



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO

---

---

FACULTAD DE CIENCIAS

PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE  
UNA MEZCLA PRODUCIDA POR LA  
RECONVERSIÓN ENTRE FERMIONES Y  
BOSONES IDEALES A BAJAS  
TEMPERATURAS.

T E S I S

que para obtener el título de:

F I S I C O

presenta:

Eleazar Neri Medina

Directora de tesis:

Dra. Rosario Paredes Gutiérrez



2009



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**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.

---

## Hoja de Datos del Jurado

|    |   |
|----|---|
| 1. | Datos del alumno<br>Neri<br>Medina<br>Eleazar<br>57 36 42 93<br>Universidad Nacional Autónoma de México<br>Facultad de Ciencias<br>Física<br>097122829                |
| 2. | Datos del tutor<br>Dra.<br>Rosario<br>Paredes<br>Gutiérrez  |
| 3. | Datos del sinodal 1<br>Dra.<br>María de los Angeles<br>Ortíz<br>Flores  |
| 4. | Datos del sinodal 2<br>Dr.<br>Juan Carlos<br>Alonso<br>Huitrón  |
| 5. | Datos del sinodal 3<br>Dr.<br>Luis Antonio<br>Pérez<br>López  |
| 6. | Datos del sinodal 4<br>Dr.<br>Vicenta<br>Sánchez<br>Morales   |
| 7. | Datos de la Tesis<br>Propiedades termodinámicas de una mezcla producida por la reconversión<br>entre fermiones y bosones ideales a bajas temperaturas<br>96 p<br>2009 |

"Dios me libre de completar NADA. Este libro entero no es más que un borrador; mejor dicho, el borrador de un borrador. ¡Ah, Tiempo, Energía, Dinero y Paciencia!"

MOBY DICK, Herman Melville



*A todos y cada uno de los que contribuyeron a mi formación como físico y persona, a los que me han acompañado en este viaje, y especialmente a todos los que participaron haciendo posible la realización de esta tesis.*

*gracias!*

El desarrollo de esta tesis ha sido financiado por los proyectos de investigación  
DGAPA-PAPIIT (UNAM) IN-117406 y IN-114308:  
“Termodinámica y transporte en gases ultrafríos confinados (II)”

# Índice general

|   |           |
|---|-----------|
| Hoja de Datos del Jurado  | i         |
| Índice general  | vii       |
| Resumen   | ix        |
| <b>1 Introducción</b>   | <b>1</b>  |
| <b>2 Confinamiento magnético y enfriamiento láser</b>                         | <b>5</b>  |
| 2.1 Confinamiento magnético . . . . .   | 6         |
| 2.1.1 Potencial de confinamiento . . . . .                                    | 6         |
| 2.1.2 Confinamiento radial y axial . . . . .                                  | 7         |
| 2.2 Enfriamiento láser y evaporativo . . . . .                                | 9         |
| 2.2.1 Fuerza de frenamiento . . . . .   | 9         |
| 2.2.2 Frenamiento Zeeman . . . . .  | 12        |
| 2.2.3 Melazas ópticas . . . . .   | 12        |
| 2.2.4 Enfriamiento evaporativo . . . . .                                      | 13        |
| <b>3 Termodinámica de un gas ideal cuántico confinado: bosones, fermiones</b> | <b>15</b> |
| 3.1 Gas ideal cuántico . . . . .  | 16        |
| 3.2 Formalismo gran canónico . . . . .  | 16        |
| 3.2.1 Densidad de estados . . . . .   | 19        |
| 3.2.2 Gran potencial . . . . .  | 21        |
| 3.3 Propiedades termodinámicas . . . . .                                      | 22        |
| 3.4 Condensado de Bose-Einstein . . . . .                                     | 27        |
| 3.4.1 Calor específico de un gas de bosones . . . . .                         | 32        |
| 3.5 Gas degenerado de Fermi . . . . .   | 35        |
| 3.5.1 Calor específico a volumen constante, gas de fermiones . . . . .        | 38        |
| 3.6 Potencial químico . . . . .   | 40        |
| 3.6.1 Gas de bosones . . . . .  | 40        |
| 3.6.2 Gas de fermiones . . . . .  | 42        |

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>4</b> | <b>Perfiles de Densidad</b>  | <b>45</b> |
| 4.1      | Gas de bosones . . . . .   | 46        |
| 4.2      | Gas de Fermiones . . . . .   | 49        |
| <b>5</b> | <b>Mezcla de bosones y fermiones</b>   | <b>53</b> |
| 5.1      | Composición de la mezcla . . . . .   | 54        |
| 5.2      | Gran potencial de la mezcla . . . . .  | 55        |
| 5.3      | Equilibrio químico . . . . .   | 58        |
| 5.3.1    | Relaciones termodinámicas . . . . .  | 58        |
| 5.4      | Temperatura crítica . . . . .  | 60        |
| 5.4.1    | Mezcla balanceada . . . . .  | 61        |
| 5.4.2    | Mezcla desbalanceada . . . . .   | 63        |
| 5.5      | Potenciales químicos . . . . .   | 65        |
| 5.5.1    | Mezcla balanceada . . . . .  | 66        |
| 5.5.2    | Mezcla desbalanceada . . . . .   | 67        |
| 5.6      | Composición de la mezcla en equilibrio . . . . .   | 68        |
| <b>6</b> | <b>Conclusiones</b>  | <b>73</b> |
| <b>A</b> | <b>Estados energéticos de partícula confinada</b><br><b>(Potencial homogéneo, armónico, cuadrupolar)</b> | <b>77</b> |
| <b>B</b> | <b>Funciones de Bose y de Fermi</b>  | <b>81</b> |
|          | <b>Bibliografía</b>  | <b>83</b> |

# Resumen

En esta tesis se analizan las propiedades termodinámicas de un gas ideal cuántico confinado tres diferentes potenciales externos (tridimensionales): homogéneo, armónico y cuadrupolar. Esta tesis se puede dividir en dos partes: en la primera se estudia al gas conformado por un solo tipo de partículas: bosones o fermiones (capítulo 3), en este caso se analizan también los perfiles de densidad como función de la temperatura (capítulo 4); mientras que en la segunda parte se analiza una mezcla con ambos tipos de partículas: fermiones en dos estados de espín diferentes ( $\uparrow$ ,  $\downarrow$ ) que pueden estar en la mezcla como partículas independientes o ligarse para formar un boson (capítulo 5).

El análisis termodinámico que se hace del **gas de bosones y fermiones** comprende dos regímenes: altas temperaturas, en el que se recuperan las propiedades del gas ideal clásico; y el de bajas temperaturas, en el cual se abordan las características del condensado de Bose-Einstein y el gas degenerado de Fermi. Se obtienen la temperatura crítica  $T_c$  para el gas de bosones, y la energía de Fermi  $\epsilon_F$  para el gas de fermiones, en cada uno de los potenciales de confinamiento. Para ambos gases se estudia la entropía y la energía interna, así como el potencial químico como función de la temperatura. Una propiedad importante que se analiza es el calor específico a volumen constante  $C_V$  como función de la temperatura. Finalmente también se analizan los perfiles de densidad como función de la temperatura.

En el caso de la **mezcla**, se distinguen dos tipos: cuando el número de fermiones en cada estado son iguales  $N_\uparrow = N_\downarrow$  (balanceada), y el caso contrario  $N_\uparrow \neq N_\downarrow$  (mezcla desbalanceada). Para ambos caso se analizan tres propiedades: la temperatura crítica  $T_c$  a la cual se presenta el condensado de Bose-Einstein en los bosones de la mezcla, y que depende de la energía necesaria para formar un boson a partir de dos fermiones en diferente estado (energía de ligadura  $\epsilon^*$ ); los potenciales químicos para cada tipo de partículas (fermiones en los dos estado  $\uparrow$ ,  $\downarrow$ ; y bosones) como función de la temperatura; y finalmente se analiza la población de fermiones( $\uparrow$ ,  $\downarrow$ ) y de bosones como función de la temperatura.

# CAPÍTULO 1

## Introducción

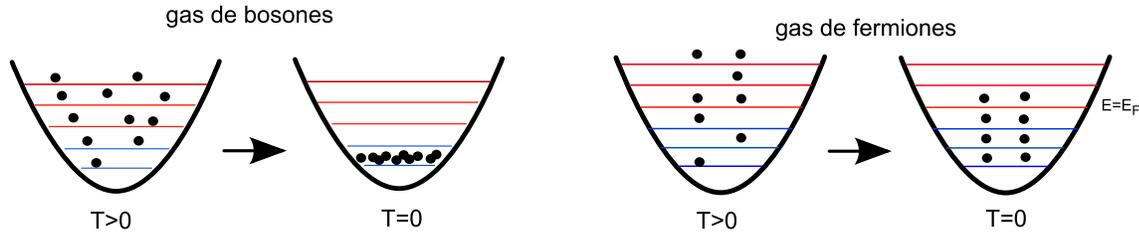
Una de las principales características de todas las partículas presentes en la naturaleza es que se pueden clasificar en dos tipos diferentes: bosones y fermiones. Esta clasificación se debe al comportamiento estadístico que tienen cuando se congregan para formar un conjunto de partículas. Esto es una consecuencia del comportamiento cuántico de las partículas, en específico de la indistinguibilidad<sup>1</sup> de las partículas. Así, para un sistema de  $N$  partículas, la función de onda del sistema debe ser físicamente equivalente ante la permutación de dos partículas. Se puede demostrar entonces que la función de onda del sistema  $\Psi(\dots r_i \dots r_j \dots)$  puede ser simétrica o antisimétrica ante la permutación de dos partículas:  $\Psi(\dots r_i \dots r_j \dots) = \pm \Psi(\dots r_j \dots r_i \dots)$ . Cuando la función de onda es simétrica (+), a las partículas se les denomina bosones y cuando la función de onda es antisimétrica (-) se les denomina fermiones. Una consecuencia de esto es que los fermiones satisfacen el principio de exclusión de Pauli, mientras que los bosones no. Así, en un mismo estado cuántico puede haber uno o más bosones; pero únicamente puede haber un fermión. Por otro lado, se sabe que el espín de los bosones debe tener valor entero, mientras que el de los fermiones valor semientero.

Esta característica de las partículas permite que para un gas ideal (partículas sin interacción), a muy bajas temperaturas, ocurran dos fenómenos diferentes según el tipo de partículas que lo componen: el condensado de Bose-Einstein para un gas de bosones y el gas degenerado de Fermi para un gas de fermiones. El condensado de Bose-Einstein se caracteriza por que la gran mayoría de los bosones que componen al gas, se hallan en el estado de mínima energía (estado base) como consecuencia de que los átomos pueden ocupar el mismo estado cuántico, la transición al condensado ocurre a una temperatura crítica  $T_c$ , que depende únicamente de la densidad de partículas del gas. Por otro lado, el gas degenerado de Fermi se define como un gas de fermiones a  $T = 0$ ; en este caso las partículas ocupan los estados de mínima energía (respetando el principio de exclusión), de tal manera que llenan todos los estados con energía menor a la energía de Fermi  $\epsilon_F$ , y que también depende úni-

---

<sup>1</sup>Por indistinguibilidad, entendemos no solo que todas las partículas son idénticas (cuando son del mismo tipo); sino que además no podemos "etiquetarlas" para diferenciar una de otra.

camente de la densidad de partículas. Este comportamiento del gas degenerado de Fermi es una consecuencia de que los fermiones satisfacen con el principio de Pauli. En la figura 1.1 se ilustra este comportamiento para ambos tipos de partículas confinadas en un potencial armónico.



**Figura 1.1:** Ocupación de los bosones y de los fermiones en los estados energéticos para  $T > 0$  y  $T = 0$

Ambos fenómenos habían permanecido únicamente como predicciones teóricas, hasta que se logró obtener experimentalmente por primera vez el condensado de Bose-Einstein en el año 1995, y el gas degenerado de Fermi en el año 1999. El condensado de Bose-Einstein se obtuvo el mismo año por varios grupos de investigadores en diferentes universidades utilizando gases alcalinos:  $^{87}\text{Rb}$  (Cornell y Wieman, Univ. de Colorado)[3],  $^{27}\text{Na}$  (Ketterle, MIT)[4] y  $^7\text{Li}$  (Hulet, Univ. de Rice)[5]. Mientras que el gas degenerado de Fermi se logró con un gas de  $^{40}\text{K}$  por el grupo de la Dra. Deborah Jin en la Universidad de Colorado [6].

Para lograr obtener el condensado de Bose-Einstein y el gas degenerado de Fermi fue necesario confinar a los gases y alcanzar temperaturas del orden de nanokelvins. Las técnicas experimentales para obtener estas condiciones consisten principalmente en la aplicación de campos magnéticos que interactúan con el momento magnético de los átomos de tal manera que actúan como un potencial, gracias al cual es posible confinar al gas; y la aplicación de radiación láser que actúa como un medio por el cual el átomo es frenado, esto provoca que la velocidad de los átomos del gas disminuya y por lo tanto el gas se enfríe. En el capítulo 2, se hará una breve revisión de los fundamentos físicos que soportan estas técnicas.

A partir de que se logró obtener experimentalmente el condensado de Bose-Einstein y el gas degenerado de Fermi, se ha venido intensificado la variedad de experimentos con gases atómicos a muy bajas temperaturas; uno de estos son las mezclas compuestas por ambos tipos de partículas: bosones y fermiones. Así, en el año 2003 el grupo de la Dra. Deborah Jin consiguió obtener la fase condensada de Bose-Einstein a partir de un gas con átomos de  $^{40}\text{K}$  (fermiones) en dos estados de espín diferentes ( $\uparrow, \downarrow$ )[7]. Para lograr la mezcla de fermiones y bosones, se inicia con un gas de fermiones en dos estados de espín diferentes; de tal manera que es posible que dos de ellos se ligen para formar un bosón molecular ( $\uparrow\downarrow$ ). La formación de bosones es controlada mediante la interacción entre los fermiones y puede ser "modulada" por medio de un campo magnético externo. Si la temperatura es suficientemente baja entonces el gas puede pasar de un estado de gas degenerado de Fermi, a un condensado de Bose-Einstein, y viceversa. Estos experimentos tienen un interés importante debido a la transición BEC-BCS: de un estado de condensado de Bose-Einstein BEC (bosones), a un estado de superfluido BCS (fermiones).

Esta serie de logros experimentales en gases atómicos a muy bajas temperaturas ha motivado la investigación teórica por describir las diferentes propiedades de estos gases bajo estas condiciones. En este sentido, el objetivo de esta tesis es analizar la termodinámica de un gas ideal cuántico confinado: tanto del gas compuesto por un solo tipo de partículas, ya sea fermiones o bosones; así como de una mezcla compuesta por ambos tipos de partículas.

La estructura de esta tesis se puede resumir de la siguiente manera: en el capítulo 2 se hace una breve revisión de los fundamentos físicos que describen el confinamiento magnético y el enfriamiento láser, y que hacen posible alcanzar temperaturas del orden de nanokelvins en gases atómicos. En este capítulo mostraremos que el confinamiento de estos gases se logra mediante potenciales de tipo armónico ( $V(r) \propto r^2$ ) y cuadrupolar ( $V(r) \propto r$ ). Así, en el capítulo 3 se hace el análisis de la termodinámica del gas compuesto por bosones o fermiones, confinados en ambos potenciales junto, con el bien estudiado en la literatura, potencial homogéneo<sup>2</sup> (caja cúbica); se estudian las características para el condensado de Bose-Einstein (temperatura crítica), así como las del gas degenerado de Fermi (energía de Fermi). Por otra parte, en el capítulo 4 se obtienen los perfiles de densidad, para el gas de bosones y de fermiones, como función de la temperatura; los perfiles pueden servir como un medio de comparación con los experimentos, ya que estos son reportados por quienes realizan los experimentos con gases a muy bajas temperaturas. En el capítulo 5 se aborda la termodinámica de una mezcla de fermiones en dos estados diferentes ( $\uparrow, \downarrow$ ) que pueden formar un bosón molecular( $\uparrow\downarrow$ ); en este caso se estudian las propiedades de la temperatura crítica a la cual se presenta el condensado de Bose-Einstein en los bosones de la mezcla, así como los potenciales químicos para cada tipo de partículas que componen la mezcla y la población de cada tipo de partículas como función de la temperatura. Para la mezcla identificamos dos tipos: mezcla balanceada, para la cual hay el mismo número de fermiones de cada estado de espín ( $N_{\uparrow} = N_{\downarrow}$ ); y la mezcla desbalanceada que corresponde al caso contrario ( $N_{\uparrow} \neq N_{\downarrow}$ ). Finalmente en el capítulo 6 se hace una discusión final.

---

<sup>2</sup>Aunque el para el caso del potencial homogéneo son bien conocidas sus propiedades, que se pueden consultar varios libros de Física Estadística: Greiner[15], Huang[16], Pathria[17], etc. este ha servido como comparación con los otros dos.

## CAPÍTULO 2

# Confinamiento magnético y enfriamiento láser

Uno de los logros experimentales más importantes en las últimas décadas ha sido la obtención de la fase condensada de Bose-Einstein y el gas degenerado de Fermi en gases atómicos. Esto fue posible gracias a las técnicas de confinamiento y enfriamiento de estos gases, que permitieron obtener densidades del orden de  $10^{12} \sim 10^{14}$  partículas por  $\text{cm}^3$  y al mismo tiempo alcanzar temperaturas del orden de nanokelvins [3] [4]. Aunque la teoría que fundamenta estas técnicas es muy amplia y compleja; en este capítulo se hará una breve revisión sobre ella. Primero analizaremos el confinamiento magnético de los gases. Esto se logra mediante campos magnéticos externos que interactúan con el momento magnético de los átomos; de tal forma que representan potenciales de tipo armónico y cuadrupolar para los átomos. Dichos campos son producidos mediante arreglos de bobinas con diferentes configuraciones; aquí analizaremos una configuración que utiliza dos arreglos de bobinas: uno para el confinamiento radial y otro para el confinamiento axial, si pensamos en coordenadas cilíndricas.

Posteriormente analizaremos los principios básicos del enfriamiento láser que consisten en frenar a los átomos del gas mediante una fuerza producida por el campo de radiación de un láser que interactúa con los átomos. Estudiaremos el frenamiento Zeeman que consiste en aplicar un campo magnético adicional a los átomos para compensar la variación de la fuerza de frenamiento debida al efecto doppler en el sistema del átomo. Haremos una breve explicación de las melazas ópticas, que consisten en un arreglo de láseres, capaces de ejercer sobre los átomos una fuerza parecida a la de un medio viscoso sobre una partícula. Finalmente revisaremos el enfriamiento evaporativo, cuyo principio es el de permitir escapar a los átomos más energéticos del gas, y por lo tanto disminuir aún más la temperatura del gas.

## 2.1 Confinamiento magnético

El confinamiento de gases atómicos es posible mediante la aplicación de campos magnéticos externos que interactúan con el momento magnético de los átomos. Como es bien sabido, la interacción entre el momento magnético de un átomo con un campo magnético externo produce el desdoblamiento de las energías de los distintos estados del átomo. Este es el efecto Zeeman, y es el principio mediante el cual es posible confinar los átomos, como veremos a continuación.

### 2.1.1 Potencial de confinamiento

En general un átomo multielectrónico tiene un momento angular total dado por  $\mathbf{F}=\mathbf{J}+\mathbf{I}$ , donde  $\mathbf{J}$  es el momento angular electrónico total<sup>1</sup> debido a los electrones que componen al átomo; mientras que  $\mathbf{I}$  corresponde al espín total del núcleo. Así, el estado del átomo queda determinado por los cuatro números cuánticos  $|IJFM_F\rangle$ , donde  $M_F$  es la proyección del momento angular total del átomo  $\mathbf{F}$ .

El momento magnético total del átomo tiene entonces dos contribuciones, una debida al momento angular electrónico  $\mathbf{J}$  y otra al espín nuclear  $\mathbf{I}$ :

$$\boldsymbol{\mu}_{atomo} = -g_J\mu_B\mathbf{J} + g_I\mu_N\mathbf{I}, \quad (2.1)$$

donde  $g_J = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)}$ , es el factor de Landé para el acoplamiento L-S; mientras que  $g_I$  corresponde a la razón giromagnética del núcleo;  $\mu_B$  y  $\mu_N$  son el magneton de Bohr y nuclear respectivamente<sup>2</sup>. El signo negativo viene por que corresponde a la contribución debida a los electrones que tienen carga negativa, mientras que el signo positivo corresponde a la contribución del núcleo que esta formado por protones con carga positiva. De está forma la energía de interacción entre el momento magnético del átomo y un campo magnético externo  $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ , está dada por:

$$U(\mathbf{r}) = -\boldsymbol{\mu}_{atomo} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}). \quad (2.2)$$

Cuando el campo magnético externo no es muy intenso [20], entonces la energía de interacción entre el momento magnético del átomo y el campo magnético externo está dada por:

$$U(\mathbf{r}) = g_F\mu_B M_F |\mathbf{B}(\mathbf{r})|, \quad (2.3)$$

donde  $g_F = \frac{F(F+1)+J(J+1)-I(I+1)}{2F(F+1)}g_J$ , corresponde al factor de Landé para el acoplamiento I-J, que en general es positivo. Este potencial de confinamiento ejerce sobre los átomos una fuerza que depende de la posición:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla U = -g_F\mu_B M_F \nabla |\mathbf{B}(\mathbf{r})|; \quad (2.4)$$

<sup>1</sup> $\mathbf{J}=\mathbf{L}+\mathbf{S}$ , donde  $\mathbf{L}$  corresponde al momento orbital electrónico total y  $\mathbf{S}$  al espín electrónico total. En los átomos alcalinos en su estado base, que son los más utilizados en los experimentos de condensación de Bose-Einstein,  $\mathbf{L} = 0$  por lo que  $\mathbf{J}=\mathbf{S}=\pm\frac{1}{2}$

<sup>2</sup> $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \simeq 5.66 \times 10^{-5} eVT^{-1}$        $\mu_N = (m_e/m_p)\mu_B \simeq \mu_B/1836$

está fuerza es la necesaria para confinar a los átomos. Así, un campo magnético  $\mathbf{B}(\mathbf{r})$  que contenga un mínimo produce un gradiente de fuerzas, y de manera efectiva se tiene un potencial externo de confinamiento  $U(\mathbf{r})$ . La manera más utilizada en las técnicas experimentales de conseguir esto, consiste principalmente en dos arreglos de bobinas, uno para el confinamiento radial y otro para el confinamiento axial si consideramos coordenadas cilíndricas.

### 2.1.2 Confinamiento radial y axial

El confinamiento radial se consigue mediante un cuadrupolo magnético que consisten en dos pares de bobinas colocadas paralelamente sobre un mismo eje, tal que la corriente eléctrica en las bobinas circula en sentidos contrarios, la figura 2.1a es un esquema de este arreglo. Si las bobinas son alargadas como se muestra en está figura, entonces en una pequeña region cerca del origen, el campo magnético tiene componente  $z$  nula y únicamente depende de la dirección angular  $\phi$  y del radio  $r$  de la siguiente manera[20]:

$$\mathbf{B}(r, \phi, z) = -Br\hat{\phi}, \quad (2.5a)$$

$$|\mathbf{B}(r, \phi, z)| = Br, \quad (2.5b)$$

donde  $B$  es una constante. Entonces la intensidad del campo magnético depende únicamente de  $r$  (linealmente), por lo que se anula sobre el eje  $z$  ( $r = 0$ ),  $|\mathbf{B}(0, \phi, z)| = 0$ ; de está manera el potencial de confinamiento (2.3) toma la siguiente forma:

$$U(r) = (g_F\mu_B M_F B) r. \quad (2.6)$$

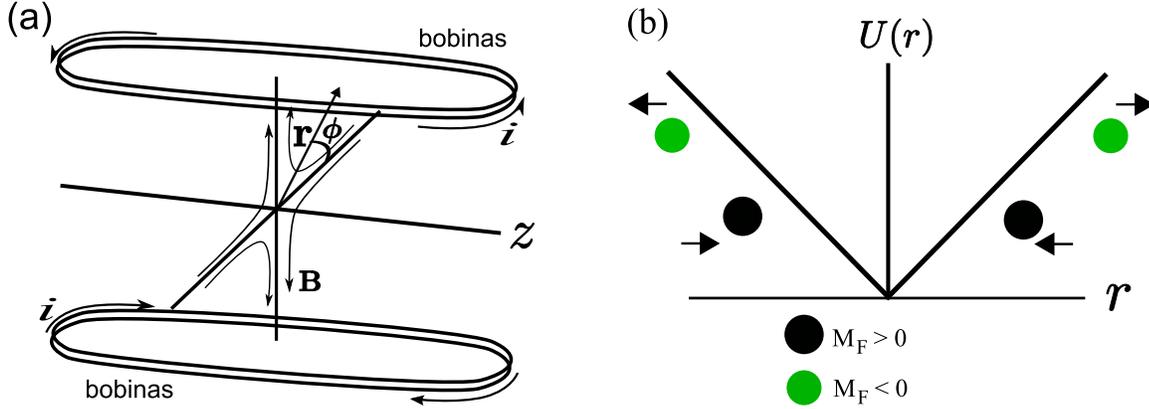
Este potencial que varia linealmente, se le conoce como potencial cuadrupolar. Así, la fuerza que se ejerce sobre los átomos por este potencial toma la siguiente forma:

$$\mathbf{F}(r) = -\nabla U(r) = -(g_F\mu_B M_F B) \hat{r}. \quad (2.7)$$

Si un átomo se encuentra en un estado con  $M_F > 0$ , la fuerza es de atracción hacia el eje  $z$  donde el potencial es mínimo  $U(0) = 0$ ; así, los átomos pueden ser confinados sobre del eje  $z$ . Si por el contrario un átomo se encuentra en un estado con  $M_F < 0$  la fuerza es de repulsión y escapa del confinamiento (ver figura 2.1b).

Existe una desventaja con está configuración del campo, ya que en el eje  $z$  donde se confinan los átomos el campo es nulo. Esto provoca que la separación energética, debida al efecto Zeeman, entre estados con distinto número cuántico  $M_F$  sea muy pequeña o nula. Así, los átomos cambian fácilmente de un estado con  $M_F > 0$  a estados con  $M_F < 0$ , debido a la pequeña brecha energética y escapan del confinamiento radial.

Existen diferentes técnicas que se han implementado para eliminar este defecto en el confinamiento radial. Una de ellas consiste en la aplicación un campo magnético adicional  $\mathbf{B}'(z)$ , cuya intensidad sobre el eje  $z$  tenga un valor diferente de cero. De está forma el campo magnético total, sobre este eje, tiene un valor diferente de cero. Así, la brecha energética entre



**Figura 2.1:** (a) Conjunto de bobinas que produce un potencial cuadrupolar para el confinamiento axial de los átomos. (b) gráfica del potencial cuadrupolar en función de la distancia radial al eje  $z$  ( $U(r) \propto r$ ), este potencial en el origen se anula; las partículas con estado  $M_F > 0$  son atraídas hacia el origen mientras que las que tienen estado  $M_F < 0$  son repelidas del origen.

estados con diferente  $M_F$  es mayor, y se evitan posibles transiciones de los átomos a estados con  $M_F < 0$  para que escapen.

Mediante un arreglo de bobinas Helmholtz en la dirección axial (fig. 2.2), es posible obtener este campo adicional. Sobre el eje  $z$ , el campo producido por este par de bobinas tiene únicamente componente vertical y tiene un valor mínimo en el origen:  $\mathbf{B}'(0) = B_0\hat{z}$ , diferente de cero y que se mantiene uniforme en una pequeña region alrededor del origen. Así, el campo magnético total cerca del origen ahora viene dada por:

$$\mathbf{B}(r, \phi, z) = -Br\hat{\phi} + B_0\hat{z}, \quad (2.8a)$$

$$|\mathbf{B}(r)| = [B_0^2 + B^2r^2]^{1/2} \simeq B_0 + \frac{B^2r^2}{2B_0}; \quad (2.8b)$$

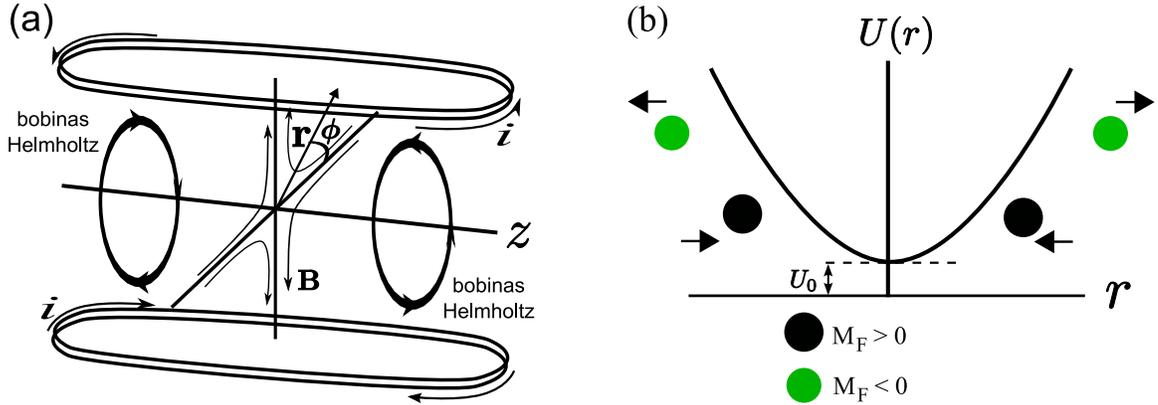
esta aproximación es buena para  $Br \ll B_0$ , que se cumple para pequeños valores de  $r$ , que corresponde a la zona de confinamiento de los átomos, entonces el potencial de confinamiento (2.3) queda de la siguiente forma:

$$U(r) = g_F\mu_B M_F \left( B_0 + \frac{B^2r^2}{2B_0} \right) = U_0 + \frac{1}{2}m\omega_r^2 r^2, \quad (2.9)$$

cuya expresión es de tipo oscilador armónico. Donde  $m$  es la masa de los átomos, y  $\omega_r = \sqrt{\frac{g_F\mu_B M_F}{mB_0}} B$  corresponde a la frecuencia de oscilación del confinamiento radial. El valor mínimo del potencial está dado por  $U_0 = g_F\mu_B M_F B_0$ . Así, mediante este potencial se consigue el confinamiento radial de los átomos.

Para el confinamiento axial se emplea el mismo arreglo de bobinas Helmholtz utilizado para producir el campo magnético  $\mathbf{B}'(z)$ . Como hemos visto, la intensidad del campo debido a este par de bobinas, en la dirección  $z$  tiene un valor mínimo en el origen  $|\mathbf{B}'(0)| = B_0$  y se

puede mostrar[20] que la intensidad de este campo en la dirección axial varía de la siguiente forma:  $|\mathbf{B}'(z)| \simeq B_0 + B'z^2$ . Donde  $B_0$  y  $B'$  son constantes diferentes de cero; de manera que también se produce un potencial de confinamiento, de tipo armónico, en la dirección axial con frecuencia  $\omega_z = \sqrt{2B'/m}$ . Así, es posible confinar a los átomos en una nube de tipo cilíndrica ( $\omega_z < \omega_r$ ) o esférica ( $\omega_z = \omega_r$ ).



**Figura 2.2:** (a) Arreglo de Bobinas helmholtz, que junto con el el cuadrupolo magnético producen un potencial de tipo armónico. (b) gráfica del potencial armónico, generado por el conjunto de bobinas, cuyo valor en el origen  $U_0$  es distinto de cero.

