro que variamos para confinar los bosones (número finito) pero al mismo tiempo variamos el número de partículas para mantener la densidad constante. El número de estados, k , que consideramos para cada sistema, hasta alcanzar la convergencia manteniendo para este sistema el producto $\omega N/L$ constante, dependió de si las partículas estaban libres o restringidas armónicamente.

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.

Resumiendo:

a) obtuvimos las propiedades termodinámicas de diferentes sistemas con número finito de partículas, en dimensiones menores que tres y estando o no, restringidas espacialmente por potenciales externos del tipo de oscilador armónico.

b) Aunque algunos autores han atacado el problema de sistemas con un número finito de partículas, cuando no desde el inicio, en algún nivel del proceso de cálculo aproximan sumas por integrales que los conduce a resultados enmascarados por una menor precisión. Prueba de ello es que en el Cap. 3 de esta tesis, a mitad del proceso de cálculo de las propiedades del sistema que denominamos $2D+2\delta$, usamos justificadamente la aproximación de Euler-Mclaurin para aproximar nuestras sumas por sumas de integrales, y los resultados fueron menos exactos que los que obtuvimos utilizando las sumas.

c) Privilegiar las sumas antes que aproximarlas por integrales en el cálculo de las propiedades de sistemas finitos, nos permite concluir que la finitud del número de partículas es más importante, desde el punto de vista numérico, en los sistemas de menor dimensión espacial. Aunque la diferencia numérica se incrementa a temperaturas más grandes, ésta es más notaria en los puntos críticos tales como en el pico del calor específico de la condensación Bose-Einstein.

d) Finalmente, para mostrar la aplicabilidad de nuestros resultados debemos mencionar que el gas formado por un número finito de bosones en 2D atrapado por dos osciladores, lo podemos ver como un gas de bosones cargados dentro de un campo magnético externo. El espectro de energía de cada bosón atrapado por el potencial bidimensional de oscilador armónico isotrópico corresponden a los valores para la energía de un bosón cargado dentro del campo magnético externo cuya frecuencia de oscilación ω es el parámetro que usamos para confinar un gas de bosones usando potenciales armónicos.

Apéndice A

Gas ideal de bosones

Temperatura crítica para el gas ideal de bosones en tres dimensiones en el límite termodinámico

Sea un gas de bosones dentro de una “caja tridimensional” de lado L y un número total N de bosones, los bosones no interactúan entre sí, ni con las paredes de la caja. Así la energía de cada partícula bosónica corresponde a la energía de una partícula libre, es decir

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (\text{A.1})$$

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 ε 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-Einstein*.

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_e , es decir,

$$N = N_0 + N_e \quad (\text{A.2})$$

donde

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

$$N_e = \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1}.$$

y el término dentro de la suma anterior lo podemos escribir como

$$\bar{n}_k = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1}$$

el cual es el número medio de partículas bosónicas en el nivel de energía definido por k . Con ε_k la energía del estado y μ es el potencial químico. Es fácil ver que para un gas de bosones este potencial químico debe ser no positivo, así que en un gas de Bose se gana energía al perder partículas y se disminuye energía al tomarlas. En el límite termodinámico el segundo término del miembro derecho de la ecuación (A.2) al cual se designa por N_e se calcula mediante

$$N_e = \frac{1}{\Omega} \int dk_x \int dk_y \int dk_z \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1} \quad (\text{A.3})$$

con $\Omega = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$ el volumen de la celda unitaria en el espacio de \mathbf{k} . Sustituyendo (A.1) en (A.3)

$$N_e = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int dk_x \int dk_y \int dk_z \frac{1}{e^{\beta\left(\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - \mu\right)} - 1}. \quad (\text{A.4})$$

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

$$k_x = k \sin \theta \cos \varphi \quad (\text{A.5})$$

$$k_y = k \sin \theta \sin \varphi \quad (\text{A.6})$$

$$k_z = k \cos \theta \quad (\text{A.7})$$

donde $k \in [0, \infty)$, $\theta \in [0, \pi]$, $\varphi \in [0, 2\pi]$ obteniéndose

$$N_e = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int dk 4\pi k^2 \bar{n}_k \quad (\text{A.8})$$

Así sustituyendo \bar{n}_k en la ecuación (A.8) y reescribiéndola en términos de la energía ε , nos queda

$$N_e = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} \quad (\text{A.9})$$

Si recordamos que $N_e = \int_0^\infty d\varepsilon(\varepsilon)f(\varepsilon)g(\varepsilon)$ donde

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

Es la función de distribución de Bose-Einstein, y podemos identificar a

$$g(\varepsilon) = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}} \quad (\text{A.10})$$

como la densidad de estados, es decir, el número de estados por unidad de energía.

