



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE
MÉXICO

Dinámica cuántica de la formación de un
condensado de Bose-Einstein descrita a
través de una ecuación cinética tipo
Boltzmann.

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:
MAESTRA EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:
YANET ROMERO NAVA

DIRECTORA DE TESIS:
Dra. Rosario Paredes Gutiérrez

COMITÉ TUTORAL:
Dra. María de los Ángeles Ortíz Flores
Dra. Rocio Jáuregui Renaud



posgrado en ciencias físicas
u n a m

Mexico, D.F

Marzo

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.

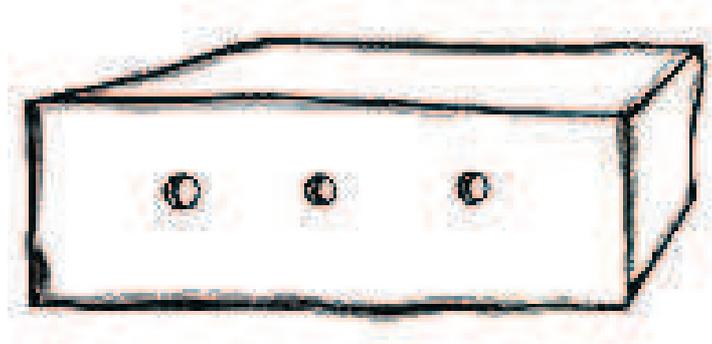
“La primavera no está todavía ahí al alcance de la mano / la primavera no
llegará mañana pero acaso pasado mañana / nadie podrá impedir que la
primavera llegue pasado mañana...”

Primavera con una esquina rota, Mario Benedetti

Con mucho cariño para todas las personas que han permanecido a mi lado en
este largo viaje.

¡gracias!

"Esta es la caja. El cordero que quieres está adentro"



A Erick, con todo mi cariño.

Índice general

Índice general	5
1. Introducción	7
2. Condensación de Bose-Einstein	11
2.1. Gas ideal en una caja	11
2.2. Gas de Bose en una trampa armónica	21
3. Experimentos en gases atómicos ultrafríos	29
3.1. Enfriamiento láser	29
3.1.1. Enfriamiento Doppler	31
3.1.2. Melazas ópticas	34
3.1.3. Enfriamiento sub-Doppler	38
3.2. Confinamiento de átomos neutros	40
3.3. Enfriamiento por evaporación	42
3.4. Observación del BEC en átomos de ^{87}Rb	43
3.5. Gas de Bose en dos dimensiones	44
4. Modelos teóricos del gas de Bose con interacción	47
4.1. Interacción entre átomos	47
4.1.1. Longitud de dispersión en onda s	48
4.2. La ecuación de Gross-Pitaevskii	51
4.2.1. Consecuencias de la ecuación de Gross-Pitaevskii	53
4.3. Gas de Bose y matriz de densidad	57
4.4. Ecuación maestra	59
4.4.1. Ecuación de movimiento general	60
4.5. Modelos actuales para el gas de Bose	61
5. Ecuación cinética cuántica para un gas de Bose-Einstein	63
5.1. Descripción del sistema	64
5.2. Deducción de la ecuación cinética	66

6. Simulación numérica del proceso de enfriamiento por evaporación	77
6.1. Consideraciones físicas de la simulación	79
6.2. Extrapolación	82
6.3. Simulación para temperaturas mayores que T_c	83
6.4. Enfriamiento por evaporación	88
6.5. Simulación para el condensado	90
7. Conclusiones	93
A. Funciones de Bose	97
B. Código fuente de la simulación	99
Bibliografía	113

CAPÍTULO 1

Introducción

Nuestro conocimiento actual sobre la materia, su estructura y comportamiento, es el resultado del desarrollo de ideas y conceptos que comenzaron siendo especulaciones, nociones filosóficas o experimentos primitivos que en ocasiones conducían a resultados e interpretaciones erróneas. Hacia el siglo XIX la experimentación se convirtió en una herramienta indispensable para la comprensión de un gran número de procesos físicos que a su vez, requerían modelos teóricos de primeros principios que los explicaran. Así mismo, el refinamiento de aparatos y técnicas utilizadas en los laboratorios condujo al descubrimiento de nuevos fenómenos que resultaron incomprensibles desde el punto de vista de la física hasta entonces conocida. Ejemplos de lo anterior son la radiación de cuerpo negro o el efecto fotoeléctrico.

En el año de 1900 existían dos leyes empíricas para describir la radiación de cuerpo negro. La primera, conocida como la Ley de Wien, describía de forma apropiada los resultados experimentales para altas frecuencias. Por otro lado, la fórmula de Rayleigh-Jeans arrojaba resultados correctos en la región de bajas frecuencias pero predecía un comportamiento divergente de la radiación emitida para frecuencias mayores. Es decir, no existía una teoría única capaz de describir apropiadamente la radiación de cuerpo negro a cualquier frecuencia. En ese mismo año, las ideas originales de Max Planck no sólo resolvieron esta interrogante, sino que pusieron las bases de lo que hoy conocemos como física cuántica. Planck abordó el problema desde un punto de vista estadístico. Propuso al cuerpo negro formado por osciladores en equilibrio termodinámico con la radiación electromagnética contenida en una cavidad y sugirió que estos absorben la energía de la radiación incidente de forma proporcional a la frecuencia, en particular, expresó a la energía absorbida mediante la fórmula $E = h\nu$.

Pocos años después, Albert Einstein resolvió el problema del efecto fotoeléctrico utilizando la idea de que la luz está formada por paquetes o cuantos ahora llamados fotones. Siguiendo el trabajo de Planck, Einstein propuso que la energía que posee cada fotón está dada por la cantidad $h\nu$, de donde se sigue que la radiación tiene un comportamiento corpuscular y que la energía no puede tomar valores continuos, es decir, está cuantizada.

Con estos resultados en mente, el físico hindú Satyendra Nath Bose realizó un trabajo en el que abordó el problema de cuerpo negro a partir de tratar a los fotones como un gas de partículas idénticas.

En 1924, Albert Einstein conoció el trabajo de Bose y se interesó en él. La idea de considerar a los fotones como un gas de partículas indistinguibles lo lleva a generalizar el estudio realizado por Bose y así desarrolla una descripción estadística no sólo para fotones, sino para átomos en general. Con esto se comprobó que la distribución encontrada por Bose resulta ser útil para todas las partículas con espín entero ahora conocidas como bosones.

Al aplicar las reglas establecidas por Bose a los átomos de un gas ideal, Einstein encontró la existencia de una temperatura crítica T_c por debajo de la cual los átomos comienzan a abandonar los estados excitados para poblar de forma macroscópica el estado de menor energía. A este fenómeno se le conoce como condensación de Bose-Einstein y se puede entender como una transición de fase del gas.

Después de la predicción teórica de la condensación, resultó necesaria su reproducción en el laboratorio. Para que este fenómeno pueda ocurrir es necesario que la relación entre densidad y temperatura que surge al aplicar la estadística de Bose a los átomos del gas permanezca constante. A saber, esto se cumple sólo si ocurre alguna de las dos siguientes condiciones: mantener constante la densidad de partículas en el gas a medida que la temperatura disminuye, o bien, incrementar la densidad para una temperatura fija. Debido a que se requiere cumplir con la condición de gas ideal (sin interacción apreciable entre los átomos), resulta más viable el primer método. Sin embargo existe un gran freno, las temperaturas necesarias para la producción de un condensado son del orden de $10^{-9}K$ para una nube atómica formada de 10^4 átomos con una densidad aproximada de 10^{10} átomos/cm³.

Aunque a mediados del siglo XX las técnicas de enfriamiento permitían alcanzar temperaturas tan bajas como $10^{-3}K$, la obtención del condensado resultaba prácticamente imposible. No fue sino hasta el año de 1995 que mediante técnicas de enfriamiento novedosas, el grupo de Eric Cornell y Carl Anderson de la universidad de Colorado consiguió enfriar un gas a temperaturas del orden de *nanoKelvin* y obtuvo así el primer condensado en el laboratorio. Para ello, llevaron a un gas de átomos de rubidio desde temperatura ambiente a tan solo unos cuantos microkelvin utilizando el proceso de enfriamiento láser. Posteriormente, con el fin de obtener las temperaturas necesarias para la condensación, se retiraron los átomos más energéticos del gas mediante el proceso conocido como enfriamiento por evaporación. La combinación de estas dos técnicas de enfriamiento permitió encontrar la fase condensada en un gas de átomos de ^{87}Rb a una temperatura de $170nK$ y densidades del orden de 10^{10} átomos/cm³ en una nube atómica de aproximadamente 10^4 átomos [1].

En ese mismo año, el grupo de W. Ketterle consiguió obtener la fase condensada en un gas de átomos de ^{27}Na mediante un proceso análogo. La temperatura a la cual ocurrió la condensación fue de aproximadamente $2\mu K$ y se alcanzaron densidades del orden de 10^{14} átomos/cm³ [2].

Hoy en día es posible obtener experimentalmente un gas condensado no sólo para el rubidio y el sodio, sino para casi cualquier átomo alcalino. Sin embargo, de forma estricta estos gases no cumplen con la condición de ser ideales; más aún, las técnicas de confinamiento en el laboratorio involucran potenciales de tipo armónico. Entonces, una descripción teórica que pretenda reproducir los datos experimentales debe tomar en cuenta estos dos aspectos.

Actualmente los trabajos teóricos se centran no sólo en describir la termodinámica de la fase condensada, sino en conocer el proceso dinámico mediante el cual el gas alcanza el equilibrio después de haber sido enfriado y posteriormente experimenta la condensación. Se ha demostrado que es posible reproducir de forma adecuada los datos experimentales mediante una ecuación cinética tipo Boltzmann. Para ello es necesario considerar un gas bosónico ultrafrío con interacciones binarias entre sus átomos y atrapado en un potencial de tipo armónico. En este ámbito, C. W. Gardiner y P. Zoller principalmente [3, 4, 5, 6, 7], han trabajado en la formulación de una ecuación cinética cuántica maestra que describe la evolución temporal del gas y la transición a la fase condensada. Esto se puede conseguir a partir de encontrar la ecuación de evolución para la matriz de densidad de N átomos mediante una generalización de la ecuación de Boltzmann. También suele emplearse la ecuación de Hartree-Fock-Bogoliubov y la ecuación de Gross-Pitaevskii para deducir la forma de la ecuación cinética cuántica maestra.

Uno de los objetivos principales de esta tesis consiste en describir el proceso de termalización que tiene lugar cuando se realiza el enfriamiento por evaporación. En otras palabras, mediante una ecuación cinética cuántica se desea investigar cómo alcanza el equilibrio un gas de Bose-Einstein ultrafrío con interacciones entre sus átomos. Para ello se hace uso del esquema de segunda cuantización; además, el gas que se estudia presenta interacciones entre pares de partículas y está confinado en un potencial de tipo armónico. El método utilizado para determinar la dinámica del gas es el de expresar al sistema de átomos a través de una matriz de densidad reducida $\rho_1(t)$, sobre la cual se hacen las aproximaciones de que la interacción entre pares de partículas puede ser considerada como una perturbación del sistema, y que la relajación al equilibrio representa un proceso Markoviano. De esta manera se obtiene una ecuación cinética para el número de ocupación promedio de los niveles de energía de los átomos, cuya solución representa la forma en la cual el gas alcanza el equilibrio termodinámico. Con el fin de complementar el estudio del gas de Bose con interacciones, se recurrió a la implementación de la ecuación cinética cuántica mediante una simulación numérica. Esto último tuvo como objetivo la comparación de nuestro modelo con las observaciones hechas en el laboratorio.

El presente trabajo consta de 6 capítulos que pueden dividirse en tres apartados principales:

Fundamentos y fenomenología: Consiste de los capítulos 2 y 3 en los que se aborda tanto la teoría de la condensación de Bose-Einstein ideal como las bases fenomenológicas que dan lugar a la fase condensada. En este apartado se discuten y revisan los principales resultados del gas ideal confinado en un recipiente de paredes rígidas y en un potencial armónico. Posteriormente se presentan los detalles de la formación de un condensado en el laboratorio, para ello se hace un estudio general de los procesos de enfriamiento de gases bosónicos, así como de las técnicas de atrapamiento de átomos fríos.

Modelos teóricos: En el capítulo 4 se presentan los principales modelos teóricos para la dinámica del gas de Bose en el proceso de enfriamiento. Para cada uno de ellos se estudia el sistema que se modela y los principales resultados que se obtienen. Debido a su importancia para este trabajo, se hace énfasis en el estudio del gas mediante una ecuación

dinámica para la matriz de densidad, así mismo, se revisan las aproximaciones de Born y Markov que serán utilizadas en la deducción de la ecuación cinética del gas.

Deducción de la ecuación cinética y resultados: Comienza con el capítulo 5 en el que se hace una descripción del sistema que se va a estudiar. Además, se presentan las bases teóricas necesarias y se deduce la ecuación cinética cuántica que gobierna la dinámica del gas de Bose. Se analiza cuantitativamente la ecuación cinética obtenida y se realiza una discusión de su validez. El capítulo 6 comprende una descripción completa de la simulación numérica realizada, así como los resultados obtenidos a partir de ella. Finalmente, en el capítulo 7 se presentan las conclusiones, así como los logros y perspectivas del trabajo.

CAPÍTULO 2

Condensación de Bose-Einstein

La condensación de Bose-Einstein es un fenómeno cuántico que se manifiesta a escalas macroscópicas y fue predicho en 1924 contemporáneamente con el desarrollo de la mecánica cuántica por Satyendra Nath Bose y Albert Einstein. Bose derivó la ecuación de Planck para la radiación de cuerpo negro utilizando la idea de tratar a los fotones como un gas de partículas idénticas. Posteriormente Einstein aplicó estas reglas a los átomos de un gas y encontró la existencia de una temperatura crítica T_c , por debajo de la cual un número macroscópico de partículas puebla el estado base o de menor energía.

La transición efectuada por los átomos del gas al estado de mínima energía es única para bosones (partículas con espín entero) y se puede ver como una transición de fase que es llevada a cabo por la estadística de las partículas y no por sus interacciones.

En este capítulo estudiaremos la condensación de Bose-Einstein para un gas ideal cuántico de bosones contenido en un recipiente de paredes rígidas (caja) y en un potencial del tipo armónico. Aunque el problema del gas ideal atrapado en una caja se presenta en los libros básicos de física estadística, su exposición en este trabajo tiene la finalidad de hacer una comparación con el caso experimental; pues como se verá en el siguiente capítulo, para conseguir un condensado en el laboratorio es necesario confinar al gas en un potencial de tipo armónico y no en uno de paredes rígidas.

2.1. Gas ideal en una caja

Por definición, un gas ideal es aquel en el que las interacciones entre las partículas que lo componen no son relevantes para su descripción. Es decir, se puede pensar como un gas diluido en el que las colisiones entre partículas no cambian el estado termodinámico del mismo, y por lo tanto, no influyen en las cantidades físicas medibles.

Supongamos un gas ideal de Bose formado por N partículas indistinguibles, a temperatura T y confinado en una caja de volumen $V = L^3$. Es decir, un gas confinado por un potencial de la forma

$$W(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \text{si } -L \leq \mathbf{r} \leq L \\ \infty & \text{de otra forma.} \end{cases}$$

El Hamiltoniano del gas atrapado en un potencial de este tipo se puede escribir como

$$H = \sum_i^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} . \quad (2.1)$$

Para calcular las propiedades termodinámicas de este sistema se hace uso del ensemble gran canónico, en donde la gran función de partición está dada por:

$$\Xi(T, V, \mu) = \sum_N e^{\alpha N} Z(T, V, N) , \quad (2.2)$$

con $\alpha = \frac{\mu}{kT}$, donde μ es el potencial químico y k la constante de Boltzmann. $Z(T, V, N)$ es la función de partición y está dada por $Z(T, V, N) = \sum_{\{k\}} e^{-\beta E_{\{k\}}}$, siendo $E_{\{k\}}$ la energía de un estado del sistema completo. Además, se satisface la restricción $N = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}$, con $n_{\mathbf{k}}$ el número de ocupación del estado k .

A partir del gran potencial $\Omega(T, V, \mu) = -kT \ln \Xi$, es posible obtener las propiedades termodinámicas del gas. Por ejemplo, el número promedio de partículas en el sistema, la entropía y la presión están dadas por las siguientes relaciones

$$N(T, V, \mu) = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, V} \quad (2.3a)$$

$$S(T, V, \mu) = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{V, \mu} \quad (2.3b)$$

$$P(T, V, \mu) = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial V} \right)_{T, \mu} . \quad (2.3c)$$

Se puede demostrar que para un gas ideal de bosones [8, 9] el gran potencial toma la siguiente forma

$$\Omega(T, V, \mu) = -kT \ln \Xi = kT \sum_{\mathbf{k}} \ln [1 - e^{(\mu - \epsilon_{\mathbf{k}})\beta}] . \quad (2.4)$$

De acuerdo con esto, el número promedio de partículas en el gas es

$$N(T, V, \mu) = \sum_{\mathbf{k}=1}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} - 1} . \quad (2.5)$$

De la relación anterior se puede notar que existe una singularidad cuando $\epsilon_{\mathbf{k}} = \mu$, lo cual implica que $N(T, V, \mu)$ aumentará indefinidamente. Esto representa una contradicción con el hecho de que el número total de partículas se conserve, es decir $N = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}$. Además, cuando $\mu > 0$ y en particular cuando $\beta\mu \gg 1$, la ecuación (2.5) carece de significado físico. Por lo anterior se debe exigir que el potencial químico sea negativo o nulo. Entonces, la relación para el número total de partículas en el sistema (2.5) sólo será válida si cumple con la condición $\mu \leq 0$.