## 2.2 Enfriamiento láser y evaporativo

La idea del enfriamiento láser se puede entender de una manera simple como el frenamiento de las partículas (disminución de su velocidad) que conforman al gas para así bajar su temperatura. Como sabemos, la temperatura para un gas ideal se relaciona con la energía cinética de las partículas como:

$$3k_B T/2 = mv_{rms}^2/2, \quad (2.10)$$

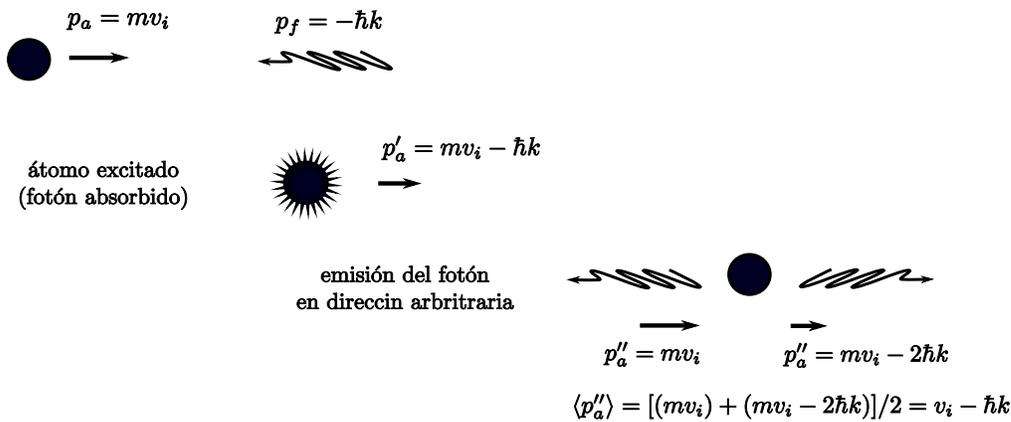
donde  $v_{rms}$  representa la raíz del promedio de la velocidad cuadrática de las partículas ( $v_{rms} = \sqrt{\langle v^2 \rangle}$ ); de tal manera que al reducir la energía cinética de las partículas ( $mv_{rms}^2/2$ ) entonces la temperatura del gas disminuye.

### 2.2.1 Fuerza de frenamiento

El proceso de enfriamiento láser por el cual los átomos del gas se “frenan”, se puede entender mediante la absorción y emisión de fotones de la siguiente manera (ver figura 2.3): supongamos inicialmente un átomo que encuentra en su estado base y se mueve con momento<sup>3</sup>  $p_a = mv_i$ ,

<sup>3</sup>Por simplicidad y sin pérdida de generalidad consideremos el movimiento del átomo y del fotón en una sola dimensión.

mientras que un fotón se propaga en dirección contraria a la del átomo con momento<sup>4</sup>  $p_f = -\hbar k$ ; de tal manera que en la colisión del átomo y el fotón, este es absorbido por el átomo y pasa a un estado excitado. Por conservación de momento el átomo, ahora en estado excitado, reduce su velocidad inicial en la cantidad  $v_{fren} = -\hbar k/m$  ( $p'_a = mv_i - \hbar k$ ). Después de un tiempo el átomo decae nuevamente a su estado base emitiendo un fotón con la misma energía que el absorbido en dos posibles direcciones ( $p'_f = \pm \hbar k$ ), por lo que el momento final del átomo tiene dos posibilidades:  $p''_a = mv_i$ ,  $p''_a = mv_i - 2\hbar k$ . Sin embargo, puesto que la dirección de emisión del fotón es arbitraria (emisión espontánea), en promedio el momento final del átomo es  $\langle p''_a \rangle = [(mv_i) + (mv_i - 2\hbar k)]/2 = mv_i - \hbar k$  y la velocidad del átomo se reduce en el valor  $v_{fre} = -\hbar k/m$ . Después de varios procesos de absorción-emisión el átomo puede reducir su velocidad a valores del orden de  $30m/s$ , que para un gas cuyas partículas tienen en promedio está velocidad, corresponde a temperaturas del orden de microkelvin.



**Figura 2.3:** Proceso del enfriamiento láser: un átomo que se mueve con momento  $p_a$  absorbe un fotón que se propaga en dirección contraria con momento  $-\hbar k$ ; después de un tiempo el átomo emite un fotón con la misma energía y en dirección arbitraria por lo que el átomo disminuye su velocidad en la cantidad  $-\hbar k$ .

Este modelo que se ha explicado del enfriamiento láser mediante la absorción y emisión de fotones considera a los átomos y los fotones como partículas cuya dinámica es clásica; sin embargo el átomo y su interacción con los fotones representa un sistema cuántico, que conforme disminuye la energía de los átomos (menor temperatura del gas) más evidentes serán sus efectos cuánticos. Es posible hacer una aproximación semiclásica mediante un sistema cuántico de dos niveles (átomo en su estado base y su estado excitado) que interactúa con un campo de radiación (láser), lo nos permite obtener una expresión para la fuerza que se ejerce sobre un átomo ( $\mathbf{F} = \Delta p_f / \Delta t$ ) debida al impacto con los fotones (campo de radiación)[18],[20],[19]:

<sup>4</sup>La energía de un fotón viene dada por  $E_f = h\nu = hc/\lambda$ , donde  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío; por otro lado la energía del fotón esta relacionada con su momento lineal mediante  $p_f = E_f/c$ , por lo que entonces:  $p_f = \hbar k$ , donde  $k = 2\pi/\lambda$ .

| Elemento          | $T_i$ (fuente de átomos)<br>(K) | $v_{rms}^i$<br>(m/s) | $L_{min}$<br>(m) | $\tau$<br>(ns) | $T_{min}$<br>( $\mu$ K) |
|-------------------|---------------------------------|----------------------|------------------|----------------|-------------------------|
| $^1\text{H}$      | 1000                            | 5000                 | 0.012            | 1.60           | 2389.                   |
| $^4\text{He}$     | 650                             | 2013                 | 4.4              | 106.83         | 35.75                   |
| $^7\text{Li}$     | 1017                            | 2051                 | 1.5              | 26.87          | 142.11                  |
| $^{23}\text{Na}$  | 712                             | 876                  | 0.42             | 15.90          | 240.18                  |
| $^{39}\text{K}$   | 617                             | 626                  | 0.77             | 26.13          | 146.16                  |
| $^{85}\text{Rb}$  | 568                             | 402                  | 0.75             | 26.63          | 143.41                  |
| $^{133}\text{Cs}$ | 544                             | 319                  | 0.93             | 30.70          | 124.39                  |

**Tabla 2.1:** Algunos datos del tiempo mínimo y de la distancia mínima de frenado de los átomos para diferentes elementos, a partir de una temperatura inicial  $T$ .

$$\mathbf{F} = \Delta \mathbf{p}_{foton} / \Delta t = \hbar \mathbf{k} \left( \frac{\Gamma}{2} \frac{s_0}{1 + s_0 + [2(\omega_l - \omega_0)/\Gamma]^2} \right). \quad (2.11)$$

Esta fuerza de frenado sobre los átomos depende de la vida media de excitación del átomo  $\tau$  ( $\Gamma = 1/\tau$ ), de la frecuencia del láser  $\omega_l$ , y la de resonancia del átomo  $\omega_0$ , así como del factor  $s_0 = I/I_{sat}$  que corresponde a la razón entre la intensidad del láser y la de saturación.

A intensidades del láser muy grandes ( $I \rightarrow \infty$ ) la fuerza de desaceleración llega a un límite dado por  $F_{max} = \hbar k \Gamma / 2$ . Por lo que hay una máxima desaceleración posible para el átomo dada por  $a_{max} = \hbar k \Gamma / (2m)$ . Para el Na por ejemplo, es del orden de  $10^5$  veces la aceleración de la gravedad. Esta fuerza máxima determina un tiempo mínimo para frenar totalmente al átomo<sup>5</sup>, que inicialmente tiene una velocidad  $v_{rms}^i$ , dado por:  $t_{min} = v_{rms}^i / a_{max}$ , así como la distancia mínima necesaria para frenarlos:  $L_{min} = (v_{rms}^i)^2 / 2a_{max}$ .

En la tabla 2.1 se dan algunos valores de  $L_{min}$  para algunos elementos (alcalinos) que se utilizan en los experimentos [10]. Debido a que estos elementos, en su estado puro, se encuentran en fase sólida bajo condiciones normales es necesario calentarlos en un horno (fuente de átomos) hasta una temperatura  $T_i$  para tenerlos en fase gaseosa. El horno, a temperatura  $T_i$ , actúa como fuente del haz de átomos cuya velocidad inicial está dada por  $v_{rms}^i = 2\sqrt{kT_i/m}$ . Es importante mencionar que el confinamiento de los gases se hace en cámaras de ultravacío con presiones del orden de  $10^{-9}$  Torr [14].

Este proceso de frenado para los átomos requiere intensidades altas del láser. Sin embargo, esto puede afectar el enfriamiento del gas ya que cuando la intensidad de la radiación es muy intensa puede producir emisión estimulada de fotones. En este caso el fotón es emitido en la misma dirección del fotón absorbido ( $p_f = p'_f = -\hbar k$ ) por lo que la transferencia de momento al átomo después del proceso absorción-emisión es cero ( $p_a = p''_a = mv_i$ ) y el átomo no disminuye su velocidad inicial  $v_i$  por lo que no es posible enfriar al gas.

<sup>5</sup>Claro que esto no es posible para los átomos, debido al principio de incertidumbre de Heisenberg. Sin embargo nos da una estimación del tiempo mínimo para frenar a los átomos a velocidades cercanas a cero. Además como veremos más adelante existe una velocidad mínima a la que se llega mediante la técnica de enfriamiento láser

### 2.2.2 Frenamiento Zeeman

La fuerza de frenado dada por la ecuación (2.11) es máxima cuando  $\omega_l = \omega_0$ . Sin embargo si el átomo se mueve con velocidad  $v$  en dirección contraria a la radiación láser, la frecuencia láser en el sistema de referencia del átomo varía por efecto Doppler como:

$$\omega'_l = \omega_l + kv. \quad (2.12)$$

Es necesario entonces compensar este corrimiento Doppler en la frecuencia del láser. Para ello se aplica un gradiente de campo magnético, de tal forma que la frecuencia de resonancia del átomo varíe y compense este corrimiento Doppler. Esta técnica llamada frenamiento Zeeman, utiliza magnetos que producen un gradiente de campo magnético en la dirección que viaja el átomo (supongamos  $z$ ). Los estados energéticos del átomo, que viaja a través del gradiente de campo, tienen un corrimiento por efecto Zeeman ( $\Delta E_Z$ ) de tal forma que la frecuencia de resonancia del átomo varía de la siguiente manera:

$$\omega'_0 = \omega_0 + \frac{\Delta E_Z}{\hbar}. \quad (2.13)$$

Donde  $\omega_0$  es la frecuencia de resonancia del átomo en ausencia de campo magnético y  $\Delta E_Z$  corresponde a la energía de interacción entre el momento magnético del átomo y el campo magnético externo:  $\Delta E_Z = -\boldsymbol{\mu}_{\text{atomo}} \cdot \mathbf{B}(z)$ . Así, se busca un campo magnético  $\mathbf{B}(z)$  tal que cumple la relación:  $\omega'_0 = \omega'_l$ , y que corresponde a la condición de que la fuerza sea máxima:

$$\omega_0 + \frac{\Delta E_Z}{\hbar} = \omega_l + kv. \quad (2.14)$$

### 2.2.3 Melazas ópticas

Hasta ahora hemos considerado que el átomo se mueve en una sola dirección, mientras que el campo de radiación láser se propaga en dirección contraria a la del átomo. Así, la técnica de frenamiento Zeeman es aplicable para un haz de átomos que se propaga en una sola dirección. Sin embargo en un gas los átomos se mueven en cualquier dirección y para lograr enfriarlo es necesario tres pares de láseres ortogonales que se propagan en direcciones opuestas. Cualquier dirección arbitraria en la que se mueva el átomo, se puede descomponer en las tres direcciones ortogonales de los láseres.

Analicemos el movimiento del átomo sometido a la radiación de un solo par de láseres que se propagan en direcciones opuestas con la misma frecuencia  $\omega_l$ . La fuerza de frenado (2.11) sobre el átomo <sup>6</sup> debido al par de láseres es:

$$\begin{aligned} F_{mel} &= \hbar k \frac{\Gamma}{2} \left\{ \frac{s_0}{1 + s_0 + [2(\omega_l - kv - \omega_0)/\Gamma]^2} - \frac{s_0}{1 + s_0 + [2(\omega_l + kv - \omega_0)/\Gamma]^2} \right\} \\ &= F[(\omega_l - \omega_0) - kv] - F[(\omega_l - \omega_0) + kv] \end{aligned} \quad (2.15)$$

<sup>6</sup>En el sistema de referencia del átomo, donde la frecuencia del láser esta dada por:  $\omega'_l = \omega_l \mp kv$ , según el láser se propague en la misma dirección que el átomo, o en dirección contraria.

Haciendo una aproximación hasta primer orden en serie de Taylor, alrededor de  $\delta = \omega_l - \omega_0$ , tenemos que:

$$\begin{aligned} F_{mel} &\simeq \left[ F(\delta) - kv \frac{\partial F}{\partial \delta} \right] - \left[ F(\delta) + kv \frac{\partial F}{\partial \delta} \right] \\ &\simeq -2 \frac{\partial F}{\partial \delta} kv = -\alpha v \end{aligned} \quad (2.16)$$

La fuerza sobre el átomo, debida al par de láseres, es proporcional a su velocidad. Esta fuerza es igual al de una partícula que se mueve en un medio viscoso (de ahí el nombre de melazas ópticas). El coeficiente de proporcionalidad dado por  $\alpha = 2k \frac{\partial F}{\partial \delta} = 4\hbar k^2 \frac{-2I\delta/\Gamma}{I_{sat}[1+(2\delta/\Gamma)^2]^2}$ . Para que esta fuerza actúe en sentido contrario al movimiento del átomo y lo frene es necesario que  $\alpha > 0$ , que se cumple siempre y cuando:  $\omega_l - \omega_0 = \delta < 0$ . Es decir que la frecuencia del láser debe de ser menor a la de resonancia del átomo. Esta técnica es muy eficiente para enfriar gases atómicos a temperaturas del orden de microkelvin. Sin embargo, para lograr el condensado de Bose-Einstein o el gas degenerado de Fermi es necesario tener al gas a temperaturas del orden de nanokelvins<sup>7</sup>, mediante la técnica de enfriamiento evaporativo es posible llegar a estas temperaturas.

## 2.2.4 Enfriamiento evaporativo

Como hemos visto el proceso de enfriamiento láser consiste en la absorción y emisión de fotones por los átomos. En el proceso de emisión, el fotón es emitido al azar en cualquier dirección y la transferencia de momento al átomo, por el proceso de emisión, después de emitir varios fotones es en promedio cero. Sin embargo, en el proceso de emisión de varios fotones el átomo desarrolla un movimiento aleatorio en el espacio de momentos, similar al movimiento Browniano de una partícula en el espacio real. Este efecto tiene como consecuencia que el átomo no se frene por completo ( $v \neq 0$ ), y por lo tanto hay una temperatura mínima  $T_{min}$  por debajo de la cual no es posible enfriar al gas mediante la técnica de enfriamiento láser.

Un análisis del movimiento aleatorio del átomo en el espacio de momentos, con pasos  $\hbar k/m$  correspondientes a la emisión de un fotón, determina la temperatura mínima [10]:  $T_{min} = \hbar\Gamma/2k_B$ . Esta temperatura depende únicamente de la vida media del estado excitado del átomo  $\Gamma = 1/\tau$ . En la tabla 2.1 se dan los valores  $\tau$  y  $T_{min}$  para algunos elementos usados en los experimentos [10]. La temperatura límite a la que se puede enfriar un gas mediante la técnica láser es del orden de microkelvins. Para lograr enfriar al gas a temperaturas del orden de nanokelvins se emplea adicionalmente la técnica de enfriamiento evaporativo.

La idea del enfriamiento evaporativo consiste en dejar escapar del confinamiento a las partículas más energéticas (rápidas) de tal manera que las partículas que queden en el gas tienen en promedio menor energía, lo que significa menor temperatura del gas. La

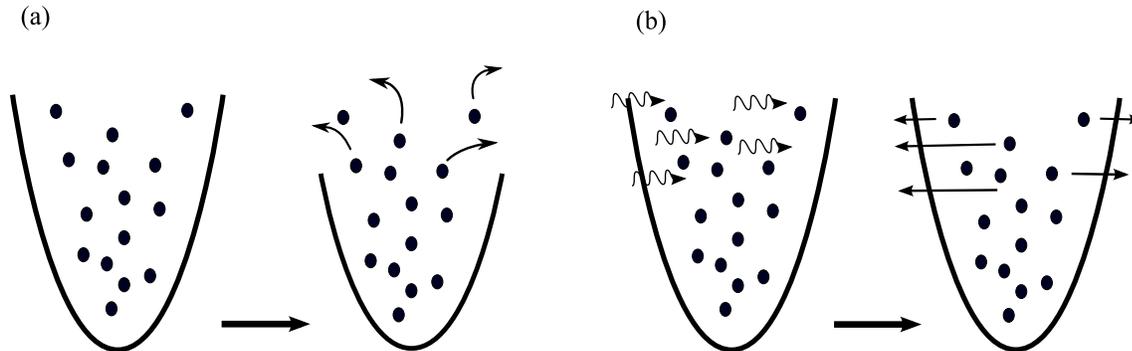
<sup>7</sup>La temperatura crítica del condensado de Bose-Einstein y del gas degenerado de Fermi dependen de la densidad de partículas en el gas, en los experimentos de confinamiento de átomos se obtienen densidades del orden de  $10^5 - 10^{10}$ . Para estas densidades las temperaturas críticas son del orden de  $10^{-9}K$ .

distribución de energía de los átomos en un gas depende de la temperatura  $T$  a través de la distribución de Boltzmann:

$$f(E, T) = \exp(-E/k_B T.) \quad (2.17)$$

Supongamos que el gas tiene una temperatura  $T_1$ , que corresponde a una distribución  $f(E, T_1)$  y se dejan escapar a los átomos con energía mayor que un valor dado  $E_c$ , entonces la energía por átomo en el gas será menor. Después de un tiempo el gas llega al equilibrio térmico por el proceso de colisiones entre los átomos, y se establece una nueva distribución de energía  $f(E, T_2)$ , donde necesariamente  $T_2 < T_1$ . Este es el proceso de enfriamiento evaporativo, en la práctica se suele hacer gradualmente repitiendo el proceso varias veces hasta llegar a temperaturas del orden de nanokelvins.

Existen principalmente dos maneras de dejar escapar a los átomos más energéticos. Una de ellas es reducir la intensidad del potencial de confinamiento hasta un valor  $U_{max}$ , de tal manera que los átomos con energía  $E > U_{max}$  escapen. Este proceso también reduce el espacio de confinamiento<sup>8</sup> del gas por lo que puede representar una desventaja. Otra forma más eficiente es utilizar campos electromagnéticos de radiofrecuencia para producir transiciones de los átomos a estados con  $M_F < 0$ , que como mencionamos anteriormente la fuerza sobre ellos es de repulsión y por lo tanto escapan del confinamiento.



**Figura 2.4:** Enfriamiento evaporativo: (a) cuando se disminuye la intensidad del potencial de confinamiento da lugar a que las partículas más energéticas escapen de la trampa. (b) mediante pulsos de radiofrecuencia se induce que los átomos más energéticos realicen una transición a estados con  $M_F < 0$  de tal manera que escapan de la trampa

<sup>8</sup>Recordemos que el potencial de confinamiento depende de las coordenadas espaciales, ec. (2.6), (2.9)

# Termodinámica de un gas ideal cuántico confinado: bosones, fermiones

En el capítulo anterior se hizo una breve revisión de los fundamentos físicos de las técnicas experimentales mediante las cuales es posible confinar a los gases atómicos para lograr las condiciones necesarias del condensado de Bose-Einstein y gas degenerado de Fermi. Como vimos, esto se logra mediante campos magnéticos externos que producen potenciales de tipo cuadrupolar ( $U(r) \propto r$ ) o de tipo armónico ( $U(r) \propto r^2$ ). En este capítulo analizaremos la termodinámica del gas ideal cuántico confinado en cada uno de estos potenciales (armónico y cuadrupolar), junto con el potencial homogéneo (caja rígida tridimensional).

Para ello usaremos el formalismo del conjunto gran canónico; en el cual, a partir del gran potencial  $\Omega(T, V, \mu)$  se obtienen las relaciones termodinámicas que describen al sistema. Como veremos, el gran potencial para el gas ideal cuántico confinado en un potencial externo  $U(\mathbf{r})$ , depende únicamente de la densidad de estados  $\rho(\epsilon)$  para una partícula confinada en dicho potencial, por lo que se determina la expresión de  $\rho(\epsilon)$  para cada uno de los potenciales externos: armónico, cuadrupolar y homogéneo. Posteriormente se analizan las relaciones termodinámicas que describen ambos tipos de gases (bosones y fermiones), donde distinguimos dos regímenes de temperatura: altas temperaturas, donde recuperaremos las propiedades del gas ideal clásico (ecuación de gas ideal y teorema de equipartición de la energía); y el régimen de bajas temperaturas donde analizamos el fenómeno del condensado de Bose-Einstein para el gas de bosones y el gas degenerado de Fermi para el gas de fermiones. En este caso, obtendremos la temperatura crítica  $T_c$ , y la energía de Fermi  $\epsilon_F$ , para cada potencial de confinamiento.

### 3.1 Gas ideal cuántico

Por gas ideal cuántico entendemos un sistema de  $N$  partículas (átomos, moléculas, etc) que se mueven libremente, es decir no interactúan entre ellas. Además, las partículas se rigen por las leyes de la mecánica cuántica. Esto lo hace diferente de un gas ideal clásico, donde las partículas no interactúan entre ellas, sin embargo su dinámica esta determinado por la mecánica clásica. Debido a su comportamiento cuántico, las partículas se pueden clasificar en dos tipos: bosones o fermiones. Esta clasificación es muy importante cuando se trata de sistemas de muchas partículas, y como veremos más adelante, marca una diferencia notable en el comportamiento de un gas de bosones y un gas de fermiones en el régimen de muy bajas temperaturas (cuando los efectos cuánticos de las partículas se hacen evidentes).

En mecánica cuántica a cada partículas se le asocia una longitud de onda  $\lambda = h/p$ , donde  $h$  es la constante de Planck y  $p$  el momento de la partícula. Por otro lado, clásicamente, en un gas ideal homogéneo la energía promedio por partícula (que en un gas ideal es solamente cinética) se relaciona con la temperatura mediante la siguiente relación:  $\langle p^2/2m \rangle = 3k_B T/2$ , donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann. De esta relación podemos despejar  $p$ , y sustituirlo en la longitud de onda de la partícula, con lo cual obtenemos  $\lambda = h/\sqrt{3mk_B T}$ , que representa la longitud de onda asociada a las partículas de un gas ideal clásico. Es usual definir la longitud de onda térmica como:  $\lambda_T = h/\sqrt{2\pi mk_B T}$ , que salvo por factores constantes es idéntica a  $\lambda$ . Así, cuando la separación entre las partículas que conforman al gas es del orden de  $\lambda_T$  (es decir del orden de su longitud de onda), entonces los efectos cuánticos comienzan a ser apreciables. Como la separación entre las partículas depende de la densidad del gas, esto sucede cuando:

$$\frac{N}{V} \lambda_T^3 \approx 1, \quad (3.1)$$

donde  $N/V$  representa la densidad de partículas del gas. Es importante notar que esta relación depende tanto de la temperatura (a través de  $\lambda_T$ ), así como de la densidad de partículas; y como veremos más adelante marca el límite a partir del cuál un gas ideal cuántico cambia de manera evidente sus propiedades; en un gas de bosones se presenta el fenómeno de condensado de Bose-Einstein, mientras que en el gas de fermiones el llamado gas degenerado de Fermi. Cuando la temperatura es del orden de nanokelvins, que son las temperaturas alcanzadas en los experimentos, la longitud de onda térmica (para un gas con átomos de  $^{87}\text{Rb}$ ,  $m = 1.4 \times 10^{-25} \text{kg}$ ) es del orden de  $\lambda_T \approx 6 \times 10^{-4} \text{cm}$ ; mientras que las densidades alcanzadas son del orden de  $N/V \approx 10^{-12} / \text{cm}^3$ , y por lo tanto se cumple la relación (3.1).

### 3.2 Formalismo gran canónico

La termodinámica del gas ideal cuántico la estudiaremos en el formalismo del conjunto gran canónico. En este formalismo se define el gran potencial  $\Omega(T, V, \mu)$ , a partir del cual se obtienen las siguientes relaciones termodinámicas que describen el sistema:

$$S(T, V, \mu) = - \left( \frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{V, \mu}, \quad (3.2a)$$

$$P(T, V, \mu) = - \left( \frac{\partial \Omega}{\partial V} \right)_{T, \mu}, \quad (3.2b)$$

$$N(T, V, \mu) = - \left( \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, V}. \quad (3.2c)$$

Así, en este formalismo,  $\Omega(T, V, \mu)$  representa el potencial termodinámico del sistema y se define a través de la función de gran partición  $\Xi(T, V, \mu)$ , de la siguiente manera:

$$\Omega(T, V, \mu) = -k_B T \ln \Xi, \quad (3.3)$$

mientras que la función de gran partición se define de la siguiente forma:

$$\Xi(T, V, \mu) = \sum_{N=0}^{\infty} Z_N(T, V) e^{\alpha N}, \quad (3.4)$$

donde  $\alpha = \mu/k_B T$ , y  $N$  es el número de partículas; por otro lado,  $Z_N(T, V)$  representa la función de partición canónica definida de la siguiente manera:

$$Z_N(T, V) = \sum_{\{n_1 n_2 \dots\}} e^{-\beta(n_1 \epsilon_1 + n_2 \epsilon_2 + \dots)}, \quad (3.5)$$

donde  $\beta = 1/k_B T$  y  $n_{\mathbf{p}}$  es el número de ocupación, que corresponde al número de partículas que se encuentran en el estado cuántico  $\mathbf{p}$ -ésimo con energía  $\epsilon_{\mathbf{p}}$ . Para el gas de fermiones tenemos la restricción de que  $n_{\mathbf{p}} = 0, 1$ ; mientras que para el gas de bosones  $n_{\mathbf{p}} = 0, 1, 2, \dots$ . La suma se extiende a todos los posibles valores de  $n_{\mathbf{p}}$  y  $\epsilon_{\mathbf{p}}$  accesibles al sistema y compatibles con el estado macroscópico del sistema. Es decir, el número total de partículas y la energía interna total del gas, debe ser la suma de las contribuciones de cada estado:

$$E = \sum_{\mathbf{p}} \epsilon_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p}}, \quad (3.6)$$

$$N = \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p}}. \quad (3.7)$$

Para un gas ideal cuántico, el número medio de partículas en cada estado cuántico viene dado por el número de ocupación:

$$\bar{n}_{\mathbf{p}} = \frac{1}{e^{(\beta \epsilon_{\mathbf{p}} - \alpha) \mp 1}} \quad \begin{cases} \text{bosones} \\ \text{fermiones} \end{cases} \quad (3.8)$$

donde el signo negativo corresponde al gas de bosones y el positivo al gas de fermiones, como se indica. El número de ocupación depende de la temperatura a través de los parámetros  $\beta$

y  $\alpha$ . De esta expresión podemos concluir que para un gas de bosones  $\alpha$  debe ser negativa ( $\alpha < 0$ ), o equivalentemente  $\mu < 0$ ; esto para cualquier valor de la temperatura, de lo contrario podríamos tener valores negativos para el número ocupación lo cual es físicamente incompatible. Para el gas de fermiones esta restricción no es necesaria.

Para el gas ideal cuántico la función de gran partición (3.4) tiene la siguiente forma[16]:

$$\Xi(T, V, \mu) = \prod_{\mathbf{p}}^{\infty} [1 \mp e^{(\alpha - \beta \epsilon_{\mathbf{p}})}]^{\mp 1} \quad \begin{cases} \text{bosones} \\ \text{fermiones} \end{cases} \quad (3.9)$$

De tal forma que el gran potencial (3.3), para un gas ideal cuántico, queda de la siguiente manera:

$$\Omega(T, V, \mu) = \pm k_B T \sum_{\mathbf{p}=1}^{\infty} \ln [1 \mp e^{(\alpha - \beta \epsilon_{\mathbf{p}})}] \quad \begin{cases} \text{bosones} \\ \text{fermiones} \end{cases} \quad (3.10)$$

Cuando el intervalo entre energías de estados sucesivos es mucho menor que la energía térmica de las partículas<sup>1</sup>, es decir:  $k_B T \gg \epsilon_{k+1} - \epsilon_k$ , podemos reemplazar la suma por una integral, ya que en este caso los estados pueden ser considerados como un continuo. Entonces podemos reescribir el gran potencial de la siguiente manera:

$$\Omega(T, V, \mu) = \pm k_B T \int_0^{\infty} \rho(\epsilon) \ln (1 \mp e^{(\alpha - \beta \epsilon)}) d\epsilon \quad \begin{cases} \text{bosones} \\ \text{fermiones} \end{cases} \quad (3.11)$$

Donde  $\rho(\epsilon)$  corresponde a la densidad de estados accesibles al sistema con energías entre  $\epsilon$  y  $\epsilon + d\epsilon$ . Esta ecuación es muy importante ya que dada la densidad de estados, que como veremos más adelante, depende del potencial de confinamiento del gas, es posible entonces determinar el gran potencial del sistema, a partir del cuál se obtienen la relaciones termodinámicas (3.2) que describen al sistema.

A partir de la densidad de estados  $\rho(\epsilon)$ , y el número de ocupación (3.8) en el límite continuo:  $n(\epsilon) = 1/[e^{(\beta \epsilon - \alpha)} \mp 1]$ ; se determina la energía interna del gas de la siguiente manera:

$$E(T, V, \mu) = \int_0^{\infty} \rho(\epsilon) n(\epsilon) \epsilon d\epsilon, \quad (3.12)$$

de la cual se obtiene la capacidad calorífica a volumen constante:

$$C_V = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_{V, N}. \quad (3.13)$$

De esta forma, las relaciones (3.2) junto con la energía interna (3.12) y el calor específico (3.13) constituyen las principales propiedades termodinámicas del gas ideal cuántico que vamos analizar en esta tesis. A continuación deduciremos las expresiones para la densidad de estados  $\rho(\epsilon)$  del gas confinado en cada uno de los potenciales de confinamiento (homogéneo, armónico y cuadrupolar).

---

<sup>1</sup>Esto se cumple en límite termodinámico:  $N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty, N/V = \text{constante}$

### 3.2.1 Densidad de estados

En esta sección determinaremos la forma explícita de  $\rho(\epsilon)$  para el gas ideal cuántico confinado en el potencial homogéneo (caja cubica de lado  $L$ ), armónico y cuadrupolar, definidos de la siguiente manera:

$$U(x, y, z) = \begin{cases} 0 & \text{si } x, y, z < L \\ \infty & \text{si } x, y, z \geq L \\ \frac{1}{2}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) & \text{Potencial armónico} \\ \sqrt{(A_x x)^2 + (A_y y)^2 + (A_z z)^2} & \text{Potencial cuadrupolar} \end{cases} \quad (3.14)$$

Para determinar la densidad de estados es necesario establecer los estados energéticos (eigenenergías) de una partícula confinada en cada uno de los potenciales y contabilizar los estados cuánticos accesibles en un intervalo de energía  $\epsilon$  y  $\epsilon + d\epsilon$ . En el caso del potencial homogéneo y armónico conocemos la forma explícita de las energías de cada estado<sup>2</sup>:

#### Potencial homogéneo

$$\epsilon = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2), \quad n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z} \quad (3.15a)$$

#### Potencial armónico

$$\epsilon = \sum_{i=x,y,z} \hbar\omega_i \left( \frac{1}{2} + n_i \right). \quad n_x, n_y, n_z \in \mathbb{N} \quad (3.15b)$$

Si consideramos el espacio de coordenadas  $n_x, n_y, n_z$ ; entonces cada punto de este espacio representa un estado accesible a la partícula. Así, la ecuación (3.15a) representa una esfera en este espacio; y la ecuación (3.15b) un plano contenido en el primer cuadrante, tal como lo muestran la figura 3.1. De esta manera es fácil ver que para un valor dado de la energía existen varios estados posibles (degeneración de estados), y que están contenidos en la esfera de radio  $R = (L/\hbar)\sqrt{2m\epsilon}$ , para una partícula confinada en el potencial homogéneo, y en un plano para el potencial armónico. Entonces el número de estados con energía entre 0 y  $\epsilon$  viene dado por el volumen<sup>3</sup> de la esfera (3.15a) para el potencial homogéneo, y por el volumen que limita el plano (3.15b) con los ejes  $n_x, n_y, n_z$  para el potencial armónico:

<sup>2</sup>Ver apéndice A para una breve deducción de las energías de una partícula confinada en el potencial homogéneo y armónico.