Ahora la ecuación (A.9) toma la siguiente forma si hacemos el siguiente cambio de variable $x \equiv \beta\varepsilon$

$$N_e = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\beta\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty dx \frac{x^{\frac{1}{2}}}{e^x z^{-1} - 1} \quad (\text{A.11})$$

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

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

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

$$N_e = V \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} g_{\frac{3}{2}}(z) \quad \forall T. \quad (\text{A.12})$$

Para temperaturas altas y mayores que la temperatura crítica μ se comporta clásicamente, es decir, $\mu < 0$ y $N_e = N$. 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 $N = N_0 + N_e$ se le llama temperatura crítica T_c . Notemos además

$$N_0 = \bar{n}_0 = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1}$$

que en el limite cuando $\mu \rightarrow 0$ la exponencial se puede desarrollar en serie.

En la Ec. (A.12) para $T = T_c$ se tiene que $N_e = N$, $\mu = 0$ por tanto $z = 1$ entonces

$$N = V \left(\frac{mk_B T_c}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} g_{\frac{3}{2}}(1), \quad (\text{A.13})$$

que es una constante para cualquier temperatura.

Temperatura crítica

De la ecuación (A.13) Podemos despejar la temperatura crítica T_c

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left(\frac{N}{V g_{\frac{3}{2}}(1)} \right)^{\frac{2}{3}}. \quad (\text{A.14})$$

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 (A.12) y (A.13), es decir

$$\frac{N_e}{N} = \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{g_{\frac{3}{2}}(z)}{g_{\frac{3}{2}}(1)} \quad (\text{A.15})$$

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 . De la Ec. (A.2)

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{N_e}{N} \quad (\text{A.16})$$

y por tanto sustituyendo (A.15) en (A.16)

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{g_{\frac{3}{2}}(z)}{g_{\frac{3}{2}}(1)}. \quad (\text{A.17})$$

Las ecuaciones anteriores se cumplen para toda T . Para $T < T_c$, $z = 1$, y la expresión anterior queda

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{\frac{3}{2}}. \quad (\text{A.18})$$