En el límite termodinámico, es decir cuando $V \rightarrow \infty$, $N \rightarrow \infty$, manteniendo la razón $\frac{N}{V} = \tilde{n}$ constante, los posibles valores del vector de onda \mathbf{k} se pueden considerar como un continuo y es posible reescribir la suma que aparece en el gran potencial dado por (2.4)

como una integral definiendo una densidad de estados por unidad de volumen $\rho(\epsilon)$ de la siguiente manera:

A saber, la energía de una sola partícula está dada por la expresión

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} , \quad (2.6)$$

dado que el gas se encuentra confinado en una caja de longitud de lado L , el vector de onda se escribe como

$$\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) = \left(\frac{2\pi}{L} n_x, \frac{2\pi}{L} n_y, \frac{2\pi}{L} n_z \right) . \quad (2.7)$$

Considerando el espacio fase, el número de estados para una sola partícula está dado por

$$\sum_{\mathbf{k}} = \int \frac{d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{p}}{h^3} = \frac{4\pi V}{h^3} \int p^2 dp = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \int \epsilon^{\frac{1}{2}} d\epsilon , \quad (2.8)$$

donde podemos identificar a la densidad de estados como

$$\rho(\epsilon) = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \epsilon^{\frac{1}{2}} . \quad (2.9)$$

De acuerdo con las ecuaciones para la energía y el vector de onda (2.6) y (2.7), existe un estado de mínima energía, $k = 0$ que no aparecerá en la integral (2.8) y que deberemos añadir, pues aunque no parezca relevante juega un papel esencial en la condensación de Bose-Einstein.

Entonces, al reemplazar la suma del gran potencial por la integral (2.8), tendremos que para un gas ideal en el límite termodinámico, la función $\Omega(N, T, \mu)$ se escribe como

$$\Omega(T, V, \mu) = -kT \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty \epsilon^{\frac{1}{2}} d\epsilon \ln [1 - e^{\beta(\mu - \epsilon)}] - kT \ln(1 - e^{\mu/kT}) . \quad (2.10)$$

Notemos que el segundo término en la ecuación anterior proviene de evaluar el gran potencial en $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, es decir, corresponde al caso en que $\epsilon = 0$.

Integrando por partes la ecuación anterior vemos que para un gas de bosones en una caja tridimensional el gran potencial está dado por

$$\Omega(T, V, \mu) = kT \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \frac{2}{3} \beta \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{\frac{3}{2}}}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} - 1} - kT \ln(1 - e^{\mu/kT}) . \quad (2.11)$$

Haciendo la sustitución $x = \beta\epsilon$ y recordando que $\alpha = \mu/kT$, la integral anterior se puede escribir como

$$\Omega(T, V, \mu) = kTV \frac{(2\pi mkT)^{\frac{3}{2}}}{h^3} g_{\frac{3}{2}}(\alpha) - kT \ln(1 - e^\alpha) , \quad (2.12)$$

donde a $g_m(\alpha)$ se les conoce como *funciones de Bose* y están definidas según

$$g_m(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(m)} \int_0^\infty \frac{x^{m-1}}{e^{(x-\alpha)} - 1} dx \quad (2.13)$$

con $0 \leq e^\alpha \leq 1$ ($\alpha \leq 0$) y $m \in \mathbb{R}$.

Como se muestra en el apéndice A, las funciones de Bose son crecientes para valores menos negativos de α . Además, según el valor que tome la constante m se tendrá un valor finito o divergente en $\alpha = 0$ (Ver figura A.1). A su vez, m dependerá de la dimensionalidad del sistema y del potencial externo aplicado.

Otra propiedad importante de estas funciones es que su derivada presenta una regla de recurrencia tal que

$$\frac{dg_m(\alpha)}{d\alpha} = g_{m-1}(\alpha) . \quad (2.14)$$

Recordando que la longitud de onda térmica de de Broglie se define como $\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}}$, el gran potencial se puede expresar en la siguiente forma

$$\Omega(T, V, \mu) = kT \frac{V}{\lambda_T^3} g_{\frac{5}{2}}(\alpha) - kT \ln(1 - e^\alpha) . \quad (2.15)$$

Con ayuda de la recurrencia de las derivadas de las funciones de Bose (2.14) y de las relaciones para las cantidades termodinámicas del gas (2.3), se encuentra que el número de partículas, la presión y la entropía están dados por,

$$N(T, V, \mu) = \frac{V}{\lambda_T^3} g_{\frac{3}{2}}(\alpha) + \frac{e^\alpha}{1 - e^\alpha} , \quad (2.16a)$$

$$P(T, V, \mu) = \frac{NkT}{V} \frac{g_{\frac{5}{2}}(\alpha)}{g_{\frac{3}{2}}(\alpha)} , \quad (2.16b)$$

$$S(T, V, \mu) = \frac{kV}{\lambda_T^3} \left[\frac{5}{2} g_{\frac{5}{2}}(\alpha) - \alpha g_{\frac{3}{2}}(\alpha) \right] . \quad (2.16c)$$

Por el momento consideremos solamente la expresión (2.16a) para el número promedio de partículas en el gas. Vemos que el segundo término representa la contribución del estado con $\epsilon = 0$ al número total de partículas.

Con el fin de simplificar la notación, resulta conveniente definir a la cantidad

$$N_0(\alpha) = \frac{e^\alpha}{(1 - e^\alpha)} = \frac{e^{\frac{\mu}{kT}}}{(1 - e^{\frac{\mu}{kT}})} , \quad (2.17)$$

como la contribución del estado energético más bajo al número total de partículas N para un gas de Bose a temperatura T .

Análogamente, sea la cantidad $\frac{V}{\lambda_T^3} g_{\frac{3}{2}}(\alpha)$ el número de partículas que se encuentran en los estados excitados para una temperatura dada T , es decir $N_e(\alpha)$. Entonces, podemos escribir al número total N como la suma de los átomos que están en el estado base más los que se encuentran en los estados excitados

$$N(T, V, \mu) = N_e(\alpha) + N_0(\alpha) . \quad (2.18)$$

A temperatura T y en el límite termodinámico, es decir $V \rightarrow \infty$, $N \rightarrow \infty$ y $N/V = cte$, la cantidad de partículas que se encuentren en el estado base o de mínima energía será

muy pequeña comparada con el total de las que se encuentren en los estados excitados. Entonces, se puede escribir al número de partículas en el sistema simplemente como

$$N = \frac{V}{\lambda_T^3} g_{\frac{3}{2}}(\alpha) ,$$

es decir, en el límite termodinámico se puede ignorar a las partículas que se encuentran en el estado base.

Así, la densidad de partículas estará dada por la expresión

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{\lambda_T^3} g_{\frac{3}{2}}(\alpha) . \quad (2.19)$$

Dado que la ecuación anterior relaciona el valor de α con la densidad de partículas $\frac{N}{V}$ y la temperatura T , si fijamos alguna de estas variables las otras dos restantes deberán modificarse para que la igualdad siga siendo válida. Experimentalmente las cantidades que se pueden variar son la densidad y la temperatura, por lo que el potencial químico dado por α quedará determinado según los valores que tomen T y $\frac{N}{V}$. De acuerdo con esto existen dos formas en la que la relación para la densidad de partículas (2.19) puede ser satisfecha:¹

1. Manteniendo la temperatura fija y aumentando la densidad,

$$T \text{ fija, } \frac{N}{V} \uparrow$$

2. Fijando la densidad de partículas y reduciendo la temperatura

$$\frac{N}{V} \text{ fija, } T \downarrow$$

Caso 1

A partir de la relación para la densidad (2.19), tendremos la condición

$$\lambda_T^3 = \left(\frac{N}{V} \right)^{-1} g_{\frac{3}{2}}(\alpha) \quad (2.20)$$

Sabemos que la función $g_{\frac{3}{2}}(\alpha)$ es creciente conforme el valor de α aumenta y que alcanza un valor máximo de 2.612 en $\alpha = 0$. Es decir, se cumple que $g_{\frac{3}{2}}(\alpha) < g_{\frac{3}{2}}(0)$ para toda α . Entonces, en este mismo punto ($\alpha = 0$), se alcanza un máximo en la densidad $\rho_c = \frac{N_c}{V}$ y por lo tanto en el número de partículas en los estados excitados.

Una consecuencia importante de lo anterior es que debido a que $\alpha = \mu/kT$ no puede ser mayor que cero, la relación (2.20) ya no describirá al sistema si se desea seguir aumentando el número de partículas en él. Esto también se puede ver de la siguiente manera: si

¹En este capítulo consideraremos los dos casos por completez, sin embargo es conveniente resaltar que en la práctica resulta muy complicado aumentar la densidad manteniendo la temperatura fija, puesto que al incrementar la cantidad de partículas la aproximación de gas diluido no se satisface.

se desea incrementar el número de partículas, ellas deberán tener energía $\epsilon = 0$ y ocupar el estado base, pues el potencial químico no puede exceder el valor de $\mu = 0$ y por lo tanto la densidad de los estados excitados no puede ser mayor que N_c/V .

Caso 2

De forma análoga al caso anterior, cuando $\alpha = 0$

$$\frac{N}{V} = \frac{2,612}{\lambda_T^3} = \frac{(2\pi mkT)^{\frac{3}{2}}}{h^3} 2,612, \quad (2.21)$$

lo cual nos indica que no podremos seguir bajando la temperatura T si queremos que se satisfaga esta condición, pues debemos recordar que $\frac{N}{V}$ se mantiene fija.

Esto se traduce en que existe una temperatura crítica $T = T_c$ a la cual se alcanza un valor máximo para la densidad $\frac{N}{V}$. Donde

$$T_c = \left(\frac{N}{2,612V} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{h^2}{2\pi mk}. \quad (2.22)$$

A su vez, esta condición implica que se llegue a un valor máximo para el número de partículas en los estados excitados cuando $T = T_c$. Es decir, cuando el potencial químico μ sea igual a cero,

$$N_e^{max} = 2,612 \frac{V}{\lambda^3}. \quad (2.23)$$

¿Qué sucede si se sigue bajando la temperatura?

Es claro que la ecuación (2.19) para la densidad ya no describe al sistema y por tanto debemos reformularla. Como se dijo anteriormente, para temperaturas mayores a la temperatura crítica ($T > T_c$) es posible despreciar la contribución del estado base al número total de partículas en el sistema. Sin embargo, debemos verificar si este comportamiento sigue siendo válido para temperaturas menores que T_c .

La contribución del estado base al número total de partículas está dada por

$$N_0 = \frac{e^\alpha}{(1 - e^\alpha)}. \quad (2.24)$$

En la temperatura crítica T_c el potencial químico vale cero y la ecuación anterior diverge. Esto se traduce en que el número de partículas en el estado base comienza a ser importante y no podemos ignorarlo.

Entonces, en este caso la forma correcta de escribir al número total de partículas en el sistema es

$$N(T, V, \mu) = N_e(\alpha) + N_0(\alpha). \quad (2.25)$$

Resulta más conveniente expresar a esta cantidad mediante la comparación entre las partículas que se encuentran en los estados excitados o en el estado base con el número total de ellas en el sistema, es decir

$$1 = \frac{N_e(\alpha)}{N} + \frac{N_0(\alpha)}{N}. \quad (2.26)$$

De la relación anterior vemos que en el límite termodinámico se pueden distinguir dos casos

1. Cuando $\alpha \neq 0$, N_0 es una cantidad finita y $\frac{N_0}{N}$ tiende a 0. Por lo tanto, es posible decir que el número de partículas que se encuentran en el estado base es tan pequeño que se puede considerar que todas las partículas se encuentran en los estados excitados. En otras palabras, las partículas con $\epsilon = 0$ no son relevantes para la termodinámica del gas.
2. Si $\alpha = 0$, $N_\epsilon = N_\epsilon^{max}$ y N_0 crece indefinidamente. Por tanto, la fracción $\frac{N_0}{N}$ queda indeterminada. En este caso N_0 estará dada por el exceso de partículas $N - N_\epsilon^{max}$. Dado que $N_e(\alpha)$ alcanza su valor máximo, no será posible acomodar más partículas en los estados excitados y por lo tanto se comenzará a poblar en forma macroscópica el estado base para el cual $\epsilon = 0$.

Utilizando la expresión (2.22) para la temperatura crítica, se puede ver que las cantidades $\frac{N_e}{N}$ y $\frac{N_0}{N}$ toman la siguiente forma

$$\frac{N_e}{N} = \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}}, \quad (2.27)$$

$$\frac{N_0}{N} = \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}} \right], \quad (2.28)$$

Entonces, es posible resumir los resultados obtenidos anteriormente como sigue:

$$\begin{aligned} N &= \frac{V}{\lambda_T^3} g_{\frac{3}{2}}(\alpha) & \text{Si } T > T_c \\ N_e^{max} &= \frac{V}{\lambda_T^3} 2,612 & \text{Si } T = T_c \\ 1 &= \frac{N_e}{N} + \frac{N_0}{N} & \text{Si } T < T_c \end{aligned} \quad (2.29)$$

Donde la variación de $\frac{N_e}{N}$ y $\frac{N_0}{N}$ con la temperatura está dada por

$$\frac{N_e}{N} = \begin{cases} 1 & \text{si } T > T_c \\ \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}} & \text{si } T < T_c. \end{cases}$$

y

$$\frac{N_0}{N} = \begin{cases} 0 & \text{si } T > T_c \\ 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}} & \text{si } T < T_c. \end{cases}$$

El comportamiento de estas cantidades puede ser visto con más claridad en la figura 2.1.

En ella se observa que para temperaturas altas; en particular $T > T_c$, las N partículas que forman el sistema se encuentran en los estados excitados, mientras que para temperaturas bajas ($T < T_c$), la población del estado base es mucho mayor que la de los estados

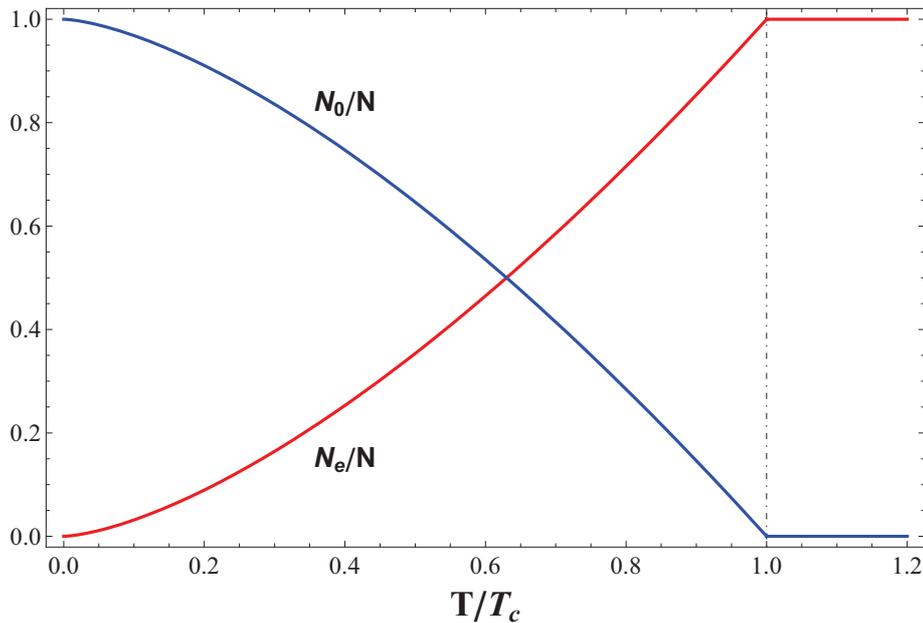


Figura 2.1: Variación de las cantidades N_e/N y N_0/N en función de la temperatura. Para temperaturas cercanas a T_c la mayoría de las partículas se encuentran en los estados excitados, mientras que para temperaturas menores, la población del estado base se vuelve considerable.

excitados. Se puede observar también que conforme se disminuye la temperatura aumenta el número de partículas en el estado base. A este fenómeno, en el que para una temperatura suficientemente baja ($T < T_c$ con $T \rightarrow 0$) la población del estado base se vuelve macroscópica se le llama *condensación de Bose-Einstein*.

Como vimos anteriormente, la temperatura crítica T_c se define cuando el potencial químico toma el valor $\mu = 0$. Ahora bien, el potencial químico μ está relacionado con la energía requerida para agregar partículas al sistema, por lo que su valor nulo nos indica que no hay costo energético por introducir partículas. Así, dado que la energía no se puede modificar por la cantidad de partículas agregadas, estas deberán poblar el estado base conforme se baja la temperatura.

Hemos visto que el número promedio de partículas en el gas de bosones nos arroja un comportamiento diferente al esperado para un gas ideal. En particular, pudimos encontrar una transición a un nuevo estado llamado *condensado*. Ahora obtengamos otras cantidades físicas para este sistema.

Sabemos que la energía promedio está dada por,

$$E = \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} n_{ijk} , \quad (2.30)$$

debido a que es un gas de bosones podemos escribir

$$E = \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} \frac{1}{e^{\beta\epsilon_{ijk} - \alpha} - 1} . \quad (2.31)$$

En el límite termodinámico se podrá reemplazar la suma por una integral definiendo una densidad de estados dada por (2.9). Entonces

$$E = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{\frac{3}{2}}}{e^{\beta\epsilon - \alpha} - 1}. \quad (2.32)$$

Mediante el cambio de variable $x = \beta\epsilon$ podemos escribir la ecuación anterior en la forma

$$E = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \beta^{\frac{5}{2}} \int_0^\infty dx \frac{x^{\frac{3}{2}}}{e^{x - \alpha} - 1}. \quad (2.33)$$

Identificando la integral con una función de Bose, la expresión para la energía promedio del sistema se reduce a

$$E = \frac{3}{2} \frac{V}{\lambda_T^3} kT g_{\frac{5}{2}}(\alpha). \quad (2.34)$$

Debemos hacer énfasis en que esta energía se ha obtenido para el caso en que $T > T_c$. Es decir, refleja la energía promedio para las partículas que se encuentran en los estados excitados. Con ayuda de la expresión (2.20) para la longitud de onda térmica podremos reescribirla como

$$E = \frac{3}{2} NkT \frac{g_{\frac{5}{2}}(\alpha)}{g_{\frac{3}{2}}(\alpha)}, \quad (2.35)$$

De donde podemos ver que para temperaturas inferiores a T_c , el potencial químico μ es cero y las funciones $g_{\frac{5}{2}}(\alpha)$ y $g_{\frac{3}{2}}(\alpha)$ alcanzan su máximo valor dejando fija la energía.