<sup>3</sup>Seguimos asumiendo el límite termodinámico y por lo tanto:  $k_B T \gg E_{k+1} - E_k$ , de tal forma que los estados forman casi un continuo

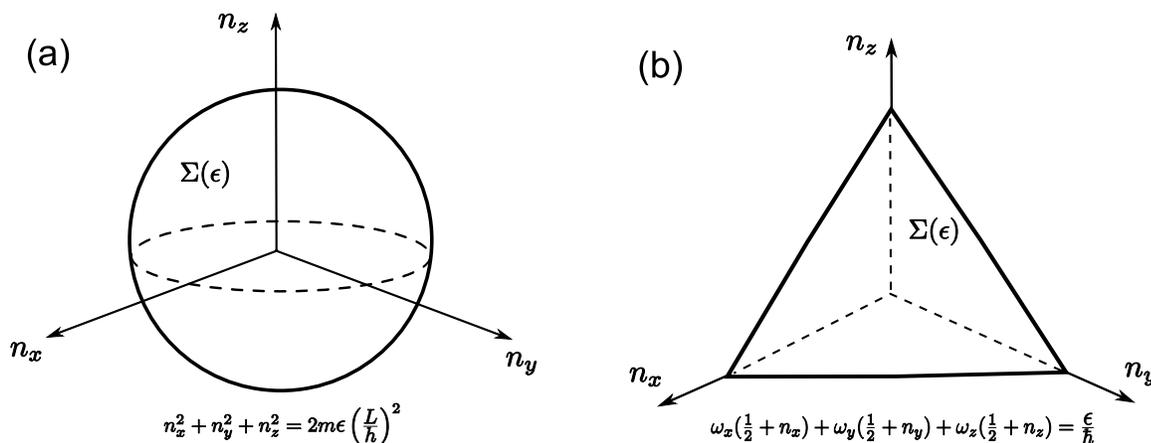
$$\text{Potencial homogéneo} \quad \Sigma(\epsilon) = \frac{4}{3}\pi R^3 = \frac{4\pi L^3(2m)^{3/2}}{3h^3} \epsilon^{3/2}, \quad (3.16a)$$

$$\text{Potencial armónico} \quad \Sigma(\epsilon) = \iiint dn_x dn_y dn_z = \frac{\epsilon^3}{6\hbar^3\omega_0^3}. \quad (3.16b)$$

donde hemos empleado la notación:  $\omega_0^3 = \omega_x\omega_y\omega_z$ . De esta manera, la densidad de estados se obtiene diferenciando estas expresiones,  $\rho(\epsilon) = d\Sigma(\epsilon)/d\epsilon$ :

$$\text{Potencial homogéneo} \quad \rho(\epsilon) = \frac{2\pi L^3(2m)^{3/2}}{h^3} \epsilon^{1/2}, \quad (3.17a)$$

$$\text{Potencial armónico} \quad \rho(\epsilon) = \frac{\epsilon^2}{2\hbar^3\omega_0^3}. \quad (3.17b)$$



**Figura 3.1:** En el espacio  $n_x, n_y, n_z$ , cada punto representa un estado accesible para una partícula confinada. Así, los estados con la misma energía están contenidos sobre la superficie de una esfera para una partícula confinada en el potencial armónico (a); y sobre un plano (triangular) para la partícula confinada en el potencial cuadrupolar (b).

Para la partícula confinada en el potencial cuadrupolar no existe una forma explícita de las energías en cada estado; sin embargo, la densidad de estados se puede obtener del volumen entre las superficies de energía  $\epsilon$  y  $\epsilon+d\epsilon$  en el espacio fase, determinadas por un sistema de partículas confinadas en un potencial  $U(\mathbf{r})$  [11]:

$$\rho(\epsilon) = \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_{V(\epsilon)} \sqrt{\epsilon - U(\mathbf{r})} d\mathbf{r}, \quad (3.18)$$

donde  $V(\epsilon)$  representa el volumen accesible a las partículas con energía  $\epsilon$  y depende del potencial de confinamiento  $U(\mathbf{r})$ . De esta forma, sustituyendo la expresión para el potencial cuadrupolar (3.14), obtenemos la densidad de estados ( $A_0^3 = A_x A_y A_z$ ):

$$\text{Potencial cuadrupolar} \quad \rho(\epsilon) = \frac{8(4\pi)^2(2m)^{3/2}}{105 h^3 A_0^3} \epsilon^{7/2}. \quad (3.19)$$

### 3.2.2 Gran potencial

Una vez que se ha determinado la expresión para la densidad de estados en cada potencial de confinamiento, es posible obtener de forma directa el gran potencial. Esto lo podemos simplificar si notamos que la densidad de estados que hemos obtenido para cada potencial de confinamiento tiene la forma general:

$$\rho(\epsilon) = \mathcal{B}\epsilon^n, \quad (3.20)$$

donde  $\mathcal{B}$  es una constante diferente para cada potencial de confinamiento, y  $n = 1/2, 2, 7/2$  para el potencial homogéneo, armónico y cuadrupolar respectivamente (ecuaciones 3.17 y 3.19). Entonces el gran potencial (3.11) queda de la siguiente la forma:

$$\Omega(T, V, \mu) = \pm k_B T \mathcal{B} \int_0^\infty \epsilon^n \ln(1 \mp e^{(\alpha - \beta\epsilon)}) d\epsilon \quad \begin{cases} \text{bosones} \\ \text{fermiones} \end{cases} \quad (3.21)$$

Después de una integración por partes y un cambio de variable podemos escribir el gran potencial en término de las funciones de Bose y de Fermi<sup>4</sup> de la siguiente manera:

$$\Omega(T, V, \mu) = -\frac{(k_B T)^{n+2} \mathcal{B}}{n+1} \Gamma(n+2) \begin{cases} g_{n+2}(\alpha) & \text{bosones} \\ f_{n+2}(\alpha) & \text{fermiones} \end{cases} \quad (3.22)$$

donde  $\Gamma(x)$  es la función Gamma. Sustituyendo la constante  $\mathcal{B}$  y el valor de  $n$  correspondientes para cada potencial de confinamiento (3.17), (3.19) obtenemos el gran potencial para el gas confinado en cada uno de los potenciales externos:

---

<sup>4</sup>Las funciones de Bose y de Fermi se definen como (ver apéndice B):

$$\frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty \frac{x^{n-1} dx}{e^{x-\alpha} \pm 1} = \begin{cases} g_n(\alpha) \\ f_n(\alpha) \end{cases} .$$

**Potencial homogéneo**

$$\Omega_h(T, V, \mu) = -k_B T \frac{V}{\lambda_T^3} \begin{cases} g_{5/2}(\alpha) \\ f_{5/2}(\alpha) \end{cases} \quad (3.23a)$$

**Potencial armónico**

$$\Omega_a(T, \omega_0^{-3}, \mu) = -k_B T \left( \frac{k_B T}{\hbar \omega_0} \right)^3 \begin{cases} g_4(\alpha) \\ f_4(\alpha) \end{cases} \quad (3.23b)$$

**Potencial cuadrupolar**

$$\Omega_c(T, A_0^{-3}, \mu) = -8\pi k_B T \left( \frac{k_B T}{\lambda_T A_0} \right)^3 \begin{cases} g_{11/2}(\alpha) \\ f_{11/2}(\alpha) \end{cases} \quad (3.23c)$$

En el caso del potencial homogéneo (caja cúbica), podemos identificar el volumen del gas como:  $V = L^3$ ; lo cual es claro ya que en este caso las partículas están confinadas a moverse únicamente dentro del volumen de la caja de lado  $L$ .

Para el gas confinado en el potencial armónico la variable análoga al volumen es  $\omega_0^{-3}$ , y para el potencial cuadrupolar  $A_0^{-3}$ , a las que llamaremos "volumen armónico" y "volumen cuadrupolar", respectivamente. Se puede demostrar que estas variables tienen propiedades semejantes a las de un volumen usual[9]. Por ejemplo, son extensivas y se puede definir, de la misma forma, la presión armónica y cuadrupolar, que tienen propiedades semejantes a la de la presión hidrostática usual, de la siguiente manera:

$$P_a = \left( \frac{\partial \Omega_a}{\partial \omega_0^{-3}} \right)_{T, \mu}, \quad (3.24a)$$

$$P_c = \left( \frac{\partial \Omega_c}{\partial A_0^{-3}} \right)_{T, \mu}. \quad (3.24b)$$

Con estas definiciones es posible seguir haciendo referencia a la densidad de partículas, y en adelante así lo haremos, entendiendo por ello la razón entre el número de partículas y el volumen definido para cada potencial de confinamiento:  $N/V$ ,  $N/\omega_0^{-3}$ ,  $N/A_0^{-3}$ , para el potencial homogéneo, armónico y cuadrupolar respectivamente. También es posible seguir hablando en general del volumen del gas, en tal caso emplearemos la notación  $\mathcal{V}$  para hacer referencia la variable extensiva:  $V$ ,  $\omega_0^{-3}$ ,  $A_0^{-3}$ , para el potencial homogéneo, armónico y cuadrupolar respectivamente.

### 3.3 Propiedades termodinámicas

Una vez que hemos obtenido la expresión del gran potencial  $\Omega(T, \mathcal{V}, \mu)$  de un gas ideal cuántico confinado en cada uno de los potenciales externos (homogéneo, armónico y cuadrupo-

lar), podemos analizar sus propiedades termodinámicas. Debido a que la expresión para el gran potencial del gas de bosones y de fermiones difiere únicamente en el tipo de función, (ecuaciones 3.23): funciones de Bose para el gas de bosones:  $g_n(\alpha)$ , y de Fermi para el gas de fermiones:  $f_n(\alpha)$ ; entonces todas las expresiones deducidas a partir de ésté serán esencialmente idénticas y pueden ser tratadas simultáneamente. Podemos entonces simplificar el número de ecuaciones empleando la siguiente notación:

$$\mathfrak{g}_n(\alpha) = \begin{cases} g_n(\alpha) & \text{para el gas de bosones} \\ f_n(\alpha) & \text{para el gas de fermiones} \end{cases}$$

Así, de las ecuaciones: (3.2b) y (3.2c), obtenemos el siguiente par de relaciones termodinámicas, para cada potencial de confinamiento:

| <b>Potencial<br/>homogéneo</b>                                  | <b>Potencial<br/>armónico</b>  | <b>Potencial<br/>cuadrupolar</b>   |         |
|---|--|--|---------|
| $\frac{N}{V} = \frac{\mathfrak{g}_{3/2}(\alpha)}{\lambda_T^3},$ | $\frac{N}{\omega_0^{-3}} = \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \mathfrak{g}_3(\alpha),$ | $\frac{N}{A_0^{-3}} = 8\pi \left(\frac{k_B T}{\lambda_T}\right)^3 \mathfrak{g}_{9/2}(\alpha);$ | (3.25a) |

|   |  |  |         |
|---|--|--|---------|
| $\frac{P}{k_B T} = \frac{\mathfrak{g}_{5/2}(\alpha)}{\lambda_T^3},$ | $\frac{P_a}{k_B T} = \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \mathfrak{g}_4(\alpha),$ | $\frac{P_c}{k_B T} = 8\pi \left(\frac{k_B T}{\lambda_T}\right)^3 \mathfrak{g}_{11/2}(\alpha).$ | (3.25b) |
|---|--|--|---------|

La primera serie de ecuaciones  $N(T, \mathcal{V}, \mu)$ , junto con la segunda serie  $P(T, \mathcal{V}, \mu)$  nos permite obtener la ecuación de estado:  $P = P(T, \mathcal{V}, N)$ , para el gas ideal cuántico confinado en cada uno de los potenciales externos. Aunque esto no es posible analíticamente, ya que las funciones  $\mathfrak{g}_n(\alpha)$  son integrales que contienen al potencial químico implícitamente<sup>5</sup>, por lo que es imposible obtener una expresión explícita de  $\mu(T, \mathcal{V}, N)$  (en la sección 3.6.1 lo haremos numéricamente). Sin embargo, podemos dividir ambas series de ecuaciones, para obtener:

| <b>Potencial<br/>homogéneo</b>   | <b>Potencial<br/>armónico</b>   | <b>Potencial<br/>cuadrupolar</b>  |         |
|--|---|---|---------|
| $\frac{PV}{Nk_B T} = \frac{\mathfrak{g}_{5/2}(\alpha)}{\mathfrak{g}_{3/2}(\alpha)},$ | $\frac{P_a \omega_0^{-3}}{Nk_B T} = \frac{\mathfrak{g}_4(\alpha)}{\mathfrak{g}_3(\alpha)},$ | $\frac{P_c A_0^{-3}}{Nk_B T} = \frac{\mathfrak{g}_{11/2}(\alpha)}{\mathfrak{g}_{9/2}(\alpha)}.$ | (3.26a) |

De estas ecuaciones podemos verificar que en el límite de altas temperaturas se recupera la ecuación de estado de gas ideal clásico. Esto se debe a que  $|\mu|$  se comporta como una función creciente de la temperatura<sup>6</sup> como veremos en la última sección del capítulo, de tal

<sup>5</sup>  $\mathfrak{g}_n(\alpha) = \begin{cases} g_n(\alpha) \\ f_n(\alpha) \end{cases} = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty \frac{x^{n-1} dx}{e^{x-\alpha} \pm 1}$ , donde:  $\alpha = \mu/k_B T$ .

<sup>6</sup> Ver secciones 3.6.1 y 3.6.2, donde se calcula numéricamente el potencial químico del gas de bosones y de fermiones, respectivamente. En ambas secciones se muestra que el potencial químico aumenta (negativamente) conforme aumenta la temperatura.

manera que a altas temperaturas  $|\alpha| \gg 1$  ( $\alpha = \mu/k_B T$ ). De las propiedades de las funciones de Bose y de Fermi, obtenemos que  $\mathfrak{g}_n(\alpha) \approx e^\alpha$ , para cualquier valor de  $n$  y  $|\alpha| \gg 1$ . Entonces el lado derecho de estas ecuaciones se hace uno, y obtenemos las ecuaciones de gas ideal clásico confinado en cada uno de los potenciales.

La entropía del gas la obtenemos del gran potencial, mediante la ecuación (3.2a):

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad \frac{S}{V} = \frac{k_B}{\lambda_T^3} \left[ \frac{5}{2} \mathfrak{g}_{5/2}(\alpha) - \alpha \mathfrak{g}_{3/2}(\alpha) \right], \quad (3.27a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad \frac{S}{\omega_0^{-3}} = k_B \left( \frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \left[ 4 \mathfrak{g}_4(\alpha) - \alpha \mathfrak{g}_3(\alpha) \right], \quad (3.27b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad \frac{S}{A_0^{-3}} = 8\pi k_B \left( \frac{k_B T}{\lambda_T} \right)^3 \left[ \frac{11}{2} \mathfrak{g}_{11/2}(\alpha) - \alpha \mathfrak{g}_{9/2}(\alpha) \right]. \quad (3.27c)$$

El límite de altas temperaturas lo podemos verificar de la misma manera. Para ello primero despejamos el potencial químico como función de la temperatura y la densidad de partículas a partir de las ecuaciones (3.25a) en el régimen de altas temperaturas. Recordemos que en este régimen  $\mathfrak{g}_n(\alpha) \approx e^\alpha$ , por lo que es posible despejar explícitamente el potencial químico de la siguiente forma:

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad \mu \approx k_B T \ln \left[ \frac{N}{V} \lambda_T^3 \right], \quad (3.28a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad \mu \approx k_B T \ln \left[ \frac{N}{\omega_0^{-3}} \left( \frac{\hbar}{k_B T} \right)^3 \right], \quad (3.28b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad \mu \approx k_B T \ln \left[ \frac{N}{A_0^{-3}} \left( \frac{\lambda_T}{k_B T} \right)^3 \right]; \quad (3.28c)$$

sustituyendo estas ecuaciones en la entropía (3.27) con  $\alpha = \mu/k_B T$ , en la cual hacemos también la aproximación de altas temperaturas: ( $\mathfrak{g}_n(\alpha) \approx e^\alpha$ ); junto con las ecuaciones (3.25a), obtenemos:

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad \frac{S}{Nk_B} \approx \frac{5}{2} + \ln \left[ \frac{V}{N} \left( \frac{1}{\lambda_T^3} \right) \right], \quad (3.29a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad \frac{S}{Nk_B} \approx 4 + \ln \left[ \frac{\omega_0^{-3}}{N} \left( \frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \right], \quad (3.29b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad \frac{S}{Nk_B} \approx \frac{11}{2} + \ln \left[ \frac{A_0^{-3}}{N} \left( \frac{k_B T}{\lambda_T} \right)^3 \right]. \quad (3.29c)$$

Estas ecuaciones representan la entropía del gas ideal cuántico en el régimen de altas temperaturas, que coincide con la entropía del gas ideal clásico confinado en cada potencial. En especial identificamos la llamada ecuación de Sackur-Tetrode (3.29a), que representa la entropía del gas ideal clásico.

La energía interna la obtenemos conforme a la ecuación (3.12); donde la densidad de estados  $\rho(\epsilon)$ , para cada potencial de confinamiento, viene dadas por las ecuaciones (3.17) y (3.19), por lo que obtenemos:

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad \frac{E}{V} = \frac{3k_B T}{2\lambda_T^3} \mathfrak{g}_{5/2}(\alpha), \quad (3.30a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad \frac{E}{\omega_0^{-3}} = 3k_B T \left( \frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \mathfrak{g}_4(\alpha), \quad (3.30b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad \frac{E}{A_0^{-3}} = 36\pi k_B T \left( \frac{k_B T}{\lambda_T} \right)^3 \mathfrak{g}_{11/2}(\alpha). \quad (3.30c)$$

Una vez más podemos verificar el régimen de altas temperaturas. Para ello utilizando las ecuaciones (3.25a), para reescribir la energía interna del gas como:

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad E = \frac{3}{2} N k_B T \frac{\mathfrak{g}_{5/2}(\alpha)}{\mathfrak{g}_{3/2}(\alpha)}, \quad (3.31a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad E = 3N k_B T \frac{\mathfrak{g}_4(\alpha)}{\mathfrak{g}_3(\alpha)}, \quad (3.31b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad E = \frac{9}{2} N k_B T \frac{\mathfrak{g}_{11/2}(\alpha)}{\mathfrak{g}_{9/2}(\alpha)}. \quad (3.31c)$$

Nuevamente verificamos que en el régimen de altas temperaturas ( $g_n(\alpha) \approx e^\alpha$ ) recuperamos la energía interna del gas ideal clásico confinado en cada uno de los potenciales. Podemos apreciar además, que se satisface el teorema de equipartición de la energía. Es decir, la energía por partícula contribuyen a la temperatura del gas, de la siguiente manera:

$$\left\langle x_m \frac{\partial H}{\partial x_n} \right\rangle = \left\langle p_m \frac{\partial H}{\partial p_n} \right\rangle = \delta_{mn} k_B T, \quad (3.32)$$

donde  $x_i, p_i$  corresponden a las componentes de la posición y del momento respectivamente. A partir del hamiltoniano de una partícula confinada en cada uno de los potenciales externos  $U(\mathbf{r})$  y de la relación de anterior obtenemos lo siguiente:

### Potencial homogéneo

$$H = \frac{1}{2m} [p_x^2 + p_y^2 + p_z^2],$$

$$\left\langle p_i \frac{\partial H}{\partial p_i} \right\rangle = \frac{1}{m} \langle p_i^2 \rangle \Rightarrow \langle H \rangle = \frac{3}{2} k_B T, \quad (3.33a)$$

### Potencial armónico

$$H = \frac{1}{2m} [p_x^2 + p_y^2 + p_z^2] + \frac{1}{2} m [\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2],$$

$$\left\langle p_i \frac{\partial H}{\partial p_i} \right\rangle = \frac{1}{m} \langle p_i^2 \rangle, \quad \left\langle x_i \frac{\partial H}{\partial x_i} \right\rangle = m \omega_{x_i}^2 \langle x_i^2 \rangle \Rightarrow \langle H \rangle = \frac{6}{2} k_B T, \quad (3.33b)$$

### Potencial cuadrupolar

$$H = \frac{1}{2m} [p_x^2 + p_y^2 + p_z^2] + \sqrt{(A_x x)^2 + (A_y^2 y)^2 + (A_z^2 z)^2},$$

$$\left\langle p_i \frac{\partial H}{\partial p_i} \right\rangle = \frac{1}{m} \langle p_i^2 \rangle, \quad \left\langle x_i \frac{\partial H}{\partial x_i} \right\rangle = A_i^2 \left\langle \frac{x_i^2}{\sqrt{(A_x x)^2 + (A_y^2 y)^2 + (A_z^2 z)^2}} \right\rangle \Rightarrow \langle H \rangle = \frac{9}{2} k_B T. \quad (3.33c)$$

Estos resultados concuerdan con las ecuaciones (3.31) en el régimen de altas temperaturas, satisfaciendo así el teorema de equipartición de la energía.

Finalmente el calor específico a volumen constante  $C_V$ , para el gas ideal cuántico lo incluiremos en las siguientes dos secciones, donde abordaremos el estudio de la condensación de Bose-Einstein y del gas degenerado de Fermi. Como veremos, en especial para el condensado de Bose-Einstein,  $C_V$  muestra propiedades especiales en el valor de la temperatura crítica  $T_c$ , que es la temperatura a partir de la cual se presenta la fase de condensado de Bose-Einstein. Es por ello, que es más conveniente estudiar esta propiedad termodinámica en las siguientes secciones.

## 3.4 Condensado de Bose-Einstein

Como mencionamos anteriormente los bosones no satisfacen el principio de exclusión de Pauli, por lo que no hay restricción en el número de partículas que puedan ocupar un estado cuántico cualquiera. Esta propiedad permite que en un gas de bosones la mayoría de las partículas, o incluso todas, ocupen un solo estado cuántico, en especial el estado de mínima energía o estado base. Este fenómeno se le conoce como condensado de Bose-Einstein y a continuación analizaremos sus propiedades.

El condensado de Bose-Einstein es un fenómeno que se presenta en un gas de bosones cuando la mayoría de las partículas del gas ocupan el estado de mínima energía. En la sección 3.2, ecuación (3.8) vimos que para un gas de bosones se debe cumplir:  $\alpha < 0$ . Ahora mostraremos que  $\alpha = 0$ , marca el límite para el cual se presenta el condensado de Bose-Einstein.

Para ello regresemos a la expresión para el gran potencial (3.11), en la integral de esta ecuación hemos omitido el estado de mínima energía  $\epsilon_0 = 0$ , ya que en este caso  $\rho(\epsilon_0) = 0$ , para los tres potenciales de confinamiento (ecuaciones 3.17 y 3.19). Entonces es necesario agregar explícitamente al gran potencial el término correspondiente al estado con energía  $\epsilon_0 = 0$ . Este término se obtiene del gran potencial en forma de suma ecuación (3.10), y para el gas de bosones viene dado por:  $\Omega_0 = k_B T \ln(1 - e^\alpha)$ , que es independiente del potencial de confinamiento, ya que esta ecuación es general para cualquier sistema. De esta manera, el número de partículas en el estado de mínima energía viene dado por:

$$N_0 = - \left( \frac{\partial \Omega_0}{\partial \mu} \right)_{T, \nu} = \frac{1}{e^{-\alpha} - 1}. \quad (3.34)$$

Que coincide, como era de esperar, con el número de ocupación ec. (3.8) para el estado base  $\epsilon_0 = 0$ . Así, el número de partículas en el gas de bosones tiene dos contribuciones:  $N = N_0 + N_\epsilon$ , las partículas en el estado base  $N_0$ , y las partículas en los estados excitados  $N_\epsilon$ , que llamaremos partículas térmicas, y están determinadas mediante la ecuación (3.2c):

$$N_\epsilon = - \left( \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, \nu}. \quad (3.35)$$

De esta manera obtenemos, el número de bosones para cada potencial de confinamiento viene dado por:

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad N = N_0 + \frac{V}{\lambda_T^3} g_{3/2}(\alpha), \quad (3.36a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad N = N_0 + \left( \frac{k_B T}{\hbar \omega_0} \right)^3 g_3(\alpha), \quad (3.36b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad N = N_0 + 8\pi \left( \frac{k_B T}{\lambda_T A_0} \right)^3 g_{9/2}(\alpha). \quad (3.36c)$$

Ahora bien, conforme a las propiedades de las funciones de Bose, sabemos que  $g_n(\alpha)$  tienen un valor máximo en  $\alpha = 0$ . Recordemos que  $\alpha = \mu/k_B T$ , mientras que el potencial

químico como función de la densidad de partículas y la temperatura esta determinado por las ecuaciones (3.25a) . Entonces, para una temperatura dada, existe un valor en el número de partículas (o densidad de partículas) térmicas, para el cual  $\alpha = 0$ , y que además es máximo. Así, para una temperatura dada existe un numero máximo de partículas que puede haber en los estados excitados, y que para cada potencial de confinamiento esta dada por:

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad N_{\epsilon}^{max} = \frac{1}{\lambda_T^3} \zeta(3/2), \quad (3.37a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad N_{\epsilon}^{max} = \left( \frac{k_B T}{\hbar \omega_0} \right)^3 \zeta(3), \quad (3.37b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad N_{\epsilon}^{max} = 8\pi \left( \frac{k_B T}{\lambda_T A_0} \right)^3 \zeta(9/2). \quad (3.37c)$$

Donde hemos utilizado siguiente relación<sup>7</sup>:  $g_n(0) = \zeta(n)$ . Así, cuando  $\alpha = 0$  la ec. (3.34) diverge, lo cual no tiene sentido. Sin embargo, el número de partículas en el estado base lo obtenemos simplemente de la siguiente relación:  $N_0 = N - N_{\epsilon}^{max}$ .

Conforme mayor sea el número de partículas del gas  $N \gg N_{\epsilon}^{max}$ , entonces mayor será el número de partículas en el estado base y por lo tanto se obtiene el condensado de Bose-Einstein. Esta manera de lograr el condensado, se obtiene fijando una temperatura  $T$  que determina a  $N_{\epsilon}^{max}$ , de tal manera que el número total de partículas del gas sobrepase este valor. Sin embargo, para ello se requiere tener densidades muy altas y la interacción entre las partículas comienza a ser importante. Así, nuestro modelo del gas ideal deja de cumplirse.

Una alternativa sería ahora fijar el número de partículas y obtener una temperatura crítica por debajo de la cual se obtiene el condensado. En el capítulo 2, vimos que experimentalmente este es el método utilizado para obtener el condensado de Bose-Einstein en gases atómicos.

Para determinar la temperatura crítica, a la cual se obtiene el condensado, regresemos a las ecuaciones (3.36). Cuando  $\alpha \neq 0$ , se puede demostrar que  $N_0 = (e^{-\alpha} - 1)^{-1}$  es prácticamente cero y tenemos:

---

<sup>7</sup>Ver apéndice B sobre las propiedades de las funciones de Bose.

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad N = \frac{V}{\lambda_T^3} g_{3/2}(\alpha), \quad (3.38a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad N = \left( \frac{k_B T}{\hbar \omega_0} \right)^3 g_3(\alpha), \quad (3.38b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad N = 8\pi \left( \frac{k_B T}{\lambda_T A_0} \right)^3 g_{9/2}(\alpha). \quad (3.38c)$$

Si fijamos la densidad de partículas, respectiva a cada potencial de confinamiento. Entonces el lado izquierdo de estas ecuaciones es una constante. Si disminuimos  $T$ ,  $|\alpha|$  disminuye<sup>8</sup> y  $g_n(\alpha)$  crece, de tal manera que es posible mantener constante el lado izquierdo de estas ecuaciones como es debido. Esto es posible hasta que  $\alpha = 0$ , cuando  $g_n(0)$  alcanza su valor máximo, si seguimos disminuyendo la temperatura ya no sera posible mantener constante el lado derecho de las ecuaciones, sin embargo ahora  $N_0$  comienza a ser apreciable y por lo tanto se presenta el condensado de Bose-Einstein. De esta manera, las ecuaciones (3.38) en  $\alpha = 0$ , definen la temperatura crítica por debajo de la cual se presenta el condensado de Bose-Einstein:

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad T_c = \frac{h^2}{2\pi m k_B} \left( \frac{1}{\zeta(3/2)} \frac{N}{V} \right)^{2/3}, \quad (3.39a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad T_c = \frac{h}{2\pi k_B} \left( \frac{1}{\zeta(3)} \frac{N}{\omega_0^{-3}} \right)^{1/3}, \quad (3.39b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad T_c = \left( \frac{h^2}{2\pi m k_B^3} \right)^{1/3} \left( \frac{1}{8\pi \zeta(9/2)} \frac{N}{A_0^{-3}} \right)^{2/9}. \quad (3.39c)$$

Como podemos notar, la temperatura crítica depende únicamente de la densidad de partículas del gas ( $N/V$ ). Por ejemplo, en uno de los experimentos con un gas de átomos de <sup>87</sup>Rb [3], se reportados densidades del orden de  $N/V \approx 2.5 \times 10^{12}$  part/cm<sup>3</sup>; por lo que para un gas confinado en un potencial homogéneo con estas densidades, la temperatura crítica (ecuación 3.39a) es del orden de  $T_c \simeq 35$  nK<sup>9</sup>. Sin embargo, como vimos en el capítulo 2 el confinamiento de estos gases se hace en potenciales de tipo armónico o cuadrupolar; en el mismo citado se reporta que el condensado de Bose-Einstein se logra con una gas de  $2 \times 10^4$  átomos de <sup>87</sup>Rb confinados en un potencial armónico cuya frecuencia tiene un valor de  $\omega_0 = 120$  Hz, por lo que la densidad de partículas (armónica) es del orden de

<sup>8</sup>Al final de este capítulo mostramos las propiedades del potencial químico como función de  $T$  y  $N/V$ .

<sup>9</sup>La masa del <sup>87</sup>Rb es igual a 87 uma, es decir  $1.4 \times 10^{-25}$ kg

$N/\omega_0^{-3} \approx 34 \times 10^9$  part/Hz<sup>-3</sup>, en este caso la temperatura crítica (ecuación 3.39b) es del orden  $T_c \simeq 23$  nK.

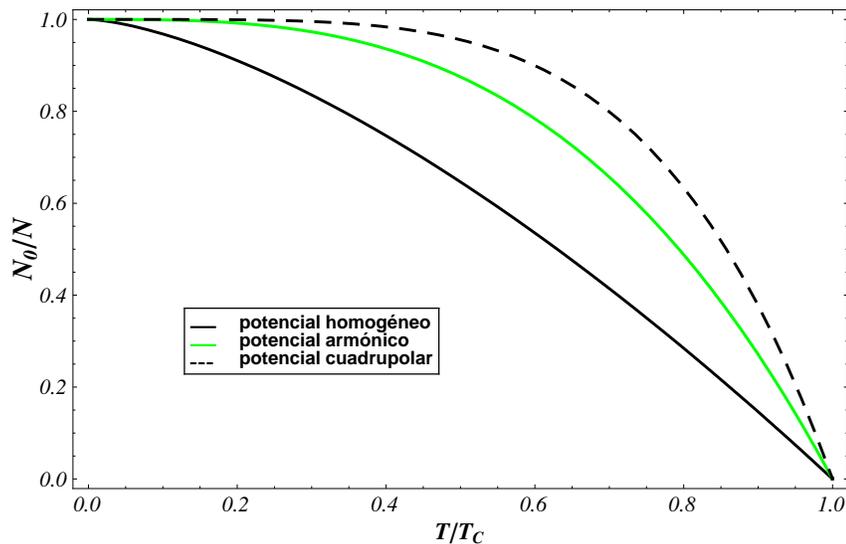
El número de partículas en el condensado (estado base  $\epsilon_0$ ) se obtiene de las ecuaciones (3.36) con  $\alpha = 0$ , y que en términos de la temperatura crítica obtenemos:

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad N_0 = N \left[ 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right], \quad (3.40a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad N_0 = N \left[ 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^3 \right], \quad (3.40b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad N_0 = N \left[ 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^{9/2} \right]. \quad (3.40c)$$

Así, la fracción de partículas en el estado base aumenta conforme disminuye la temperatura, y en el límite  $T \rightarrow 0$  todas las partículas del gas se encuentran en el estado base. La figura (3.2) muestra esta dependencia.