Apéndice B

programas en fortran para los sistemas estudiados en el capítulo 2 y 3

Este programa calcula la energía interna y el calor específico del gas de bosones
en 3D.

```
IMPLICIT REAL*8 (A-K, O-Z)
COMMON/COEF1/b,Np,Nk
OPEN(UNIT=10, FILE='UCv100k30.DAT')
PI=4.*atan(1.)
Zeta1p5 = 2.61238
DELT= 0.01
C Damos los parámetros
WRITE(*,*) 'INTRODUCIR Np,Nk,NPUN'
READ(*,*) Np,Nk,NPUN
b =PI*(Zeta1p5/Np)**(2.0/3.0)
Do 150 IT=1,NPUN
T= DELT*IT
C Temperatura.
C FUGACIDAD :
za=0.01; zb=0.99999
C Intervalo donde se buscará la solución
CUENTA=0
C contador para ver cuantas veces pasa por aquí
750 CUENTA=CUENTA+1
zm=(za+zb)/2.0
IF(FUGA(zm,T)*FUGA(zb,T) .GE. 0) THEN
zb=zm
ELSE
za=zm
END IF
IF(ABS(FUGA(zm,T)) .GE. 0.0003) GO TO 750
z=zm
C POTENCIAL QUIMICO:
```

```

amu=T*LOG(z)
C ENERGIA INTERNA SOBRE ( $k_{\beta}T$ ) Y partes de la derivada de la C fugacidad z
C AL MISMO TIEMPO
U=0.0
FDZAUX1=0.0
FDZAUX2=0.0
JINI=0
DO 145 I=0,Nk
IF(I .NE. 0) JINI=1
DO 165 J=JINI,Nk
DO 185 K=1,Nk
STEMP=I*I+J*J+K*K
C CASO EN QUE I=0 Y J=0, PUNTOS EN 6 EJES
IF(I .EQ. 0 .AND. J .EQ. 0) THEN
U = U + 6.0*(b*STEMP/T)/(EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)
FDZAUX1 = FDZAUX1 + 6.0*EXP(b*STEMP/T)*b*STEMP/z/T/T/
* (EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)**2
FDZAUX2 = FDZAUX2 + 6.0*EXP(b*STEMP/T)/z/z/
* (EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)**2
C CASO EN QUE I=0, PUNTOS EN CARAS
ELSE IF(I .EQ. 0) THEN
U = U + 12.0*(b*STEMP/T)/(EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)
FDZAUX1 = FDZAUX1 + 12.0*EXP(b*STEMP/T)*b*STEMP/z/T/T/
* (EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)**2
FDZAUX2 = FDZAUX2 + 12.0*EXP(b*STEMP/T)/z/z/
* (EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)**2
ELSE
C CASO EN QUE I NE 0 ENTONCES J NE 0, PUNTOS EN 8 OCTANTE
U = U + 8.0*(b*STEMP/T)/(EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)
FDZAUX1 = FDZAUX1 + 8.0*EXP(b*STEMP/T)*b*STEMP/z/T/T/
* (EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)**2
FDZAUX2 = FDZAUX2 + 8.0*EXP(b*STEMP/T)/z/z/
* (EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)**2
END IF
185 CONTINUE
165 CONTINUE
145 CONTINUE
C DERIVADA DE LA FUGACIDAD z.
FDZ = -FDZAUX1/(1.0/(1.0 - z)**2 + FDZAUX2)
C AQUI CALCULO EL CALOR ESPECIFICO,
EN TERMINOS DE LA DERIVADA DE LA FUGACIDAD z.
Cv = 0.0

```



```

JINI=0
DO 245 I=0,Nk
IF(I .NE. 0) JINI=1
DO 265 J=JINI,Nk
DO 285 K=1,Nk
STEMP=I*I+J*J+K*K
C CASO EN QUE I=0 Y J=0, PUNTOS EN 6 EJES
IF(I .EQ. 0 .AND. J .EQ. 0) THEN
Cv = Cv + 6.0*b*STEMP*EXP(b*STEMP/T)*(FDZ/z/z + b*STEMP/T/T/z)
* /(EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)**2
C CASO EN QUE I=0, PUNTOS EN CARAS
ELSE IF(I .EQ. 0) THEN
Cv = Cv + 12.0*b*STEMP*EXP(b*STEMP/T)*(FDZ/z/z + b*STEMP/T/T/z)
* /(EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)**2
ELSE
C CASO EN QUE I NE 0 ENTONCES J NE 0, PUNTOS EN 8 OCTANTE
Cv = Cv + 8.0*b*STEMP*EXP(b*STEMP/T)*(FDZ/z/z + b*STEMP/T/T/z)
* /(EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)**2
END IF
285 CONTINUE
265 CONTINUE
245 CONTINUE
PRINT*,T,U/Np,Cv/Np
WRITE(10,600)T,U/Np,Cv/Np
150 CONTINUE
600 FORMAT(1F6.3,5F18.15)
END
FUNCTION FUGA(X,T)
IMPLICIT REAL*8 (A-K, O-Z)
COMMON/COEF1/b,Np,Nk
FUGA=0.0
JINI=0
DO 140 I=0,Nk
IF(I .NE. 0) JINI=1
DO 160 J=JINI,Nk
DO 180 K=1,Nk
STEMP=I*I+J*J+K*K
C CASO EN QUE I=0 Y J=0, PUNTOS EN 6 EJES
IF(I .EQ. 0 .AND. J .EQ. 0) THEN
FUGA = FUGA + 6.0/(EXP(b*STEMP/T)/X -1.0)
C CASO EN QUE I=0, PUNTOS EN CARAS
ELSE IF(I .EQ. 0) THEN