Para la presión tendremos un caso muy similar. De acuerdo con la expresión para el gran potencial (2.15) podemos escribir que

$$p = \frac{kT}{\lambda_T^3} g_{5/2}(\alpha) - \frac{kT}{V} \ln(1 - e^\alpha) \quad (2.36)$$

A partir de la ecuación anterior se puede ver que debido a que la cantidad $\ln(1 - e^\alpha)$ es siempre menor que 1 (por ser $\alpha \leq 0$), en el límite termodinámico cuando $V \rightarrow \infty$ el segundo término en la suma tiende a cero. Esto se traduce en que las partículas del estado base no contribuyen a la presión del gas.

Entonces es válido tomar en cuenta únicamente el término que corresponde a los estados excitados. Utilizando la relación (2.20) para la longitud de onda térmica, es posible reescribir a la presión como:

$$p = \frac{NkT}{V} \frac{g_{\frac{5}{2}}(\alpha)}{g_{\frac{3}{2}}(\alpha)}, \quad (2.37)$$

de donde vemos que se alcanzará un máximo cuando el potencial químico tome el valor de $\mu = 0$. Entonces, la expresión anterior es válida para temperaturas mayores a T_c .

La condensación de Bose-Einstein al igual que todas las transiciones de fase depende fuertemente de la dimensión en la que se trabaje. Como ya habíamos mencionado, el valor de m en las funciones de Bose también depende de la dimensión y del potencial externo aplicado según la expresión [9]

$$g_{\frac{d+2}{2}}(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(\frac{d+2}{2})} \int_0^\infty \frac{x^{\frac{d+2}{2}}}{e^{(x-\alpha)} - 1} dx,$$

donde d representa la dimensión.

En particular, para la partícula en un caja de volumen V se puede escribir al gran potencial como sigue :

$$\Omega(N, T, \mu) = kT \frac{L^d}{\lambda_T^d} g_{\frac{d+2}{2}}(\alpha) - kT \ln(1 - e^\alpha) . \quad (2.38)$$

Con estos resultados a mano, revisemos brevemente el comportamiento del gas de Bose en dos y una dimensiones.

Gas de bosones en una caja bidimensional

En este caso, el gran potencial estará dado por:

$$\Omega(N, T, \mu) = kT \frac{A}{\lambda_T^3} g_2(\alpha) - kT \ln(1 - e^\alpha) . \quad (2.39)$$

Entonces, nuevamente con ayuda de las ecuaciones para las propiedades termodinámicas y la recurrencia de las derivadas en las funciones de Bose (2.3) y (2.14), encontramos que el número promedio de partículas a temperatura $T > T_c$ está dado por

$$N = \frac{A}{\lambda_T^2} g_1(\alpha) . \quad (2.40)$$

En la transición, es decir cuando $\alpha = 0$, podemos ver de la figura A.1 que $g_1(\alpha)$ diverge. Esto se traduce en que la razón $\frac{N}{A}$ no está acotada y no se tendrá un número máximo de partículas en los estados excitados. Así, siempre existirán estados excitados en los cuales acomodar a las partículas y no se presentará la condensación de Bose-Einstein.

Gas de bosones en una caja unidimensional

De igual forma podemos estudiar al gas atrapado en una “caja” unidimensional. En este caso, el gran potencial tomará la forma

$$\Omega(N, T, \mu) = kT \frac{L}{\lambda_T} g_{\frac{3}{2}}(\alpha) - kT \ln(1 - e^\alpha) . \quad (2.41)$$

y el número promedio de partículas a temperatura $T > T_c$ será

$$N = \frac{L}{\lambda_T} g_{\frac{1}{2}}(\alpha) . \quad (2.42)$$

Notemos que cuando $\alpha = 0$ la función $g_{\frac{1}{2}}(\alpha)$ alcanza un valor finito provocando que se alcance un número máximo de partículas en los estados excitados. Entonces, para este caso nuevamente se presentará el fenómeno de la condensación de Bose-Einstein en el que por debajo de la temperatura crítica T_c , las partículas poblarán de forma macroscópica el estado base.

Ya hemos visto como depende la condensación de Bose de la dimensión del sistema, ahora veamos su dependencia con el potencial de atrapamiento del gas. A continuación describiremos el caso de un gas en un potencial armónico.

2.2. Gas de Bose en una trampa armónica

En los experimentos con gases de átomos alcalinos bosónicos se suele confinar al gas en potenciales externos no homogéneos y no en recipientes de paredes rígidas. En particular, se confina a los átomos mediante un potencial de tipo armónico. Abordemos entonces el problema de un gas ideal confinado por un potencial armónico en tres dimensiones.

El Hamiltoniano para este sistema será

$$H = \sum_i^N \left[\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \mathbf{r}^2 \right] \quad (2.43)$$

En términos del operador de número,

$$H = \sum_i^N \hbar\omega(\hat{n}_i^x + \hat{n}_i^y + \hat{n}_i^z) . \quad (2.44)$$

En donde los estados de una sola partícula serán $\{|\bar{n}\rangle = |n_i, n_j, n_k\rangle\}$ con $i, j, k = 0, 1, 2, \dots$ y con energías $E_{ijk} = \hbar\omega(n_i + n_j + n_k)$. Además, se ha escogido la energía de punto cero tal que $\epsilon_0 = 0$.

De forma análoga al caso del gas confinado en una caja de paredes rígidas, calcularemos las propiedades termodinámicas del sistema haciendo uso del ensemble gran canónico.

Para un gas ideal de bosones el gran potencial está dado por (2.4) y a partir de él es posible obtener todas las propiedades termodinámicas del sistema. En el caso de un potencial armónico, el gran potencial toma la forma

$$\Omega(\mu, T, \omega) = kT \sum_{ij k} \ln [1 - e^{\alpha - \beta\hbar\omega(n_i + n_j + n_k)}] . \quad (2.45)$$

La separación entre niveles de energía será $\Delta\epsilon = E_{ijk} - E_{i-1jk}$ o de forma análoga, $\Delta\epsilon = E_{ijk} - E_{ij-1k}$, $\Delta\epsilon = E_{ijk} - E_{ijk-1}$ y arrojará en todos los casos el valor constante de $\hbar\omega$. Observemos que $\frac{\Delta\epsilon}{E} \ll 1$, y en particular para un nivel alto de energía N tendremos que

$$\frac{\Delta E}{\epsilon} \sim \frac{\hbar\omega}{N\hbar\omega} = \frac{1}{N} \rightarrow 0$$

Entonces podremos suponer a los estados de energía como un continuo; y por tanto, definir una densidad de estados $\rho(\epsilon)$.

Vemos que la ecuación de la energía define un plano que corta a los ejes en $\frac{E}{\hbar\omega}$ (Fig. 2.2).

$$\frac{E_{ijk}}{\hbar\omega} = i + j + k , \quad (2.46)$$

Entonces, la densidad de estados se puede obtener a partir del volumen contenido bajo el plano que define la energía, puesto que $\rho(\epsilon) = \frac{dN}{d\epsilon} = \frac{dV}{d\epsilon}$.

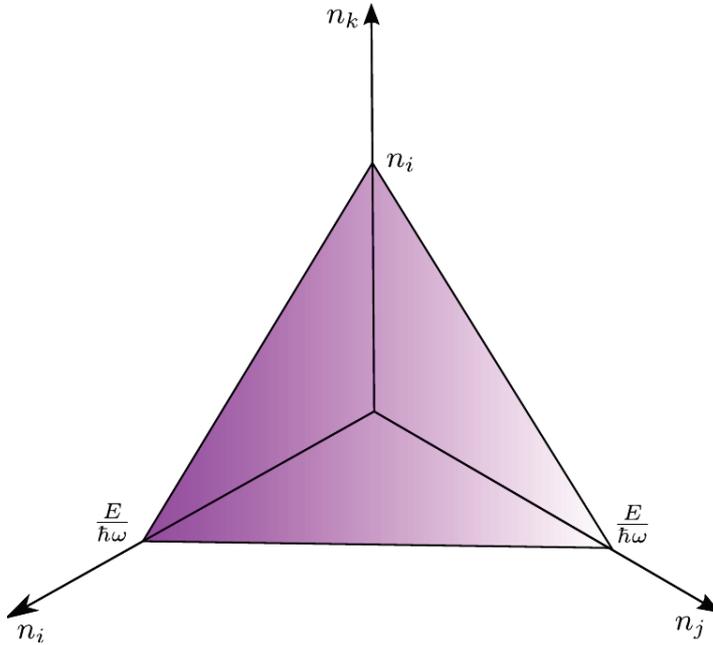


Figura 2.2: Tetraedro formado por el plano que define la energía E en un oscilador armónico en tres dimensiones.

Ahora bien, este volumen queda determinado por la integral

$$V = \int_0^{\frac{\epsilon}{\hbar\omega}} dx \int_0^{\frac{\epsilon}{\hbar\omega}-x} dy \int_0^{\frac{\epsilon}{\hbar\omega}-x-y} dz, \quad (2.47)$$

entonces,

$$V = \int_0^{\frac{\epsilon}{\hbar\omega}} \int_0^{\frac{\epsilon}{\hbar\omega}-x} \left[\frac{\epsilon}{\hbar\omega} - x - y \right] dy dx = \frac{1}{6} \left[\frac{\epsilon}{\hbar\omega} \right]^3. \quad (2.48)$$

Por lo que la densidad de estados será

$$\rho(\epsilon) = \frac{dV}{d\epsilon} = \frac{1}{2} \left[\frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^3} \right]. \quad (2.49)$$

De manera análoga al caso de un gas ideal en una caja, es conveniente reescribir el gran potencial dado por (2.45) en términos de una integral. Para ello es necesario considerar el límite termodinámico, sin embargo, en este caso no tenemos de forma explícita un volumen V de confinamiento. Respecto a ello, veremos más adelante que es posible definir a la cantidad $1/\omega^3$ de forma equivalente al volumen. Entonces, en el límite termodinámico, es decir cuando $N \rightarrow \infty$, $1/\omega^3 \rightarrow \infty$ y $N/\omega^3 = \text{cte}$:

$$\sum_{ijk} \longrightarrow \int_0^\infty \rho(\epsilon) d\epsilon = \int_0^\infty \frac{\epsilon^2}{2(\hbar\omega)^3} d\epsilon. \quad (2.50)$$

Por lo que el gran potencial para un gas ideal de bosones confinado en una trampa armónica será

$$\Omega(\mu, T, \omega) = \frac{kT}{2(\hbar\omega)^3} \int_0^\infty \epsilon^2 d\epsilon \ln [1 - e^{\alpha - \beta\epsilon}] . \quad (2.51)$$

Integrando por partes la ecuación anterior, llegaremos a

$$\Omega(\mu, T, \omega) = -\frac{1}{6} \left(\frac{1}{\hbar\omega} \right)^3 \int \frac{\epsilon^3}{e^{\beta\epsilon - \alpha} - 1} d\epsilon . \quad (2.52)$$

Mediante el cambio de variable $x = \beta\epsilon$ podemos escribir al gran potencial (2.52) como

$$\Omega(\mu, T, \omega) = -\frac{1}{6} \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^3 kT \int_0^\infty \frac{x^3}{e^{x-\alpha} - 1} dx . \quad (2.53)$$

De igual forma que para el gas en una caja en tres dimensiones, podemos identificar esta integral con una función de Bose, en particular podemos decir que

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{e^{x-\alpha} - 1} dx = g_4(\alpha) \Gamma(4) . \quad (2.54)$$

Por lo que para el potencial armónico podemos escribir a $\Omega(\mu, T, \omega)$ como

$$\Omega(\mu, T, \omega) = -kT \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^3 g_4(\alpha) , \quad (2.55)$$

y a partir de el obtendremos las propiedades termodinámicas del gas.

De acuerdo con las definiciones para las cantidades termodinámicas (2.3) y la recursividad en las derivadas de las funciones de Bose (2.14), el número promedio de partículas, la presión y la entropía para este gas están dadas por

$$N(\mu, T, \omega) = \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^3 g_3(\alpha) \quad (2.56a)$$

$$p(\mu, T, \omega) = \frac{NkT g_4(\alpha)}{\left(\frac{1}{\hbar\omega} \right)^3 g_3(\alpha)} \quad (2.56b)$$

$$S(\mu, T, \omega) = k \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^3 [4g_4(\alpha) - \alpha g_3(\alpha)] \quad (2.56c)$$

Notemos que para el potencial armónico las cantidades anteriores son función de el potencial químico μ , la temperatura T y la frecuencia del potencial ω , mientras que para el caso de el gas de bosones atrapados en una caja estas cantidades son función de μ , T y V . Entonces es válido preguntarnos si la frecuencia del potencial armónico puede de alguna manera tener un papel similar al del volumen de la caja.

Acercas de esto se ha encontrado que para el caso del potencial armónico es posible definir una nueva cantidad extensiva equivalente al volumen dada por el inverso al cubo de la frecuencia del potencial [10, 11]. A esta nueva variable se la llama el *volumen armónico* y se define como

$$\mathcal{V} = \frac{1}{\omega^3} \quad (2.57)$$

Así mismo se puede mostrar que el volumen armónico tiene por variable conjugada a la *presión armónica* \mathcal{P} que no sólo es equivalente a la presión hidrostática sino que incluso tiene el mismo significado físico.

Regresando a nuestro problema, consideremos únicamente la ecuación (2.56a) para el número total de partículas en el sistema a temperatura T_c .

Como se puede ver en el apéndice A, la función $g_3(\alpha)$ es creciente para valores menos negativos de α y converge al valor 1,202 cuando $\alpha = 0$.

De forma análoga al gas de bosones en una caja, podemos considerar los siguientes casos:

1. Mantener la temperatura fija e incrementar el numero de partículas.

$$T \text{ fijo y } N \uparrow$$

2. Mantener fijo el número de partículas y disminuir la temperatura.

$$N \text{ fijo y } T \downarrow$$

Caso 1

A partir de (2.56a) podemos escribir al número de partículas como

$$N = \mathcal{V} \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^3 g_3(\alpha), \quad (2.58)$$

de donde se puede ver que al mantener fija la temperatura, el número de partículas podrá aumentar solo hasta $\alpha = 0$, pues para este valor $g_3(\alpha)$ alcanza su máximo valor. Entonces, tendremos un máximo en N dado por

$$N^* = \mathcal{V} \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^3 g_3(0), \quad (2.59)$$

Ahora bien, dado que $g_3(\alpha) < g_3(0)$ se cumple que

$$\frac{N}{\left(\frac{\mathcal{V}}{\hbar^3} \right)} < \frac{N^*}{\left(\frac{\mathcal{V}}{\hbar^3} \right)}.$$

Es decir, conforme aumenta el valor del potencial químico μ , $N \rightarrow N^*$, de forma tal que para $\alpha = 0$ se llegará a que $N = N^*$.

Si se sigue incrementando el número de partículas en el sistema se deberá cumplir que $N > N^*$. Sin embargo, μ ya no puede crecer más y tiene que conservar su valor nulo. Lo anterior impide que se satisfaga la relación (2.58) y por lo tanto se puede decir que ella no describe al número de partículas en el sistema, es decir

$$\frac{N}{\left(\frac{\mathcal{V}}{\hbar^3} \right)} \neq (kT)^3 g_3(0). \quad (2.60)$$

Este punto en el que la relación (2.58) ya no se cumple, define una temperatura crítica dada por

$$\frac{\hbar}{k} \left(\frac{N}{\mathcal{V}g_3(o)} \right)^{\frac{1}{3}} = T_c . \quad (2.61)$$

Caso 2

Al disminuir la temperatura el término $(kT)^3$ también decrece y α aumenta su valor. Dado que $\mu \leq 0$, si T baja μ se hará cada vez menos negativo hasta alcanzar el valor máximo de 0. Como vimos en el caso anterior, llegará a este máximo en la temperatura crítica T_c , en donde la cantidad

$$\frac{N}{\left(\frac{\mathcal{V}}{\hbar^3}\right)} = (kT)^3 g_3(0)$$

queda definida. Entonces podemos decir que esta expresión describe al sistema en $T = T_c$. podemos resumir los resultados de los dos casos anteriores en la siguiente forma

$$\begin{aligned} \frac{N}{\left(\frac{\mathcal{V}}{\hbar^3}\right)} &= (kT)^3 g_3(\alpha) \quad \text{si } T > T_c \\ \frac{N}{\left(\frac{\mathcal{V}}{\hbar^3}\right)} &= (kT_c)^3 g_3(0) \quad \text{si } T = T_c \\ \frac{N}{\left(\frac{\mathcal{V}}{\hbar^3}\right)} &\neq (kT)^3 g_3(0) \quad \text{si } T < T_c \end{aligned} \quad (2.62)$$

En forma análoga al estudio del gas de Bose confinado en una caja, podemos escribir $N = n_{ijk=0} + \sum_{n_{ijk>0}} n_{ijk}$, donde $n_{ijk} = \frac{1}{\exp^{-\alpha+\beta\epsilon_{ijk}} - 1}$

Entonces,

$$N = n_{ijk=0} + \mathcal{V} \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^3 g_3(\alpha) . \quad (2.63)$$

Para N fijo, $\mu = 0$ y $T < T_c$,

$$N = N_c(T) + \mathcal{V} \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^3 g_3(0) , \quad (2.64)$$

donde $N_c(T)$ da el número de partículas que se encuentran en el estado base y el segundo término corresponde a las partículas en los estados excitados. Es decir,

$$N = N_c(T) + N_e(T) .$$

Ahora, de igual forma que hicimos para el problema del gas de Bose en una caja, podemos escribir al número total de partículas (2.64) en términos de la temperatura crítica T_c como

$$N = N_c(T) + (kT)^3 \mathcal{V} \left(\frac{1}{\hbar} \right)^3 \frac{N}{\left(\frac{kT_c}{\hbar}\right)^3 \mathcal{V}} , \quad (2.65)$$

de donde podemos encontrar que el número de partículas en el estado base está dado por

$$N_c(T) = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \right]. \quad (2.66)$$

Podemos ver que para $T < T_c$ el número de partículas en los estados excitados está dado por la diferencia entre el número total de partículas en el sistema y el número de partículas que se encuentran en el estado base, así

$$N_{e(T < T_c)} = \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 N. \quad (2.67)$$

Entonces, el número de partículas en los estados excitados depende de la temperatura según (Fig. 2.3):

$$\begin{aligned} N_e &= N & \text{si } T > T_c \\ N_e &= N^*(T) & \text{si } T = T_c \\ N_e &= \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 N & \text{si } T < T_c \end{aligned} \quad (2.68)$$

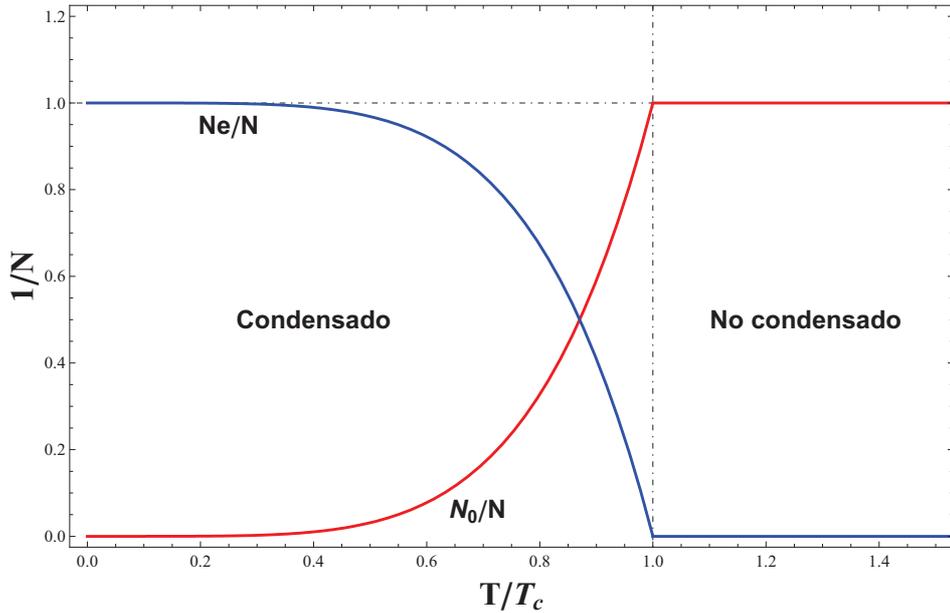


Figura 2.3: A la temperatura crítica T_c un número macroscópico de partículas comienza a poblar el estado base. En particular, a $T = 0$ todas las partículas se encuentran en el nivel de mínima energía.