**Figura 3.2:** Fracción de partículas en el estado base como función de la temperatura para un gas de bosones confinado en el potencial homogéneo, armónico y cuadrupolar.

Las propiedades termodinámicas del gas de bosones para  $T \leq T_c$ , se obtienen de las ya estudiadas en la sección anterior, solamente que en este caso  $\mu = 0$ , es decir  $\alpha = 0$ . Así por ejemplo de las ecuaciones (3.25b), obtenemos las siguientes expresiones de para la presión del gas de bosones ( $T \leq T_c$ ):

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad P = \frac{\zeta(5/2)}{\lambda_T^3} k_B T \sim T^{5/2}, \quad (3.41a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad P = \frac{\zeta(4)}{\hbar^3} (k_B T)^4 \sim T^4, \quad (3.41b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad P = \frac{8\pi\zeta(11/2)}{\lambda_T^3} (k_B T)^4 \sim T^{11/2}. \quad (3.41c)$$

La presión depende únicamente de la temperatura, no de la densidad de partículas ( $N/\mathcal{V}$ ) como en el caso clásico. Esto se debe a que, como hemos visto, a una temperatura dada ( $T \leq T_c$ ) el número de partículas en los estados excitados  $N_\epsilon$  es una constante; en este caso si variamos  $N$ , lo que varía es el número de partículas en el estado base  $N_0$ . Sin embargo estas partículas no contribuyen a la presión del gas, ya que no tienen energía ( $\epsilon_0 = 0$ ). Una consecuencia de esto es que la presión se anula<sup>10</sup> en  $T = 0$ , ya que como hemos visto en este caso todas las partículas se encuentran en el estado base. Para un gas a temperaturas del orden de nanokelvins, la presión alcanza valores de  $P \approx 10^{-17}$  Pa =  $10^{-19}$  Torr, recordemos que experimentalmente las trampas magnéticas utilizan cámaras de vacío con presiones del orden de  $10^{-9}$  Torr[14].

La entropía del gas de bosones para  $T \leq T_c$ , la obtenemos de las ecuaciones (3.27)

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad \frac{S}{V} = \frac{5}{2} \frac{k_B}{\lambda_T^3} \zeta(5/2) \sim T^{3/2}, \quad (3.42a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad \frac{S}{\omega_0^{-3}} = 4k_B \left( \frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \zeta(4) \sim T^3, \quad (3.42b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad \frac{S}{A_0^{-3}} = 44\pi k_B \left( \frac{k_B T}{\lambda_T} \right)^3 \zeta(11/2) \sim T^{9/2}. \quad (3.42c)$$

Podemos notar que la entropía de un gas de bosones satisface la tercera ley de la termodinámica, es decir  $\lim_{T \rightarrow 0} S = 0$ . Esta es una característica importante de la entropía, recordemos que para un gas ideal clásico la entropía no cumple con esta ley, por lo que al incluir los efectos cuánticos al gas ideal mejoramos el modelo teórico para describir su comportamiento, en especial a bajas temperaturas y altas densidades.

<sup>10</sup>Como veremos más adelante, esto no sucede con el gas de fermiones.

Finalmente la energía interna del gas ecs. (3.30), para  $T \leq T_c$  tienen la siguiente forma:

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad \frac{E}{V} = \frac{3}{2} \frac{\zeta(5/2)}{\lambda_T^3} k_B T \sim T^{3/2}, \quad (3.43a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad \frac{E}{\omega_0^{-3}} = \frac{3\zeta(4)}{\hbar^3} (k_B T)^4 \sim T^4, \quad (3.43b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad \frac{E}{A_0^{-3}} = \frac{36\pi\zeta(11/2)}{\lambda_T^3} (k_B T)^{11/2} \sim T^{11/2}. \quad (3.43c)$$

La energía interna del gas de bosones, tal como sucede con la presión, se anula en  $T = 0$ . Esto se debe a que en  $T = 0$  todas la partículas se encuentran en el estado base con energía cero, por lo que no contribuyen a la energía interna del gas.

### 3.4.1 Calor específico de un gas de bosones

Ahora analizaremos el comportamiento del calor específico a volumen constante para el gas de bosones confinado en cada uno de los potenciales externos (homogéneo, armónico y cuarupolar), y que esta determinado mediante la energía interna del gas de la siguiente manera:  $C_V = (\partial E / \partial T)_{V,N}$ . Sin embargo, tenemos dos regímenes distintos: uno para  $T > T_c$ , es decir fuera de la fase de condensado de Bose-Einstein, donde la energía interna está determinada por las ecuaciones (3.30); y el otro para  $T \leq T_c$  en la fase de condensado, donde la energía está determinada por las ecuaciones (3.43).

De esta forma, para  $T > T_c$  el calor específico a volumen constante en cada uno de los potenciales de confinamiento esta dado por<sup>11</sup>:

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad \frac{C_V}{Nk_B} = \frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(\alpha)}{g_{3/2}(\alpha)} - \frac{9}{4} \frac{g_{3/2}(\alpha)}{g_{1/2}(\alpha)}, \quad (3.44a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad \frac{C_V}{Nk_B} = 12 \frac{g_{5/2}(\alpha)}{g_{3/2}(\alpha)} - 9 \frac{g_{3/2}(\alpha)}{g_{1/2}(\alpha)}, \quad (3.44b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad \frac{C_V}{Nk_B} = \frac{117}{4} \frac{g_{11/2}(\alpha)}{g_{9/2}(\alpha)} - \frac{99}{4} \frac{g_{9/2}(\alpha)}{g_{7/2}(\alpha)}. \quad (3.44c)$$

Para obtener estas ecuaciones hemos tomado en cuenta las ecuaciones (3.25a). De la misma forma, a partir de las ecuaciones (3.43), el calor específico a volumen constante en la fase de condensado de Bose-Einstein  $T \leq T_c$ , para cada uno de los potenciales de confinamiento, quedan de la siguiente manera (sustituyendo la definición de  $T_c$  correspondiente a cada potencial):

<sup>11</sup>De las ecuaciones (3.30) tenemos  $E = E(T, V, \mu)$ , mientras que de las ecuaciones (3.25a) obtenemos  $\mu = \mu(T, V, N)$ . Entonces para obtener  $C_V$ , se procede conforme a la regla de la cadena:  $C_V = (\partial E / \partial T)_{V,N} = (\partial E / \partial T)_{V,\mu} + (\partial E / \partial \mu)_{T,V} (\partial \mu / \partial T)_{V,N}$

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad \frac{C_V}{Nk_B} = \frac{15}{4} \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}, \quad (3.45a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad \frac{C_V}{Nk_B} = 12 \frac{\zeta(4)}{\zeta(3)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^3, \quad (3.45b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad \frac{C_V}{Nk_B} = \frac{117}{4} \frac{\zeta(11/2)}{\zeta(9/2)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{9/2}. \quad (3.45c)$$

En la figura 3.3, están graficados los calores específicos para cada potencial de confinamiento. Es importante notar tres características respecto a su comportamiento. Primero, que satisface la tercera ley de la termodinámica, en el sentido de que:  $\lim_{T \rightarrow 0} C_V = 0$ , y que se puede notar de las ecuaciones (3.45).

La segunda característica, es su comportamiento en  $T = T_c$ . Para el potencial homogéneo,  $C_V$  es continua en  $T_c$ ; sin embargo su derivada muestra una discontinuidad. Por otro lado, para el potencial armónico y cuadrupolar  $C_V$  tiene una discontinuidad en  $T = T_c$ . Esto también lo podemos notar de las ecuaciones para  $C_V$  (3.44) y (3.45), ya que de ellas obtenemos la siguiente serie de valores:

|                              | $\lim_{T \rightarrow T_c^+} C_V/Nk_B$ | $\lim_{T \rightarrow T_c^-} C_V/Nk_B$ |
|------------------------------|---------------------------------------|---------------------------------------|
| <b>Potencial homogéneo</b>   | 1.925                                 | 1.925                                 |
| <b>Potencial armónico</b>    | 10.804                                | 4.227                                 |
| <b>Potencial cuadrupolar</b> | 28.431                                | 5.263                                 |

Este comportamiento de  $C_V$  muestra que de acuerdo al esquema de Ehrenfest, se trata de una transición de fase de segundo orden, ya que el calor específico esta relacionado con las segundas derivadas de los potenciales termodinámicos (en especial con el gran potencial  $\Omega$ , como lo estamos trabajando)

Finalmente, hay que notar que  $C_V$  en el límite de altas temperaturas coincide con el de un gas clásico, como era de esperar. Esto lo podemos notar de las ecuaciones (3.44) (una vez más recordemos que  $f_n \approx e^\alpha$ ), de donde obtenemos:  $\lim_{T \rightarrow \infty} C_V/Nk_B = 3/2, 3, 9/2$ , para el gas confinado en el potencial homogéneo, armónico y cuadrupolar respectivamente; y que coinciden con el caso clásico.

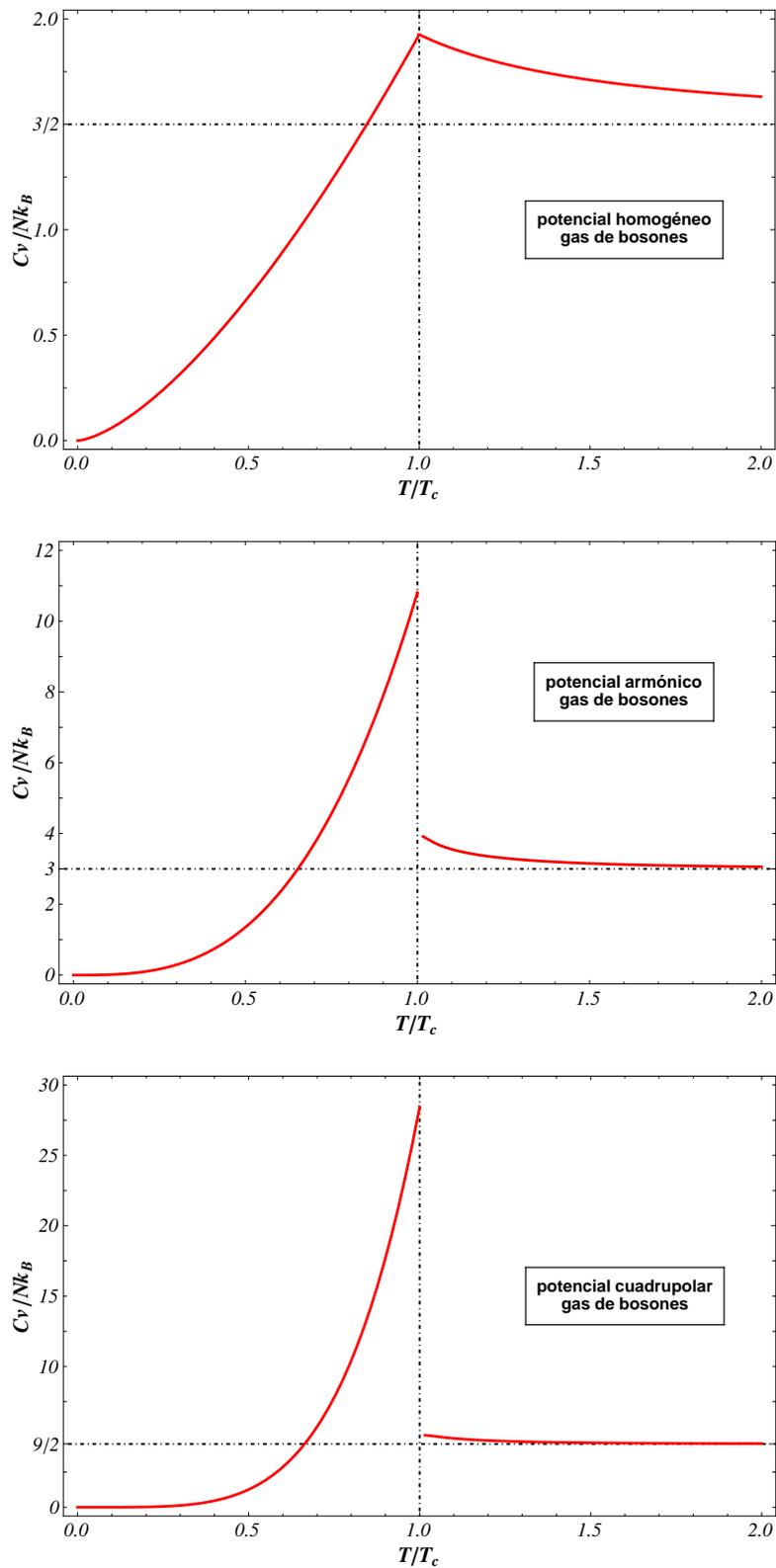


Figura 3.3: Calor específico para el gas de bosones confinado en los diferentes potenciales externos

## 3.5 Gas degenerado de Fermi

Los fermiones sabemos, cumplen con el principio de exclusión de Pauli, por lo que para el gas de fermiones no es posible la condensación de Bose-Einstein. Sin embargo, al disminuir la temperatura es de esperar que las partículas del gas ocupen los estados de menor energía (respetando el principio de Pauli). Para analizar como sucede esto, regresemos al número de ocupación de partículas por estado de un gas de fermiones, dado por la siguiente ecuación:

$$\bar{n}_{\mathbf{p}} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu)} + 1}. \quad (3.46)$$

Esta ecuación tiene una dependencia con la temperatura a través del factor  $\beta = 1/k_B T$ . En el límite  $T = 0$ , el número de ocupación  $\bar{n}_{\mathbf{p}}$  toma el valor de 1 si  $\epsilon_{\mathbf{p}} \leq \mu_0$ ; y 0 si  $\epsilon_{\mathbf{p}} > \mu_0$ , donde  $\mu_0$  es el potencial químico del gas de fermiones a temperatura cero ( $\mu_0 = \mu(T = 0)$ ). Esto lo podemos escribir de la siguiente manera:

$$\bar{n}_{\mathbf{p}}(T = 0) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu_0)} + 1} \begin{cases} 1 & 0 \leq \epsilon_{\mathbf{p}} \leq \mu_0 \\ 0 & \mu_0 < \epsilon_{\mathbf{p}} \end{cases} \quad (3.47)$$

De esta forma, si ordenamos las energías en forma creciente:  $\epsilon_0 < \epsilon_1 < \epsilon_2 \dots$ , cuando el gas se encuentra a  $T = 0$ , las partículas del gas ocupan todos los estados cuya energía es menor o igual  $\mu_0$ . Un gas bajo estas condiciones, se le conoce como gas degenerado de Fermi y a la energía que corresponde al máximo valor posible que pueden tener las partículas se le llama energía de Fermi, y corresponde al valor del potencial químico a temperatura cero:  $\epsilon_F = \mu_0$ .

Recordemos que en el espacio de coordenadas  $n_x, n_y, n_z$  (espacio  $\mathbf{k}$ ), representado en la figura 3.1, los estados cuánticos de una partícula confinada en el potencial homogéneo con la misma energía están contenidos en la superficie de una esfera, y sobre la parte positiva de un plano para el potencial armónico (figura 3.1). En general, los estados cuánticos con la misma energía de una partícula confinada en un potencial externo, están contenidos sobre la superficie con energía constante. Así, para el gas degenerado de Fermi ( $T = 0$ ) las partículas ocupan todos los estados contenidos dentro del volumen que limita la superficie con la energía de Fermi  $\epsilon_F$ ; a esta superficie se le suele llamar superficie de fermi.

De esta forma, a  $T = 0$  el número de partículas sobre la superficie de Fermi (con energía  $\epsilon_F$ ) es mayor comparado con el número de partículas que tienen una energía  $\epsilon_{\mathbf{p}}$ , siendo  $\epsilon_{\mathbf{p}} < \epsilon_F$ . En este sentido hay cierta analogía con el condensado de Bose-Einstein. Mientras que en el condensado la mayoría de las partículas se hallan en un mismo estado cuántico (estado de mínima energía) y por lo tanto con la misma energía; en el gas degenerado de Fermi existe una población mayoritaria de partículas con la misma energía (energía de Fermi), a pesar de que no se hallan en el mismo estado cuántico.

Ahora veamos cómo se determina la energía de Fermi para el gas confinado en cada uno de los potenciales externos. Para esto, veamos que el número de partículas del gas, como función de  $(T, \mathcal{V}, \mu)$ , se puede obtener de la siguiente manera:

$$N(T, \mathcal{V}, \mu) = \int_0^{\infty} \rho(\epsilon) n(\epsilon) d\epsilon, \quad (3.48)$$

donde  $n(\epsilon)$ , es el número de ocupación (ecuación 3.46) en el límite continuo ( $k_B T \gg \epsilon_{k+1} - \epsilon_k$ ), y  $\rho(\epsilon)$  la densidad de estados. En  $T = 0$ , el número de ocupación viene dado por la ecuación (3.47), y el potencial químico toma el valor de la energía de Fermi  $\mu = \epsilon_F$ , de tal forma que obtenemos:

$$N(T = 0, \mathcal{V}, \mu = \epsilon_F) = \int_0^{\epsilon_F} \rho(\epsilon) d\epsilon. \quad (3.49)$$

Esta ecuación determina la energía de Fermi como función de la densidad de partículas del gas:  $\epsilon_F(N/\mathcal{V})$ ; esto es similar a la temperatura crítica de un gas de bosones y que depende también de la densidad de partículas. Sustituyendo en la ecuación anterior la expresión de la densidad de estados para cada potencial de confinamiento (ecuaciones 3.17 y 3.19), obtenemos la energía de Fermi del gas confinado en cada uno de los potenciales:

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad \epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left( 6\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3}, \quad (3.50a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad \epsilon_F = \hbar \left( 6 \frac{N}{\omega_0^{-3}} \right)^{1/3}, \quad (3.50b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad \epsilon_F = \sqrt[3]{\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{945}{(16\pi)^2} \frac{N}{A_0^{-3}} \right)^{2/9}}. \quad (3.50c)$$

A partir de la energía de Fermi, es inmediato definir la temperatura de Fermi como  $T_F = \epsilon_F/k_B$ . Así, de las ecuaciones anteriores, notamos que la temperatura de Fermi (gas de fermiones) es prácticamente igual, excepto por factores constantes, a la temperatura crítica del gas de bosones ecs. (3.39). Recordemos que el gas degenerado de Fermi se define como un gas de fermiones a  $T = 0$ ; sin embargo la temperatura de Fermi  $T_F$  puede entenderse como la temperatura a la cual las partículas en un gas de fermiones tienen energía térmica igual a la energía de Fermi ( $\epsilon_F = k_B T_F$ ), por lo que sus propiedades son muy cercanas a las de un gas degenerado. Para un gas de fermiones con las mismas condiciones descritas anteriormente cuando vimos la temperatura crítica del condensado de Bose-Einstein<sup>12</sup>, que son muy similares a las cuales se logro observar las propiedades del gas degenerado de Fermi en un gas con átomos de <sup>40</sup>K [6], es decir con densidades del orden de  $N/V \approx 2.5 \times 10^{12}$  part/cm<sup>3</sup> y  $N/\omega_0^{-3} \approx 34 \times 10^9$  part/Hz<sup>-3</sup>, la temperatura de Fermi tiene los valores  $T_F \simeq 80$  nK y  $T_F \simeq 45$  nK para el confinamiento en el potencial homogéneo y armónico respectivamente, estos valores son del mismo orden que la temperatura crítica para el gas de bosones.

---

<sup>12</sup>ver final de la página 29

Para analizar las propiedades termodinámicas del gas de fermiones a bajas temperaturas, es conveniente utilizar la aproximación de las funciones de Fermi<sup>13</sup> en el régimen de bajas temperaturas ( $\alpha \ll 1$ ):

$$f_n(\alpha) \approx \frac{\alpha^n}{\Gamma(n+1)} \left( 1 + \frac{\pi^2}{6\alpha^2} n(n-1) \right). \quad (3.51)$$

Así, la presión a bajas temperaturas de un gas de fermiones confinado en cada uno de los potenciales de confinamiento tiene la siguiente forma:

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad P \approx \frac{2}{5} \frac{N}{V} \epsilon_F \left[ 1 + \frac{5\pi^2}{12} \left( \frac{T}{T_F} \right)^2 \right], \quad (3.52a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad P_a \approx \frac{1}{4} \frac{N}{\omega_0^{-3}} \epsilon_F \left[ 1 + \frac{5\pi^2}{12} \left( \frac{T}{T_F} \right)^2 \right], \quad (3.52b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad P_c \approx \frac{2}{11} \frac{N}{A_0^{-3}} \epsilon_F \left[ 1 + \frac{9\pi^2}{12} \left( \frac{T}{T_F} \right)^2 \right]. \quad (3.52c)$$

Se puede ver que la presión para el gas de fermiones en  $T = 0$  no se anula. A diferencia del condensado de Bose-Einstein en el que a  $T = 0$  todas las partículas ocupan el estado de mínima energía ( $\epsilon_0 = 0$ ) donde su energía es cero por lo que la presión se anula, en el gas degenerado de Fermi los fermiones deben ocupar diferentes estados cuánticos con energía  $\epsilon \neq 0$  por lo que en este caso la presión no se anula. Para las densidades mencionadas anteriormente y que son las utilizadas en los experimentos con gases confinados, la presión en  $T = 0$  para un gas de fermiones sería del orden de  $P \approx 10^{-12} \text{ Pa} = 10^{-15} \text{ Torr}$ , la cual es superior por cuatro ordenes de magnitud a del condensado de Bose-Einstein (con las mismas condiciones en la densidad) a temperaturas de nanokelvins.

La entropía para el gas de fermiones en el régimen de bajas temperaturas tienen la siguiente forma:

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad \frac{S}{Nk_B} \approx \frac{\pi^2}{2} \left( \frac{T}{T_F} \right), \quad (3.53a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad \frac{S}{Nk_B} \approx \pi^2 \left( \frac{T}{T_F} \right), \quad (3.53b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad \frac{S}{Nk_B} \approx \frac{3\pi^2}{2} \left( \frac{T}{T_F} \right). \quad (3.53c)$$

<sup>13</sup>Ver Apéndice B para las propiedades de las funciones de Fermi

Como podemos ver, la entropía del gas de fermiones, al igual para el gas de bosones, satisface la tercera ley de la termodinámica:  $\lim_{T \rightarrow 0} S = 0$

Finalmente, la energía interna en el régimen de bajas temperaturas tienen la siguiente forma:

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad \frac{E}{N} \approx \frac{3}{5} \epsilon_F \left[ 1 + \frac{5\pi^2}{12} \left( \frac{T}{T_F} \right)^2 \right], \quad (3.54a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad \frac{E}{N} \approx \frac{3}{4} \epsilon_F \left[ 1 + \frac{2\pi^2}{3} \left( \frac{T}{T_F} \right)^2 \right], \quad (3.54b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad \frac{E}{N} \approx \frac{9}{11} \epsilon_F \left[ 1 + \frac{11\pi^2}{12} \left( \frac{T}{T_F} \right)^2 \right]. \quad (3.54c)$$

Tal como como era de esperar para el gas de fermiones, la energía en  $T = 0$  no se anula, esto se debe a que en el gas degenerado de Fermi las partículas ocupan todos los estados con energía  $\epsilon < \epsilon_F$  (ocupan toda la superficie de Fermi) y que se nota claramente en las ecuaciones anteriores cuando  $T = 0$ .

### 3.5.1 Calor específico a volumen constante, gas de fermiones

Ahora analizaremos el comportamiento del calor específico a volumen constante para el gas de fermiones en cada uno de los potenciales de confinamiento. Tal como lo hicimos para el gas de bosones,  $C_V$  se obtiene a partir de la energía interna del gas ideal cuántico ecs. (3.30), de donde obtenemos:

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad \frac{C_V}{Nk_B} = \frac{15}{4} \frac{f_{5/2}(\alpha)}{f_{3/2}(\alpha)} - \frac{9}{4} \frac{f_{3/2}(\alpha)}{f_{1/2}(\alpha)}, \quad (3.55a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad \frac{C_V}{Nk_B} = 12 \frac{f_{5/2}(\alpha)}{f_{3/2}(\alpha)} - 9 \frac{f_{3/2}(\alpha)}{f_{1/2}(\alpha)}, \quad (3.55b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad \frac{C_V}{Nk_B} = \frac{117}{4} \frac{f_{11/2}(\alpha)}{f_{9/2}(\alpha)} - \frac{99}{4} \frac{f_{9/2}(\alpha)}{f_{7/2}(\alpha)}. \quad (3.55c)$$

Lo primero que podemos verificar de estas ecuaciones es el límite clásico que se produce en el régimen de altas temperaturas; recordemos que en este caso, podemos aproximar a las funciones de Fermi como:  $f_n(\alpha) \approx e^\alpha$ . Entonces, de las ecuaciones para el calor específico (3.55), es fácil ver que:  $\lim_{T \rightarrow \infty} C_V/Nk_B = 3/2, 3, 9/2$ , para el gas confinado

en el potencial homogéneo, armónico y cuadrupolar respectivamente, que coinciden con las expresiones correspondientes al gas clásico

Como hemos venido haciendo, con el gas de fermiones, podemos obtener ahora una aproximación de  $C_V$  en el régimen de bajas temperaturas, y apreciar mejor su comportamiento en este régimen. Para ello, utilizamos la aproximación de la energía interna en el régimen de bajas de temperaturas ecs. (3.54), entonces simplemente derivando ( $C_V = \partial E / \partial T_{V,N}$ ) obtenemos la aproximación del calor específico a volumen constante, para cada uno de los potenciales de confinamiento:

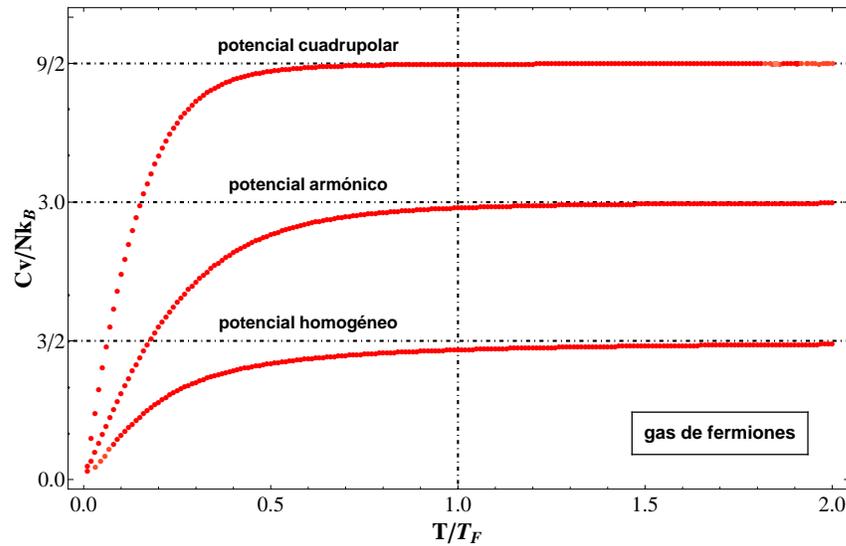
$$\textit{Potencial homogéneo} \quad \frac{C_V}{Nk_B} \approx \frac{\pi^2}{2} \left( \frac{T}{T_F} \right), \quad (3.56a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad \frac{C_V}{Nk_B} \approx \pi^2 \left( \frac{T}{T_F} \right), \quad (3.56b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad \frac{C_V}{Nk_B} \approx \frac{3\pi^2}{2} \left( \frac{T}{T_F} \right). \quad (3.56c)$$

Al igual que para el gas de bosones, el calor específico a volumen constante para un gas de fermiones satisface la tercera ley de la termodinámica:  $\lim_{T \rightarrow 0} C_V = 0$ .

Para el gas de fermiones, a diferencia del gas de bosones, no hay dos expresiones diferentes para el calor específico a volumen constante. Por lo que entonces no existen discontinuidades en  $C_V$ . La figura 3.4 contiene las curvas del calor específico en función de la temperatura para el gas de fermiones confinado en cada uno de los potenciales de confinamiento.



**Figura 3.4:** Calor específico para el gas de fermiones confinado en los diferentes potenciales externos

## 3.6 Potencial químico

En esta sección estudiaremos el comportamiento del potencial químico, como función de la temperatura, para el gas de bosones y de fermiones confinado en cada uno de los potenciales externos. Esta dependencia es muy importante, y como hemos visto en las secciones anteriores, nos ha permitido determinar el comportamiento de las propiedades termodinámicas del gas ideal cuántico en el regimen de altas y bajas temperaturas.

Como ya hemos hecho referencia en las secciones anteriores, el potencial químico es una función creciente (en valor absoluto) de la temperatura cuando la densidad de partículas  $N/V$  se mantiene constante. Sin embargo, para el gas de bosones  $\mu = 0$ , por debajo y en la temperatura crítica (en especial en  $T = 0$ ); mientras que para el gas de fermiones el potencial químico no tiene esta restricción además de que en  $T = 0$  el potencial químico toma el valor de la energía de Fermi:  $\mu(T = 0) = \epsilon_F$ . Esta diferencia en el comportamiento del potencial químico a bajas temperaturas para ambos tipos de gases marca la diferencia en el comportamiento del calor específico a volumen como pudimos ver en las secciones 3.4.1 y 3.5.1.

El potencial químico como función de la temperatura y la densidad de partículas, para cada uno de los potenciales de confinamiento, esta determinado por las ecuaciones 3.25a:

| <i>Potencial<br/>homogéneo</i>                                 | <i>Potencial<br/>armónico</i>   | <i>Potencial<br/>cuadrupolar</i>   |
|--|---|--|
| $\frac{N}{V} = \frac{\mathfrak{g}_{3/2}(\alpha)}{\lambda_T^3}$ | $\frac{N}{\omega_0^{-3}} = \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \mathfrak{g}_3(\alpha)$ | $\frac{N}{A_0^{-3}} = 8\pi \left(\frac{k_B T}{\lambda_T}\right)^3 \mathfrak{g}_{9/2}(\alpha),$ |

donde hay que recordar que  $\mathfrak{g}_n(\alpha)$  representa a las funciones de Bose o de Fermi, según se trate de un gas de bosones o un gas de fermiones respectivamente. Estas funciones son integrales que contiene al potencial químico implícitamente ( $\alpha = \mu/k_B T$ ), de las cuales no es posible despejar explícitamente al potencial químico como función de la temperatura y de la densidad de partículas. Sin embargo, es posible realizar el cálculo numérico del potencial químico para diferentes valores de la temperatura, para el gas de bosones y de fermiones como se expone en la siguiente sección.