```

```
FUGA = FUGA + 12.0/(EXP(b*STEMP/T)/X -1.0)
ELSE
C CASO EN QUE I NE 0 ENTONCES J NE 0, PUNTOS EN 8 OCTANTE
FUGA = FUGA + 8.0/(EXP(b*STEMP/T)/X -1.0)
END IF
180 CONTINUE
160 CONTINUE
140 CONTINUE
FUGA = Np - FUGA - 1/(1/X-1.0)
C RETURN
END
```

Este programa calcula la energía interna y el calor específico en 2D del cap. 2

```
IMPLICIT REAL*8 (A-K, O-Z)
COMMON/COEF1/b,Np,Nk
OPEN(UNIT=10, FILE='UyCv2d1000k400.DAT')
PI=4.*atan(1.)
Zeta1p5 = 2.61238
DELT=0.01
Damos los parámetros
WRITE(*,*) 'INTRODUCIR Np,Nk,NPUN'
READ(*,*) Np,Nk,NPUN
b = 1/Np
Do 150 IT=1,NPUN
T=DELT*IT
C Temperatura.
FUGACIDAD:
za=0.01; zb=0.99999
C Intervalo donde se buscará la solución
CUENTA=0
C contador para ver cuantas veces pasa por aquí
750 CUENTA=CUENTA+1
zm=(za+zb)/2.0
IF(FUGA(zm,T)*FUGA(zb,T) .GE. 0) THEN
zb=zm
ELSE
za=zm
END IF
IF((zb-za)/zb .GE. 10**(-5.0)) GO TO 750
IF(ABS(FUGA(zm,T)) .GE. 0.0003) GO TO 750
z=zm
C POTENCIAL QUIMICO:
amu=T*LOG(z)
C ENERGIA INTERNA SOBRE ( $k_{\beta}T$ ) Y partes de la derivada de la fugacidad
AL MISMO TIEMPO
U=0.0
FDZAUX1=0.0
FDZAUX2=0.0
JINI=0
DO 145 I=0,Nk
IF(I .NE. 0) JINI=1
DO 165 J=JINI,Nk
STEMP=I*I+J*J
```

```

C CASO EN QUE I=0 J=0, PUNTOS EN 4 EJES
IF (I QE 0 .AND. J QE 0) THEN
  U = U + 4.0*(b*STEMP/T)/(EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)
  FDZAUX1 = FDZAUX1 + 4.0*EXP(b*STEMP/T)*b*STEMP/z/T/T/
* (EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)**2
  FDZAUX2 = FDZAUX2 + 4.0*EXP(b*STEMP/T)/z/z/
* (EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)**2
ELSE
C CASO EN QUE I NE 0 ENTONCES J NE 0, PUNTOS EN 4 cuadrantes
  U = U + 4.0*(b*STEMP/T)/(EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)
  FDZAUX1 = FDZAUX1 + 4.0*EXP(b*STEMP/T)*b*STEMP/z/T/T/
* (EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)**2
  FDZAUX2 = FDZAUX2 + 4.0*EXP(b*STEMP/T)/z/z/
* (EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)**2
END IF
165 CONTINUE
145 CONTINUE
C DERIVADA DE LA FUGACIDAD z.
FDZ = -FDZAUX1/(1.0/(1.0 - z)**2 + FDZAUX2)
C AQUI CALCULO EL CALOR ESPECIFICO SUMANDO CORRECTAMENTE,
EN TERMINOS DE LA DERIVADA DE LA FUGACIDAD z.
Cv = 0.0
JINI=0
DO 245 I=0,Nk
IF(I .NE. 0) JINI=1
DO 265 J=JINI,Nk
STEMP=I*I+J*J
C CASO EN QUE I=0 J=0, PUNTOS EN 4 EJES
IF(I .EQ. 0 .AND. J .EQ. 0) THEN
  Cv = Cv + 4.0*b*STEMP*EXP(b*STEMP/T)*(FDZ/z/z + b*STEMP/T/T/z)
* /(EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)**2
ELSE
  CASO EN QUE I NE 0 ENTONCES J NE 0, PUNTOS EN 4 cuadrantes
  Cv = Cv + 4.0*b*STEMP*EXP(b*STEMP/T)*(FDZ/z/z + b*STEMP/T/T/z)
* /(EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)**2
END IF
265 CONTINUE
245 CONTINUE
PRINT*,T,U/Np,Cv/Np
WRITE(10,600)T,U/Np,Cv/Np
150 CONTINUE
600 FORMAT(1F6.3,5F18.15)