Podemos concluir entonces, que para temperaturas menores a la temperatura crítica T_c , las partículas comienzan a poblar el estado base de forma que se tiene nuevamente el fenómeno de condensación de Bose-Einstein.

Calculemos ahora la energía promedio del sistema. De las expresiones para la energía y densidad de estados (2.31) y (2.49), tendremos que en el límite termodinámico,

$$E = \frac{1}{2(\hbar\omega)^3} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^3}{e^{\beta\epsilon - \alpha} - 1}. \quad (2.69)$$

Haciendo el cambio de variable $x = \beta\epsilon$ e identificando la integral resultante con una función de Bose,

$$E = 3kT \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^3 g_4(\alpha). \quad (2.70)$$

De forma similar al caso del gas de Bose en un recipiente de paredes rígidas, esta energía se fijará cuando $\alpha = 0$ y $T = T_c$. Además, dado que en la condensación las partículas se van al estado base, estas no contribuirán a la energía del sistema.

Para la presión del gas tendremos que

$$P = \frac{NkT}{\left(\frac{\mathcal{V}}{\hbar^3}\right)} \frac{g_4(\alpha)}{g_3(\alpha)}, \quad (2.71)$$

y de igual forma que para el caso del gas de bosones atrapado en una caja, sólo será válida para $T \geq T_c$.

Analicemos ahora el caso del gas de bosones confinado en una trampa armónica de dimensiones 2 y 1. Para el caso armónico, el gran potencial (2.55) depende de la dimensión según:

$$\Omega(\mu, T, \omega) = -kT\mathcal{V} \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^d g_{d+1}(\alpha). \quad (2.72)$$

Gas de bosones en un potencial armónico bidimensional

En este caso, el gran potencial toma la forma

$$\Omega(\mu, T, \omega) = -kT\mathcal{V} \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^2 g_3(\alpha). \quad (2.73)$$

Por lo que el número promedio de partículas en el sistema será

$$N(\mu, T, \omega) = \mathcal{V} \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^3 g_2(\alpha).$$

A la temperatura crítica T_c , $g_2(\alpha)$ converge al valor de 1,645. Esto se traduce en que el número promedio de átomos está acotado y por lo tanto se tendrá un valor máximo de partículas en los estados excitados. Entonces, podemos concluir que para el caso en que el gas esta atrapado en una trampa armónica bidimensional, la condensación de Bose se

hace presente².

Gas de bosones en un potencial armónico unidimensional

Aquí el gran potencial tomará la forma:

$$\Omega(\mu, T, \omega) = -kT\mathcal{V} \left(\frac{kT}{\hbar} \right) g_2(\alpha) . \quad (2.74)$$

Por lo que el numero promedio de partículas en el sistema estará dado por

$$N(\mu, T, \omega) = \mathcal{V} \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^3 g_1(\alpha) .$$

Para el caso en que $\alpha = 0$ y $T = T_c$, la función $g_1(\alpha)$ no converge a un valor finito, por lo tanto siempre se tendrán estados excitados en los cuales acomodar a las partículas que se agreguen al sistema y no se observará el fenómeno de la condensación de Bose-Einstein.

²Experimentalmente se ha encontrado que para el potencial armónico en dos dimensiones la fase que se observa no es estrictamente la descrita en este apartado sino más bien de la forma Berezinskii-Kosterlitz-Thouless. En el siguiente capítulo se hará mención a ella y se describirá de forma general.

CAPÍTULO 3

Experimentos en gases atómicos ultrafríos

Después de que Einstein predijera el fenómeno de la condensación, la búsqueda de esta nueva fase de la materia en la que los átomos de un gas ocupan el mismo estado cuántico se convirtió en un pilar de la física experimental en el régimen de las bajas temperaturas, pues como vimos en el capítulo anterior, una forma de llevar a un gas al estado condensado es mantener la densidad de partículas constante y reducir su temperatura. Sin embargo, uno de los principales obstáculos para la realización experimental del condensado de Bose-Einstein es que el enfriamiento debe alcanzar los $10^{-9}K$.

Las técnicas experimentales desarrolladas durante el siglo XX han abierto un nuevo campo en la física atómica que permite llevar a un gas a tan sólo unas cienmillonésimas de grados Kelvin por encima del cero absoluto de temperatura. Gracias a ello, en 1995 fue posible que los científicos de la Universidad de Colorado, Eric Cornell y Carl Anderson, obtuvieran el primer condensado de Bose-Einstein en átomos de rubidio a una temperatura de $170nK$. Para alcanzar esta meta disminuyeron la temperatura del gas de átomos mediante el proceso conocido como enfriamiento láser y posteriormente retiraron las partículas más energéticas haciendo uso del enfriamiento por evaporación. Para ello se requirió la implementación de una trampa magneto-óptica que permitió confinar al gas formado por aproximadamente 10^{14} átomos [1].

En este capítulo se presentan de forma general las bases teóricas y experimentales mediante las cuales trabajan los métodos de enfriamiento mencionados arriba. Además, se describe el funcionamiento de las trampas atómicas en las que se confina a los gases que son enfriados.

3.1. Enfriamiento láser

Desde su invención en 1960, el láser ha tenido un gran número de aplicaciones científicas y tecnológicas. El proceso mediante el cuál funciona se conoce como emisión estimulada y consiste en la absorción de un fotón por un átomo que inicialmente se encuentra en un estado excitado. Después de la absorción, el átomo pasa al estado base emitiendo un segundo fotón con las mismas características que el incidente, es decir, la misma frecuencia,

dirección y fase. De ahí que la luz resultante sea monocromática, coherente y de alta intensidad.

En el año de 1975, los físicos T. Hänsch y A. Schawlow, e independientemente Wineland y Dehmelt, fueron los primeros en proponer que el láser podía ser utilizado para enfriar un gas de átomos. Su idea se basó en el hecho de que la radiación electromagnética posee momento y por lo tanto es capaz de ejercer presión sobre las partículas en las que incide y frenarlas. Además, debido a que la temperatura de un gas se encuentra relacionada con la energía cinética de sus átomos y por lo tanto con su velocidad, el frenado se traduce en un enfriamiento general del gas.

La manera en la que la fuerza de radiación frena a los átomos se puede ejemplificar como sigue. Imaginemos que un átomo de masa m y velocidad v absorbe un fotón que viaja en dirección contraria con energía $h\nu$. Durante del proceso de absorción el fotón cede toda su energía al átomo, el cual la convierte en energía interna y pasa a un estado excitado. Pero además de energía, el fotón transfiere momento igual a h/λ , por lo que el átomo disminuirá su velocidad en una cantidad igual, es decir $v' = v - h/m\lambda$. Esta reducción es muy pequeña en comparación con su velocidad inicial, entonces es necesario que se absorban una cantidad enorme de fotones para que el frenado sea considerable ($\sim 10^4$ fotones). Sin embargo, el átomo pasa un tiempo τ en el estado excitado antes de regresar al estado inicial y poder repetir el ciclo emisión-absorción que reducirá su velocidad y por ende su temperatura. Este tiempo corresponde a la vida media del estado excitado y como veremos más adelante es muy relevante para el enfriamiento.

Para regresar al estado inicial el átomo emite de manera espontánea un fotón de la misma energía que el que absorbió pero lo hace en dirección arbitraria. Aunque este proceso involucra nuevamente una transferencia de momento, al promediar sobre un gran número de fotones el átomo sólo habrá disminuido su velocidad en la dirección contraria a su desplazamiento (Fig. 3.1).

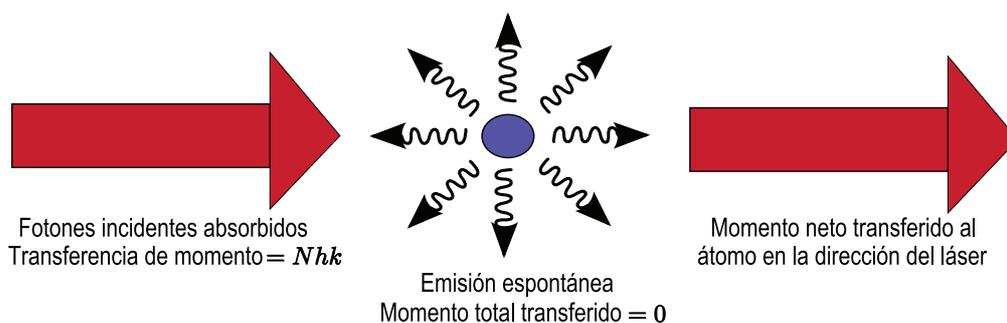


Figura 3.1: El átomo es frenado mediante el proceso de absorción-emisión debido a la transferencia de energía con el haz de luz láser.

En caso de que el fotón y el átomo viajen en la misma dirección, el resultado será un incremento de velocidad. Sin embargo, más adelante veremos que es posible hacer que el átomo “prefiera” a los fotones que viajan en dirección opuesta a él. Cabe mencionar también que la interacción fotón-átomo sólo se dará si estos se encuentran en resonancia, esto significa que la diferencia de energía entre niveles del átomo deberá igualar la cantidad $h\nu$ ($= \hbar\omega_0$ donde ω_0 es la frecuencia de resonancia del átomo).

Para que la reducción en la velocidad sea efectiva es necesario tener control sobre las transiciones que efectúa el átomo en cada ciclo de emisión-absorción. Para ello resulta conveniente pensar al átomo como un sistema cerrado de dos niveles en el que las transiciones tienen lugar únicamente entre el estado inicial $\langle 1|$ y el estado final $\langle 2|$. Experimentalmente esto se consigue fácilmente. Veamos el ejemplo del sodio para el cual se consideran únicamente las transiciones entre los estados $3S_{1/2}$ y $3P_{3/2}$.

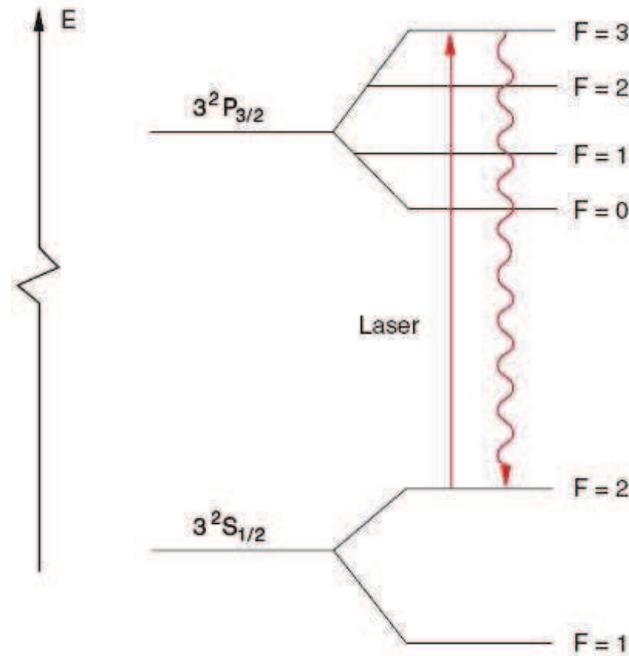


Figura 3.2: Esquema de los niveles energéticos para un átomo de Na . Mediante el ajuste del láser se puede ver al átomo como un sistema cerrado de dos niveles

En la figura 3.2 se muestran las componentes hiperfinas del diagrama de niveles para el sodio. Cada nivel está caracterizado por el número cuántico F de momento angular total que considera las contribuciones del espín electrónico s , el momento angular orbital L y el espín nuclear I , es decir $F = s + L + I$. Entonces, si se ajusta el láser a la transición $F'' = 2 \rightarrow F' = 3$, por emisión espontánea el átomo sólo podrá ir de $F' = 3 \rightarrow F'' = 2$ debido a que las reglas de selección implican que $\Delta F = 0, \pm 1$. De esta forma se tendrá un sistema real que considera únicamente dos niveles del átomo.

3.1.1. Enfriamiento Doppler

Un aspecto importante para que el enfriamiento sea exitoso es ajustar correctamente el láser con la frecuencia de resonancia atómica ω_0 . Sin embargo, debido a la velocidad con que se mueven los fotones, el átomo verá la frecuencia del haz desplazada de su valor original una cantidad $\delta_L(\omega)$ por efecto Doppler. Esta cantidad será negativa si la dirección de propagación del haz es opuesta a la del átomo, y positiva en caso de que ambos viajen en

el mismo sentido. Entonces, para permitir la absorción de fotones es necesario desintonizar el láser una cantidad δ_L de la frecuencia de resonancia. Esto tiene como consecuencia una pérdida de energía para el átomo pues emitirá un fotón de mayor frecuencia del que absorbió.

Fuerza de frenado en un átomo de dos niveles

La transferencia de momento del fotón se puede ver como una fuerza aplicada directamente sobre el átomo cuya magnitud depende de la frecuencia de resonancia atómica ω_0 , el corrimiento debido al efecto Doppler $\delta_L = \omega_L - \omega_0$ y la velocidad del átomo v , principalmente.

Para obtener la fuerza de frenado sobre los átomos es necesario hacer un estudio semi-clásico del sistema en el cual se considera a la radiación láser como una onda electromagnética clásica y al átomo como un sistema cuántico de dos niveles de energía. En el régimen de baja intensidad del láser se encuentra que [12]:

$$F = \hbar k \Gamma = \hbar k \left[\frac{\gamma}{2} \frac{s_0}{1 + s_0 + [2(\delta_L - |\omega_D|)/\gamma]^2} \right], \quad (3.1)$$

donde $s_0 = I/I_s$ es la razón entre la intensidad del láser y la intensidad de saturación¹, γ es el inverso de la vida media de excitación del átomo τ , y $\omega_D = -kv$ es el corrimiento Doppler visto por el átomo.

La cantidad Γ representa la razón de excitación de los átomos y juega un papel muy importante porque determina la magnitud de la fuerza de frenado. A este tema volveremos más adelante.

Para valores grandes de la intensidad I , la fuerza de frenado y la desaceleración del átomo alcanzan valores máximos dados por $F_{max} = \hbar k \gamma / 2$ y $a_{max} = \hbar k \gamma / 2m$. A su vez, esto determina un tiempo y una distancia mínima a la que el átomo puede ser frenado. Como es de esperarse, estos dos últimos parámetros dependen de la velocidad del átomo según $t_{min} = v_0 / a_{max}$ y $L_{min} = v_0^2 / 2a_{max}$. Donde v_0 denota la velocidad inicial del átomo y esta dada por $v_0 = 2\sqrt{kT/m}$. Un punto importante aquí es que la intensidad no puede tener valores arbitrariamente grandes. Esto se debe principalmente a que se busca evitar la emisión estimulada en los átomos, pues como sabemos, en este proceso el fotón se emite en dirección opuesta a la del absorbido resultando en una transferencia de momento cero y por lo tanto en una reducción nula de la velocidad.

Para que el enfriamiento sea considerable es necesario frenar a los átomos tanto como sea posible. Sin embargo, un detalle que no se ha considerado hasta el momento es que al disminuir la velocidad de los átomos el sistema deja de ser resonante pues también cambia la frecuencia con la que estos ven a los fotones del láser. Entonces cesa el proceso de absorción-emisión y su velocidad no disminuye más. Para evitar esta situación es necesario mantener constante el valor de $\delta_L - |\omega_D|$ de forma que los átomos no dejen de absorber fotones. Esto se puede conseguir cambiando la frecuencia del láser o mediante la aplicación

¹La intensidad de saturación se define de tal forma que cuando la intensidad del láser I iguala el valor de I_s , un cuarto de los átomos del gas estarán en un estado excitado.

de campos magnéticos que modifiquen los niveles de energía de los átomos y por lo tanto, la frecuencia de absorción de los mismos. Con cualquiera de estos dos métodos la luz del láser corresponderá siempre a la frecuencia de resonancia de la transición electrónica en los átomos y estos podrán seguir siendo enfriados.