### 3.6.1 Gas de bosones

Para el gas de bosones es conveniente reescribir las ecuaciones (3.57) en unidades de la temperatura crítica  $T_c$  respectiva a cada potencial de confinamiento, definidas mediante las ecuaciones (3.39). De esta manera, las ecuaciones quedan de la siguiente forma:

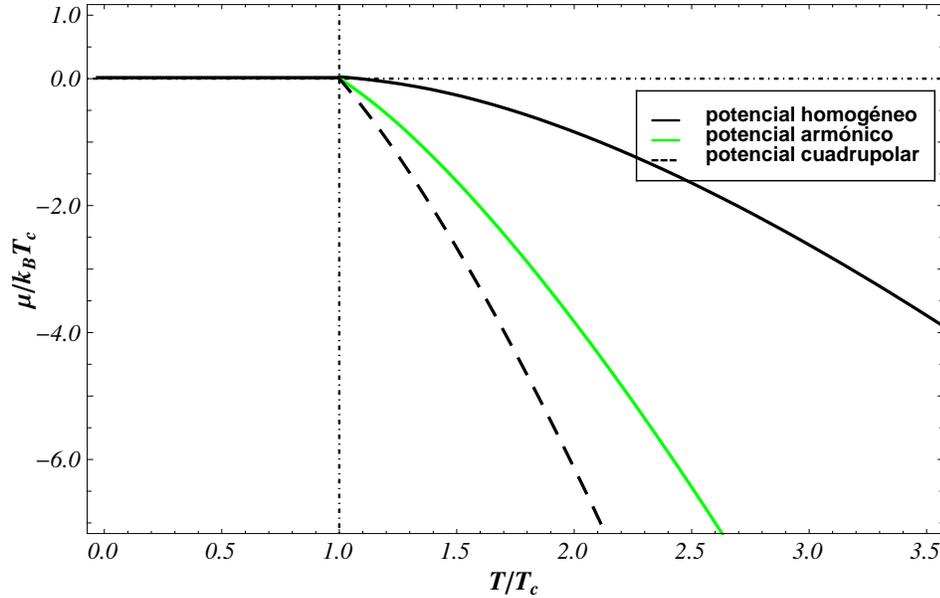
$$\text{Potencial homogéneo} \quad \zeta(3/2) = \mathbf{t}^{3/2} g_{3/2}(\boldsymbol{\mu}/\mathbf{t}), \quad (3.57a)$$

$$\text{Potencial armónico} \quad \zeta(3) = \mathbf{t}^3 g_3(\boldsymbol{\mu}/\mathbf{t}), \quad (3.57b)$$

$$\text{Potencial cuadrupolar} \quad \zeta(9/2) = \mathbf{t}^{9/2} g_{9/2}(\boldsymbol{\mu}/\mathbf{t}). \quad (3.57c)$$

Donde  $\mathbf{t} = T/T_c$  y  $\boldsymbol{\mu} = \mu/k_B T_c$ . De esta manera la dependencia con la densidad de partículas  $N/\mathcal{V}$ , esta contenida a través de  $T_c$ , recordemos que la temperatura crítica depende únicamente de la densidad de partículas.

Así, mediante estas ecuaciones, es posible calcular numéricamente el potencial químico como función de la temperatura  $\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}(\mathbf{t})$ , para esto utilizaremos la representación en serie de las funciones de Bose:  $g_n(\alpha) = \sum_{l=1}^{\infty} (e^\alpha)^l / l^n$ , y consideraremos únicamente los términos dominantes de la serie. La figura (3.5) muestra las curvas obtenidas numéricamente del potencial químico como función de la temperatura para los tres potenciales de confinamiento, podemos notar que el potencial químico es cero para  $T = T_c$ , y que corrobora lo que habíamos dicho anteriormente.



**Figura 3.5:** Potencial químico como función de la temperatura para un gas de bosones confinado en cada uno de los potenciales de externos. La dependencia con la densidad de partículas está contenida a través de  $T_c$ .

### 3.6.2 Gas de fermiones

De manera semejante a como hicimos con el gas de bosones, para determinar el potencial químico como función de la temperatura y la densidad de partículas, reescribimos las ecuaciones (3.57), ahora en términos de la temperatura de Fermi  $T_F$ , respectiva a cada potencial de confinamiento, definidas mediante las ecuaciones (3.50) ( $T_F = E_F/k_B$ ). Así, en términos de la temperatura de Fermi, estas ecuaciones tienen la forma:

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad \frac{4}{3\sqrt{\pi}} = \mathbf{t}^{3/2} f_{3/2}(\boldsymbol{\mu}/\mathbf{t}), \quad (3.58a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad \frac{1}{6} = \mathbf{t}^3 f_3(\boldsymbol{\mu}/\mathbf{t}), \quad (3.58b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad \frac{32}{945\sqrt{\pi}} = \mathbf{t}^{9/2} f_{9/2}(\boldsymbol{\mu}/\mathbf{t}). \quad (3.58c)$$

Estas ecuaciones son análogas a las del gas de bosones (ecuaciones 3.57), donde ahora,  $\mathbf{t} = T/T_F$  y  $\boldsymbol{\mu} = \mu/k_B T_F$ . Una vez más la dependencia con la densidad de partículas en estas ecuaciones, queda implícita a través de las unidades de la temperatura de Fermi  $T_F$ .

Tal como se hizo para el gas de bosones, podemos representar a las funciones de Fermi como la serie:  $f_n(\alpha) = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l+1} (e^\alpha)^l / l^n$ , y calcular numéricamente el potencial químico (tomando solamente los primeros términos) para diferentes temperaturas. Mediante estas ecuaciones podemos calcular el potencial químico del gas de fermiones a diferentes temperaturas.

A diferencia del gas de bosones, para el gas de fermiones es posible encontrar una forma explícita del potencial químico como función de la temperatura y la densidad de partículas, en el regimen de bajas temperaturas. Para ello, utilizamos la aproximación de las funciones de Fermi (3.51). Sustituyendo esta aproximación de las funciones de Fermi en las ecuaciones (3.57) obtenemos explícitamente el potencial químico como función de la temperatura y la densidad de partículas, para cada uno de los potenciales de confinamiento. Nuevamente haciendo uso de las unidades  $T_F$ , tenemos las siguientes ecuaciones:

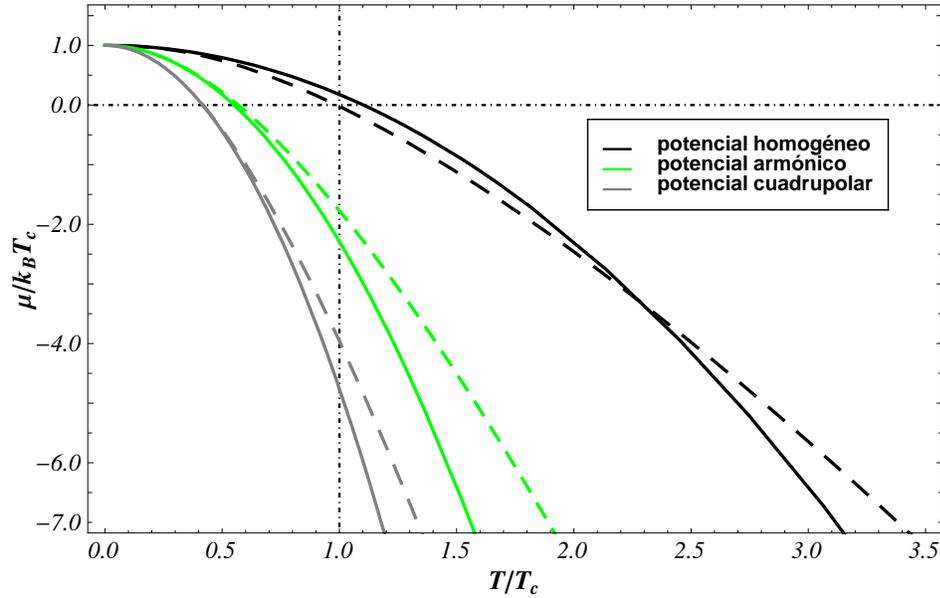
$$\textit{Potencial homogéneo} \quad \boldsymbol{\mu} = \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \mathbf{t}^2 \right], \quad (3.59a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad \boldsymbol{\mu} = \left[ 1 - \frac{\pi^2}{3} \mathbf{t}^2 \right], \quad (3.59b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad \boldsymbol{\mu} = \left[ 1 - \frac{7\pi^2}{12} \mathbf{t}^2 \right]. \quad (3.59c)$$

A partir de estas ecuaciones notamos que el potencial químico para el gas de fermiones, es cero únicamente para un valor de la temperatura (en el gas de bosones es cero si:  $T \leq T_c$ ).

Además, en  $T = 0$  se satisface que el potencial químico es igual a la energía de Fermi:  $\mu = \epsilon_F$  ( $\epsilon_F = k_B T_F$ ), de acuerdo con su definición. La figura 3.6 contiene las curvas obtenidas del potencial químico del gas de fermiones, en las aproximación de bajas temperaturas (ecs. 3.59) y la aproximación numérica obtenida mediante las ecuaciones (3.58). Notamos de estas gráficas que ambas aproximaciones coinciden en el régimen de bajas temperaturas, como era de esperar; mientras que a altas temperaturas es evidente la discrepancia.



**Figura 3.6:** Potencial químico como función de la temperatura para un gas de fermiones confinado en cada uno de los potenciales de externos. La dependencia con la densidad de partículas está contenida a través de  $T_F$ . Las curvas punteadas representan la aproximación a bajas temperaturas ecs. (3.59); mientras que las curvas continuas representan la aproximación numérica de las ecuaciones (3.58).

# CAPÍTULO 4

## Perfiles de Densidad

Hasta ahora hemos analizado únicamente las propiedades termodinámicas del gas ideal de bosones y fermiones confinado en cada uno de los potenciales externos. En el capítulo anterior vimos que para un gas de bosones se presenta el fenómeno de condensación de Bose-Einstein y para el gas de fermiones la degeneración de Fermi. Ambos fenómenos son consecuencia del comportamiento cuántico de las partículas. En especial, obtuvimos la temperatura crítica y la energía de Fermi, que caracterizan ambos fenómenos.

Una propiedad muy importante del gas, y con la cual es posible comparar los resultados experimentales, es la distribución espacial de las partículas o perfiles de densidad. En este capítulo analizaremos el comportamiento de los perfiles de densidad con la temperatura, para el gas de bosones y de fermiones confinados en cada uno de los potenciales externos. Para obtener las expresiones de los perfiles, como función de la temperatura, utilizaremos una aproximación semiclásica. Los perfiles de densidad representan la principal información con la que cuenta el trabajo experimental; a partir de la cual es posible determinar la temperatura del gas y saber si el gas se encuentra por debajo de la temperatura crítica o de Fermi, y por lo tanto en la fase de condensado de Bose-Einstein o degeneración de Fermi, para un gas de bosones o de fermiones respectivamente.

Para determinar los perfiles de densidad del gas de bosones, partimos del número de ocupación de partículas en cada estado ec. (3.8):

$$\bar{n}_{\mathbf{p}} = \frac{1}{e^{(\beta\epsilon_{\mathbf{p}} - \alpha)} - 1}, \quad (4.1)$$

donde  $\epsilon_{\mathbf{p}}$  corresponde a la energía del estado cuántico  $\mathbf{p}$  de una partícula confinada en el potencial  $U(\mathbf{r})$ . La distribución espacial de las partículas se puede obtener a partir de las funciones de onda  $\Psi_{\mathbf{p}}$ , para todos los estados  $\mathbf{p}$  de una partícula confinada en el potencial externo  $U(\mathbf{r})$ . Recordemos que el elemento  $|\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$  representa la probabilidad de encontrar a la partícula con estado  $\mathbf{p}$  en el volumen  $d\mathbf{r}$  alrededor de la posición  $\mathbf{r}$ ; así, sumando sobre todos los estados cuánticos accesibles pesados por el número de ocupación (4.1), obtenemos la distribución espacial de partículas:  $n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p}} \bar{n}_{\mathbf{p}} |\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$ . Sin embargo, esta expre-

sión tiene dos inconvenientes: el primero es que se trata de una suma infinita, ya que hay un número infinito de estados accesibles para una partícula confinada; y el segundo es que para determinar  $n(\mathbf{r})$  es necesario conocer todas las funciones de estado  $\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ , así como de sus energías  $\epsilon_{\mathbf{p}}$ . Para el caso de una partícula confinada en el potencial homogéneo y armónico conocemos la formas explícita las funciones y de sus energías, pero para el potencial cuadrupolar no las tenemos.

Sin embargo, podemos hacer una aproximación semiclásica[11] en la cuál la energía de cada estado  $\epsilon_{\mathbf{p}}$ , se reemplaza por la energía clásica de una partícula confinada en el potencial externo  $U(\mathbf{r})$ :  $\epsilon = \mathbf{p}^2/2m + U(\mathbf{r})$ . Entonces el número de ocupación (ecuación 4.1) queda de la siguiente forma:

$$\bar{n}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{1}{e^{\beta(\mathbf{p}^2/2m + U(\mathbf{r}) - \mu)} - 1}, \quad (4.2)$$

donde podemos notar claramente la dependencia con la posición, a través del potencial de confinamiento  $U(\mathbf{r})$ . La dependencia con la temperatura es mediante el factor  $\beta = 1/k_B T$ . Ahora bien, en el espacio fase de un sistema de  $N$  partículas, la fracción de partículas con momento entre  $p$  y  $p + dp$  contenidas entre  $r$  y  $r + dr$  viene dado por:

$$dN = \frac{1}{h^3} \bar{n}_{\mathbf{p}} d^3 p d^3 r. \quad (4.3)$$

Sustituyendo en esta ecuación la aproximación semiclásica del número de ocupación ec. (4.2) e integrando sobre todos los momentos obtenemos los perfiles de densidad, que corresponden a la fracción de partículas contenidas en el elemento de volumen  $dV = d^3 r$  en la posición  $\mathbf{r}$ :

$$\eta(\mathbf{r}, T) \equiv \left[ \frac{dN}{dV} \right]_{\mathbf{r}} = \frac{4\pi}{h^3} \int_0^\infty \frac{p^2 dp}{e^{\beta(p^2/2m + U(\mathbf{r}) - \mu)} - 1}. \quad (4.4)$$

Los perfiles de densidad dependen de la temperatura ( $\beta = 1/k_B T$ ); y de la posición, a través del potencial de confinamiento  $U(\mathbf{r})$ . Mediante un cambio de variable en la integral, podemos escribir los perfiles de densidad en términos de la función de Bose  $g_{3/2}[\alpha - U(\mathbf{r})]$ . De esta forma los perfiles de densidad quedan determinados por[11]:

$$\eta(\mathbf{r}, T) = \frac{1}{\lambda_T^3} g_{3/2}[\alpha - \beta U(\mathbf{r})]. \quad (4.5)$$

## 4.1 Gas de bosones

En un gas de bosones la ecuación (4.5) que determina los perfiles de densidad, es válida únicamente para  $T \geq T_c$ , (en  $T_c$ ,  $\alpha = 0$ ), es decir fuera del régimen de condensado de Bose-Einstein. Esto es porque en el condensado los efectos cuánticos deben ser tomados en cuenta, y nuestra aproximación semiclásica deja de ser aplicable.

En el condensado de Bose-Einstein la mayoría de las partículas se encuentran en el estado base (mínima energía)  $\epsilon_0 = 0$  y solo una pequeña fracción de ellas se encuentra en los estados

excitados (que hemos llamado partículas térmicas). De esta forma los perfiles de densidad se puede escribir como la suma de dos contribuciones: una debida a las partículas del estado base dada por  $N_0 |\Psi_0(\mathbf{r})|^2$ , donde  $N_0$  es el número de partículas en este estado y  $\Psi_0(\mathbf{r})$  es la función del estado base de una partícula confinada en el potencial  $U(\mathbf{r})$ ; la otra contribución a los perfiles de densidad es debida a las partículas térmicas y que puede ser bien aproximada mediante la ecuación (4.5) con  $\alpha = 0$ .

Así, podemos distinguir claramente tres regímenes para los perfiles de densidad

$$\eta(\mathbf{r}, T) = \begin{cases} \frac{1}{\lambda_T^3} g_{3/2} [\alpha - \beta U(\mathbf{r})] & T > T_c, \\ \frac{1}{\lambda_T^3} g_{3/2} [-\beta U(\mathbf{r})] & T = T_c, \\ N_0 |\Psi_0(\mathbf{r})| + \frac{1}{\lambda_T^3} g_{3/2} [-\beta U(\mathbf{r})] & T < T_c. \end{cases} \quad (4.6)$$

Así, los perfiles de densidad dependen de la temperatura (el potencial químico como función de la temperatura esta descrito en la sección 3.6.1) y del potencial de confinamiento  $U(\mathbf{r})$ . El número de partículas en el estado  $N_0$  base viene dado por las ecuaciones (3.40); mientras que las funciones del estado base  $\Psi_0(\mathbf{r})$  para una partícula confinada en el potencial homogéneo, armónico y cuadrupolar se pueden consultar en el apéndice A.

De esta manera los perfiles de densidad quedan completamente determinados. Las gráficas 4.1 y 4.2 muestran los perfiles de densidad para diferentes temperaturas: la primera corresponde al gas confinado en el potencial armónico y la segunda en el potencial cuadrupolar. En estas gráficas hemos utilizado unidades referidas a la longitud característica de un gas de bosones  $R_B$ , definidas de la siguiente forma<sup>1</sup>:

**Potencial armónico**

$$\frac{1}{2} m \omega_0^2 R_B^2 = k_B T_c \quad \Rightarrow \quad R_B = \frac{1}{\omega_0} \sqrt{\frac{2\hbar}{m}} \left( \frac{N \omega_0^3}{\zeta(3)} \right)^{1/6}, \quad (4.7a)$$

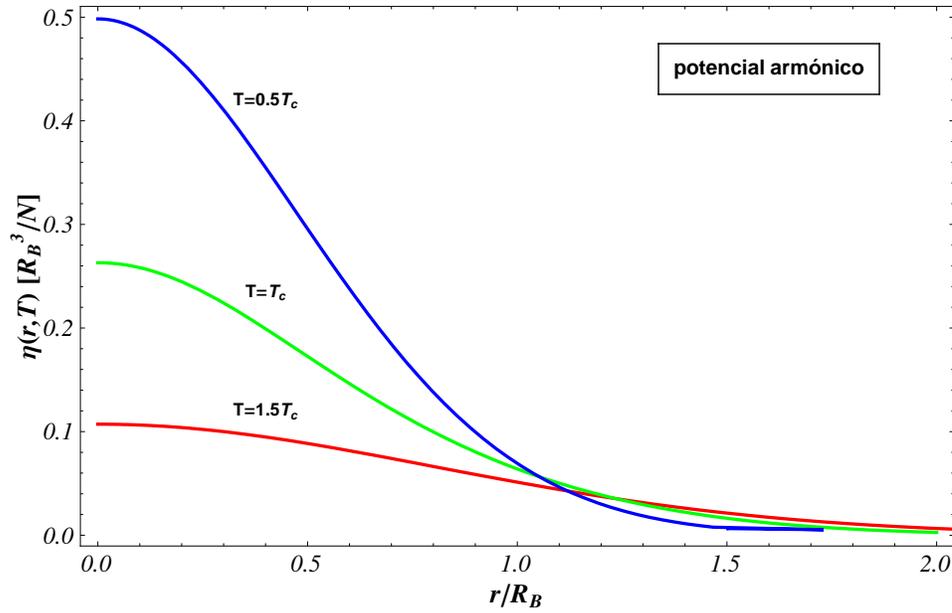
**Potencial cuadrupolar**

$$A_0 R_B = k_B T_c \quad \Rightarrow \quad R_B = \frac{1}{A_0} \left( \frac{\hbar^2}{2\pi m} \right)^{1/3} \left( \frac{N A_0^3}{8\pi \zeta(9/2)} \right)^{2/9}, \quad (4.7b)$$

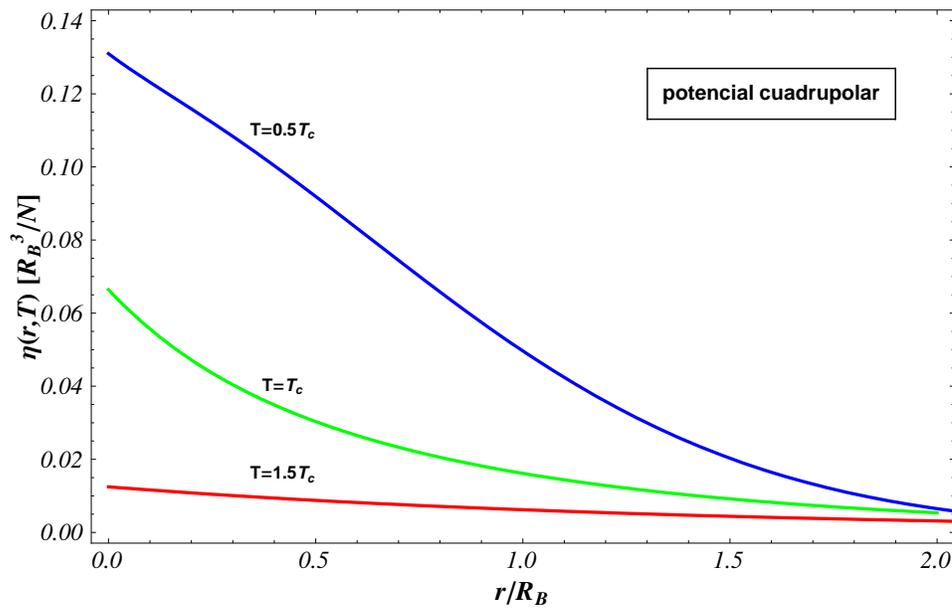
donde hemos sustituido el valor de  $T_c$  para cada potencial de confinamiento (ecuaciones 3.39). Podemos ver que  $R_B$  depende únicamente de la densidad de partículas del gas.

---

<sup>1</sup> $R_B$ , se puede interpretar como la amplitud a la que oscila una partícula clásica confinada en el potencial externo (armónico o cuadrupolar), cuando el gas tiene la temperatura crítica  $T_c$ .



**Figura 4.1:** Perfiles de densidad para un gas de bosones confinado en un potencial armónico con diferentes temperaturas



**Figura 4.2:** Perfiles de densidad para un gas de bosones confinado en un potencial cuadrupolar con diferentes temperaturas

## 4.2 Gas de Fermiones

Para el gas de fermiones podemos identificar dos regímenes de temperatura: cuando  $T \geq T_F$ , donde la aproximación semiclásica de los perfiles de densidad (4.5) tiene validez, ya que los efectos cuánticos no son tan importantes; y cuando  $T = 0$  (gas degenerado de Fermi), en este caso los efectos cuánticos son relevantes por lo que esta aproximación deja de ser válida. Es necesario entonces encontrar una expresión para los perfiles de densidad en  $T = 0$ . Recordemos que para el gas de bosones en  $T < T_c$  (Condensado de Bose-Einstein), los perfiles de densidad se obtuvieron agregando un término que correspondía a la contribución de las partículas que se hallan en el estado base, y que representaba el término dominante. Sin embargo, para el gas degenerado de Fermi ( $T = 0$ ) este procedimiento no tendría sentido, debido a que los fermiones cumplen con el principio de exclusión de Pauli por lo que únicamente hay una partícula por estado cuántico, entonces este término sería despreciable.

Para determinar el perfil de densidad para el gas degenerado de Fermi recordemos que en un gas de fermiones a  $T = 0$  las partículas pueden tener únicamente energía menor a la de Fermi  $\epsilon < \epsilon_F$  (las partículas ocupan los estados contenidos dentro de la superficie de Fermi, ver figura 3.1). Entonces podemos obtener una aproximación semiclásica de la distribución espacial de partículas[12] definiendo el número de onda local de Fermi  $\mathbf{k}_F$ , de la siguiente manera:

$$\frac{\hbar^2 |\mathbf{k}_F|^2}{2m} + U(\mathbf{r}) = \epsilon_F, \quad (4.8)$$

esta ecuación representa el balance de energía para las partículas del gas degenerado de Fermi (donde  $\epsilon_F$  es una constante) y define al número de onda local de Fermi  $\mathbf{k}_F = \mathbf{k}_F(\mathbf{r})$ , que depende de la posición a través del potencial de confinamiento  $U(\mathbf{r})$ .

A  $T = 0$  las partículas del gas ocupan todos los estados con energía menor o igual a la energía de Fermi  $\epsilon_F$ ; entonces la fracción de partículas contenidas entre  $\mathbf{r}$  y  $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$  se obtiene del volumen de la esfera de radio  $\mathbf{k}_F(\mathbf{r})$  en el espacio recíproco, dividido entre el volumen por unidad de estado<sup>2</sup>:

$$n(\mathbf{r}, T = 0) = \frac{4\pi}{3} \mathbf{k}_F(\mathbf{r})^3 \frac{1}{(2\pi/L)^3} = \frac{L^3 |\mathbf{k}_F(\mathbf{r})|^3}{6\pi^2}, \quad (4.9)$$

sustituyendo en esta ecuación el valor de  $\mathbf{k}_F(\mathbf{r})$  determinado por la ecuación (4.8), obtenemos finalmente los perfiles de densidad para el gas degenerado de Fermi:

$$\eta(\mathbf{r}, T = 0) = \frac{1}{6\pi^2} \left[ \frac{2m}{\hbar^2} \{ \epsilon_F - U(\mathbf{r}) \} \right]^{3/2}. \quad (4.10)$$

Esta ecuación depende del potencial de confinamiento  $U(\mathbf{r})$  y de la densidad de partículas a través de la energía de Fermi  $\epsilon_F$  para cada potencial de confinamiento (ecuaciones 3.50).

<sup>2</sup>En el espacio recíproco los estados no llenan completamente el espacio ec. (3.15), sino que están separados entre sí por el espaciado  $\frac{2\pi}{L}$ .

Al igual que para el gas de bosones, definimos la longitud característica de un gas de fermiones  $R_F$ , como el alcance máximo de una partícula confinada en el potencial externo cuando el gas tiene la temperatura de Fermi  $T_F$ :

**Potencial armónico**

$$\frac{1}{2}m\omega_0^2 R_F^2 = k_B T_F \quad \Rightarrow \quad R_F = \frac{1}{\omega_0} \sqrt{\frac{2\hbar}{m}} (6N\omega_0)^{1/6}, \quad (4.11a)$$

**Potencial cuadrupolar**

$$A_0 R_F = k_B T_F \quad \Rightarrow \quad R_F = \frac{1}{A_0} \left( \frac{\hbar^2}{2\pi m} \right)^{1/3} \left( \frac{945 N A_0^3}{(16\pi)^2} \right)^{2/9}. \quad (4.11b)$$

Estas longitudes, al igual que para el gas de bosones (ecuaciones 4.7), dependen únicamente de la densidad de partículas. Sustituyendo la expresión del potencial de confinamiento  $U(\mathbf{r})$  (armónico y cuadrupolar) en la ecuación (4.10) con su respectiva  $R_F$ , obtenemos la forma explícita de los perfiles de densidad para el gas degenerado de Fermi:

**Potencial armónico**  $\eta(\mathbf{r}, T = 0) = \frac{8}{\pi} \frac{N}{R_F^3} \left[ 1 - \frac{\mathbf{r}^2}{R_F^2} \right]^{3/2}, \quad (4.12a)$

**Potencial cuadrupolar**  $\eta(\mathbf{r}, T = 0) = \frac{189}{34\pi} \frac{N}{R_F^3} \left[ 1 - \frac{|\mathbf{r}|}{R_F} \right]^{3/2}. \quad (4.12b)$

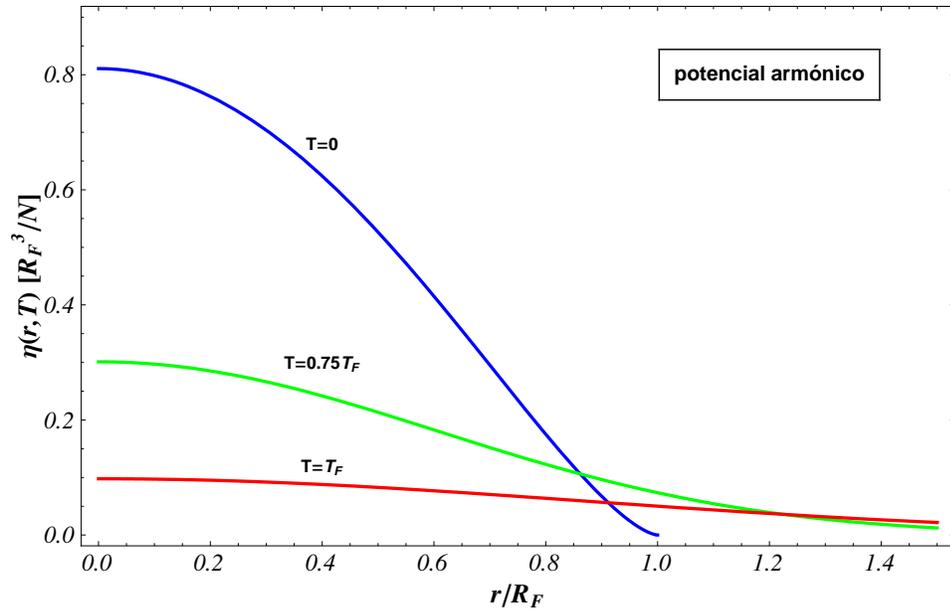


Figura 4.3: Perfiles de densidad para un gas de fermiones confinados en un potencial armónico.

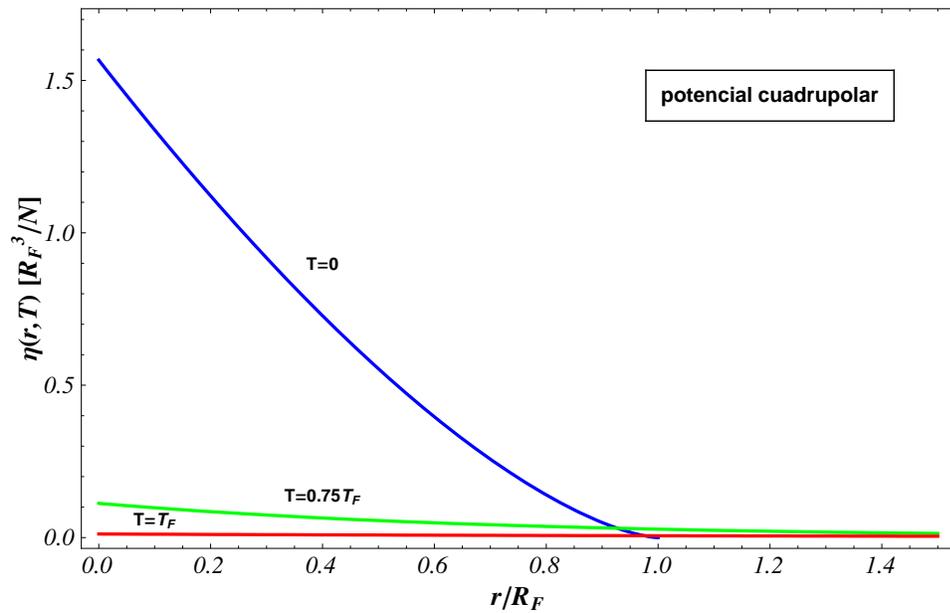


Figura 4.4: Perfiles de densidad para un gas de fermiones confinados en un potencial cuadrupolar.

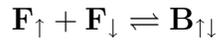
## Mezcla de bosones y fermiones

Actualmente uno de los retos principales en los experimentos con gases atómicos ultrafríos, es la obtención y caracterización de la transición del estado superfluido (BCS) al estado condensado de Bose-Einstein, y viceversa. Para conseguir dicha transición se requiere de una mezcla compuesta de fermiones en dos estados de espín diferentes ( $\uparrow$ ,  $\downarrow$ ), de tal manera que da lugar a que ambas especies se combinen para formar un bosón molecular; o si el proceso ocurre en forma inversa, los pares moleculares(bosones) se disocian en átomos fermiónicos. Este proceso ocurre como resultado del control de la interacción entre los átomos (fermiones en estados diferentes), a través de la longitud de dispersión que puede ser “modulada” mediante un campo magnético externo[7]. Esto se consigue manipulando los niveles Zeeman de cada especie de fermiones por lo que es posible conseguir que la longitud de dispersión sea negativa o positiva, resultando en una interacción atractiva o repulsiva respectivamente. De esta manera los átomos (fermiones) del gas pueden formar pares ligados (bosones) o mantenerse como partículas individuales.