```

END

```
FUNCTION FUGA(X,T)
IMPLICIT REAL*8 (A-K, O-Z)
COMMON/COEF1/b,Np,Nk
FUGA=0.0
JINI=0
DO 140 I=0,Nk
IF(I .NE. 0) JINI=1
DO 160 J=JINI,Nk
STEMP=I*I+J*J+K*K
C CASO EN QUE I=0 J=0, PUNTOS EN 4 EJES
IF(I .EQ. 0 .AND. J .EQ. 0) THEN
FUGA = FUGA + 4.0/(EXP(b*STEMP/T)/X -1.0)
ELSE
CASO EN QUE I NE 0 ENTONCES J NE 0, PUNTOS EN 4 cuadrantes
FUGA = FUGA + 4.0/(EXP(b*STEMP/T)/X -1.0)
END IF
160 CONTINUE
140 CONTINUE
FUGA = Np - FUGA - 1/(1/X-1.0)
RETURN
END
```

Este programa calcula la energía interna y el calor específico en 1D del cap 2.

```

IMPLICIT REAL*8 (A-K, O-Z)
COMMON/COEF1/b,Np,Nk
OPEN(UNIT=10, FILE='UyCv1d1000k100.DAT')
PI=4.*atan(1.)
Zeta1p5 = 2.61238
DELT=1
Damos los parametros
WRITE(*,*) 'INTRODUCIR Np,Nk,NPUN'
READ(*,*) Np,Nk,NPUN
b=1/(Np*Np)
Do 150 IT=1,NPUN
T=DELT*IT
C Temperatura.
C FUGACIDAD:
za=0.01; zb=0.99999
C Intervalo donde se buscará la solución
CUENTA=0
contador para ver cuantas veces pasa por aquí
750 CUENTA=CUENTA+1
zm=(za+zb)/2.0
IF(FUGA(zm,T)*FUGA(zb,T) .GE. 0) THEN
zb=zm
ELSE
za=zm
END IF
IF(ABS(FUGA(zm,T)) .GE. 0.00001) GO TO 750
z=zm
POTENCIAL QUIMICO:
amu=T*LOG(z)
ENERGIA INTERNA SOBRE ( $k_{\beta}T$ ) Y partes de la derivada de la
fugacidad
AL MISMO TIEMPO
U=0.0
FDZAUX1=0.0
FDZAUX2=0.0
JINI=0
DO 145 I=1,Nk
STEMP=I*I
C CASO EN QUE I=0 , PUNTOS EN 2 EJES
U = U + 2.0*(b*STEMP/T)/(EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)

```

```

    FDZAUX1 = FDZAUX1 + 2.0*EXP(b*STEMP/T)*b*STEMP/z/T/T/
* (EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)**2
    FDZAUX2 = FDZAUX2 + 2.0*EXP(b*STEMP/T)/z/z/
* (EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)**2
    145 CONTINUE
C DERIVADA DE LA FUGACIDAD z.
    FDZ = -FDZAUX1/(1.0/(1.0 - z)**2 + FDZAUX2)
C AQUI CALCULO EL CALOR ESPECIFICO SUMANDO CORRECTAMENTE,
EN TERMINOS DE LA DERIVADA DE LA FUGACIDAD z.
    Cv = 0.0
    DO 245 I=1,Nk
    STEMP=I*I
C CASO EN QUE I=0, PUNTOS EN 2 EJES
    Cv = Cv + 2.0*b*STEMP*EXP(b*STEMP/T)*(FDZ/z/z + b*STEMP/T/T/z)
* /(EXP(b*STEMP/T)/z - 1.0)**2
    245 CONTINUE
    500 CONTINUE
    PRINT*,T,U/Np,Cv/Np
    WRITE(10,600)T,U/Np,Cv/Np
    150 CONTINUE
    600 FORMAT(1F6.3,5F18.15)
    END
C FUNCTION FUGA(X,T)
    IMPLICIT REAL*8 (A-K, O-Z)
    COMMON/COEF1/b,Np,Nk
C FUGA=0.0
    DO 140 I=1,Nk
    STEMP=I*I
C CASO EN QUE I=0 J=0, PUNTOS EN 4 EJES
    FUGA = FUGA + 2.0/(EXP(b*STEMP/T)/X -1.0)
    140 CONTINUE
    FUGA = Np - FUGA - 1/(1/X-1.0)
C RETURN
    END