Barrido de la frecuencia láser ω_L

Al disminuir la velocidad con la que se mueven los átomos también disminuye el corrimiento Doppler, es decir, los átomos que han sido enfriados ven que los fotones poseen una frecuencia menor a la de resonancia y por lo tanto no se da la absorción. Para compensar este efecto es necesario incrementar el valor de ω_L de forma tal que para un átomo en reposo coincida con el valor de ω_0 (Fig. 3.3).

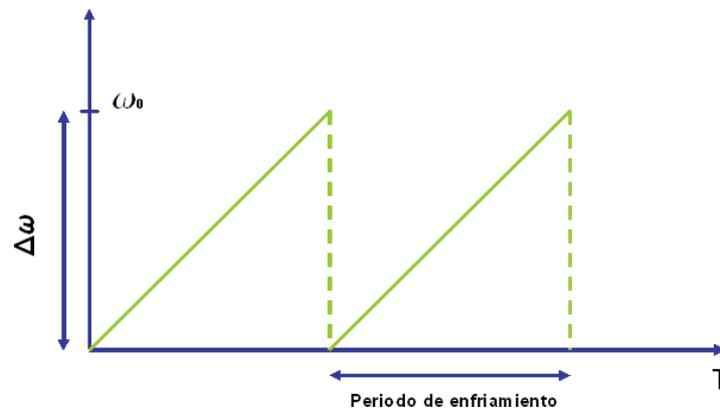


Figura 3.3: Variación de la frecuencia del láser conforme se va frenando a los átomos. La frecuencia ω_0 corresponde a la de resonancia para un átomo en reposo.

El periodo de tiempo en el cual se varía la frecuencia corresponde al necesario para enfriar a los átomos. Con este método se pueden alcanzar velocidades de tan sólo algunos centímetros por segundo. Esta técnica resulta no ser la más conveniente debido a que se requiere modificar de forma rápida y precisa la frecuencia del láser y ello no siempre es posible.

Variación de la frecuencia atómica ω_0

Cambiar la frecuencia de absorción de los átomos implica modificar su niveles de energía conforme se va dando el enfriamiento. Experimentalmente esto se puede conseguir aplicando campos magnéticos o eléctricos.

Al interactuar con un campo magnético externo, el átomo adquiere energía adicional $\Delta E_Z = -\mu_{\text{atomo}} \cdot \mathbf{B}(z)$ que permite el desdoblamiento de los niveles atómicos dependiendo del momento angular que cada uno de ellos posea. A esta interacción del átomo y del campo magnético se le conoce como efecto Zeeman y resulta de gran utilidad durante el proceso de enfriamiento.

Debido a que con cada proceso de absorción el átomo modifica la frecuencia de resonancia, es necesario generar un campo magnético no homogéneo cuya intensidad varía

espacialmente. Entonces, durante su recorrido el átomo ve incrementada la energía de sus niveles por una cantidad ΔE_Z de forma tal que

$$\omega'_0 = \omega_0 + \frac{\Delta E_Z}{\hbar} \quad (3.2)$$

Experimentalmente se busca que el campo disminuya en intensidad conforme los átomos se van frenando. De esta forma se consigue que $\omega'_0 = \omega_0$ cuando $B = 0$. Esto resulta de gran utilidad puesto que el punto en el que se anula el campo coincide con la zona de mínima velocidad, en la cual los átomos pueden ser recolectados (Fig. 3.4).

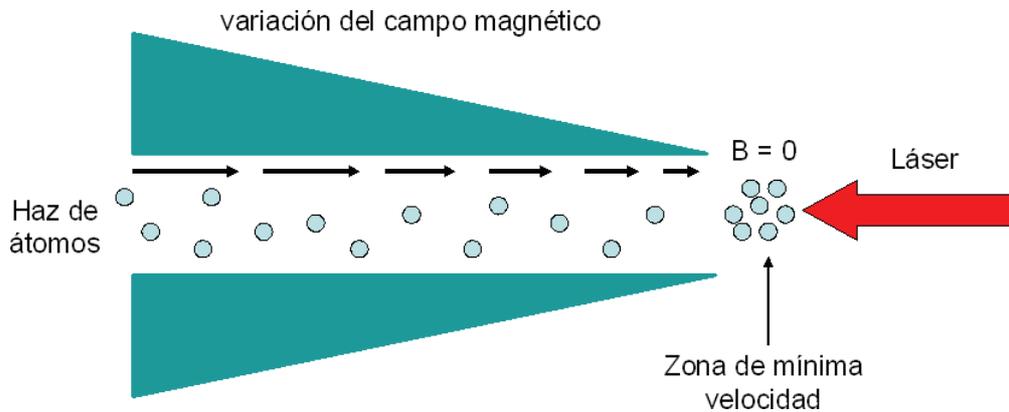


Figura 3.4: Dispositivo utilizado en el enfriamiento Zeeman. Las flechas indican la variación en la magnitud del campo magnético B.

Como se mencionó anteriormente, la modificación en los niveles energéticos también puede obtenerse aplicando un campo eléctrico inhomogéneo. Sin embargo, este método requiere de campos muy grandes y resulta ser más complicado de implementar en el laboratorio.

3.1.2. Melazas ópticas

En ocasiones el haz láser no sólo consigue frenar a los átomos sino que cambia su dirección de movimiento logrando que viajen en su mismo sentido. Entonces los átomos ya no podrán ser enfriados porque la frecuencia que verán ya no será la de resonancia, y en caso de que se llegue a dar la absorción de un fotón, el momento transferido al átomo sería en la misma dirección de desplazamiento del átomo resultando en un incremento de la velocidad. Esto también podría tener como consecuencia la pérdida de átomos durante el experimento.

Con el fin de evitar esta situación, se coloca un segundo haz láser que se propaga en dirección opuesta al primero, y así debido al efecto Doppler y al desplazamiento en frecuencia de cada uno de los haces, los átomos sólo absorben los fotones que viajan en la dirección contraria a su propia dirección de movimiento, mientras que aquellos que viajan en la misma dirección serán ignorados ya que no poseen la frecuencia de resonancia y por lo tanto no pueden ser absorbidos (Fig. 3.5). Entonces, además de asegurar la reducción

de velocidad de un mayor número de átomos se logra recolectar a los que ya han sido enfriados.

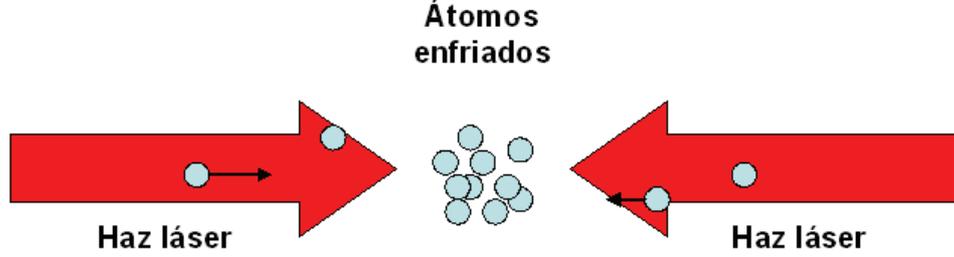


Figura 3.5: Dos haces láser permiten enfriar a los átomos y confinarlos en una pequeña región del espacio. Cada uno de ellos afecta únicamente a los átomos que viajan en sentido contrario a la propagación del láser

De igual forma que en el caso de un solo láser es posible encontrar la fuerza que siente el átomo pero ahora debida a los dos haces que se propagan en sentidos opuestos. Considerando nuevamente un sistema con baja intensidad se obtiene que la fuerza total es simplemente la suma de las contribuciones de cada uno de ellos, es decir $F_{mel} = F_+ + F_-$, con

$$\begin{aligned} F_{\pm} &= \pm \hbar k \Gamma \\ &= \pm \hbar k \left[\frac{\gamma}{2} \frac{s_0}{1 + s_0 + [2(\delta_L \mp |\omega_D|)/\gamma]^2} \right]. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Entonces, la fuerza total está dada por [13]:

$$\begin{aligned} F_{conf} &= F_+ + F_- \\ &= \frac{\hbar k \gamma}{2} \left[\frac{s_0}{1 + s_0 + (2\delta_+/\gamma)^2} - \frac{s_0}{1 + s_0 + (2\delta_-/\gamma)^2} \right], \\ &= \vec{F}_{conf} \cong \frac{8\pi k^2 \delta s_0 v}{\gamma(1 + s_0 + (2\delta/\gamma)^2)} \equiv -\beta v \end{aligned} \quad (3.4)$$

de donde podemos concluir que la fuerza depende en gran medida de la velocidad con la que se mueven los átomos. En la ecuación anterior $\delta_{\pm} = \delta_L \mp |kv|$ denota el corrimiento completo en la frecuencia. Entonces podemos ver que existe una dependencia de la velocidad y el corrimiento con la fuerza de frenado. Esta dependencia resulta en una aceleración de los átomos si hay un *corrimiento al azul*, es decir si $\delta_L < 0$, mientras que para *corrimiento al rojo* (si $\delta_L > 0$) la fuerza actúa en contra del átomo y lo frena (Fig. 3.6).

Para un átomo de masa m que se mueve en la región en que se traslapan los dos haces de luz láser, la fuerza esta dada por $F = -\beta v$. Entonces, a partir de la relación $dv/dt = F/m$ se encuentra que

$$dv/v = -\frac{\beta}{m} dt$$

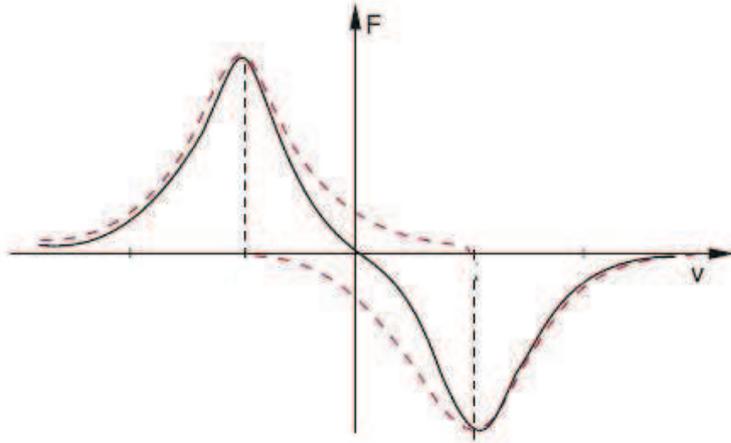


Figura 3.6: Se muestra la fuerza de frenado o de fricción que sienten los átomos debido a su velocidad para corrimiento al rojo. En la región central de velocidades, la fuerza varía linealmente con la velocidad. Las curvas punteadas muestran los perfiles de absorción debidos a un solo átomo moviéndose en la misma dirección y de forma opuesta al láser.

de donde se obtiene que la velocidad tiene una dependencia en el tiempo que varía según

$$v = v_0 e^{(-\beta/m)t} \quad (3.5)$$

es decir, en la región de intersección de los haces el átomo experimenta una fuerza tal que su velocidad decrece exponencialmente con el tiempo de enfriamiento definido como $t_D = m/\beta$.

Hasta éste punto se ha hecho el análisis solamente en una dimensión, sin embargo en los experimentos reales se requiere frenar a los átomos en las tres dimensiones espaciales. Para ello se utiliza un arreglo de tres pares de haces láser mutuamente perpendiculares como se muestra en la figura 3.7.

Estas configuraciones permiten restringir el movimiento de los átomos a la región de intersección de los seis haces, por lo que además de ser un método de enfriamiento resulta ser un buen recolector de átomos fríos. En el centro del arreglo los átomos sufren un amortiguamiento debido a que la fuerza que actúa sobre ellos es de la forma $\vec{F} = -\beta\vec{v}$. Entonces, debido que el átomo ve afectado su movimiento de igual manera que si estuviera inmerso en un medio muy viscoso, a este tipo de dispositivo se le conoce como “Melaza Óptica”.

La fuerza que experimenta el átomo en la zona de intersección corresponde a la suma de las tres componentes espaciales F_x , F_y y F_z , donde cada una de ellas toma la forma de (3.4). Igualmente, la velocidad en el centro del arreglo decrecerá exponencialmente según $v_i = v_{i0} e^{(-\beta/m)t}$, donde $i = x, y, z$. Debemos recordar que estas expresiones sólo son válidas para un átomo de dos niveles en el régimen de intensidades de láser y velocidades bajas. En la figura 3.6 se puede observar que la fuerza es tipo viscosa únicamente en el intervalo en que se traslapan los dos haces láser. En caso contrario la dependencia de la fuerza con la velocidad deja de ser lineal y el átomo no siente el amortiguamiento del medio.

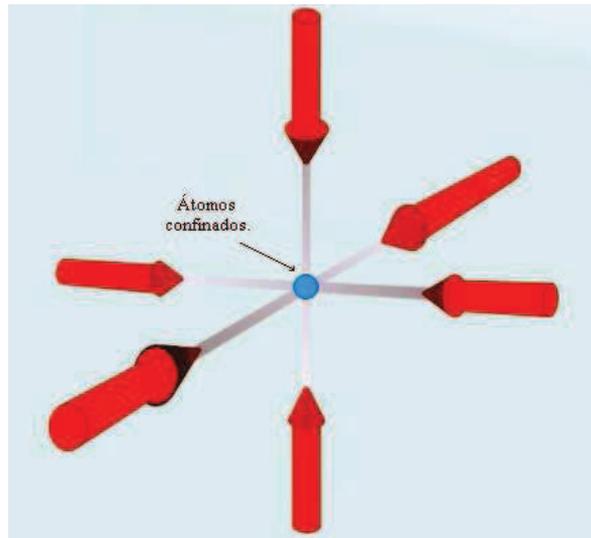


Figura 3.7: Arreglo experimental de los tres pares de luz láser. En el centro del dispositivo los átomos sienten una fuerza viscosa que los confina.

Con ayuda de este mecanismo de enfriamiento se ha encontrado que un átomo puede reducir su velocidad de 600m/s a tan solo 30m/s . Este intervalo de velocidades corresponde a llevar al gas de temperatura ambiente (300 K) a tan sólo unos cuantos μK mediante la absorción de aproximadamente 2×10^4 fotones [14].

Límites del enfriamiento Doppler

Existen varios factores que limitan las velocidades y por lo tanto las temperaturas mínimas que pueden alcanzar los átomos mediante esta técnica. Un ejemplo de ello es que la fuerza de frenado no puede exceder el valor de $F_{max} = \hbar k \gamma / 2$, entonces los átomos no disminuyen más su velocidad y el gas no puede seguir siendo enfriado. Además, la emisión espontánea de fotones implica una transferencia de momento al átomo en direcciones aleatorias, por lo que visto desde el espacio de momentos, el átomo efectuará un movimiento de caminante aleatorio que impedirá que su velocidad sea cero. De acuerdo con esto, la temperatura mínima que se puede alcanzar está dada por $T_{min} = \hbar \gamma / 2 k_B$, la cual depende únicamente de la vida media del estado excitado τ . En el cuadro 3.1 se muestran las temperaturas y velocidades mínimas que se pueden alcanzar para los átomos alcalinos que más se han utilizado con esta técnica de enfriamiento

Otro factor importante es que en realidad no todos los átomos del gas tienen la misma velocidad inicial, entonces no todos verán a los fotones con la frecuencia de resonancia y por ende no serán enfriados. Estos átomos “rápidos” pueden transferir momento a los que fueron desacelerados resultando en un incremento de la temperatura del gas. La densidad también representa un problema pues mientras más átomos fríos se acumulan mayor es la probabilidad de que choquen entre ellos aumentando el tamaño de la región de confinamiento y también su velocidad promedio.

Átomo	$T_{inicial}$ (K)	\bar{v}_0 (m/s)	τ (ns)	T_{min} (μ k)	v_{min} (cm/s)
^7Li	1017	2051	26.87	142.11	71
^{23}Na	712	876	15.90	240.18	30
^{85}Rb	568	402	26.63	143.41	20
^{133}Cs	544	319	30.70	124.39	15

Cuadro 3.1: Temperaturas y velocidades mínimas que se pueden alcanzar mediante la técnica de enfriamiento Doppler.

3.1.3. Enfriamiento sub-Doppler

El enfriamiento Doppler permite reducir la temperatura hasta cierto límite que depende del átomo que se esté enfriando. Teóricamente se ha encontrado que para los principales átomos alcalinos utilizados en el laboratorio la temperatura mínima está apenas por arriba de los 100 μ K. Sin embargo, experimentalmente se encontró que las temperaturas alcanzadas eran mucho menores que T_{min} . Por ejemplo, para el sodio se lograban temperaturas de 40 μ K siendo que $T_{min} = 240 \mu\text{K}$. Estos resultados hicieron pensar en la existencia de otros mecanismos de enfriamiento que no estaban siendo tomados en cuenta.

Posteriormente se mostró que el enfriamiento sub-Doppler se debe principalmente a gradientes de intensidad y de polarización de la luz láser con la que se frena a los átomos. En esta sección discutiremos estas dos técnicas de enfriamiento.

Por lo general la luz láser está polarizada linealmente, de forma que dos haces láser de la misma frecuencia que se propaguen en sentidos opuestos formarán una onda estacionaria. Dado que la dirección de polarización de la luz coincide con la dirección de oscilación del campo eléctrico, en los nodos se cumplirá que $\vec{E} = 0$. El valor máximo que alcance \vec{E} corresponderá con la intensidad del haz. Entonces podremos decir que la onda estacionaria representa un *gradiente de intensidad* de la luz. También es posible generar un *gradiente de polarización* mediante dos haces ortogonales linealmente polarizados que se propagan en sentidos opuestos. En este caso, la polarización cambiará de circular a lineal cada $\lambda/8$ de longitud de onda como se muestra en la figura 3.8.

Supongamos primero un átomo de dos niveles que viaja entre dos haces láser que se propagan en direcciones opuestas con polarizaciones lineales perpendiculares, es decir, en un gradiente de polarización. Consideremos además que se utiliza un campo magnético que permite modificar los niveles energéticos del átomo con el fin de que siempre esté en resonancia con el láser. Debido al espín, el átomo tendrá dos subniveles asociados con el estado base que irán cambiando con la polarización por efecto Stark². Este cambio se puede apreciar más claramente en la figura 3.8 b.