Este tipo de experimentos constituye uno de los motivos principales de esta tesis, y en este capítulo se estudia la termodinámica de una mezcla ideal confinada compuesta por fermiones en dos estados de espín diferentes ( $\uparrow$ ,  $\downarrow$ ) que pueden ligarse, para formar un bosón. Si  $\epsilon^*$ , es la energía de ligadura necesaria para formar al bosón, entonces  $\epsilon^* \leq 0$ . Tratándose de una mezcla con dos tipos de fermiones que pueden formar un bosón, entonces distinguiremos dos tipos de mezclas: cuando la población de fermiones en cada estado es la misma (mezcla balanceada), y el caso contrario (mezcla desbalanceada). Para ambos tipos de mezcla se analiza el comportamiento de la temperatura de transición al condensado de Bose-Einstein ( $T_c$ ), como función del energía de ligadura  $\epsilon^*$ ; y del potencial químico, como función de la temperatura, para cada especie de partículas. Al final del capítulo se estudia la población de partículas, de cada especie, como función de la temperatura.

## 5.1 Composición de la mezcla

Consideremos un gas de fermiones, en el que cada fermión puede hallarse en dos estados diferentes: con espín  $+1/2$ , a los que denotaremos como  $\mathbf{F}_\uparrow$ ; o con espín  $-1/2$ , y que denotaremos como  $\mathbf{F}_\downarrow$ . Supondremos además que los fermiones no pueden realizar transiciones entre los diferentes estados de espín, por lo que solo pueden estar en un estado posible. Ambos tipos de fermiones pueden estar en el gas como partículas independientes; o bien, dos fermiones en diferente estado pueden ligarse para formar un bosón con espín cero<sup>1</sup>, a los que denotaremos como  $\mathbf{B}_{\uparrow\downarrow}$ . Ambos procesos los podemos simbolizar de la siguiente manera:

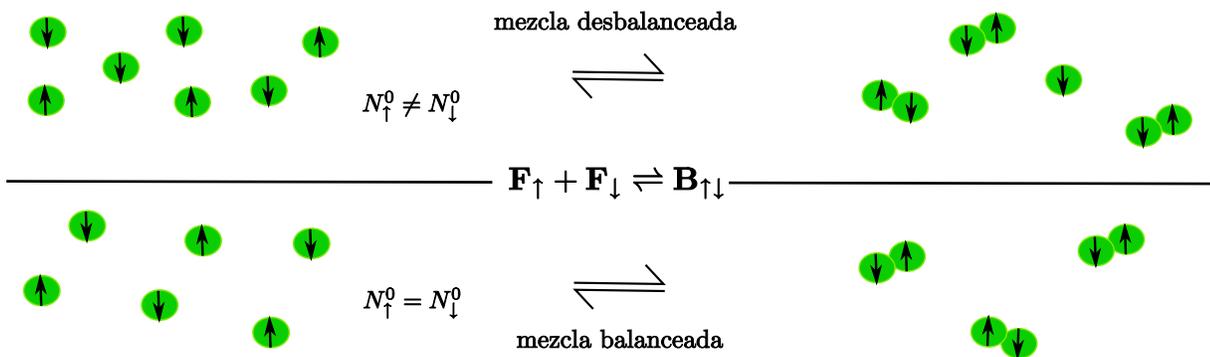


A la energía necesaria para ligar a los dos fermiones y formar al bosón la denotaremos como  $\epsilon^*$ , y puesto que se trata de una energía de ligadura entonces  $\epsilon^* \leq 0$ . La población de fermiones ( $\mathbf{F}_\uparrow$ ,  $\mathbf{F}_\downarrow$ ), así como de bosones ( $\mathbf{B}_{\uparrow\downarrow}$ ) presentes en la mezcla cuando esta en equilibrio viene determinada por la composición inicial que se tenga de ellas. Supongamos entonces una composición inicial:  $N_\uparrow^0$  fermiones del tipo  $\mathbf{F}_\uparrow$ , y  $N_\downarrow^0$  fermiones del tipo  $\mathbf{F}_\downarrow$ . Así, puesto que solamente dos fermiones en diferente estado pueden formar un bosón y viceversa, entonces en equilibrio el número de fermiones en cada estado esta determinado por:

$$N_\uparrow = N_\uparrow^0 - N_{\uparrow\downarrow} \quad \text{fermiones } \mathbf{F}_\uparrow, \quad (5.1a)$$

$$N_\downarrow = N_\downarrow^0 - N_{\uparrow\downarrow} \quad \text{fermiones } \mathbf{F}_\downarrow; \quad (5.1b)$$

donde  $N_{\uparrow\downarrow}$  es el número de bosones. Estas ecuaciones representan la conservación de partículas, y determinan las proporción que debe haber entre las partículas de diferente tipo, a partir de la composición inicial de la mezcla ( $N_\uparrow^0$ ,  $N_\downarrow^0$ ). Si  $N_\uparrow^0 = N_\downarrow^0$ , la mezcla es balanceada ya que entonces  $N_\uparrow = N_\downarrow$ ; en caso contrario  $N_\uparrow^0 \neq N_\downarrow^0$  la mezcla sera desbalanceada  $N_\uparrow \neq N_\downarrow$ .



**Figura 5.1:** Composición de la mezcla

<sup>1</sup>Debido a que los fermiones satisfacen el principio de exclusión de Pauli, descartamos la posible formación de bosones a partir de dos fermiones en el mismo estado.

## 5.2 Gran potencial de la mezcla

Para estudiar la termodinámica de la mezcla utilizaremos el formalismo del conjunto gran canónico, tal como lo hicimos con el gas ideal cuántico con un solo tipo de partículas (bosones, fermiones) en el capítulo 3. Recordemos que en este formalismo, las propiedades termodinámicas del sistema se obtiene a partir del gran potencial  $\Omega$ , que se define a través de la función de gran partición  $\Xi$ .

A continuación definiremos la energía del sistema, y posteriormente veremos cual es la expresión que tiene la función de gran partición  $\Xi$  para la mezcla. Para esto, consideremos como:  $\{\epsilon_{\mathbf{p}}^{\uparrow}, \bar{n}_{\mathbf{p}}^{\uparrow}\}$ ,  $\{\epsilon_{\mathbf{p}}^{\downarrow}, \bar{n}_{\mathbf{p}}^{\downarrow}\}$ ,  $\{\epsilon_{\mathbf{p}}^{\uparrow\downarrow}, \bar{n}_{\mathbf{p}}^{\uparrow\downarrow}\}$ , los niveles de energía y el número de ocupación para una partícula del tipo  $\mathbf{F}_{\uparrow}$ ,  $\mathbf{F}_{\downarrow}$ ,  $\mathbf{B}_{\uparrow\downarrow}$  respectivamente, que se halla confinada en el potencial externo  $U(\mathbf{r})$  (homogéneo, armónico, cuadrupolar). Entonces, designaremos por microestado del sistema:  $\{s\}$ , al conjunto de valores que puede tomar los diferentes numeros de ocupación:  $\{s\} = n_0^{\uparrow} n_1^{\uparrow} n_2^{\uparrow} \cdots n_0^{\downarrow} n_1^{\downarrow} n_2^{\downarrow} \cdots n_0^{\uparrow\downarrow} n_1^{\uparrow\downarrow} n_2^{\uparrow\downarrow} \cdots$ . Este conjunto de valores dice cuantas partículas, de cada tipo, hay en cada uno de los estados energéticos. De tal manera que la energía total del sistema en el microestado  $\{s\}$ , viene determinada por:

$$E_{\{s\}} = \sum_{\mathbf{k}=0} \epsilon_{\mathbf{k}}^{\uparrow} n_{\mathbf{k}}^{\uparrow} + \sum_{\mathbf{l}=0} \epsilon_{\mathbf{l}}^{\downarrow} n_{\mathbf{l}}^{\downarrow} + \sum_{\mathbf{m}=0} \epsilon_{\mathbf{m}}^{\uparrow\downarrow} n_{\mathbf{m}}^{\uparrow\downarrow} + \epsilon^* N_{\uparrow\downarrow}, \quad (5.2)$$

donde hay que recordar que la energía de ligadura es negativa ( $\epsilon^* < 0$ ); ya que es la energía necesaria para mantener ligado al par de fermiones que forman a un bosón, de tal manera se ha restado la energía de ligadura de los  $N_{\uparrow\downarrow}$  bosones que contiene la mezcla. Es necesario que esta expresión sea congruente con las propiedades termodinámicas del sistema, por lo que debe ser igual a la energía interna  $E$  del sistema:

$$E = E_{\{s\}}. \quad (5.3)$$

Es claro que para un valor de la energía existen diferentes microestados posibles; sin embargo solo consideraremos aquellos que satisfacen la condiciones específicas de la mezcla; es decir, si  $N_{\uparrow} = \sum_{\mathbf{k}=0}^{\infty} n_{\mathbf{k}}^{\uparrow}$ ,  $N_{\downarrow} = \sum_{\mathbf{l}=0}^{\infty} n_{\mathbf{l}}^{\downarrow}$ ,  $N_{\uparrow\downarrow} = \sum_{\mathbf{m}=0}^{\infty} n_{\mathbf{m}}^{\uparrow\downarrow}$  entonces la ecuación (5.2) debe ser compatibles con las ecuaciones (5.1):

$$N_{\uparrow}^0 = \sum_{\mathbf{k}=0}^{\infty} n_{\mathbf{k}}^{\uparrow} + \sum_{\mathbf{m}=0}^{\infty} n_{\mathbf{m}}^{\uparrow\downarrow}, \quad (5.4a)$$

$$N_{\downarrow}^0 = \sum_{\mathbf{l}=0}^{\infty} n_{\mathbf{l}}^{\downarrow} + \sum_{\mathbf{m}=0}^{\infty} n_{\mathbf{m}}^{\uparrow\downarrow}. \quad (5.4b)$$

Una vez definida la energía para cada microestado accesible al sistema, y de la expresión para la función de partición:

$$\begin{aligned} Z_N(T, \mathcal{V}) &= \sum_{\{s\}} e^{-\beta E_{\{s\}}} \\ &= \sum_{\{s\}} e^{-\beta \left( \sum_{\mathbf{k}=0} \epsilon_{\mathbf{k}}^{\uparrow} n_{\mathbf{k}}^{\uparrow} + \sum_{\mathbf{l}=0} \epsilon_{\mathbf{l}}^{\downarrow} n_{\mathbf{l}}^{\downarrow} + \sum_{\mathbf{m}=0} \epsilon_{\mathbf{m}}^{\uparrow\downarrow} n_{\mathbf{m}}^{\uparrow\downarrow} + \epsilon^* N_{\uparrow\downarrow} \right)}, \end{aligned} \quad (5.5)$$

podemos escribir la función de gran partición para la mezcla:

$$\Xi_M(T, \mathcal{V}, \mu_{\uparrow}, \mu_{\downarrow}, \mu_{\uparrow\downarrow}) = \sum_{N_{\uparrow}=0}^{\infty} \sum_{N_{\downarrow}=0}^{\infty} \sum_{N_{\uparrow\downarrow}=0}^{\infty} Z_N(T, \mathcal{V}) e^{\alpha_{\uparrow} N_{\uparrow}} e^{\alpha_{\downarrow} N_{\downarrow}} e^{\alpha_{\uparrow\downarrow} N_{\uparrow\downarrow}}. \quad (5.6)$$

Esta expresión es una extensión de la que vimos en el capítulo 3 para el gas ideal cuántico (ecuación 3.4), aplicada a un gas con tres diferentes tipos de partículas. Donde los parámetros:  $\alpha_{\uparrow}$ ,  $\alpha_{\downarrow}$ ,  $\alpha_{\uparrow\downarrow}$  están relacionados con el potencial químico para cada tipo de partículas de la siguiente manera:

$$\alpha_{\uparrow} = \mu_{\uparrow}/k_B T \quad \text{fermiones} \quad \mathbf{F}_{\uparrow}, \quad (5.7a)$$

$$\alpha_{\downarrow} = \mu_{\downarrow}/k_B T \quad \text{fermiones} \quad \mathbf{F}_{\downarrow}, \quad (5.7b)$$

$$\alpha_{\uparrow\downarrow} = \mu_{\uparrow\downarrow}/k_B T \quad \text{bosones} \quad \mathbf{B}_{\uparrow\downarrow}. \quad (5.7c)$$

Sustituyendo la expresión (5.5) en la función de gran partición, es posible escribirla de la siguiente manera:

$$\Xi_M(T, \mathcal{V}, \mu_{\uparrow}, \mu_{\downarrow}, \tilde{\mu}) = \Xi_{\uparrow}(T, \mathcal{V}, \mu_{\uparrow}) \Xi_{\downarrow}(T, \mathcal{V}, \mu_{\downarrow}) \Xi_{\uparrow\downarrow}(T, \mathcal{V}, \tilde{\mu}), \quad (5.8)$$

donde cada termino tiene la siguiente expresión:

$$\Xi_{\uparrow} = \sum_{N_{\uparrow}} Z_{\uparrow}(T, \mathcal{V}) e^{\alpha_{\uparrow} N_{\uparrow}} \quad Z_{\uparrow}(T, \mathcal{V}) = \sum_{\{s\}} e^{-\beta \left( \sum_{\mathbf{k}=0}^{\infty} \epsilon_{\mathbf{k}}^{\uparrow} n_{\mathbf{k}}^{\uparrow} \right)}, \quad (5.9a)$$

$$\Xi_{\downarrow} = \sum_{N_{\downarrow}} Z_{\downarrow}(T, \mathcal{V}) e^{\alpha_{\downarrow} N_{\downarrow}} \quad Z_{\downarrow}(T, \mathcal{V}) = \sum_{\{s\}} e^{-\beta \left( \sum_{\mathbf{l}=0}^{\infty} \epsilon_{\mathbf{l}}^{\downarrow} n_{\mathbf{l}}^{\downarrow} \right)}, \quad (5.9b)$$

$$\Xi_{\uparrow\downarrow} = \sum_{N_{\uparrow\downarrow}} Z_{\uparrow\downarrow}(T, \mathcal{V}) e^{\tilde{\alpha} N_{\uparrow\downarrow}} \quad Z_{\uparrow\downarrow}(T, \mathcal{V}) = \sum_{\{s\}} e^{-\beta \left( \sum_{\mathbf{m}=0}^{\infty} \epsilon_{\mathbf{m}}^{\uparrow\downarrow} n_{\mathbf{m}}^{\uparrow\downarrow} \right)}. \quad (5.9c)$$

además, hemos empleado la siguiente notación:

$$\tilde{\mu} = \mu_{\uparrow\downarrow} - \epsilon^* \quad (\text{equivalente} \quad \tilde{\alpha} = \alpha_{\uparrow\downarrow} - \beta\epsilon^*). \quad (5.10)$$

De tal manera que identificamos cada uno de los términos de la expresión (5.8), como la función de gran partición correspondiente a cada tipo de partícula:  $\Xi_{\uparrow}(T, \mathcal{V}, \mu_{\uparrow})$  y  $\Xi_{\downarrow}(T, \mathcal{V}, \mu_{\downarrow})$  para los fermiones  $\mathbf{F}_{\uparrow}$  y  $\mathbf{F}_{\downarrow}$  respectivamente, mientras que  $\Xi_{\uparrow\downarrow}(T, \mathcal{V}, \tilde{\mu})$  para los bosones  $\mathbf{B}_{\uparrow\downarrow}$ . Cada una de estas expresiones es idéntica a la función de gran partición para un gas ideal cuántico con un solo tipo de partículas que vimos en el capítulo 3, ecuación (3.4). Entonces el gran potencial para la mezcla, que se define a través de la función de gran partición como:  $\Omega_M = -k_B T \ln \Xi_M$ , tiene la siguiente expresión:

$$\Omega_M(T, \mathcal{V}, \mu_{\uparrow}, \mu_{\downarrow}, \tilde{\mu}) = \Omega_{\uparrow}(T, \mathcal{V}, \mu_{\uparrow}) + \Omega_{\downarrow}(T, \mathcal{V}, \mu_{\downarrow}) + \Omega_{\uparrow\downarrow}(T, \mathcal{V}, \tilde{\mu}), \quad (5.11)$$

donde es posible identificar cada termino como el gran potencial para un gas con un solo tipo de partículas: fermiones para los dos primeros, y bosones para el tercero.

$$\Omega_{\uparrow}(T, \mathcal{V}, \mu_{\uparrow}) = -k_B T \ln \Xi_{\uparrow} \quad \text{fermiones } \mathbf{F}_{\uparrow}, \quad (5.12a)$$

$$\Omega_{\downarrow}(T, \mathcal{V}, \mu_{\downarrow}) = -k_B T \ln \Xi_{\downarrow} \quad \text{fermiones } \mathbf{F}_{\downarrow}, \quad (5.12b)$$

$$\Omega_{\uparrow\downarrow}(T, \mathcal{V}, \tilde{\mu}) = -k_B T \ln \Xi_{\uparrow\downarrow} \quad \text{bosones } \mathbf{B}_{\uparrow\downarrow}. \quad (5.12c)$$

En sección 3.2.2 vimos la expresión para cada uno de ellos (ver ecuaciones (3.23)), en cada potencial de confinamiento, de donde obtenemos las siguiente expresiones:

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad \left\{ \begin{array}{l} \Omega_{\mathfrak{f}} = -k_B T \frac{V}{\lambda_T^3} f_{5/2}(\alpha_{\mathfrak{f}}) \\ \Omega_{\uparrow\downarrow} = -2^{3/2} k_B T \frac{V}{\lambda_T^3} g_{5/2}(\tilde{\alpha}) \end{array} \right. \quad (5.13a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad \left\{ \begin{array}{l} \Omega_{\mathfrak{f}} = -k_B T \left( \frac{k_B T}{\hbar \omega_0} \right)^3 f_4(\alpha_{\mathfrak{f}}) \\ \Omega_{\uparrow\downarrow} = -2^{3/2} k_B T \left( \frac{k_B T}{\hbar \omega_0} \right)^3 g_4(\tilde{\alpha}) \end{array} \right. \quad (5.13b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad \left\{ \begin{array}{l} \Omega_{\mathfrak{f}} = -8\pi k_B T \left( \frac{k_B T}{\lambda_T A_0} \right)^3 f_{11/2}(\alpha_{\mathfrak{f}}) \\ \Omega_{\uparrow\downarrow} = -2^{3/2} 8\pi k_B T \left( \frac{k_B T}{\lambda_T A_0} \right)^3 g_{11/2}(\tilde{\alpha}) \end{array} \right. \quad (5.13c)$$

Donde  $\mathfrak{f}$  representa ( $\uparrow$ ) para los fermiones  $\mathbf{F}_{\uparrow}$ ; y ( $\downarrow$ ) para los fermiones  $\mathbf{F}_{\downarrow}$ . El factor  $2^{3/2}$  en el gran potencial para los bosones, se debe a que la masa de los bosones es el doble que la de los fermiones ( $\lambda_T$  y  $\omega_0$  son proporcionales a  $1/\sqrt{m}$ , ver ecuación 2.9).

### 5.3 Equilibrio químico

Ahora analizaremos cual es la condición de equilibrio que fija el número de partículas de cada especie en la mezcla, para una temperatura dada. Durante el proceso de conversión y reconversión de fermiones a bosones; el sistema se encuentra fuera de equilibrio, ya que la población de ellos esta variando. Sin embargo, a una temperatura fija, esto no se mantienen indefinidamente, y el número de fermiones y de bosones llega a un equilibrio llamado equilibrio químico.

Como la variación de partículas de cada especie no es arbitraria; sino que esta condicionada por la expresión (5.1), entonces:

$$\delta N_{\uparrow} = -\delta N_{\uparrow\downarrow}, \quad (5.14a)$$

$$\delta N_{\downarrow} = -\delta N_{\uparrow\downarrow}. \quad (5.14b)$$

Por otro lado, la variación en la entropía (a volumen y temperatura constante) esta dada por:

$$\begin{aligned} \delta S &= \frac{\partial S_{\uparrow}}{\partial N_{\uparrow}} \delta N_{\uparrow} + \frac{\partial S_{\downarrow}}{\partial N_{\downarrow}} \delta N_{\downarrow} + \frac{\partial S_{\uparrow\downarrow}}{\partial N_{\uparrow\downarrow}} \delta N_{\uparrow\downarrow}, \\ &= \mu_{\uparrow} \delta N_{\uparrow} + \mu_{\downarrow} \delta N_{\downarrow} + \mu_{\uparrow\downarrow} \delta N_{\uparrow\downarrow}. \end{aligned} \quad (5.15)$$

Sustituyendo en esta expresión las relaciones (5.14), junto con la condición de equilibrio termodinámico:  $\delta S = 0$  ( $S$  es máxima), obtenemos que:

$$\mu_{\uparrow\downarrow} = \mu_{\uparrow} + \mu_{\downarrow} \quad (\alpha_{\uparrow\downarrow} = \alpha_{\uparrow} + \alpha_{\downarrow}) \quad (5.16)$$

Esta condición de equilibrio químico no es más que una consecuencia de la conservación de partículas ec. (5.1) y define una relación entre los potenciales químicos para las partículas.

#### 5.3.1 Relaciones termodinámicas

Una vez que hemos obtenido el gran potencial para mezcla, y la relación entre los potenciales químicos de las partículas (equilibrio químico); podemos escribir las ecuaciones que relacionan las diferentes variables termodinámicas (ecuaciones (3.2)):

$$S(T, \mathcal{V}, \mu_{\uparrow}, \mu_{\downarrow}) = \left( \frac{\partial \Omega_M}{\partial T} \right)_{\mathcal{V}, \mu_{\uparrow}, \mu_{\downarrow}}, \quad (5.17a)$$

$$P(T, \mathcal{V}, \mu_{\uparrow}, \mu_{\downarrow}) = \left( \frac{\partial \Omega_M}{\partial \mathcal{V}} \right)_{T, \mu_{\uparrow}, \mu_{\downarrow}}, \quad (5.17b)$$

$$N_{\uparrow}(T, \mathcal{V}, \mu_{\uparrow}) = \left( \frac{\partial \Omega_{\uparrow}}{\partial \mu_{\uparrow}} \right)_{T, \mathcal{V}}, \quad (5.17c)$$

$$N_{\downarrow}(T, \mathcal{V}, \mu_{\downarrow}) = \left( \frac{\partial \Omega_{\downarrow}}{\partial \mu_{\downarrow}} \right)_{T, \mathcal{V}}, \quad (5.17d)$$

$$N_{\uparrow\downarrow}(T, \mathcal{V}, \tilde{\mu}) = \left( \frac{\partial \Omega_{\uparrow\downarrow}}{\partial \tilde{\mu}} \right)_{T, \mathcal{V}}. \quad (5.17e)$$

Donde hemos utilizado las propiedades del gran potencial, ecuación (5.11). Es importante notar que las tres ultimas ecuaciones no son independientes; sino que están relacionadas entre si, mediante las ecuaciones (5.1), que representan la conservación de partículas y que podemos escribir de la siguiente manera:

$$N_{\uparrow}^0 = \left( \frac{\partial \Omega_{\uparrow}}{\partial \mu_{\uparrow}} \right)_{T, \mathcal{V}} + \left( \frac{\partial \Omega_{\uparrow\downarrow}}{\partial \tilde{\mu}} \right)_{T, \mathcal{V}}, \quad (5.18a)$$

$$N_{\downarrow}^0 = \left( \frac{\partial \Omega_{\downarrow}}{\partial \mu_{\downarrow}} \right)_{T, \mathcal{V}} + \left( \frac{\partial \Omega_{\uparrow\downarrow}}{\partial \tilde{\mu}} \right)_{T, \mathcal{V}}. \quad (5.18b)$$

Este par de ecuaciones, como veremos en las siguientes secciones, determinan la temperatura crítica  $T_c$  a la cual se presenta el condensado de Bose-Einstein en los bosones de la mezcla; así como también el potencial químico, como función de la temperatura, para cada tipo de partículas. Para escribir estas ecuaciones, para la mezcla confinada en cada uno de los potenciales externos, es conveniente utilizar las unidades de temperatura de Fermi, definidas a través de las ecuaciones (3.50) que definen la energía de Fermi  $\epsilon_F = k_B T_F$ , de donde obtenemos:

$$\textit{Potencial homogéneo} \quad T_F = \frac{h^2}{2k_B m} \left( 6\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3}, \quad (5.19a)$$

$$\textit{Potencial armónico} \quad T_F = \frac{\hbar}{k_B} \left( 6 \frac{N}{\omega_0^{-3}} \right)^{1/3}, \quad (5.19b)$$

$$\textit{Potencial cuadrupolar} \quad T_F = \frac{1}{k_B} \sqrt[3]{\frac{h^2}{2m} \left( \frac{945}{(16\pi)^2} \frac{N}{A_0^{-3}} \right)^{2/9}}. \quad (5.19c)$$

Donde para la mezcla:  $N = N_{\uparrow}^0 + N_{\downarrow}^0$ ; de esta manera, a partir de las expresiones para el gran potencial de cada tipo de partículas, confinadas en cada uno de los potenciales externos (5.13) las ecuaciones (5.18) se pueden expresar en forma general de la siguiente manera:

$$\frac{N_{\uparrow}^0}{N} = \Gamma(n+1) \left( \frac{T}{T_F} \right)^n \left( f_n(\alpha_{\uparrow}) + 2^{3/2} g_n(\tilde{\alpha}) \right), \quad (5.20a)$$

$$\frac{N_{\downarrow}^0}{N} = \Gamma(n+1) \left( \frac{T}{T_F} \right)^n \left( f_n(\alpha_{\downarrow}) + 2^{3/2} g_n(\tilde{\alpha}) \right). \quad (5.20b)$$

donde  $n = 3/2, 3$  y  $9/2$ ; para el potencial de confinamiento homogéneo, armónico y cuadrupolar respectivamente. Es importante recalcar que  $T_F$  depende únicamente de la densidad de partículas  $N/\mathcal{V}$ .

## 5.4 Temperatura crítica

En la sección 3.4 vimos que la temperatura crítica para un gas de bosones confinado, a partir de la cual se obtiene la fase de condensado Bose-Einstein, se obtiene mediante las ecuaciones (3.38). Se puede ver que en general para un gas de bosones, la ecuación:  $N_B(T, \mathcal{V}, \mu) = (\partial\Omega/\partial\mu)_{T, \mathcal{V}}$  define la temperatura crítica  $T_c$  cuando  $\mu = 0$  (equivalentemente  $\alpha = 0$ ), donde  $N_B$  es el número de bosones que componen al gas; por lo que la ecuación:

$$N_B = \left( \frac{\partial\Omega}{\partial\mu} \right)_{T, \mathcal{V}} \Big|_{T=T_c, \mu=0}, \quad (5.21)$$

define implícitamente la temperatura crítica  $T_c$ , como función de la densidad de partículas  $N_B/\mathcal{V}$  para un gas de bosones. De manera similar se obtiene la temperatura crítica para la mezcla; en este caso, el número de bosones que la componen  $N_{\uparrow\downarrow}$  no es fijo sino que depende de la temperatura. Sin embargo, esta cantidad queda determinada por las ecuaciones (5.18); por lo que la temperatura crítica para la mezcla se obtiene mediante estas ecuaciones; ahora, bajo la condición  $\tilde{\mu} = 0$  ( $\tilde{\alpha} = 0$ ):

$$N_{\uparrow}^0 = \left( \frac{\partial\Omega_{\uparrow}}{\partial\mu_{\uparrow}} \right)_{T, \mathcal{V}} \Big|_{T=T_c, \mu_{\uparrow}=\mu_{\uparrow}^c} + \left( \frac{\partial\Omega_{\uparrow\downarrow}}{\partial\tilde{\mu}} \right)_{T, \mathcal{V}} \Big|_{T=T_c, \tilde{\mu}=0}, \quad (5.22a)$$

$$N_{\downarrow}^0 = \left( \frac{\partial\Omega_{\downarrow}}{\partial\mu_{\downarrow}} \right)_{T, \mathcal{V}} \Big|_{T=T_c, \mu_{\downarrow}=\mu_{\downarrow}^c} + \left( \frac{\partial\Omega_{\uparrow\downarrow}}{\partial\tilde{\mu}} \right)_{T, \mathcal{V}} \Big|_{T=T_c, \tilde{\mu}=0}. \quad (5.22b)$$

Donde  $\mu_{\uparrow}^c$  y  $\mu_{\downarrow}^c$  corresponde al valor de los potenciales químicos para los fermiones en cada estado en  $T = T_c$ , y que están relacionados mediante la condición de equilibrio químico que para este valor de la temperatura toma la forma ( $\tilde{\mu} = \mu_{\uparrow\downarrow} - \epsilon^* = 0$ ):

$$\mu_{\uparrow}^c + \mu_{\downarrow}^c = \epsilon^*. \quad (5.23)$$

Para comprender el significado de la temperatura crítica en la mezcla, regresemos a las ecuaciones (5.18) que determinan el balance que debe haber entre las partículas de diferente especie, que componen la mezcla, en equilibrio termodinámico. Es claro que el número de fermiones en ambos estados, así como el de bosones, depende de la composición inicial de la mezcla:  $N_{\uparrow}^0, N_{\downarrow}^0$ , que consideramos fija. Entonces, el lado derecho de estas ecuaciones se debe balancear de tal forma que se mantenga constante.

Si disminuimos la temperatura (supongamos  $T > T_c$ ), como veremos más adelante, el número de fermiones de cada especie ( $N_{\uparrow} = (\partial\Omega_{\uparrow}/\partial\mu_{\uparrow})_{T,\nu}$ ,  $N_{\downarrow} = (\partial\Omega_{\downarrow}/\partial\mu_{\downarrow})_{T,\nu}$ ) disminuye; mientras que el número de bosones ( $N_{\uparrow\downarrow} = (\partial\Omega_{\uparrow\downarrow}/\partial\tilde{\mu})_{T,\nu}$ ) aumenta. De esta manera, es posible balancear el lado derecho de las ecuaciones y mantenerlo constante. Sin embargo, esto es posible hasta que  $\tilde{\mu} = 0$  ( $\tilde{\alpha} = 0$ ), cuando  $N_{\uparrow\downarrow} = (\partial\Omega_{\uparrow\downarrow}/\partial\tilde{\mu})_{T,\nu}|_{T=T_c, \tilde{\mu}=0}$  alcanza su valor máximo<sup>2</sup>: Esto se debe a que  $N_{\uparrow\downarrow} = (\partial\Omega_{\uparrow\downarrow}/\partial\tilde{\mu})_{T,\nu}$ , representa únicamente la población de los bosones que se hallan en los estados excitados:  $N_{\uparrow\downarrow}^{\epsilon} = (\partial\Omega_{\uparrow\downarrow}/\partial\tilde{\mu})_{T,\nu}$ , que para  $T > T_c$  son casi todos; sin embargo, cuando  $\tilde{\mu} = 0$  alcanzan su valor máximo. Si seguimos disminuyendo la temperatura, se sigue cumpliendo que  $\tilde{\mu} = 0$  y  $N_{\uparrow\downarrow}^{\epsilon}$  disminuye; mientras que los bosones en el estado base (condensado de Bose-Einstein)  $N_0$  aumenta. De esta manera es posible balancear el lado derecho de las ecuaciones y mantenerlo constante; así la condición  $\tilde{\mu} = 0$  marca la transición al condensado de Bose-Einstein para la mezcla. Estos argumentos son muy similares a los que utilizamos con el condensado del gas de bosones (ver sección 3.4).

Es importante notar de las ecuaciones (5.22) que la temperatura crítica para la mezcla depende tanto de la composición de la mezcla ( $N_{\uparrow}^0, N_{\downarrow}^0$ ), así como de la energía de ligadura de los bosones  $\epsilon^*$ .