```

Programa para encontrar la energía interna y el calor específico en 2d-1δs del capítulo 3 sección 3.1.4

```
IMPLICIT REAL*8 (A-K, O-Z)
COMMON/COEF1/b,omega,Np,Nkx,Nky
OPEN(UNIT=10, FILE='UyCv2d1O1000s+.DAT')
PI=4.*atan(1.)
Zeta1p5 = 2.61238
omegaNp=10.0
C hbar*w en unidades de kTc del sistema 2d-1del L.T.
DELT=0.01
DELTA0=0.6
C Damos los parámetros
WRITE(*,*) 'INTRODUCIR Np, Nkx, Nky, NPUN'
READ(*,*) Np,Nkx,Nky,NPUN
omega = omegaNp/Np
b = PI*(Zeta1p5/Np)**2/omega**3
Do 150 IT=1,NPUN
T=DELTA0+DELT*IT
C Temperatura en unidades de la Tc del sistema 2d-1del L.T.
za=0.001; zb=0.9999
C Intervalo donde se buscará la solución
C GO TO 500 !SALTO A LA FORMA DE LA TANGENTE PARA CEROS
CUENTA=0
C contador para ver cuantas veces pasa por aquí
750 CUENTA=CUENTA+1
C PRINT*, 'CUENTA=', CUENTA
zm=(za+zb)/2.0
C PRINT*, FUGA(zm,T),zm,FUGA(zb,T),zb
IF(FUGA(zm,T)*FUGA(zb,T) .GE. 0) THEN
zb=zm
ELSE
za=zm
END IF
IF(CUENTA .GE. 60) THEN
PRINT*, 'NO CONVERGENCIA'; STOP
END IF
IF(ABS(FUGA(zm,T)) .GE. 0.0002) GO TO 750
z=zm
C 500 CONTINUE
C TANGENTE METODO PARA ENCONTRAR EL CERO, LA "FUGACIDAD PRIMA"
```



```

GO TO 510
eps=1.E-6
x1=0.0001; x2=0.99999
count = 0
y1 = FUGA(x1,T)
y2 = FUGA(x2,T)
do while (.true.)
PRINT*,COUNT,X1,X2
count = count + 1
deltaY = y1 - y2
if (abs(deltaY) .LT. eps) then
count = - 1
exit
end if
x3 = (y1 * x2 - y2 * x1) / deltaY
y3 = FUGA(x3,T)
if (abs(y3) .LT. eps .or. abs(x3-x2) .LT. eps) then
zero = x3
exit
end if
x1 = x2
y1 = y2
x2 = x3
y2 = y3
end do
z=zero !fugacidad prima
510 CONTINUE
C POTENCIAL QUIMICO amu:
amu=T*LOG(z)+ omega/2.0
C ENERGIA INTERNA SOBRE ( $k_{\beta}T$ ) Y partes de la derivada de la
C fugacidad z.
U=0.0
FDZAUX1=0.0
FDZAUX2=0.0
DO 145 J=0,Nky
DO 165 I=0,Nkx
betaeps=(b*I*I+J)*omega/T
IF(I .EQ. 0 .AND. J .EQ. 0) THEN
GO TO 165
ELSE IF(I .EQ. 0) THEN
U = U + betaeps/(EXP(betaeps)/z -1.0)
C Print*,'betaeps=',betaeps,' U=',U