Supongamos un átomo que se encuentra en la región de polarización circular derecha σ^+ y en el subnivel con $M_F = 1/2$, donde M_F representa la proyección del momento angular total \mathbf{F} del átomo. Para pasar al subnivel $M_F = -1/2$ el átomo debe perder energía mediante el proceso conocido como bombeo óptico que consiste en lo siguiente: el átomo

²El efecto Stark consiste en modificar los niveles energéticos y por lo tanto la energía interna del átomo mediante la aplicación de un campo eléctrico.

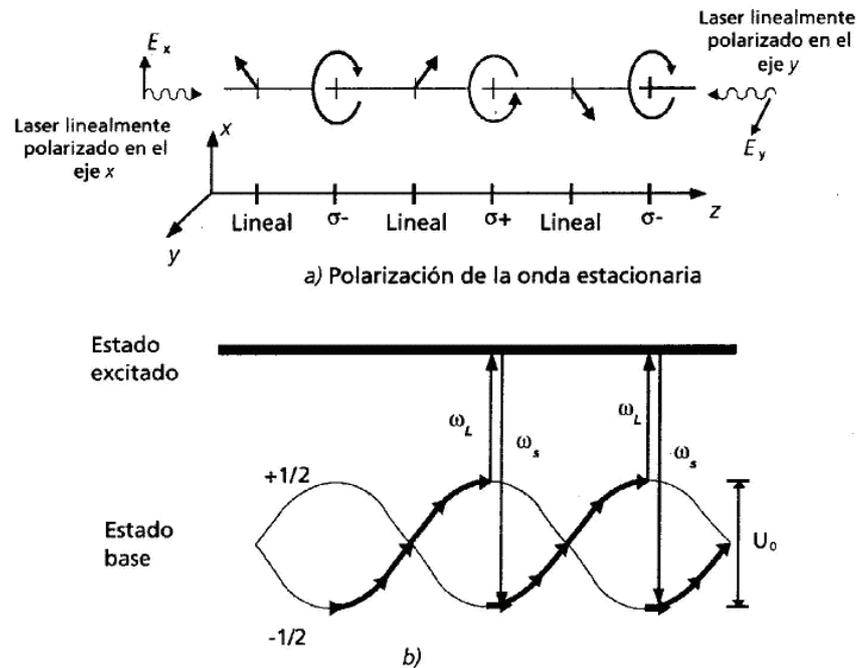


Figura 3.8: Mecanismo de enfriamiento por gradiente de polarización.

absorbe un fotón del láser con frecuencia ω_L y pasa al estado excitado. Posteriormente, por emisión espontánea emite un fotón de frecuencia ω_s y pasa al subnivel del estado base con menor energía, es decir $M_F = -1/2$. El efecto total es que el átomo pierde una cantidad de energía U_0 igual a la separación entre los subniveles. Para pasar a la región con polarización negativa σ^- el átomo convierte la energía cinética en energía potencial, sin embargo, al ser bombeado esta energía se pierde en forma de radiación y nunca se recupera. Además, el átomo regresa al subnivel de menor energía y el proceso vuelve a repetirse. Esta técnica también recibe el nombre de enfriamiento Sísifo en analogía con el personaje griego del mismo nombre³.

Para un gradiente de intensidad se tendrá un efecto similar pero ahora el átomo se moverá a través de una onda estacionaria con polarización circular. En el nodo, el átomo se encuentra en el subnivel de mayor energía del estado base. En ese punto, redistribuye su energía por efecto Zeeman y es bombeado ópticamente, es decir absorbe un fotón de frecuencia ω_L para pasar al estado excitado y emite otro con frecuencia mayor ω_s para ir al subnivel de menor energía del estado base. Posteriormente el átomo es acelerado hacia el siguiente nodo y repite el ciclo. Nuevamente el efecto total será la pérdida de energía en cada bombeo óptico resultando en un enfriamiento general del gas (Fig. 3.9).

Estos dos tipos de enfriamiento sólo son efectivos para átomos que se mueven a bajas velocidades, ya que con esto se asegura que haya tiempo suficiente para llevar a cabo el

³En la mitología griega Sísifo es condenado a empujar una roca a la parte más alta de una colina, sin embargo, una vez que llegaba a la cima, la roca resbalaba hasta la base obligándolo a empujarla nuevamente.

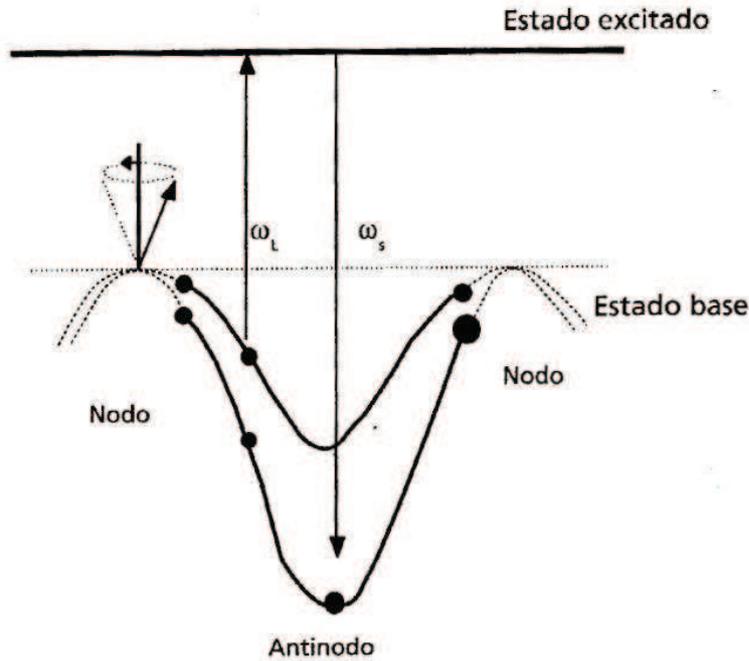


Figura 3.9: Mecanismo de enfriamiento sub-Doppler en gradiente de intensidad creado por una onda estacionaria

bombeo óptico mientras el átomo se encuentra en el subnivel del estado base de mayor energía. Los átomos que se muevan muy rápidamente no serán afectados por el enfriamiento Sísifo, por lo que es recomendable frenarlos por efecto Doppler antes de llevar a cabo esta técnica.

3.2. Confinamiento de átomos neutros

Actualmente existe una gran variedad de trampas que permiten el confinamiento de átomos neutros, la mayoría utilizan luz o campos magnéticos para guiar a los átomos hacia una región en específico. Sin embargo, se ha comprobado que aquellas que mezclan estas dos técnicas resultan ser las más eficientes. A este tipo de trampas se les conoce como magneto-ópticas (MOT por sus siglas en inglés) y son especialmente importantes para la obtención del condensado de Bose-Einstein.

Las trampas magneto-ópticas consisten básicamente de un arreglo de haces láser similar a una melaza óptica y de un campo magnético cuadrupolar que varía linealmente con la distancia generado por dos bobinas de Helmholtz con corrientes opuestas. Si consideramos al eje z como el eje de simetría, el campo magnético cerca del mínimo (escogido como el origen del sistema de coordenadas, es decir $z = 0$) se escribe como

$$B(z) = bz . \quad (3.6)$$

La magnitud del campo está dada por $B = B'(x^2 + y^2 + (bz)^2)^{1/2}$, de donde resulta claro ver que varía linealmente con la distancia y que en $z = 0$ es nulo.

Para un átomo inmerso en este campo magnético, se tendrá que la interacción con el campo es de la forma $V = -\mu_{atomo} \cdot \mathbf{B}$, donde $\mu_{atomo} = -g_J \mu_B \mathbf{J} + g_I \mu_N \mathbf{I}$. Como se mencionó en la sección (3.1) \mathbf{J} representa el momento angular total mientras que \mathbf{I} al espín nuclear. g_J corresponde al factor de Landé para el acoplamiento L-S y g_I es la razón giromagnética del núcleo.

Debido a que el magnetón de Bohr μ_B es mucho mayor en magnitud que el nuclear μ_N , se puede suponer que $\mu_{atomo} \cong -g_J \mu_B \mathbf{J}$. Entonces la energía de interacción entre el átomo y el campo estará dada por

$$\begin{aligned} V &= g_J \mu_B \mathbf{J} \cdot \mathbf{B} \\ &= g_F \mu_B M_F |\mathbf{B}|, \end{aligned} \quad (3.7)$$

donde $g_F = \frac{F(F+1)+J(J+1)-I(I+1)}{2F(F+1)}$. M_F es el número cuántico magnético y cumple con $-F \leq M_F \leq F$.

El campo magnético externo B interactúa con los átomos de tal forma que se puede decir que ellos se encuentran bajo la acción de un potencial de confinamiento cuya magnitud está dada por (3.7). De acuerdo con esto, los átomos sentirán una fuerza asociada al potencial V que será de la forma

$$\mathbf{F} = -\nabla V = -g_F \mu_B M_F \nabla |\mathbf{B}|. \quad (3.8)$$

De la ecuación anterior podemos ver que aquellos átomos con número cuántico $M_F > 0$ sentirán una fuerza de atracción hacia el punto en que el campo es mínimo, que en este caso coincide con el centro de la trampa. En caso contrario, si los átomos se encuentran en un estado tal que $M_F < 0$ sentirán una fuerza de repulsión y podrán escapar de la trampa. De esta forma se puede ver que todos los átomos con $M_F > 0$ serán llevados al centro de la configuración quedando atrapados en este punto.

Mediante un análisis similar al de las melazas ópticas es posible encontrar la forma explícita de la fuerza que sienten los átomos debido al campo magnético en términos de la frecuencia del láser ω_L , la de absorción ω_0 y el corrimiento en la frecuencia δ [14]. Resulta interesante mencionar que mediante este análisis se obtiene que $F = -Dz$, donde la constante D involucra las cantidades mencionadas anteriormente. Entonces, debido a que $F_z = -\nabla V$, es posible atribuir a la trampa magneto-óptica un potencial armónico tal que

$$V(z) = \frac{1}{2} D z^2. \quad (3.9)$$

lo cual, estabiliza a los átomos alrededor de $z = 0$.

Si en la relación anterior incluimos la fuerza que sienten los átomos debido a la melaza óptica tendremos que la fuerza total que actúa sobre ellos es

$$F_z = -Dz - \beta v_z. \quad (3.10)$$

La relación anterior indica que los átomos de masa m que se encuentran cerca del centro de la trampa efectúan una oscilación amortiguada con frecuencia $\Omega = \sqrt{D/m}$ y constante de amortiguamiento $\alpha = \beta/m$. Es decir, los átomos serán llevados al centro de la trampa como se había mencionado antes.

3.3. Enfriamiento por evaporación

Las temperaturas alcanzadas con enfriamiento láser son impresionantemente bajas (del orden de μK) pero no lo suficiente como para producir un condensado de Bose-Einstein. Para alcanzar tales temperaturas es necesario utilizar un método conocido como *enfriamiento por evaporación* después del enfriamiento láser.

Este procedimiento permite la producción de muestras de átomos con baja temperatura y alta densidad confinadas y enfriadas previamente en una trampa magneto-óptica.

La técnica del enfriamiento por evaporación es muy sencilla de entender y se basa en la remoción de aquellos átomos que poseen una mayor energía cinética promedio. Este proceso es seguido por una rethermalización del resto del gas mediante colisiones elásticas.

Experimentalmente, el procedimiento mediante el cual se retira a los átomos más energéticos es básicamente el que sigue: primero, los átomos que ya han sido enfriados con luz láser son enviados a una trampa magneto-óptica en la que inicialmente solo actúa el campo magnético. Entonces debido a la fuerza magnética los átomos serán llevados al centro de la trampa y se atenuará su movimiento. La distribución de energía de los átomos implica que “llenen” el potencial de la trampa hasta cierto valor E_{max} que dependerá de la temperatura.

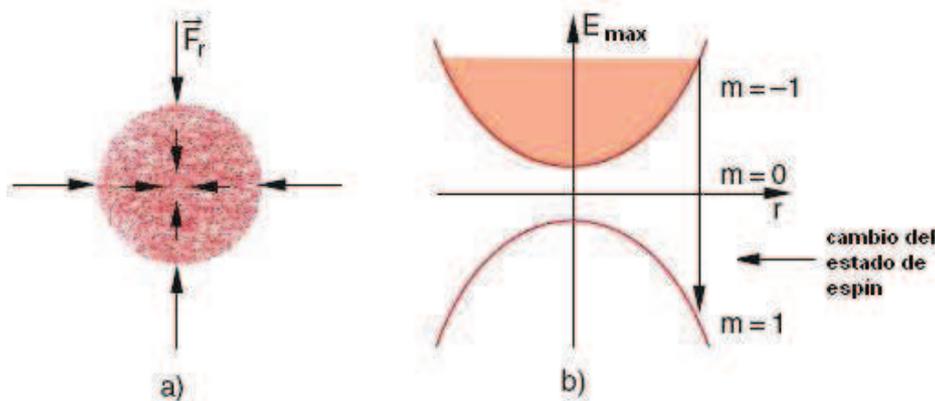


Figura 3.10: Enfriamiento por evaporación en una trampa magnética. a) Nube atómica confinada por la fuerza puramente magnética. b) potencial armónico asociado con la MOT. Se muestra el cambio en el estado del espín que permite retirar a las partículas con mayor energía.

Una vez que los átomos han sido confinados, la trampa se irradia con radiofrecuencia con el objetivo de cambiar el espín electrónico s . Este cambio en el espín ocurre cuando la frecuencia $\nu_{rf} \Delta E / h$ iguala la diferencia de energía $\Delta E = E_{\uparrow} - E_{\downarrow} = (g_s \mu_B) 2 = 2 \mu_B B$. Los átomos que han cambiado su estado de espín son expulsados de la trampa debido a que su potencial es ahora negativo (Fig. 3.10). Si se escoge la frecuencia de tal forma que sólo los átomos más calientes (con energía cinética y velocidad mayor) puedan cambiar el estado de espín, se tendrá una disminución en la energía promedio de los átomos que permanecen atrapados. También se puede lograr el enfriamiento mediante la disminución del potencial de confinamiento. Esto se lleva a cabo a través de una reducción en la intensidad del campo magnético aplicado.

Aunque al retirar a las partículas más energéticas se eliminan átomos de la muestra, se requiere sólo la evaporación de una pequeña cantidad de ellos para enfriar al gas de manera considerable. Las densidades atómicas (número de partículas en el gas) que se requieren están dadas por $n\lambda_T^3 \simeq 2,612$, donde n es la densidad del gas y λ_T^3 es la longitud de onda térmica de de Broglie. Para átomos a presión y temperatura ambiente esta cantidad toma valores de aproximadamente 10^6 , sin embargo, en el laboratorio suelen tenerse nubes con $\sim 10^{10}$ átomos. Valores más grandes para la densidad pueden provocar que la luz dispersada por un átomo sea reabsorbida por otro incrementando su energía cinética y por lo tanto la temperatura del gas en general, además de representar una posible pérdida de átomos de la muestra.

El proceso de evaporación se puede repetir tantas veces sea necesario hasta alcanzar la temperatura de transición del condensado. Sin embargo, durante el proceso y sobre todo en la descripción teórica del mismo se deben tener en cuenta las siguientes restricciones:

1. La distribución de los átomos en el espacio de las coordenadas y momentos (espacio fase) depende solamente de la energía de los átomos y de su naturaleza.
2. Al inicio del proceso de evaporación el gas puede ser descrito mediante la estadística clásica y se asume que se encuentra lejos de la fase condensada.
3. La tasa de colisiones elásticas es mayor que la de colisiones inelásticas. Entonces, al dominar las colisiones elásticas se asegura la conservación de la energía del sistema⁴.
4. El proceso de evaporación preserva la naturaleza térmica de la distribución. Es decir, la termalización (el proceso mediante el cual el gas alcanza el equilibrio) es mucho más rápida que la tasa de enfriamiento (la razón a la cual son extraídos del sistema los átomos más energéticos).
5. Los átomos que escapan de la trampa no colisionan ni intercambian energía con los que permanecen en ella.

Mediante esta técnica de enfriamiento es posible alcanzar temperaturas del orden de 10^{-9}K necesarias para la formación del condensado de Bose-Einstein.

3.4. Observación del BEC en átomos de ^{87}Rb

Mediante la implementación de los métodos de enfriamiento mencionados en este capítulo, en 1995 el grupo de Eric Cornell y Carl Anderson logró obtener por primera vez un condensado de átomos de ^{87}Rb en el laboratorio. El proceso que siguieron se describe a continuación.

Durante aproximadamente 300s recolectaron átomos a temperatura ambiente ($\sim 300\text{K}$) utilizando una trampa magneto-óptica. Es decir, utilizaron la fuerza ejercida por el láser para llevar a los átomos a una región en el espacio en la que además, el campo magnético era nulo (Figs. 3.7 y 3.4). Posteriormente ajustaron la frecuencia del láser y el gradiente del campo aplicado para comprimir y enfriar la muestra a tan solo $20 \mu\text{K}$.

⁴Con esto se evitan pérdidas de energía como por ejemplo la asociada con el enlace entre átomos.