### 5.4.1 Mezcla balanceada

Analicemos primero la mezcla balanceada:  $N_{\uparrow}^0 = N_{\downarrow}^0$ . En este caso, de las ecuaciones (5.22) y (5.23) se obtiene que:  $\mu_{\uparrow}^c = \mu_{\downarrow}^c = \epsilon^*/2$ , por lo que la temperatura crítica se obtiene de la única ecuación:

$$N_{\uparrow}^0 = \left( \frac{\partial\Omega_{\uparrow}}{\partial\mu_{\uparrow}} \right)_{T,\nu} \Big|_{T=T_c, \mu_{\uparrow}^c=\epsilon^*/2} + \left( \frac{\partial\Omega_{\uparrow\downarrow}}{\partial\tilde{\mu}} \right)_{T,\nu} \Big|_{T=T_c, \tilde{\mu}=0}; \quad (5.24)$$

cuya expresión general para la mezcla confinada, según las ecuaciones (5.20) toma la siguiente forma:

$$\frac{N_{\uparrow}^0}{N} = \Gamma(n+1) \left( \frac{T_c}{T_F} \right)^n \left( f_n(\epsilon^*/2k_B T_c) + 2^{3/2} \zeta(n) \right). \quad (5.25)$$

De esta ecuación se obtiene la temperatura crítica, como función de la energía de ligadura ( $N_{\uparrow}^0/N = 0.5$ ):  $T_c = T_c(\epsilon^*)$ , para cada uno de los potenciales de confinamiento. La figura 5.2 contienen estas gráficas. Como se puede ver de estas gráficas, la temperatura crítica para  $\epsilon^* < 0$  varía muy poco y se mantiene casi constante; en este caso, de la ecuación (5.25)

<sup>2</sup>Ver sección 3.4, ecuaciones (3.37)

podemos verificar el límite al cual tiende la temperatura crítica cuando  $\epsilon^* \rightarrow -\infty$ , ya que en este caso  $f_n(\alpha) \approx e^\alpha$ . Sustituyendo esta aproximación en la ecuación (5.25) obtenemos los siguientes valores:

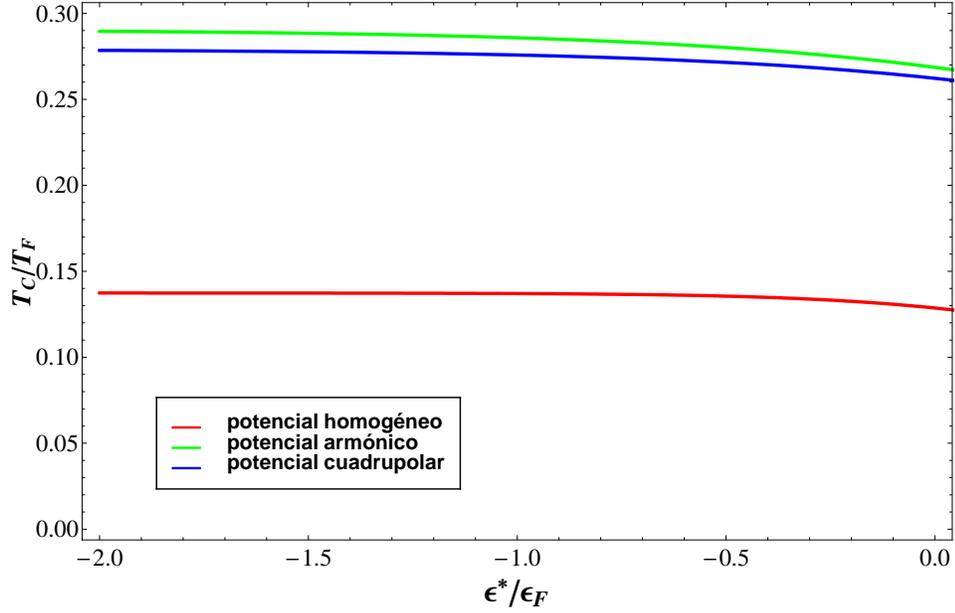
$$\begin{array}{ll}
 \textit{Potencial homogéneo} & \lim_{\epsilon^* \rightarrow -\infty} T_c \approx 0.137 \\
 \textit{Potencial armónico} & \lim_{\epsilon^* \rightarrow -\infty} T_c \approx 0.290 \\
 \textit{Potencial cuadrupolar} & \lim_{\epsilon^* \rightarrow -\infty} T_c \approx 0.279
 \end{array} \tag{5.26}$$

de esta misma ecuación obtenemos el valor de  $T_c$  para  $\epsilon^* = 0$ ; en este caso  $f_n(0)$  tiene un valor finito y simplemente despejamos:

$$\frac{T_c(0)}{T_F} = \left( \frac{N}{N_\uparrow^0} \Gamma(n+1) \left[ f_n(0) + 2^{3/2} \zeta(n) \right] \right)^{-1/n}. \tag{5.27}$$

A partir del cual se obtienen los siguientes valores, para cada uno de los potenciales de confinamiento:

$$\begin{array}{ll}
 \textit{Potencial homogéneo} & \frac{T_c(0)}{T_F} \simeq 0.129 \\
 \textit{Potencial armónico} & \frac{T_c(0)}{T_F} \simeq 0.269 \\
 \textit{Potencial cuadrupolar} & \frac{T_c(0)}{T_F} \simeq 0.262
 \end{array} \tag{5.28}$$



**Figura 5.2:** Temperatura crítica en función de la energía de ligadura ( $\epsilon^* \leq 0$ ) para una mezcla balanceada ( $N_{\uparrow}^0 = N_{\downarrow}^0$ ) confinada en cada uno de los potenciales de externos.

### 5.4.2 Mezcla desbalanceada

Para la mezcla desbalanceada:  $N_{\uparrow}^0 \neq N_{\downarrow}^0$ , la temperatura crítica esta determinada estrictamente por el par de ecuaciones (5.22). Sustituyendo en estas ecuaciones la condición de equilibrio químico (5.23), obtenemos las siguientes expresiones para la mezcla confinada:

$$\frac{N_{\uparrow}^0}{N} = \Gamma(n+1) \left( \frac{T_c}{T_F} \right)^n \left( f_n [(\epsilon^* - \mu_{\uparrow}^c)/k_B T_c] + 2^{3/2} \zeta(n) \right), \quad (5.29a)$$

$$\frac{N_{\downarrow}^0}{N} = \Gamma(n+1) \left( \frac{T_c}{T_F} \right)^n \left( f_n(\mu_{\downarrow}^c/k_B T_c) + 2^{3/2} \zeta(n) \right). \quad (5.29b)$$

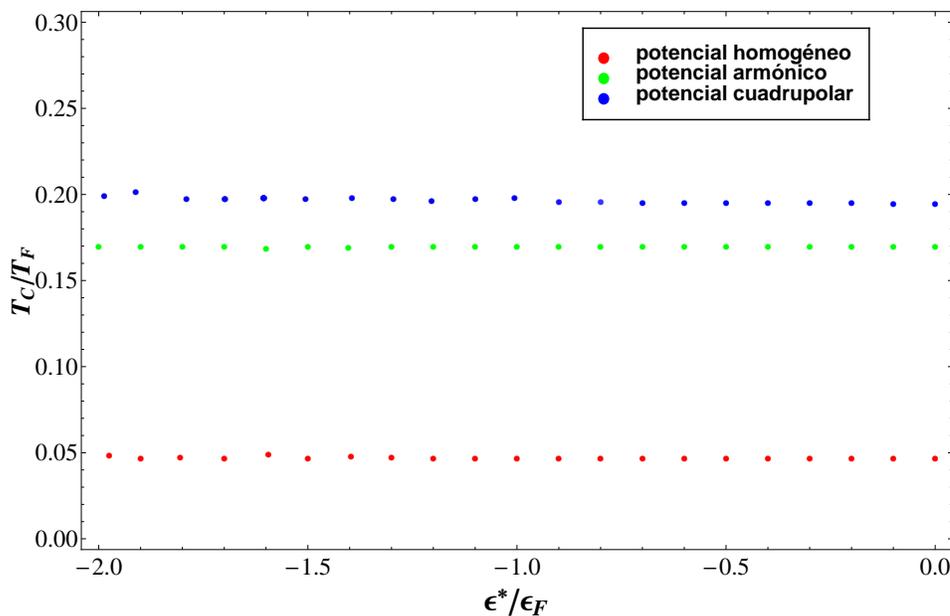
Este par de ecuaciones determina la temperatura crítica para la mezcla desbalanceada, como función de la energía de ligadura y de la composición inicial  $T_c = T_c(\epsilon^*, N_{\uparrow}^0, N_{\downarrow}^0)$ , para cada uno de los potenciales de confinamiento. La figura 5.3 contiene estas gráficas para la composición  $N_{\uparrow}^0/N = 0.9$ ,  $N_{\downarrow}^0/N = 0.1$ . Podemos notar que las curvas son semejantes a las de la mezcla balanceada. De igual forma que hicimos con la mezcla balanceada, podemos determinar el valor límite de la temperatura crítica cuando  $\epsilon^* \rightarrow -\infty$  (en este caso  $f_n(\alpha) \approx e^\alpha$ ), para la composiciones inicial  $N_{\uparrow}^0/N = 0.9$ ,  $N_{\downarrow}^0/N = 0.1$ :

|                              |   |
|------------------------------|---|
| <i>Potencial homogéneo</i>   | $\lim_{\epsilon^* \rightarrow -\infty} T_c \approx 0.049$ |
| <i>Potencial armónico</i>    | $\lim_{\epsilon^* \rightarrow -\infty} T_c \approx 0.170$ |
| <i>Potencial cuadrupolar</i> | $\lim_{\epsilon^* \rightarrow -\infty} T_c \approx 0.203$ |

Podemos notar que estos valores son menores a los de la mezcla balanceada (5.26). Para determinar el valor de  $T_c$  en  $\epsilon^* = 0$ , es necesario resolver el sistema de ecuaciones (5.29) con  $\epsilon^* = 0$ ; en cuyo caso, mediante un cálculo numérico obtenemos los siguientes valores, para la misma composición:

|                              |                                   |
|------------------------------|-----------------------------------|
| <i>Potencial homogéneo</i>   | $\frac{T_c(0)}{T_F} \simeq 0.036$ |
| <i>Potencial armónico</i>    | $\frac{T_c(0)}{T_F} \simeq 0.146$ |
| <i>Potencial cuadrupolar</i> | $\frac{T_c(0)}{T_F} \simeq 0.167$ |

(5.30)



**Figura 5.3:** Temperatura crítica en función de la energía de ligadura ( $\epsilon^* \leq 0$ ) para una mezcla desbalanceada con la composición:  $N_{\uparrow}^0 = 0.9$ ,  $N_{\downarrow}^0 = 0.1$

## 5.5 Potenciales químicos

En el capítulo 3 vimos que una de las principales propiedades del gas ideal cuántico es el comportamiento del potencial químico como función de la temperatura. Esto se debe a que ello determina el comportamiento de las función de Bose y de Fermi como funciones de  $\alpha$  ( $\alpha = \mu/k_B T$ ). Estas funciones a su vez determinan las variables termodinámica: presión, entropía, energía interna y calor específico. Para la mezcla, tiene la misma importancia determinar cada uno de los potenciales químicos ( $\mu_\uparrow, \mu_\downarrow, \mu_{\uparrow\downarrow}$ ) como función de la temperatura; más aún, en este caso determinan la composición de la mezcla en equilibrio ( $N_\uparrow, N_\downarrow, N_{\uparrow\downarrow}$ ) al variar la temperatura.

Antes de analizar el comportamiento del potencial químico para cada tipo de partículas que componen la mezcla conviene recordar algunas de las propiedades del potencial químico para el gas de bosones y de fermiones, que vimos en el capítulo 3. En este caso, el potencial químico como función de la temperatura y la densidad de partículas  $N/\mathcal{V}$  queda determinado por la ecuación  $N(T, \mathcal{V}, \mu) = (\partial\Omega/\partial\mu)_{T, \mathcal{V}}$ . Para el gas de bosones el potencial químico es siempre negativo o cero:  $\mu < 0$ , para  $T > T_c$ ; y  $\mu = 0$ , para  $T \leq T_c$ . Mientras que para el gas de fermiones el potencial químico puede ser negativo o positivo; además en  $T = 0$ , es igual a la energía de Fermi:  $\mu(T = 0) = \epsilon_F$ . En las figuras 3.5 y 3.6, del capítulo 3, se pueden apreciar mejor estas propiedades; cada una de ellas contiene las gráficas del potencial químico como función de la temperatura, en cada potenciales de confinamiento, para el gas de bosones y de fermiones respectivamente.

Ahora bien, para la mezcla existe la siguiente relación entre los potenciales químicos:  $\mu_\uparrow + \mu_\downarrow = \mu_{\uparrow\downarrow}$  (equilibrio químico). Entonces  $\mu_\uparrow$  y  $\mu_\downarrow$ , se obtienen mediante el par de ecuaciones (5.18); y  $\mu_{\uparrow\downarrow}$  se obtiene de la condición de equilibrio químico. De esta manera, es posible determinar a cada uno de los potenciales químicos de las partículas que conforman la mezcla. Para analizar el comportamiento de los potenciales químicos, es conveniente distinguir los dos regímenes de temperatura:  $T > T_c$ , cuando no hay condensado de Bose-Einstein en los bosones de la mezcla; y  $T \leq T_c$ , cuando hay fase condensada.

En el primer caso:  $\mathbf{T} > \mathbf{T}_c$ , si sustituimos la relación de equilibrio químico en las ecuaciones (5.18), quedan de la siguiente manera:

$$N_\uparrow^0 = \left( \frac{\partial\Omega_\uparrow}{\partial\mu_\uparrow} \right)_{T, \mathcal{V}} + \left( \frac{\partial\Omega_{\uparrow\downarrow}}{\partial\tilde{\mu}} \right)_{T, \mathcal{V}} \Big|_{\mu_\uparrow + \mu_\downarrow - \epsilon^*}, \quad (5.31a)$$

$$N_\downarrow^0 = \left( \frac{\partial\Omega_\downarrow}{\partial\mu_\downarrow} \right)_{T, \mathcal{V}} + \left( \frac{\partial\Omega_{\uparrow\downarrow}}{\partial\tilde{\mu}} \right)_{T, \mathcal{V}} \Big|_{\mu_\uparrow + \mu_\downarrow - \epsilon^*}. \quad (5.31b)$$

Este par de ecuaciones determinan los potenciales químicos para ambos tipos de fermiones:  $\mu_\uparrow = \mu_\uparrow(T, N_\uparrow^0, N_\downarrow^0, \epsilon^*)$ ,  $\mu_\downarrow = \mu_\downarrow(T, N_\uparrow^0, N_\downarrow^0, \epsilon^*)$ .

Por otro lado, en el régimen condensado:  $\mathbf{T} \leq \mathbf{T}_c$ , sabemos que se debe satisfacer que  $\tilde{\mu} = 0$  (equivalentemente  $\mu_\uparrow + \mu_\downarrow - \epsilon^* = 0$ ). Además en este régimen, el número total de bosones  $N_{\uparrow\downarrow}$  viene dado por los bosones que se encuentran en el condensado  $N_0$ , más los

bosones en los estados excitados  $N_{\uparrow\downarrow}^{\epsilon} = (\partial\Omega_{\uparrow\downarrow}/\partial\tilde{\mu})_{T,\nu}|_{\tilde{\mu}=0}$ ; por lo que las ecuaciones (5.31) se escriben de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} N_{\uparrow}^0 &= \left( \frac{\partial\Omega_{\uparrow}}{\partial\mu_{\uparrow}} \right)_{T,\nu} + N_0 + \left( \frac{\partial\Omega_{\uparrow\downarrow}}{\partial\tilde{\mu}} \right)_{T,\nu} \Big|_{\tilde{\mu}=0}, \\ N_{\downarrow}^0 &= \left( \frac{\partial\Omega_{\downarrow}}{\partial\mu_{\downarrow}} \right)_{T,\nu} + N_0 + \left( \frac{\partial\Omega_{\uparrow\downarrow}}{\partial\tilde{\mu}} \right)_{T,\nu} \Big|_{\tilde{\mu}=0}. \end{aligned}$$

Sí restamos ambas ecuaciones más la restricción  $\tilde{\mu} = 0$ , obtenemos el siguiente par de ecuaciones que determinan a los potenciales químicos:  $\mu_{\uparrow}(T, N_{\uparrow}^0, N_{\downarrow}^0, \epsilon^*)$ ,  $\mu_{\downarrow}(T, N_{\uparrow}^0, N_{\downarrow}^0, \epsilon^*)$ , en el régimen  $T \leq T_c$ :

$$N_{\uparrow}^0 - N_{\downarrow}^0 = \left( \frac{\partial\Omega_{\uparrow}}{\partial\mu_{\uparrow}} \right)_{T,\nu} - \left( \frac{\partial\Omega_{\downarrow}}{\partial\mu_{\downarrow}} \right)_{T,\nu}, \quad (5.32a)$$

$$\mu_{\uparrow} + \mu_{\downarrow} - \epsilon^* = 0. \quad (5.32b)$$

### 5.5.1 Mezcla balanceada

Para la mezcla balanceada ( $N_{\uparrow}^0 = N_{\downarrow}^0$ ), se obtiene que:  $\mu_{\uparrow} = \mu_{\downarrow}$ , en ambos regímenes de temperatura; esto se puede ver de las ecuaciones (5.31) y (5.32). De esto, es inmediato que en el régimen  $T \leq T_c$  los potenciales químicos tienen el valor constante:

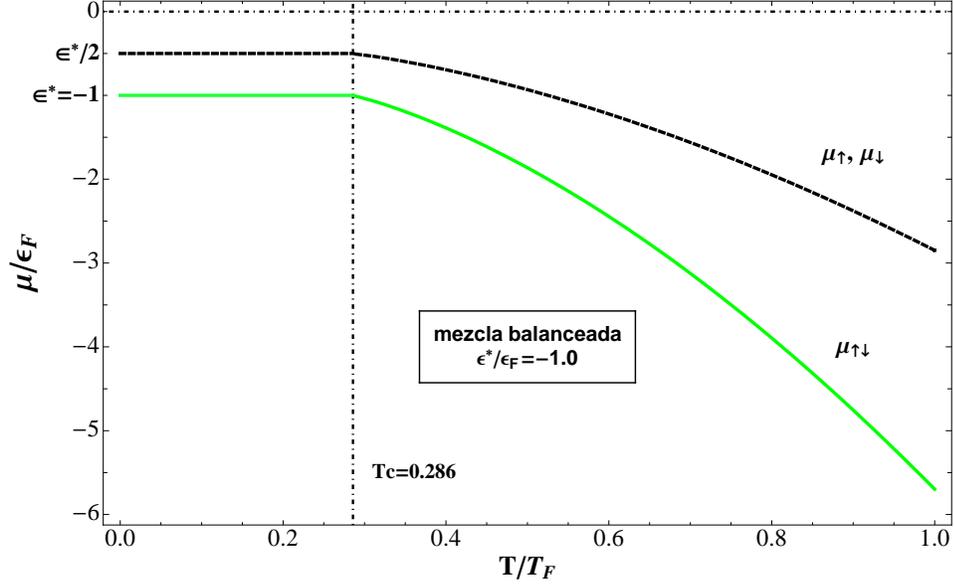
$$\mu_{\uparrow}(T \leq T_c, \epsilon^*) = \mu_{\downarrow}(T \leq T_c, \epsilon^*) = \frac{\epsilon^*}{2}, \quad (5.33a)$$

$$\mu_{\uparrow\downarrow}(T \leq T_c, \epsilon^*) = \epsilon^*. \quad (5.33b)$$

Por otro lado en el régimen  $T > T_c$ , el sistema de ecuaciones (5.31) se reduce a la única ecuación  $N_{\uparrow}^0 = (\partial\Omega_{\uparrow}/\partial\mu_{\uparrow})_{T,\nu} + (\partial\Omega_{\uparrow\downarrow}/\partial\mu_{\uparrow})_{T,\nu}|_{2\mu_{\uparrow} - \epsilon^*}$ , que para la mezcla confinada tiene la siguiente forma:

$$\frac{N_{\uparrow}^0}{N} = \Gamma(n+1) \left( \frac{T}{T_F} \right)^n \left( f_n(\alpha_{\uparrow}) + 2^{3/2} g_n(2\alpha_{\uparrow} - \epsilon^*) \right). \quad (5.34)$$

Como la mezcla es balanceada, entonces  $N_{\uparrow}^0/N = 1/2$ ; de tal forma que con esta ecuación se determina  $\mu_{\uparrow}(T, \epsilon^*)$ . La figura 5.4 contienen las gráficas de  $\mu_{\uparrow}(T) = \mu_{\downarrow}(T)$ , así como de  $\mu_{\uparrow\downarrow}(T)$ , para el potencial armónico  $n = 3$  (las del potencial homogéneo y cuadrupolar son cualitativamente idénticas) con el valor  $\epsilon^* = -\epsilon_F$ .



**Figura 5.4:** Potenciales químicos de una mezcla balanceada ( $N_{\uparrow}^0 = N_{\downarrow}^0$ ), para el valor de  $\epsilon^* = -\epsilon_F$ .

### 5.5.2 Mezcla desbalanceada

Para la mezcla desbalanceada ( $N_{\uparrow}^0 \neq N_{\downarrow}^0$ ), ambos potenciales químicos  $\mu_{\uparrow}$ ,  $\mu_{\downarrow}$ , quedan determinados estrictamente por el sistema de ecuaciones (5.31) en el régimen  $T > T_c$ ; cuyas expresiones generales para la mezcla confinada tienen la siguiente forma:

$$\frac{N_{\uparrow}^0}{N} = \Gamma(n+1) \left( \frac{T}{T_F} \right)^n \left( f_n(\alpha_{\uparrow}) + 2^{3/2} g_n(\alpha_{\uparrow} + \alpha_{\downarrow} - \epsilon^*) \right), \quad (5.35a)$$

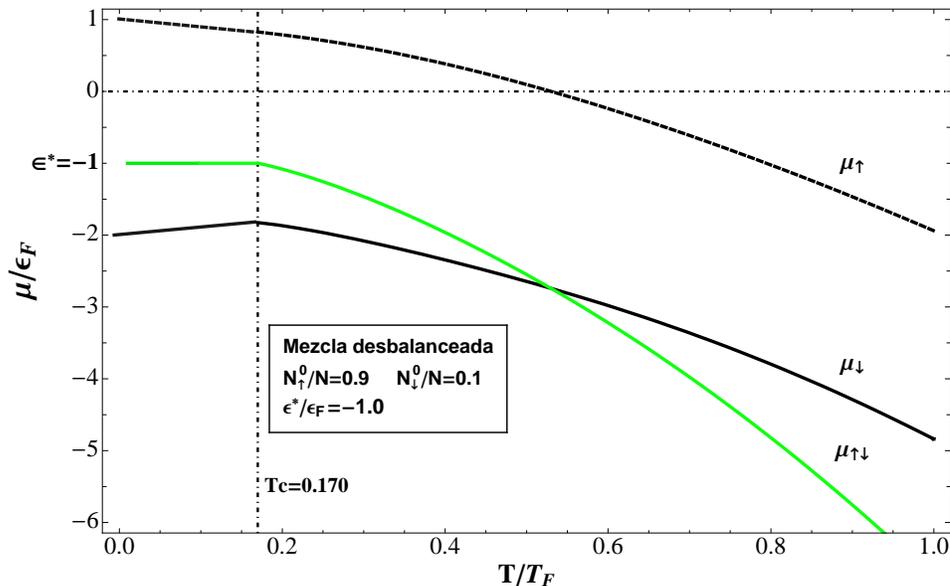
$$\frac{N_{\downarrow}^0}{N} = \Gamma(n+1) \left( \frac{T}{T_F} \right)^n \left( f_n(\alpha_{\downarrow}) + 2^{3/2} g_n(\alpha_{\uparrow} + \alpha_{\downarrow} - \epsilon^*) \right). \quad (5.35b)$$

Mientras que en el régimen  $T \leq T_c$ , los potenciales químicos quedan determinados por el sistema de ecuaciones (5.32); cuya expresión general para la mezcla confinada tiene la forma:

$$\frac{N_{\uparrow}^0 - N_{\downarrow}^0}{N} = \Gamma(n+1) \left( \frac{T}{T_F} \right)^n \left( f_n(\alpha_{\uparrow}) - f_n(\alpha_{\downarrow}) \right), \quad (5.36a)$$

$$\mu_{\uparrow} + \mu_{\downarrow} - \epsilon^* = 0. \quad (5.36b)$$

La figura 5.5 contiene las gráficas  $\mu_{\uparrow}(T)$  y  $\mu_{\downarrow}(T)$  para la composición inicial  $N_{\uparrow}^0/N = 0.9$ ,  $N_{\downarrow}^0/N = 0.1$ , con el valores  $\epsilon^* = -\epsilon_F$ .



**Figura 5.5:** Potenciales químicos de una mezcla desbalanceada ( $N_{\uparrow}^0/N = 0.9$ ,  $N_{\downarrow}^0/N = 0.1$ ), para el valor de  $\epsilon^* = -\epsilon_F$ .

## 5.6 Composición de la mezcla en equilibrio

Para finalizar el análisis de la mezcla, en esta sección estudiaremos cual es la composición de la mezcla en equilibrio ( $N_{\uparrow}$ ,  $N_{\downarrow}$ ,  $N_{\uparrow\downarrow}$ ) al variar la temperatura. Recordemos que esta composición no es arbitraria, ya que únicamente dos fermiones en diferente estado pueden formar un bosón y viceversa, además de la restricción en la composición inicial de fermiones ( $N_{\uparrow}^0$ ,  $N_{\downarrow}^0$ ); de tal forma que la composición de la mezcla, para cualquier valor de la temperatura, debe satisfacer las siguientes ecuaciones:

$$N_{\uparrow} = N_{\uparrow}^0 - N_{\uparrow\downarrow}, \quad (5.37a)$$

$$N_{\downarrow} = N_{\downarrow}^0 - N_{\uparrow\downarrow}. \quad (5.37b)$$

Donde, recordemos que  $N_{\uparrow}^0$  y  $N_{\downarrow}^0$  son cantidades fijas. En la sección anterior estudiamos la dependencia de los potenciales químicos con la temperatura, para cada tipo de partículas ( $\mu_{\uparrow}$ ,  $\mu_{\downarrow}$ ,  $\mu_{\uparrow\downarrow}$ ); a partir de los cuales, el número de fermiones en cada estado, como función de la temperatura, se obtienen mediante las ecuaciones (5.17c) y (5.17d); que al tratarse de fermiones, son validas para cualquier valor de la temperatura ( $T \leq T_c$ ,  $T > T_c$ ) y sus expresiones en unidades de temperatura de Fermi, para la mezcla confinada, tiene la forma:

$$\frac{N_{\uparrow}}{N} = \Gamma(n+1) \left( \frac{T}{T_F} \right)^n f_n(\alpha_{\uparrow}), \quad (5.38a)$$

$$\frac{N_{\downarrow}}{N} = \Gamma(n+1) \left( \frac{T}{T_F} \right)^n f_n(\alpha_{\downarrow}). \quad (5.38b)$$

En el caso de los bosones hay que distinguir entre los dos regímenes de temperatura: para  $\mathbf{T} > \mathbf{T}_c$ , la mayoría de los bosones se hallan en los estado excitados por lo que el número de bosones se obtiene mediante la ecuación (5.17e), que para la mezcla confinada tiene la forma:

$$\frac{N_{\uparrow\downarrow}}{N} = \Gamma(n+1) \left( \frac{T}{T_F} \right)^n g_n(\tilde{\alpha}); \quad (5.39)$$

mientras que para  $\mathbf{T} \leq \mathbf{T}_c$ , el número de bosones en el estado base comienza a ser apreciable, por lo que es necesario contabilizar tanto a los bosones del estado base  $N_0$ , así como a los de los estados excitados  $N_{\uparrow\downarrow}^\epsilon$  que vienen dados por la ecuación anterior pero con  $\tilde{\alpha} = 0$  (recordemos que en este régimen  $\tilde{\alpha} = 0$ ):

$$\frac{N_{\uparrow\downarrow}^\epsilon}{N} = \Gamma(n+1) \left( \frac{T}{T_F} \right)^n g_n(0), \quad (5.40)$$

mientras que el número de bosones en el estado base  $N_0$ , se obtiene simplemente de las ecuaciones (5.37), en las que el número total de bosones  $N_{\uparrow\downarrow}$  es la suma de los que se hallan en el estado base más los de los estados excitados:  $N_{\uparrow\downarrow} = N_0 + N_{\uparrow\downarrow}^\epsilon$ , por lo que estas ecuaciones se escriben de la siguiente manera:

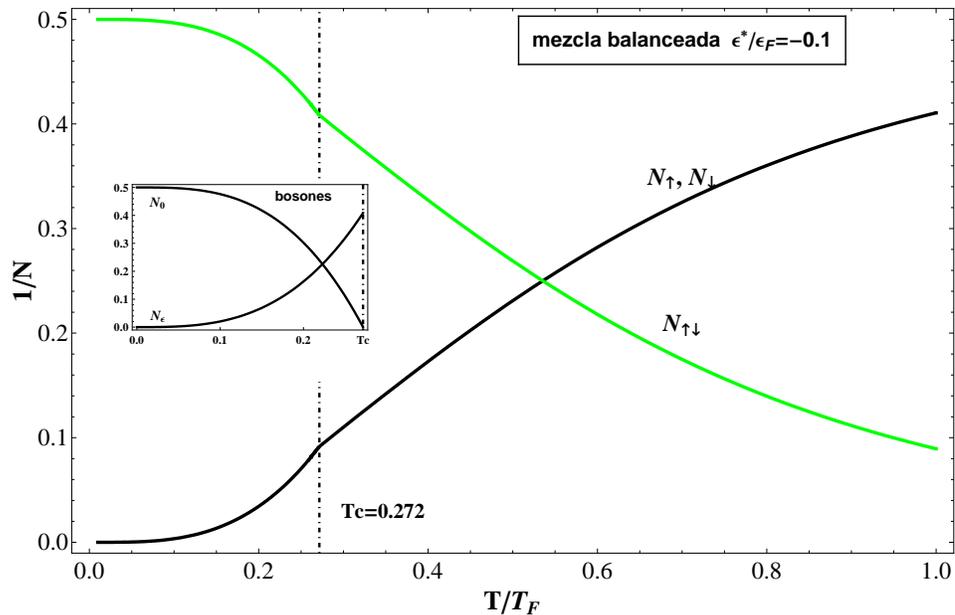
$$\begin{aligned} N_{\uparrow} &= N_{\uparrow}^0 - (N_{\uparrow\downarrow}^\epsilon + N_0), \\ N_{\downarrow} &= N_{\downarrow}^0 - (N_{\uparrow\downarrow}^\epsilon + N_0). \end{aligned}$$

De donde, si las sumamos, obtenemos el número de bosones en el condensado  $N_0$ :

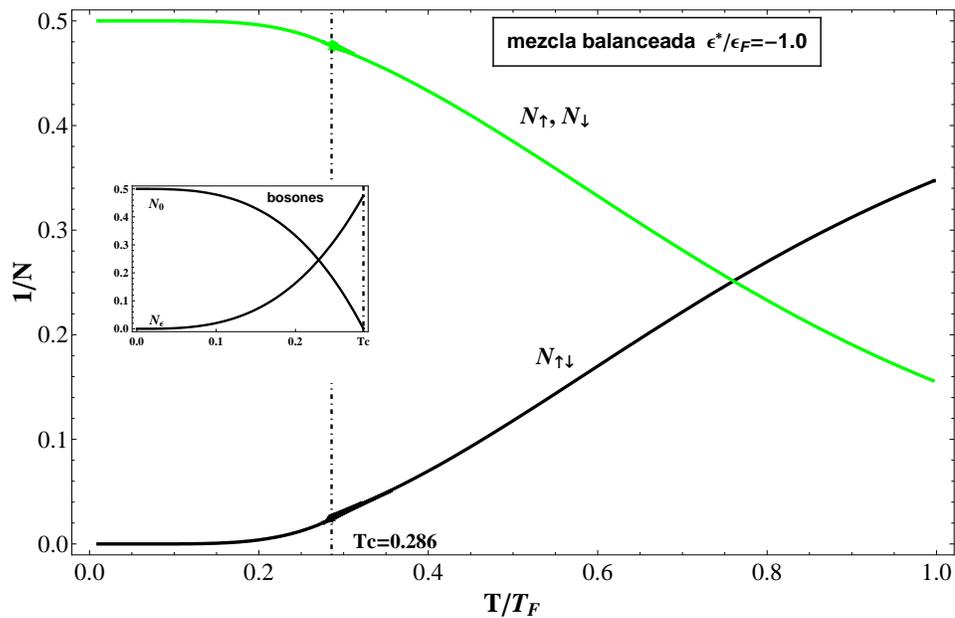
$$N_0 = \frac{1}{2}(N_{\uparrow}^0 + N_{\downarrow}^0 - N_{\uparrow} - N_{\downarrow} - 2N_{\uparrow\downarrow}^\epsilon). \quad (5.42)$$

Como mencionamos al principio del capítulo, cuando  $N_{\uparrow}^0 = N_{\downarrow}^0$  entonces la mezcla es balanceada ya que entonces tendremos que  $N_{\uparrow} = N_{\downarrow}$  para cualquier valor de la temperatura. En las figuras 5.6 y 5.7 se muestran como varía la composición de partícula en la mezcla al variar la temperatura, cuando la mezcla es balanceada, para los valores  $\epsilon^* = -0.1\epsilon_F$  y  $\epsilon^* = -\epsilon_F$ , respectivamente. Por otro lado, para la mezcla desbalanceada, en las figuras 5.8 y 5.9, contiene las gráficas para la composición inicial  $N_{\uparrow}^0/N = 0.8$ ,  $N_{\downarrow}^0/N = 0.2$ , con los valores de  $\epsilon^* = -0.1$  y  $\epsilon^* = -1.0$ .