```

```

    FDZAU1 = FDZAU1 + EXP(betaeps)*betaeps/z/
* (EXP(betaeps)/z - 1.0)**2
    FDZAU2 = FDZAU2 + EXP(betaeps)/
* (EXP(betaeps)/z - 1.0)**2
    ELSE
    U = U + 2.0*betaeps/(EXP(betaeps)/z - 1.0)
    FDZAU1 = FDZAU1 + 2.0*EXP(betaeps)*betaeps/z/
* (EXP(betaeps)/z - 1.0)**2
    FDZAU2 = FDZAU2 + 2.0*EXP(betaeps)/
* (EXP(betaeps)/z - 1.0)**2
    END IF
165 CONTINUE
145 CONTINUE
C DERIVADA DE LA FUGACIDAD z sobre kB*beta*z**2.
    FDZvs = -FDZAU1/(1.0/(1.0/z - 1.0)**2 + FDZAU2)
C DERIVADA DE LA FUGACIDAD z CON RESPECTO A T BARRA.
    FDZ=FDZvs*z**2/T
C AQUI CALCULO EL CALOR ESPECIFICO SUMANDO CORRECTAMENTE,
C EN TERMINOS DE LA DERIVADA DE LA FUGACIDAD z.
    Cv = 0.0
    DO 245 J=0,Nky
    DO 265 I=0,Nkx
    betaeps=(b*I*I+J+1./2.)*omega/T
    IF(I .EQ. 0 .AND. J .EQ. 0) THEN
    GO TO 265
    ELSE IF(I .EQ. 0) THEN
    Cv = Cv + betaeps*EXP(betaeps)*(FDZvs + betaeps/z)
* /(EXP(betaeps)/z - 1.0)**2
    ELSE
    Cv = Cv + 2.0*betaeps*EXP(betaeps)*(FDZvs + betaeps/z)
* /(EXP(betaeps)/z - 1.0)**2
    END IF
265 CONTINUE
245 CONTINUE
    Print*,T,U/Np,Cv/Np
    WRITE(10,600)T,U/Np,Cv/Np
150 CONTINUE
    600 FORMAT(1F6.3,2F18.12)
END

FUNCTION FUGA(X,T)
IMPLICIT REAL*8 (A-K, O-Z)

```

```

COMMON/COEF1/b,omega,Np,Nkx,Nky
FUGA=0.0
DO 140 J=0,Nky
DO 160 I=0,Nkx
IF(I .EQ. 0 .AND. J .EQ. 0) THEN
GO TO 160
ELSE IF(I .EQ. 0) THEN
FUGA = FUGA + 1.0/(EXP(J*omega/T)/X -1.0)
ELSE
FUGA = FUGA + 2.0/(EXP((b*I*I+J)*omega/T)/X -1.0)
END IF
160 CONTINUE
140 CONTINUE
FUGA = Np-FUGA-1.0/(1.0/X -1.0)
C RETURN
END

```

References

- [1] Albert Einstein (1924), “Quantentheorie des einatomigen idealen Gases”. *Preussische akademie der Wissenschaften* (Berlin), *Physikalisch-mathematische Klasse. Sitzungsberichte* **22**, 261-267. Versión francesa en Balibar et al. (1989), 172-179.
- [2] 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).
- [3] K. B. Davis *et al.* “Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms,” *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).
- [4] Ciencia@NASA, “Una nueva clase de materia.”
- [5] D.S Petrov, M. Holmann, and G.V Shlyapnikov, “Bose-Einstein Condensation in Quasi-2D Trapped Gases,” *Phys. Rev. A* **84**, 4188 (2000).
- [6] V. Bagnato, D. E. Pritchard and D. Kleppner, “Bose-Einstein condensation in an external potential,” *Phys. Rev. A* **35**, 10 (1987).
- [7] 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 Desarrollo* 129, 42 (1996).
- [8] Wolfgang Ketterle and N.J van Druten, “Bose-Einstein condensation of a finite number of particles trapped in one or three dimensions,” *Physical Review A* **54**, 656 (1996).