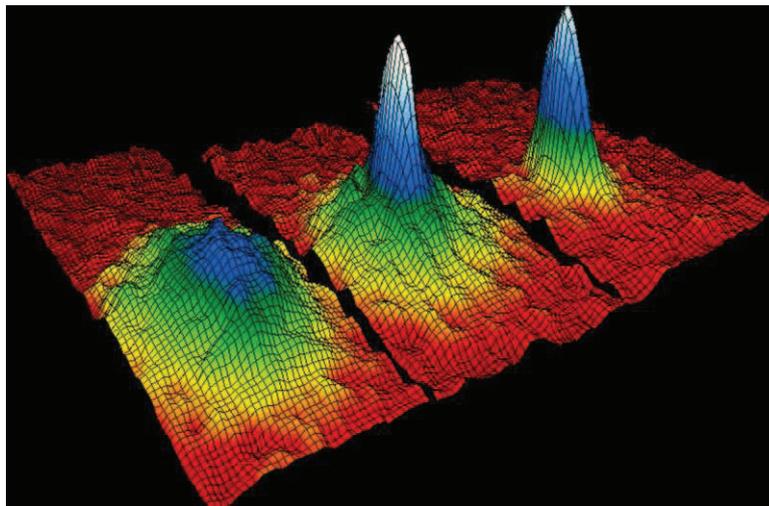


Figura 3.11: Distribución de velocidades para un gas de rubidio. A partir de ella se confirmó el descubrimiento de la fase condensada para bosones. A la izquierda se muestra al gas antes de la transición y en el centro, el momento justo en que aparece el condensado. La imagen de la derecha representa el momento posterior a la evaporación, en este punto se tiene una nube en la que prácticamente todos los átomos se encuentran en el estado base.

Debido a que resulta necesario tener una nube atómica con una densidad relativamente alta antes del proceso de evaporación, el equipo de Cornell utilizó una MOT cuyo campo magnético rota alrededor de la trampa con cierta frecuencia. A este dispositivo se le conoce como TOP por sus siglas en inglés (Time Orbiting Potential) y posee una alta capacidad de confinamiento atómico pues permite obtener densidades de espacio fase 3 veces mayores que cualquier otra trampa.

Con ayuda de la TOP se incrementó la tasa de colisiones en el gas por un factor de 5. Justo en este punto se tenían cerca de 4×10^6 átomos en la trampa con una temperatura de $90 \mu\text{K}$. Además, la densidad aproximada era de 2×10^{10} átomos/ cm^3 .

Una vez realizado lo anterior, la muestra fue enfriada evaporativamente durante 70s . El método que se siguió para dejar escapar a las partículas más energéticas fue el de reducir la “altura” del potencial variando la frecuencia del láser. Después de esto, se permitió que el gas se equilibrara durante un periodo de tiempo de 2s .

Finalmente, el condensado apareció en un rango de frecuencias del láser entre 4.25 y 4.23 MHz. La nube atómica consistía de aproximadamente 2×10^4 átomos, con densidad de $2,6 \times 10^{12}$ átomos/ cm^3 y temperatura 170 nK. En la figura 3.11 se muestra la distribución de velocidades del gas antes y después de la transición al condensado [1].

3.5. Gas de Bose en dos dimensiones

Como se había mencionado en el capítulo anterior, para un gas de Bose en un potencial armónico en dos dimensiones se observa el fenómeno de condensación. Sin embargo, experimentalmente se ha encontrado que esta fase no corresponde precisamente a la predicha por

la teoría de Bose-Einstein sino más bien a la de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT).

A diferencia del caso tridimensional, en un gas de bosones en dos dimensiones el orden de largo alcance es destruido por las fluctuaciones térmicas. Es principalmente por esta razón que un fluido de bosones idénticos no puede pasar a la fase condensada. A pesar de ello, el sistema puede formar un *cuasi-condensado* y volverse superfluido por debajo de una temperatura crítica. La teoría de BKT asocia esta transición de fase con la aparición de un orden topológico que resulta del apareamiento de vórtices con circulaciones opuestas [15, 16].

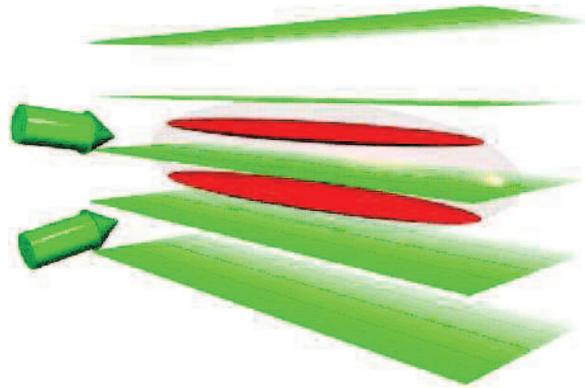


Figura 3.12: Realización experimental de la fase BKT para un gas de Bose bidimensional en una trampa armónica

La manera en que se consigue un sistema bidimensional se esquematiza en la figura (3.12). Inicialmente se tiene un gas de bosones que se ha preparado mediante un proceso de enfriamiento láser seguido de la evaporación de las partículas más energéticas. Con el propósito de “rebanar” al gas se introduce una *red óptica* con un periodo de tan sólo unos cuantos micrómetros ($\sim 3\mu m$ para átomos de ^{87}Rb) a lo largo de la dirección vertical z . Esto permite partir al gas tridimensional en dos nubes independientes y comprimir las hasta obtener dos sistemas bidimensionales. Aunque existe tunelaje de partículas de una nube a otra, la tasa a la que esta se da es despreciable en comparación con el tiempo en el que se lleva a cabo el experimento.

El número de átomos que suele contener cada nube depende de la temperatura y varía entre 0 y 5×10^4 , mientras que el número total total de átomos por plano es de $\sim 10^5$.

Para un gas ideal en dos dimensiones el número de partículas en el sistema está dado por la ecuación

$$N(\mu, T, \omega) = \mathcal{V} \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^3 g_2(\alpha) . \quad (3.11)$$

donde \mathcal{V} representa el volumen armónico dado por el inverso de la frecuencia ω al cubo.

Los experimentos realizados para bosones en dos dimensiones muestran que para potencial químico cero el valor crítico del número de partículas es mayor que el predicho por (3.11). En particular se encuentra que $N_c = aN_{c,ideal}$ con $a = 5,3$. Es decir, se obtiene cinco veces más partículas condensadas que las esperadas para el gas ideal.

Un modelo heurístico de este tipo de condensación se basa en proponer un perfil de densidad gaussiano observado experimentalmente para $N_{c,BKT}$. De acuerdo con esto,

$$N_{c,BKT} = \rho_c \lambda^2 \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right) = \rho_c \lambda^2 \frac{6}{\pi^2} N_{c,ideal}. \quad (3.12)$$

Esta ecuación resulta adecuada pues al introducir el valor experimental encontrado para $\rho_c \lambda^2$, el número de partículas $N_{c,BKT}$ toma el valor de 4.9. El cual, como se puede ver, es muy cercano a 5.3.

CAPÍTULO 4

Modelos teóricos del gas de Bose con interacción

En el primer capítulo de este trabajo se estudió la termodinámica del gas ideal de Bose sin tomar en cuenta ni la estructura interna de los átomos ni su interacción. Sin embargo, los átomos atrapados (magnética u ópticamente) no sólo interactúan, sino que esta interacción puede llegar a ser considerable. Un aspecto importante en la descripción teórica del gas de Bose y de la fase condensada es tomar en cuenta las interacciones que tienen lugar en la nube atómica que forma el gas. Debido a que esto representa una complejidad en las ecuaciones a resolver, es necesario hacer suposiciones en el tipo de interacción sin perder el sentido físico del problema.

Actualmente existen varios métodos para describir el gas de Bose no ideal que contemplan no sólo herramientas matemáticas sofisticadas como segunda cuantización o teoría de campo, sino también simulaciones numéricas que modelen el comportamiento observado experimentalmente. En este capítulo se presentarán de forma breve las principales teorías que describen al gas de Bose tanto en su fase normal como en la fase condensada. Así mismo se discutirán las ventajas y alcances de cada una de ellas.

4.1. Interacción entre átomos

La interacción entre los átomos de un gas puede ser descrita en forma general por un potencial $V(r)$ que es función de la distancia relativa r entre ellos. Aunque $V(r)$ puede llegar a ser muy complicada, para el caso de un gas diluido es posible afirmar que la parte relevante es aquella que contempla interacción a largo alcance y que corresponde a una fuerza de tipo Van der Waals. Debido a que esta fuerza es atractiva, en principio puede provocar el enlace entre los átomos que han sido confinados en la trampa, sin embargo, gracias a que los átomos sufren colisiones elásticas por pares la energía se conserva e impide la formación de moléculas o pares ligados.

La interacción de Van der Waals es causada por la fuerza dipolo-dipolo entre los átomos y tiene la forma $-C_6/r^6$, donde C_6 es un coeficiente que permite definir una *longitud característica de Van der Waals* r_0 . En términos de la masa reducida m_r para dos átomos idénticos, r_0 está dada por la relación

$$r_0 \equiv \left(\frac{2m_r C_6}{\hbar^2} \right)^{1/4} . \quad (4.1)$$

Esta longitud es muy importante, pues está relacionada con la magnitud de la interacción entre partículas.

En los experimentos en gases atómicos suele darse la colisión entre entre más de dos átomos, sin embargo la cantidad de ellas es muy pequeña si se considera el régimen de gas diluido, es decir, con densidad n muy pequeña. La distancia típica r_0 a la que ocurre la interacción para átomos alcalinos está entre los 20 y los 30 \AA , mientras que la densidad de átomos en la trampa es del orden de $n \sim 10^{11} - \sim 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, lo cual corresponde a una distancia interatómica de entre 500 y 600 \AA . Entonces, en un gas como el que se utiliza en el laboratorio, el porcentaje de colisiones entre tres partículas o más es muy bajo y puede no ser tomado en cuenta. Además, la interacción entre pares de partículas resulta ser tal que las colisiones de dos cuerpos no involucran transiciones entre diferentes estados hiperfinos, es decir, los átomos suelen permanecer en el mismo estado en que fueron preparados. Dicha interacción contribuye a la energía potencial total del átomo en la trampa. Pero sin duda alguna, la mayor importancia de las colisiones binarias reside en el hecho de que ellas son necesarias para que el sistema alcance el equilibrio termodinámico.

En el caso de los átomos alcalinos la función de la interacción $V(r)$ se simplifica considerablemente, pues como vimos anteriormente suele suceder que la longitud de intreracción r_0 es mucho más pequeña que la distancia interatómica promedio r . Entonces, puesto que $V(r)$ solo actúa a una distancia muy corta en comparación con la separación entre los átomos r , es posible aproximarla mediante una función delta de Dirac como sigue

$$V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \approx \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) . \quad (4.2)$$

En la siguiente sección veremos de forma más detallada la justificación de este potencial.

4.1.1. Longitud de dispersión en onda s

Consideremos dos átomos neutros idénticos y de masa m que interactúan mediante un potencial $V(r)$ esféricamente simétrico. Desde el sistema de referencia del centro de masa, el sistema de dos átomos se puede caracterizar por la masa reducida $m_r = m/2$, el número de onda k y energía $E_k = \hbar^2 k^2 / 2m_r$. De acuerdo con esto, la función de onda para el movimiento del centro de masa es una onda plana, mientras que para el movimiento relativo de los átomos se satisface la ecuación de Schrödinger:

$$\left[\frac{p^2}{2m_r} + V(r) \right] \psi_k(r) = E_k \psi_k(r) . \quad (4.3)$$

Para caracterizar la dispersión se suele escribir la función de onda del movimiento relativo como la suma de una onda plana incidentes y una onda dispersada

$$\psi_k(r) = e^{ikz} + \psi_{k,disp}(r) , \quad (4.4)$$

donde se ha escogido el eje z como la dirección de la velocidad relativa de la onda incidente. Para distancias interatómicas grandes la onda dispersada es una onda esférica de la forma

$f(k)e^{ikr}/r$, donde $f(k)$ es la amplitud de dispersión. Si asumimos que la interacción entre los átomos es esféricamente simétrica, podemos escribir la función de onda para distancias grandes como

$$\psi_k(r) \sim e^{ikz} + f(k, \theta) \frac{e^{ikz}}{r}, \quad (4.5)$$

donde la amplitud de dispersión $f(k, \theta)$ depende únicamente de la energía de las partículas y del ángulo θ que relaciona las direcciones del momento relativo antes y después de la dispersión.

Como veremos después, la sección eficaz es una cantidad que relaciona la longitud de dispersión con los cambios de fase de la onda dispersada con respecto a la onda incidente, por ello es importante considerarla en nuestro desarrollo.

La diferencial de la sección transversal σ se expresa en términos de la amplitud de dispersión según:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(k, \theta)|^2. \quad (4.6)$$

Si consideramos la dispersión a través de un ángulo entre θ y $\theta + d\theta$, el elemento de ángulo sólido es $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$. Debido a que el potencial en consideración tiene simetría esférica, la solución a la ecuación de Schrödinger tiene simetría axial con respecto a la dirección de la partícula incidente, por lo tanto, es posible expandir a la función de onda del movimiento relativo en términos de los polinomios Legendre $P_l(\cos \theta)$ como

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \theta) R_{kl}(r), \quad (4.7)$$

donde $R_{kl}(r)$ es la función de onda radial y satisface la ecuación

$$R_{kl}''(r) + \frac{2}{r} R_{kl}'(r) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m_r}{\hbar^2} V(r) \right] R_{kl}(r) = 0. \quad (4.8)$$

Entonces, el potencial efectivo de interacción entre el par de átomos está dado por los dos últimos términos entre paréntesis de la ecuación anterior y se puede escribir como

$$V_{ef}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_r r^2} + V(r), \quad (4.9)$$

de donde resulta claro ver que en el caso en que $l = 0$, $V_{ef}(r)$ se reduce al potencial interatómico $V(r)$. Además, se obtiene como resultado que para $l \neq 0$ el potencial que sienten los átomos tiene una contribución que se puede describir como una barrera centrífuga cuya magnitud depende de $l(l+1)$.

Regresando a la sección transversal tendremos que cada onda parcial $\sigma_l(k)$ estará dada por

$$\sigma_l(k) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2(\delta_l(k)), \quad (4.10)$$

donde δ_l representa el cambio en la fase.

En el límite en que k es muy pequeña ($k \rightarrow 0$), el cambio en la fase $\delta_l(k)$ para un potencial de alcance finito varía según k^{2l+1} . Si el potencial a grandes distancias varía de acuerdo con r^{-n} , el resultado anterior es válido si se cumple que $l < (n - 3)/2$, pero para ondas parciales superiores (l grande) el cambio de fase $\delta_l(k)$ es proporcional a k^{n-2} .

Ahora bien, en el caso de la interacción de tipo Van der Waals se tiene un potencial que varía según $1/r^6$ para grandes distancias, por lo que podemos decir que en este caso los cambios de fase se vuelven muy pequeños conforme k se aproxima a cero. Esto se traduce en que la sección eficaz de dispersión en el régimen de bajas energías se vuelve considerable sólo para ondas parciales con $l = 0$ (onda s).

Entonces, la amplitud de dispersión es isotrópica y se escribe como $f = \delta_0/k$. Además, la sección eficaz esta dada por

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sigma_{l=0}(k) = 4\pi a_s^2, \quad (4.11)$$

de donde podemos ver la relación con la longitud de dispersión a_s definida como

$$a_s = - \lim_{k \rightarrow 0} \tan \frac{\delta_0(k)}{k} \quad (4.12)$$

Entonces, podemos resumir el análisis realizado mediante la afirmación de que para $l \neq 0$ los átomos sienten además del potencial interatómico $V(r)$ una barrera centrífuga proporcional a $l(l+1)$, por lo que la probabilidad de que se acerquen a una distancia en la que la interacción sea apreciable es prácticamente nula. Entonces, se puede concluir que es una muy buena aproximación el considerar las interacciones de los átomos en el régimen de onda s para el cual $l = 0$.

Un resultado más relevante aún es que para dos átomos de masa reducida m_r , la existencia de una longitud de dispersión a_s implica una interacción efectiva igual a $(2\pi\hbar^2 a_s/m_r)\delta(r)$, donde r representa la coordenada relativa entre ellos. El caso más común que se considera es el de dos átomos de masa m para los cuales $m_r = m/2$, de forma que

$$V_{ef}(r) = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \delta(r) \quad (4.13)$$

Esta interacción puede ser caracterizada mediante una constante g cuyo valor corresponde a $g = \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m}$.

Además, usualmente g y a_s son positivas, correspondiendo a una interacción repulsiva. Esto último es importante debido a que al existir repulsión entre las partículas se evita el colapso de la nube atómica. Entonces, el valor esperado para la energía potencial interatómica está dada por

$$\langle E_{int} \rangle = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} |\Psi(0)|^2 \quad (4.14)$$

donde $\Psi(0)$ representa una función de onda que tiende a un valor constante si $r \gg a_s$. Esta función de onda también se puede expresar mediante la notación $\Psi(r_{ij} \rightarrow 0)$, la cual indica que la coordenada relativa r_{ij} debe ser muy grande comparada con la longitud de dispersión a_s .

Los efectos de esta interacción puede ser vistos como un potencial adicional que siente cada átomo, como resultado de la interacción promediada con los demás átomos del gas. Al introducir esta contribución de campo medio al potencial en la ecuación de Schrödinger se obtiene una ecuación no lineal que debe ser resuelta de forma autoconsistente para encontrar las funciones de onda y cantidades como la densidad de partículas $n(r)$ y el potencial químico μ para el caso en que el gas de Bose ha pasado al estado condensado. A este tipo de función se le conoce como ecuación de Gross-Pitaevskii y será estudiada con más detalle en la siguiente sección.

4.2. La ecuación de Gross-Pitaevskii

La ecuación de Gross-Pitaevskii (GP) fue sugerida en 1961 como una descripción para la fase superfluida del ^4He líquido, sin embargo, debido a la fuerte interacción entre los átomos de Helio no resultó ser la descripción más apropiada. Por el contrario, en el caso de los gases de átomos alcalinos diluidos, los cuales interactúan más débilmente, la ecuación GP ofrece una muy buena descripción de la fase condensada y por esta razón ha sido ampliamente utilizada en la interpretación de los experimentos. Además ofrece una descripción de las propiedades del gas de Bose a temperatura cero cuando la longitud de dispersión a_s es mucho menor que el espaciamiento entre átomos. La ecuación GP se puede ver también como la ecuación de Hartree aplicada a un gran número de bosones condensados.

Consideremos un sistema de N bosones idénticos que se mueven bajo la acción de un potencial externo que depende de la posición y el tiempo $V(\mathbf{r}, t)$ y supongamos que se satisface la condición de gas diluido, es decir, que

$$(na_s^3)^{1/3} \ll 1. \quad (4.15)$$

donde n es la densidad del gas. Además, asumamos que la longitud de dispersión a_s es menor que cualquier longitud que caracteriza al potencial externo $V_{ext}(\mathbf{r})$.