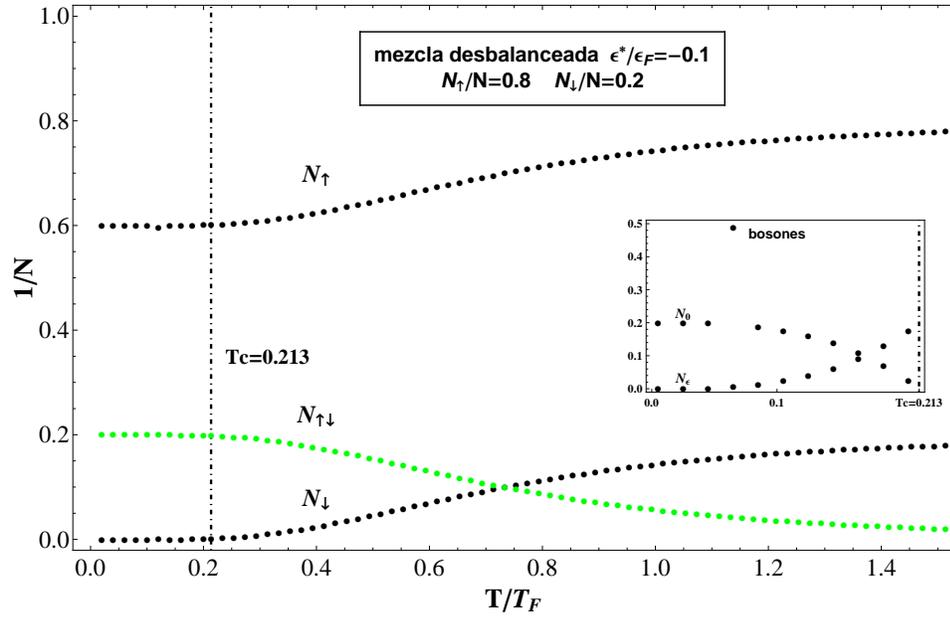
En general se puede ver de estas gráficas que conforme la temperatura es menor, mayor población de bosones hay en la mezcla y en  $T = 0$ , la población de bosones es la máxima posible; en el caso de la mezcla balanceada el número total de bosones es  $N_{\uparrow\downarrow} = N/2$ , donde  $N = N_{\uparrow}^0 + N_{\downarrow}^0$ , mientras que en la mezcla desbalanceada (con la composición  $N_{\uparrow}^0/N = 0.8$ ,  $N_{\downarrow}^0/N = 0.2$ )  $N_{\uparrow\downarrow} = 0.2N$ .



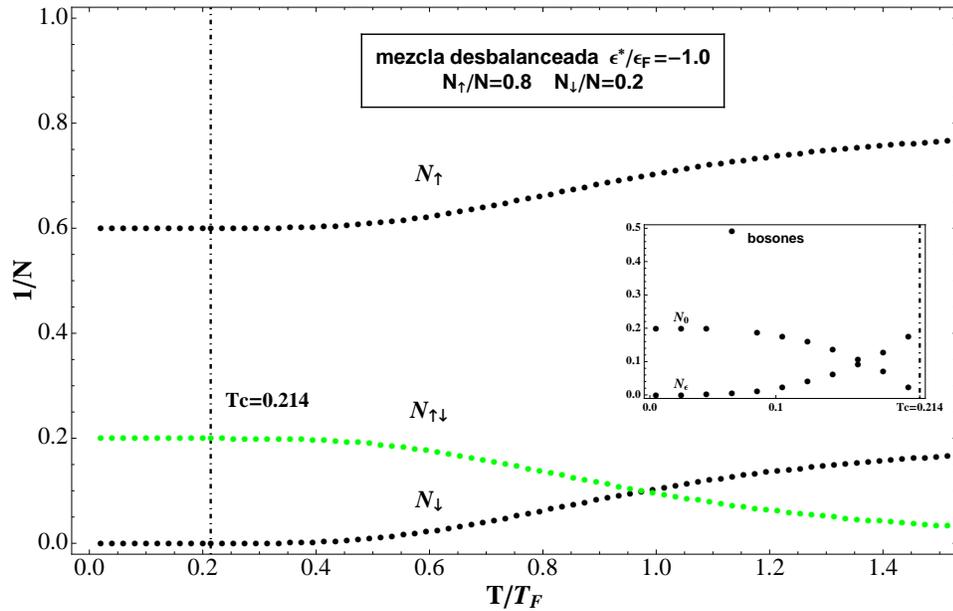
**Figura 5.6:** Composición de la mezcla en función de la temperatura (mezcla balanceada) con una energía de ligadura entre fermiones:  $\epsilon^* = -0.1\epsilon_F$ .



**Figura 5.7:** Composición de la mezcla en función de la temperatura (mezcla balanceada) con una energía de ligadura entre fermiones:  $\epsilon^* = -\epsilon_F$ .



**Figura 5.8:** Composición de la mezcla en función de la temperatura (mezcla desbalanceada:  $N_\uparrow^0/N = 0.8$ ,  $N_\downarrow^0/N = 0.2$ ) con una energía de ligadura entre fermiones:  $\epsilon^* = -0.1\epsilon_F$ .



**Figura 5.9:** Composición de la mezcla en función de la temperatura (mezcla desbalanceada:  $N_\uparrow^0/N = 0.8$ ,  $N_\downarrow^0/N = 0.2$ ) con una energía de ligadura entre fermiones:  $\epsilon^* = -\epsilon_F$ .

# CAPÍTULO 6

## Conclusiones

La motivación de esta tesis ha sido la serie de experimentos que se vienen realizando con gases atómicos a muy bajas temperaturas; en especial, la obtención del condensado de Bose-Einstein y el gas degenerado de Fermi, así como la obtención de una fase condensada de Bose-Einstein con bosones moleculares, a partir de una mezcla de fermiones en dos estados de espín diferentes ( $\uparrow$ ,  $\downarrow$ ). En el capítulo 2, se hizo una breve revisión de como es posible el enfriamiento de los gases atómicos a temperaturas del orden de nanokelvins, a partir de la interacción entre los átomos y un campo de radiación generado por láseres; este campo "frena" a los átomos disminuyendo su velocidad por lo que el gas consigue enfriarse. Una de las principales características es que el confinamiento de estos gases se obtiene mediante potenciales externos de tipo armónico y cuadrupolar, razón por la cual en esta tesis se analizaron los gases confinados en este tipo de potenciales.

Así, en el capítulo 3 se analizó la termodinámica del gas de bosones y de fermiones, confinado en cada uno de los potenciales externos: homogéneo, armónico y cuadrupolar. En este capítulo pudimos ver la semejanza que hay en las propiedades del gas confinado en los tres potenciales externos. Así por ejemplo, en el límite de **altas temperaturas**, se recuperan las propiedades del gas ideal clásico; a continuación, se presenta un breve resumen de estos resultados:

**Ecuación del gas ideal:** para los tres potenciales de confinamiento se obtuvo la ecuación general:  $P\mathcal{V} = Nk_B T$ , donde  $\mathcal{V}$  representa el volumen armónico  $\omega_0^{-1}$  y el volumen cuadrupolar  $A_0^{-1}$ , para el gas confinado en el potencial armónico y cuadrupolar respectivamente. Es importante resaltar el papel de estas nuevas variables termodinámicas introducidas recientemente [9], y que juegan el papel de la variable extensiva asociada a los potenciales de confinamiento externo armónico y cuadrupolar; así como su variable conjugada respectiva:  $P_a = (\partial\Omega/\partial\omega_0^{-3})_{T,\mu}$ ,  $P_c = (\partial\Omega/\partial A_0^{-3})_{T,\mu}$ , y que describen adecuadamente la termodinámica del sistema en cuestión.

**Teorema de equipartición de la energía:** Para ambos potenciales de confinamiento se satisfacen el teorema de equipartición de la energía, ver ecuaciones (3.33).

**Calor específico:** para el gas confinado en el potencial armónico se satisface que:

$C_V \sim 3Nk_B$ ; mientras que para el confinamiento en el potencial cuadrupolar:  $C_V \sim 9/2Nk_B$ . Esto es similar al gas ideal clásico confinado en el potencial homogéneo, donde  $C_V \sim 3/2Nk_B$  (ver figuras 3.3 y 3.4).

**Entropía:** para ambos potenciales de confinamiento la entropía tiene la forma general<sup>1</sup> (salvo por factores constantes):

$$\frac{S}{Nk_B} \sim (n + 1) - \ln \left[ \frac{N}{\mathcal{V}T^n} \right],$$

donde  $n = 3$  para gas confinado en el potencial armónico, y  $n = 9/2$  para el potencial cuadrupolar; esto es muy semejante al gas ideal clásico confinado en el potencial homogéneo para el cual  $n = 3/2$ .

Estos resultados aplicables para el régimen de altas temperaturas, son independientes del tipo de partículas que conforman al gas; lo que corrobora la propiedad de *gas ideal clásico*, donde la identidad de las partículas es irrelevante, ya que esta es una propiedad cuántica de las partículas.

Por otro lado, en el régimen de **bajas temperaturas**, donde las propiedades cuánticas de las partículas se hacen más notables; existe diferencias en el comportamiento entre un gas de bosones y uno de fermiones. En el gas de bosones se presenta el fenómeno de condensado de Bose-Einstein, en el cual por debajo de una temperatura crítica  $T_c$ , diferente de cero, la mayoría de las partículas del gas se encuentran en el estado de mínima energía ( $\epsilon_0$ ), lo cual es posible debido a que los bosones no satisfacen el principio de exclusión de Pauli. Para el gas de fermiones los átomos satisfacen este principio por tal motivo en  $T = 0$  (gas degenerado de Fermi) ocupan todos los estados con energía menor o igual a la llamada energía de Fermi  $\epsilon_F$  (ocupan toda la superficie de Fermi); además, debido a la degeneración de los estados cuánticos, hay un número mayor de fermiones con energía de Fermi  $\epsilon_F$  que con energías  $\epsilon < \epsilon_F$ . El condensado de Bose-Einstein se caracteriza por la temperatura crítica  $T_c$ ; mientras que el gas degenerado de Fermi por la energía de Fermi  $\epsilon_F$ . Ambos parámetros dependen únicamente de la densidad de partículas del gas y en general, salvo por factores constantes, tienen la expresión:  $\{T_c, \epsilon_F\} \propto (N/\mathcal{V})^{1/n}$ , donde  $n$  toma los mismos valores dados anteriormente para cada potencial de confinamiento y que seguiremos utilizando. Este comportamiento diferente entre los bosones y fermiones para ocupar los estados energéticos a muy bajas temperaturas, marca notables diferencias en las propiedades termodinámicas para ambos gases, y que a continuación describimos:

**Energía interna:** en  $T = 0$ , la energía interna de un gas de bosones (ecuaciones (3.43)) se anula  $E = 0$ ; esto es de esperarse, ya que para este valor de la temperatura todas las partículas se hallan en el estado de mínima energía:  $\epsilon_0 = 0$ ; contrariamente, para el gas de fermiones (ecuaciones (3.54)) la energía interna en  $T = 0$  tiene un valor diferente de cero  $E(T = 0) = Nn\epsilon_F$ , donde  $n$  depende del potencial de confinamiento, esto se debe a que los fermiones ocupan todos los estados (con energía  $\epsilon \neq 0$ ) dentro de la superficie de Fermi.

**Presión:** debido a que para los tres potenciales de confinamiento y los dos tipos gases, la presión esta relacionada con la energía mediante la expresión:  $E = 3/2P\mathcal{V}$ ; entonces a

---

<sup>1</sup>Ver ecuaciones (3.29)

temperatura cero un gas de bosones no ejerce presión; mientras que un gas de fermiones ejerce la presión:  $P = N\epsilon_F/(n+1)\mathcal{V}$ .

**Potencial químico:** para el gas de bosones el potencial químico se anula por debajo de la temperatura crítica  $T_c$ , en particular cuando  $T = 0$ ; por el contrario, para el gas de fermiones el potencial químico nunca se anula, salvo para un valor de la temperatura, y en  $T = 0$  toma el valor de la energía de Fermi. Salvo por estas diferencias, el potencial químico para ambos tipos de gases se comporta cualitativamente igual; crece (en valor absoluto) como función de la temperatura: a partir de  $T_c$  para el gas de bosones, y a partir de la temperatura para la cual el potencial vale cero para el gas de fermiones. En las figuras 3.5 y 3.6 se puede apreciar mejor el comportamiento del potencial químico, como función de la temperatura, para el gas de bosones y de fermiones, respectivamente.

**Calor específico:** este representa la principal diferencia entre ambos gases; ya que para el gas de bosones, tal como se ve en las figuras 3.3, el calor específico  $C_V$  presenta una discontinuidad en  $T = T_c$  para el gas confinado en el potencial armónico y cuadrupolar; mientras que para el gas confinado en el potencial homogéneo la discontinuidad está en su derivada. Esta es una característica muy importante del gas de bosones, que lo relaciona con otros fenómenos como el de la superfluidez, y que no se presenta en el gas de fermiones. Además para el gas de bosones:  $C_V \propto T^n$ ; y para el gas de fermiones:  $C_V \propto T$  (figuras 3.3 y 3.4).

Es importante mencionar también que para ambos tipos de gases se satisface la tercera ley de la termodinámica:  $\lim_{T \rightarrow 0} S = 0$  (ecuaciones (3.42), (3.53)), independientemente del potencial de confinamiento.

Para finalizar con las propiedades del gas de bosones o fermiones, en el capítulo 4 se determinaron los perfiles de densidad para ambos tipos de gases cuando son confinados en el potencial armónico y cuadrupolar<sup>2</sup>. Es importante resaltar que la única información disponible experimentalmente, sobre las propiedades del gas confinado, es a través de los perfiles de densidad; que como vimos en este capítulo, dependen de la temperatura y del potencial de confinamiento.

Para analizar la **mezcla** de bosones y fermiones se considero un sistema compuesto por fermiones con masa  $m$  en dos estados de espín diferente ( $\uparrow, \downarrow$ ); de tal forma que cuando dos de ellos se ligan con una energía de ligadura  $\epsilon^*$  forman un bosón de masa  $2m$ . Consideramos dos tipos de mezclas: cuando hay igual número de fermiones en cada estado de espín  $N_\uparrow = N_\downarrow$  (mezcla balanceada), y el caso contrario  $N_\uparrow \neq N_\downarrow$  (mezcla desbalanceada).

Una de las principales características para la mezcla es la **Temperatura crítica** a la cual se presenta el condensado de Bose-Einstein en la fracción de bosones en la mezcla; esta temperatura depende de la energía de ligadura  $\epsilon^*$  y del tipo de mezcla (balanceada o desbalanceada). En las figuras 5.2 y 5.3, están las gráficas de la temperatura crítica como función de  $\epsilon^* \leq 0$ , para una mezcla balanceada y una desbalanceada respectivamente. Se puede notar que la temperatura crítica se mantienen casi constante en un valor que dependen únicamente del tipo de mezcla: para la mezcla balanceada toman un valor mayor que para la

<sup>2</sup>En el caso del potencial homogéneo, los perfiles de densidad son constantes para ambos tipos de gases; es decir, hay una distribución uniforme de partículas en el volumen  $V$  del gas. Esto se debe a que en este caso el potencial externo es nulo o constante  $U(\mathbf{r}) = 0$ .

mezcla desbalanceada. Esto se puede entender, ya si extrapolamos este resultado, entonces en el límite cuando solamente hay fermiones en un estado tendremos que  $T_c \approx 0$ , lo cual era de esperar ya que en este caso se trata de un gas de fermiones en el cual es imposible tener condensado de Bose-Einstein.

Por otro lado, el **Potencial químico** para cada tipo de partículas que componen la mezcla deben satisfacer siempre la relación de equilibrio químico:  $\mu_{\uparrow} + \mu_{\downarrow} = \mu_{\uparrow\downarrow}$ . Esta condición tiene como consecuencia que difieran notablemente para  $T \leq T_c$ , según si la mezcla es balanceada o desbalanceada; esto se puede ver de las figuras 5.4 y 5.5. Cuando la mezcla es balanceada el potencial químico de los fermiones en ambos estados son iguales y se mantienen fijos en un valor constante:  $\mu_{\uparrow} = \mu_{\downarrow} = \epsilon^*/2$ ; y de la misma manera sucede con el potencial químico de los bosones:  $\mu_{\uparrow\downarrow} = \epsilon^*$ . Mientras que cuando la mezcla es desbalanceada únicamente el de los bosones se mantiene fijo:  $\mu_{\uparrow\downarrow} = \epsilon^*$ , y el potencial químico para los fermiones varia; de tal manera que se mantenga la relación de equilibrio químico:  $\mu_{\uparrow} + \mu_{\downarrow} = \epsilon^*$ . Así, el potencial químico de los bosones en la mezcla tiene similitudes con su respectivo para un gas de bosones, ya que en ambos casos el potencial químico toma un valor fijo por debajo de  $T_c$ ; en el caso de la mezcla toma el valor  $\mu_{\uparrow\downarrow} = \epsilon^*$ , y para el gas de bosones  $\mu = 0$ .

Finalmente hay que mencionar como se comporta la composición de partículas ( $N_{\uparrow}$ ,  $N_{\downarrow}$ ,  $N_{\uparrow\downarrow}$ ) al variar la temperatura. Es claro que dependerá tanto de la composición inicial de fermiones ( $N_{\uparrow}^0$ ,  $N_{\downarrow}^0$ ), así como de la energía de ligadura  $\epsilon^*$ . Las gráficas 5.6 y 5.7, muestran el caso de la mezcla balanceada ( $N_{\uparrow}^0 = N_{\downarrow}^0$ ) para el valor de  $\epsilon^* = -0.1\epsilon_F$  y  $\epsilon^* = -\epsilon_F$  respectivamente, de una mezcla confinada en el potencial armónico. Es de resaltar que en  $T = 0$  todos los fermiones se han ligado para formar bosones y por lo tanto  $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = 0$ , mientras que  $N_{\uparrow\downarrow} = N/2$ . Por otro lado, en el caso de una mezcla desbalanceada, las figuras 5.8 y 5.9 contienen las gráficas correspondientes a una mezcla con la composición inicial  $N_{\uparrow}^0/N = 0.8$ ,  $N_{\downarrow}^0/N = 0.2$ , para los mismos valores de  $\epsilon^*$  que de la mezcla balanceada; estas gráficas son muy similares a las de la mezcla balanceada, excepto por el hecho de que ahora, como era de esperar, en  $T = 0$  no todos los fermiones se han ligado, sino solamente los compatibles con la mezcla inicial.

En conclusión, de los resultados obtenidos, podemos decir que el comportamiento termodinámico de los gases ideales confinados (bosones o fermiones) en los potenciales armónicos y cuadrupolar es similar al gas ideal confinado en la caja rígida (potencial homogéneo). Este resultado es importante puesto que los experimentos con gases atómicos a bajas temperaturas se realizan confinándolos en potenciales de este tipo. Por otro lado, para la mezcla pudimos ver que es posible obtener el condensado de Bose-Einstein, en los bosones presentes, a partir de una temperatura crítica que depende de la composición de fermiones (de cada especie) presentes en la mezcla y de la energía de ligadura para formar al boson.

# APÉNDICE **A**

## Estados energéticos de partícula confinada (Potencial homogéneo, armónico, cuadrupolar)

Para encontrar los estados energéticos de una partícula confinada en un potencial externo  $U(\mathbf{r})$ , es necesario resolver la ecuación de Schrodinger para este potencial:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}, t) = E\psi(\mathbf{r}, t). \quad (\text{A.1})$$

Donde  $U(\mathbf{r})$  corresponde al potencial externo que confina a la partícula; en nuestro caso: potencial homogéneo (caja cubica de lado  $L$ ), armónico y cuadrupolar:

$$U(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \text{si } x, y, z < L & \text{Potencial homogéneo} \\ \infty & \text{si } x, y, z \geq L & \\ \frac{1}{2}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) & & \text{Potencial armónico} \\ \sqrt{(A_x x)^2 + (A_y y)^2 + (A_z z)^2} & & \text{Potencial cuadrupolar} \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Para el potencial homogéneo se imponen las condiciones de frontera para las soluciones sean periódicas en cada coordenada (con periodo  $L$ ) es decir:  $\psi(x, y, z) = \psi(x + L, y, z) = \psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z + L)$ . De esta forma las soluciones y los estados energéticos de la partícula confinada en el potencial homogéneo están dados por:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (\text{A.3})$$

$$\text{Donde } \mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} (n_x, n_y, n_z), \quad n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2). \quad (\text{A.4})$$

Para el potencial armónico las soluciones y los estados energéticos están dadas por:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \prod_{i=x,y,z} N_{n_i} H_{n_i}(\xi_i) e^{\frac{1}{2}m\xi_i^2 i^2} \quad (\text{A.5})$$

$$\text{Donde } N_{n_i} = \left( \frac{\xi_i}{\sqrt{\pi} 2^{n_i} n_i!} \right)^{1/2}, \quad n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \dots$$

$$\xi_i = \left( \frac{m\omega_i}{\hbar} \right),$$

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \sum_{i=x,y,z} \hbar\omega_0^3 i \left( \frac{1}{2} + n_i \right). \quad (\text{A.6})$$

Para la partícula confinada en el potencial cuadrupolar no existe solución analítica general para la ecuación de Schrodinger, y por lo tanto tampoco hay una expresión para los estados energéticos. En este caso es posible hallar una solución para el estado base, el cual nos interesa para poder determinar los perfiles de densidad de del gas de bosones confinados en este potencial para  $T \leq T_c$ . Para ellos no limitaremos al caso isotrópico ( $A_x = A_y = A_z = A$ ); en este caso, el potencial cuadrupolar tiene simetría radial por lo que es conveniente escribir la ecuación de Schrodinger en coordenadas esféricas y se propone como soluciones  $\Psi(\mathbf{r}) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)R(r)$ . La parte angular corresponden a los armónicos esféricos  $Y_l^m(\theta, \varphi)$ , de esta forma la solución general esta dada por:  $\Psi(\mathbf{r}) = Y_l^m(\theta, \varphi)R(r)$ .

Para el estado base:  $l = 0, m = 0$ ; el armónico esférico correspondiente esta dado por:  $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$ . Entonces únicamente hay que resolver para la parte radial de la ecuación de Schrodinger para el estado base, que después de un cambio de variable:  $R(r) = u(r)/r$ , viene dada por:

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar} (E_0 - Ar) u = 0, \quad (\text{A.7})$$

donde  $E_0$  corresponde a la energía del estado base; esta ecuación es una variante de la ecuación de Airy, por lo que la solución esta dada precisamente por la función de Airy:

$$u(r) = CAi(r - \epsilon) = \frac{C}{\pi} \int_0^\infty \cos\left(\frac{t^3}{3} + (r - \epsilon)t\right) dt. \quad (\text{A.8})$$

La constante  $C$ , se obtiene mediante la normalización:  $\int_0^\infty u(r) d\mathbf{r} = 1$  y el parámetro  $\epsilon$  esta relacionado con la energía del estado base  $E_0$  de la siguiente manera:

---

$$E_0 = \epsilon \left( \frac{A^2 \hbar^2}{2m} \right)^{1/3}. \quad (\text{A.9})$$

El valor de  $\epsilon$  se obtiene exigiendo que la función  $u(r)$  se anule en  $r = 0$ ; esta condición es necesaria para evitar la divergencia de la solución radial:  $R(r) = u(r)/r$ , en  $r = 0$ . Así, la función del estado base de una partícula confinada en el potencial cuadrupolar isotrópico viene dada por:

$$\Psi_0(\mathbf{r}) = \frac{C}{\sqrt{4\pi}} \frac{\text{Ai}(r - \epsilon)}{r}. \quad (\text{A.10})$$

Mediante un cálculo numérico se obtiene que  $C = 1.8496$  y  $\epsilon = 1.01879$ .

# APÉNDICE **B**

## Funciones de Bose y de Fermi

Las funciones de Bose y de Fermi se definen de la siguiente forma:

$$g_n(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty \frac{x^{n-1} dx}{e^{x-\alpha} - 1}, \quad (\text{B.1a})$$

$$f_n(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty \frac{x^{n-1} dx}{e^{x-\alpha} + 1}, \quad (\text{B.1b})$$

donde  $\Gamma(n)$  es la función Gamma con la propiedad:  $\Gamma(n) = (n-1)!$ ; a partir de esta definición para las funciones de Bose y de Fermi, se puede demostrar que es posible escribirlas como una serie, de la siguiente manera:

$$g_n(\alpha) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(e^\alpha)^l}{l^n}, \quad (\text{B.2a})$$

$$f_n(\alpha) = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l-1} \frac{(e^\alpha)^l}{l^n}, \quad (\text{B.2b})$$

de donde es fácil demostrar que tiene la siguiente propiedad:

$$\frac{dg_n(\alpha)}{d\alpha} = g_{n-1}(\alpha), \quad (\text{B.3a})$$

$$\frac{df_n(\alpha)}{d\alpha} = f_{n-1}(\alpha). \quad (\text{B.3b})$$

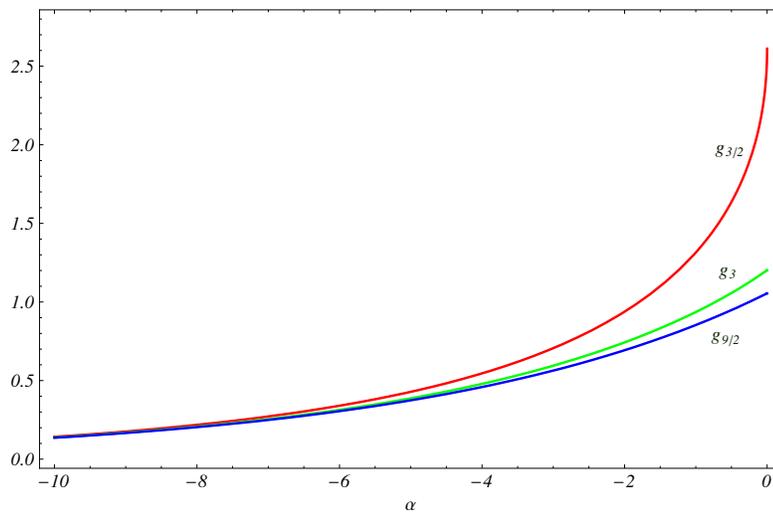
Las funciones de Bose en  $\alpha = 0$ , están relacionadas con las funciones Zeta de Riemann:  $\zeta(l) = \sum_{n=1}^{\infty} 1/n^l$ , de la siguiente manera:

$$g_n(0) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^n} = \zeta(n), \quad n > 1 \quad (\text{B.4})$$

puesto que esta serie converge para  $n > 1$ ; entonces  $g_n(0)$  es finita únicamente para valores  $n > 1$ . Esto es importante, ya que esta relacionado con el condensado de Bose-Einstein a través de la temperatura crítica:  $T_c \propto [\zeta(n)]^{-1/n}$ , donde  $n$  depende del potencial de confinamiento como se puede ver en las ecuaciones (3.39); pero también depende de la dimensionalidad del sistema, por ejemplo para un gas de bosones confinado en un pozo de potencial de dos dimensiones  $n = 1/2$ , por lo que es imposible que se presente el condensado de Bose-Einstein.

Para las funciones de Fermi se puede obtener una aproximación, de gran utilidad, en el regimen de bajas temperaturas ( $\alpha = \mu/k_B T \gg 1$ ):

$$f_n(\alpha) \simeq \frac{\alpha^n}{\Gamma(n+1)} \left( 1 + \frac{\pi^2}{6\alpha^2} n(n-1) \right) \quad (\text{B.5})$$



**Figura B.1:** funciones de Bose  $g_{3/2}(\alpha)$ ,  $g_3(\alpha)$ ,  $g_{9/2}(\alpha)$

# Bibliografía

- [1] London, F., Nature **141**, 643 (1938).
- [2] Tisza, L., Nature **141**, 913 (1938).
- [3] Anderson, M. H., J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, Science **269**, 198 (1995). "Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor below 200 nanokelvin".
- [4] Davis, K. B., M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995). "Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms".
- [5] C. C. Bradley, C. A. Sacket, J. J. Tollet, and R. G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995). "Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions".
- [6] B. de Marco, D. S. de Jin, Science **285**, 1703 (1999). "Onset of Fermi Degeneracy in a Trapped Atomic gas".
- [7] Markus Greiner, Cindy A. Regal, Deborah Jin, Nature **426**, 537 (2003): "Emergence of a molecular Bose-Einstein condensate from a Fermi gas".
- [8] R. R. Silva, et all, Laser Physics **16**, 687 (2006). "Definition and Measurement of Global Thermodynamics Variables for Laser-Cooled Traped Gas".
- [9] Víctor Romero Rochín, Phys. Rev. Lett. **94**, 130601 (2005). "Equation of state of an interacting Bose Gas Confined by a Harmonic Trap: The Role of the "Harmonic" Pressure".
- [10] H. Metcalf, P. van der Straten, J. Opt. Soc. Am. B **20**, 887 (2003): "Laser cooling and trapping of atoms".
- [11] V. Bagnato, D. Pritchard and D. Kleppner, Phys. Rev. A **35**, 4354 (1987): "Bose-Einstein condensation in a external potential".
- [12] D. A. Butts and D. S. Rokhsar, Phys. Rev. A **55**, 4346 (1997): "Trapped Fermi gases".

- 
- [13] J. E. Williams, N. Nygaard, C. W. Clark, *New Journal of Physics* **6**, 123 (2004): "Phase diagrams for an ideal gas mixture of fermionic atoms and bosonic molecules".
- [14] H J Davies and C S Adams, *J. Phys. B: At.Mol.Opt.Phys.* **33**, 4079 (2000): "Transferring laser-cooled atoms to a spatially separated magnetic trap using a far-off resonance optical guide".
- [15] Greiner, Neise, Stöcker, *Thermodynamics and Statistical Mechanics* (New York: Springer-Verlag, 1995).
- [16] Huang K. *Statistical Mechanics* (New York: Wiley, 1987).
- [17] Pathria R K *Statisticals Mechanics* (Oxford: Pergamon, 1997).
- [18] H. J. Metcalf and P. van der Straten, *laser Cooling and Trapping* (Springer-Verlag, New York, 1999).
- [19] Pethick Christopher J., Smith H. *Bose-Einstein condensation in dilute gases* (Cambridge : Cambridge University, 2002).
- [20] Christopher J. Foot *Atomic Physics* (Oxford: Oxford University Press, 2005).