- [9] H. Haugerud, T. Haugset, F. Ravndal, "A more accurate analysis of Bose-Einstein condensation in harmonic traps," *Physics Letters A* **225**, 18 (1997).
- [10] Tor Haugset, Harek Haugerud, and Jens O. Andersen, "Bose-Einstein condensation in anisotropic harmonic traps," *Physical Review A* **55**, 2922 (1997).
- [11] M. de Llano, F. J. Sevilla and S. Tapia, "Cooper pairs as bosons," *International Journal of Modern Physics B* **20**, 2931 (2006).
- [12] J. Bardeen, L.N. Cooper and J.R. Schrieffer, "Theory of Superconductivity," *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [13] J. Bardeen, "Developments of Concepts in Superconductivity," *Phys. Today* **16**, 25, (1963).
- [14] J.R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity* (Benjamin, New York, 1964).
- [15] S. Fujita and S. Godoy, *Theory of High Temperature Superconductivity* (Kluwer, NY, 2001) pp. 97-98.
- [16] R.K. Pathria, "An ideal gas in a finite-sized container," *Am. J. Phys.* **66**, 1080 (1998).
- [17] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Wieman and E. A. Cornell, "Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor," *Science* **269**, 198 (1995).
- [18] C.C. Bradley, C.A Sackett, J.J Tollett, and R.G. Hulet, "Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions," *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1687 (1995).

- [19] K. B. Davis, Mewes, M.R Andrews, N.J van Drutte, D.S Durfee, Durfee, D.M. Kurn, and W. Ketterle “Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms,” Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).
- [20] D. G. Fried, T. C. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S. C. Moss, T. J. Greytak, and D. Kleppner “Bose-Einstein Condensation of Atomic Hydrogen.” Phys. Rev. Lett. **81**, 3811 (1998).
- [21] S.L. Cornish, N.R. Claussen, J.L. Roberts, E.A Cornell, and C.E. Wieman, “Stable ^{87}Rb Bose-Einstein Condensates with Widely Tunable Interactions,” Phys. Rev. Lett. **85**, 1795 (2000).
- [22] F. Pereira Dos Santos, J. Léonard, Junmin Wang, C.J. Barrelet, F. Perales, E. Rasel, C.S. Unnikrishnan, M. Leudec, and C. Cohen-Tannoudji, “Bose-Einstein Condensation of Metastable Helium,” Phys. Rev. Lett. **86**, 3459 (2001).
- [23] G. Modugno, G. Ferrari, G. Roati, R.J. Brecha, A Simoni, and M. Inguscio, “Bose-Einstein Condensation of Potassium Atoms by Sympathetic Cooling,” Science DOI: 10.1126/science.1066687.
- [24] T.Weber, J. Herbig, M. Mark, H.C. Nagel and R. Grimm, “Bose-Einstein Condensation of Cesium,” Science **299**, 232 (2003).
- [25] A. Griesmaier, J. Werner, S. Hensler, J. Stuhler, and T. Pfau, “Bose-Einstein Condensation of Chromium, Phys. Rev. Lett. **94**, 160401 (2005).
- [26] Fuente de la Tabla 3: M. Grether and M. de Llano, por publicarse.
- [27] K. Huang, *Statistical Mechanics* (Wiley, N.Y., 1963).

- [28] F. London, *Superfluids II* (Wiley, N.Y., 1954).
- [29] R.K. Pathria, *Statistical Mechanics* (Pergamon Press, N.Y., 1985).
- [30] A.S Alexandrov, "Normal state diamagnetism of charged bosons in cuprate superconductors," ArXiv:cond-Mat/0511108 v2 6 Nov 2005.
- [31] J. M. Blatt and K. W. Boer, "Bose-Einstein Condensation of excitons," Phys. Rev. **126**, 1691 (1962).
- [32] Euler-Maclaurin Formulas pag. 806, Hand Book of Mathematical Functions, Edited by Milton Abramowitz and Irene A. Stegun (Dover Publications, Inc, New York, 1972).

Colaboración en trabajos publicados

Cond. Matter Theories **15**, 425-434 (2000), **S. Tapia**, M, Fortes, F.J. Sevilla, M.A. Solís, M. de Llano, A.A. Valladares and V.V Tolmachev, *Free and Trapped Fermi Gases: some novel results*.

International Journal of Modern Physics B **20**, 2931-2939 (2006), **S. Tapia**, F.J. Sevilla and M. de Llano, *Cooper Pairs as Bosons*.