Entonces, la función de onda Ψ de muchos cuerpos más sencilla que se puede proponer es de la forma de Hartree, es decir, una función de onda en la que todos los bosones ocupan el mismo estado.

Consideremos la ecuación de Schrödinger escrita en segunda cuantización

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(x) + V_{ext} \Psi(x) + \int dy \Psi(y) V(x-y) \Psi(y) \Psi(x) \quad (4.16)$$

donde $\Psi(x)$ representa un operador de campo en términos de los operadores de creación y aniquilación que puede ser escrito en la forma

$$\Psi(x) = \sum_l \varphi_l(x) a_l \quad (4.17)$$

Sean N partículas en el estado base, las cuales pueden ser descritas mediante $|N, 0, 0, \dots, 0\rangle$. Entonces, según la ecuación anterior para $\Psi(x)$ tendremos que

$$\Psi(x)|N, 0, 0, \dots, 0\rangle = \sum_l a_l \varphi_l(x)|N, 0, 0, \dots, 0\rangle = \sqrt{N} \varphi_0(x)|N, 0, 0, \dots, 0\rangle \quad (4.18)$$

por lo que cada uno de los términos de la ecuación de Schrödinger se puede escribir como:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi_0(x) \sqrt{N} |N, 0, 0, \dots, 0\rangle \quad (4.19)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{N} \nabla^2 \varphi_0 |N, 0, 0, \dots, 0\rangle \quad (4.20)$$

$$V_{ext} \Psi(x) = V_{ext} \sqrt{N} \varphi_0 |N, 0, 0, \dots, 0\rangle \quad (4.21)$$

El término de interacción resulta un poco más complicado pues

$$\begin{aligned} & \sum_l \sum_m \sum_n \varphi_l^*(y) \varphi_m(y) \varphi_n(x) a_l^\dagger a_m a_n |N, 0, 0, \dots, 0\rangle \\ &= \sqrt{N-1} \sqrt{N} \sqrt{N-2+1} \varphi_0^*(y) \varphi_0(x) \varphi_0(y) |N-1, 0, 0, \dots, 0\rangle \\ & \quad + \sqrt{N} \sqrt{N-1} \sum_{l \neq 0} \varphi_0(x) \varphi_0(y) \varphi_l^*(y) |N-2, 0, 0, \dots, 0\rangle \end{aligned} \quad (4.22)$$

Entonces la ecuación (4.16) toma la forma,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sqrt{N} \varphi_0(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{N} \nabla^2 \varphi_0(x) + V_{ext}(x) \sqrt{N} \varphi_0(x) + \\ & \quad \sqrt{N}(N-1) \int dy \varphi_0^*(y) V(x-y) \varphi_0(y) \varphi_0(x) + \\ & \quad \sqrt{N} \sqrt{N-1} \int dy \Psi(y) V(x-y) \varphi_0(y) \varphi_0(x) \end{aligned} \quad (4.23)$$

Para un número N grande, es posible suponer que $\sqrt{N}(N-1) \sim N^{3/2}$ y $\sqrt{N} \sqrt{N-1} \sim N$. De donde podemos ver que en el límite termodinámico, la mayor contribución la tendrá el término

$$\sqrt{N}(N-1) \int dy \varphi_0^*(y) V(x-y) \varphi_0(y) \varphi_0(x) \quad (4.24)$$

Definamos ahora a la función $\Psi(\mathbf{r}, t) = N^{1/2} \varphi_0(\mathbf{r}, t)$.

Entonces, es posible escribir a la ecuación de Schrödinger como

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V_{ext}(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) + g |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \Psi(\mathbf{r}) \quad (4.25)$$

donde hemos sustituido $V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = g \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ con $g = \frac{4\pi \hbar^2 a_s}{m}$.

Esta última ecuación es conocida como la *ecuación de Gross-Pitaevskii* (dependiente del tiempo) o en algunos casos *ecuación de Schrödinger no lineal* y describe la fracción de átomos en fase condensada, por esta última razón, en ocasiones también se le da el nombre de ecuación del condensado.

4.2.1. Consecuencias de la ecuación de Gross-Pitaevskii

Supongamos una función de onda $\Psi(\mathbf{r})$ definida en la forma (4.17) y fijemos un potencial externo tal que $V_{ext}(\mathbf{r}, t) = V_{ext}(\mathbf{r})$. Entonces, la función de onda del condensado debe ser dependiente del tiempo sólo mediante un factor de fase que puede ser escrito como $e^{-i\mu t/\hbar}$ (donde el parámetro μ es una cantidad por el momento desconocida). Si sustituimos esta función en la ecuación de GP dada por (4.25) obtendremos la ecuación de GP independiente del tiempo (donde $\Psi(\mathbf{r})$ es ahora el factor independiente del tiempo) dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{r}) + V_{ext}(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) + \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}|\Psi(\mathbf{r})|^2\Psi(\mathbf{r}) = \mu\Psi(\mathbf{r}) . \quad (4.26)$$

Para encontrar el significado físico de la cantidad μ notemos que la forma de $\Psi(\mathbf{r})$ debe ser tal que minimice la expresión para el valor esperado de la energía (4.14), es decir

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \int |\nabla\Psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} + \int V_{ext}(\mathbf{r})|\Psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \cdot \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \int |\Psi(\mathbf{r})|^4 d\mathbf{r} , \quad (4.27)$$

la cual está sujeta a la condición de conservación del número total de partículas, es decir a la restricción

$$\int |\Psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = N . \quad (4.28)$$

Es posible tratar a la restricción por la vía típica de introducir un multiplicador de Lagrange y variar la ecuación para la energía (4.27) con respecto a la forma de $\Psi(\mathbf{r})$. Haciendo esto se encuentra que μ es precisamente el multiplicador asociado con la conservación del número de partículas, es decir, resulta ser el potencial químico y cumple con

$$\mu = \frac{\partial E(N)}{\partial N} . \quad (4.29)$$

Se puede encontrar que la ecuación GP independiente del tiempo está caracterizada en cualquier punto del espacio, por una longitud $\xi(\mathbf{r})$ definida como

$$\xi(\mathbf{r}) = \sqrt{8\pi n(\mathbf{r})a_s} , \quad (4.30)$$

donde $n(\mathbf{r}) \equiv |\Psi(\mathbf{r})|^2$ representa la densidad de átomos en ese punto [5].

En el límite de gas diluido, es decir cuando $na_s^3 \ll 1$ la cantidad ξ es muy grande comparada con el espaciamiento entre átomos $n^{-1/3}$ y la longitud de dispersión a_s . Mediante un estudio de casos específicos como el potencial de caja (en el cual $V_{ext}(\mathbf{r}) = 0$ y Ψ debe tender a cero en las paredes) se puede encontrar que ξ es una medida de la distancia sobre la cual el parámetro de orden tiene la capacidad de recobrar su valor si este es forzado a moverse de su posición de equilibrio $[\bar{n}(\mathbf{r})]^{1/2}$.

Si la distancia ξ es muy pequeña comparada con otras longitudes características, entonces el término de energía cinética en la ecuación de GP independiente del tiempo (4.26) se puede desarrollar sólo hasta primer orden y la ecuación se reduce a

$$V_{ext}(\mathbf{r}) + n(\mathbf{r})g = \mu, \quad g \equiv 4\pi\hbar^2 a_s/m \quad (4.31)$$

La ecuación anterior es conocida como la ecuación de Thomas-Fermi y se refiere simplemente al potencial total efectivo en el cual el movimiento de los átomos es constante.

Ecuación de Gross-Pitaevskii para bosones atrapados

Examinemos ahora la solución a la ecuación de GP para bosones en una trampa. Como bien sabemos, los átomos atrapados sienten un potencial armónico de la forma

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2). \quad (4.32)$$

Con el fin de simplificar el problema, supongamos que las tres frecuencias de oscilación son iguales, es decir, que el potencial es isotrópico, entonces $V = m\omega^2 r^2/2$. Mediante un cálculo variacional para este potencial y escogiendo la función de prueba gaussiana $\Psi(r) = Ae^{-r^2/2b^2}$ se puede encontrar que [13, 17]:

$$E = \frac{3}{4}\hbar\omega \left(\frac{a_{osc}^2}{b^2} + \frac{b^2}{a_{osc}^2} \right) + \frac{g}{(2\pi^{3/2})} \frac{1}{b^3}, \quad (4.33)$$

donde $g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}$ representa la magnitud de interacción entre partículas.

El mínimo en la energía se obtiene derivando la expresión anterior. El resultado que se obtiene es que para el caso ideal, es decir, sin interacción entre átomos ($g = 0$), el mínimo en la energía ocurre cuando $b = a_{osc}$, donde

$$a_{osc} = \left(\frac{\hbar}{m\omega_0} \right)^{1/2} \quad (4.34)$$

es el radio característico de la función de onda gaussiana para el oscilador armónico. Para el valor de equilibrio b , los dos términos que representan a la energía cinética y potencial dan una contribución igual a la energía total, la cual es $E = 3\hbar\omega/2$, como es de esperarse para el estado base del oscilador armónico. Cabe mencionar que el método variacional arroja resultados exactos en este caso particular debido a que la función de onda de prueba tiene la misma forma gaussiana que la solución real para el oscilador armónico.

Consideremos ahora el caso en que la magnitud de la interacción sea positiva, es decir $g > 0$ y por lo tanto los átomos sientan una atracción entre ellos¹. En este caso se tiene que la razón entre los términos que representan las interacciones atómicas y la energía cinética se puede escribir como

$$\frac{4}{3(2\pi)^{3/2}} \frac{g}{a_{osc}^3 \hbar\omega} \simeq \frac{Na_s}{a_{osc}} \quad (4.35)$$

La cantidad Na_s/a_{osc} es una medida adimensional de la fuerza de interacción. Además, la razón a_s/a_{osc} resulta ser muy importante pues para valores de N mayores que ella, el término de la energía cinética se vuelve menos importante y por lo tanto se puede despreciar. Es decir, la aproximación de Thomas-Fermi es válida en este desarrollo.

En el caso de los átomos de sodio $a_{osc} = 2\mu m$ mientras que la longitud de dispersión tiene el valor de $a_s = 3nm$. Entonces, cuando el número de átomos en el condensado excede a $a_{osc}/a_s = 700$ es posible hacer un análisis teórico en el que la energía cinética no contribuya.

¹Aunque los condensados con interacciones efectivas atractivas ya han sido creados experimentalmente, existe el riesgo de que colapsen conforme el número de átomos crece.

La solución a la ecuación de Gross-Pitaevskii se vuelve más sencilla al despreciar la energía cinética. Este caso coincide con el régimen de Thomas-Fermi y entonces la ecuación de GP independiente del tiempo (4.26) se reduce a

$$V_{ext}(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) + \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} |\Psi(\mathbf{r})|^2 \Psi(\mathbf{r}) = \mu \Psi(\mathbf{r}) , \quad (4.36)$$

de donde podemos obtener que cuando $\Psi(\mathbf{r}) \neq 0$

$$|\Psi(\mathbf{r})|^2 = \frac{\mu - V_{ext}(\mathbf{r})}{g} . \quad (4.37)$$

Por consiguiente, la densidad de átomos $n(\mathbf{r}) = |\Psi(\mathbf{r})|^2$ en el oscilador armónico tiene la forma de una parábola invertida cuya ecuación está dada por

$$n(\mathbf{r}) = \left(1 - \frac{x^2}{R_x^2} - \frac{y^2}{R_y^2} - \frac{z^2}{R_z^2} \right) . \quad (4.38)$$

En el caso contrario, es decir cuando $\Psi(\mathbf{r}) = 0$ se tiene que $V(\mathbf{r}) = \mu$. Esto quiere decir que los átomos “llean la trampa” (el potencial armónico) hasta el valor del potencial químico μ como se muestra en la figura 4.1.

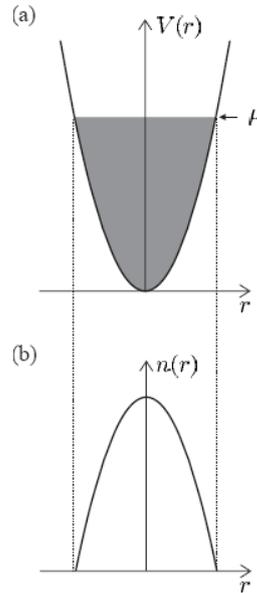


Figura 4.1: a) En el régimen de la aproximación de Thomas-Fermi el condensado tiene la misma forma que el potencial de confinamiento. a) Potencial armónico b) La densidad de átomos en una trampa armónica tiene la forma de una parábola invertida (a lo largo de los tres ejes espaciales.)

Como ya se mencionó, la aproximación de Thomas-Fermi ignora el término de energía cinética en la ecuación de GP independiente del tiempo. Además encontramos que la densidad $n(\mathbf{r})$ puede ser expresada mediante la ecuación de una parábola invertida. Sin

embargo, el pico que se obtiene para $n(\mathbf{r})$ resulta poco realista cuando se compara con los resultados experimentales. Por lo tanto se vuelve necesario tomar en cuenta de alguna forma la energía cinética. Acerca de este tema se puede encontrar más información en las referencias [13], [17] y [18].

Ecuación de GP dependiente del tiempo e hidrodinámica del condensado

La ecuación de GP puede también describir la dinámica de la fase condensada del gas de Bose. Para ello es necesario considerar la ecuación dependiente del tiempo como se verá a continuación. Aunque este trabajo no tiene como uno de sus objetivos el describir la hidrodinámica del condensado, este tema se presentará por completéz.

En esta sección veremos de forma general que la ecuación de GP ofrece una explicación apropiada para las cantidades hidrodinámicas encontradas en los los superfluidos.

Para comenzar con nuestro desarrollo retomemos el caso de la ecuación de GP dependiente del tiempo dada por la ecuación (4.25)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V_{ext}(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) + \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \Psi(\mathbf{r}, t) ,$$

y separemos a $\Psi(\mathbf{r}, t)$ en términos de la amplitud y la fase, es decir

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \equiv (n(\mathbf{r}, t))^{1/2} e^{i\varphi(\mathbf{r}, t)} (n, Re[\varphi]) . \quad (4.39)$$

Al estudiar la hidrodinámica de los superfluidos se encuentra que su velocidad $\mathbf{v}_s(\mathbf{r}, t)$ está dada por [17]:

$$\mathbf{v}_s(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{\hbar}{m} \nabla \varphi(\mathbf{r}, t) . \quad (4.40)$$

Mediante la sustitución de estas dos últimas expresiones (4.39) y (4.40) en la ecuación de GP dependiente del tiempo (4.25) se encuentran los siguientes resultados

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(\mathbf{r}, t) = -\nabla \cdot (\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}_s(\mathbf{r}, t)) , \quad (4.41)$$

de donde vemos claramente que la relación anterior es la ecuación de continuidad. Además se obtiene que

$$m \frac{\partial \mathbf{v}_s}{\partial t} = -\nabla \{ V_{ext}(\mathbf{r}, t) + n(\mathbf{r}, t)g + \frac{1}{2} m v_s^2(\mathbf{r}, t) + \Phi_Q(\mathbf{r}, t) \} \quad (4.42)$$

donde $\Phi_Q(\mathbf{r}, t)$ es el llamado término de “presión cuántica” definido como

$$\Phi_Q(\mathbf{r}, t) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{[\rho(\mathbf{r}, t)]^{1/2}} \nabla^2 \rho^{1/2}(\mathbf{r}, t) . \quad (4.43)$$

Si consideramos el régimen en el cual la variación espacial sea muy lenta, es posible despreciar este término de presión y definir un potencial químico $\mu(\mathbf{r}, t)$ dependiente del tiempo y del espacio a través de la siguiente fórmula

$$\mu(\mathbf{r}, t) \equiv V_{ext}(\mathbf{r}, t) + n(\mathbf{r}, t)g . \quad (4.44)$$

Utilizando el hecho de que la velocidad del superfluido $\mathbf{v}_s(\mathbf{r}, t)$ tiene la propiedad de ser irrotacional, es posible escribir a la ecuación (4.42) en la forma

$$m \frac{D\mathbf{v}_s}{Dt}(\mathbf{r}, t) = -\nabla\mu(\mathbf{r}, t) , \quad (4.45)$$

donde $\frac{D}{Dt}$ es la derivada hidrodinámica definida como $\partial/\partial t + \mathbf{v} \cdot \nabla$.

Con base en lo anterior es posible interpretar a la ecuación de GP dependiente del tiempo como una simple equivalencia para las ecuaciones de un fluido clásico. En el límite de amplitudes pequeñas, es decir $\mathbf{v}_s \rightarrow 0$, la ecuación de continuidad (4.41) y la del potencial químico (4.44) tienen soluciones que corresponden a las ondas de sonido con velocidad c_s , dadas por

$$c_s^2 \equiv m^{-1}(\partial\mu/\partial n) = n_0 g / m , \quad (4.46)$$

La ecuación de GP dependiente del tiempo en conjunto con las ecuaciones hidrodinámicas para un superfluido permiten encontrar el espectro de excitaciones para la fase condensada. Existe una forma alterna de obtener el espectro de excitaciones para el condensado sin tener que recurrir a las variables hidrodinámicas. Lo anterior se consigue directamente de la ecuación de GP a través de introducir un cambio $\delta\Psi$ en la función de onda Ψ . Este método es conocido como la aproximación de Bogoliubov porque mediante él se llega a las ecuaciones encontradas por Bogoliubov para las excitaciones del condensado [43].

4.3. Gas de Bose y matriz de densidad

Una descripción alternativa para un gas de Bose con interacciones es a través de la matriz de densidad.

Un sistema físico compuesto por N partículas no siempre puede ser caracterizado por una función de onda como $\Psi_N(\mathbf{r})$. Esto se debe principalmente a que con frecuencia un *ensemble* cuántico puede estar constituido a su vez por varios subensembles independientes entre sí. En estos casos es posible que una variable dinámica A esté bien definida en cada uno de los subensembles y que tome por ejemplo el valor A_i . Entonces, el valor promedio de la variable A dependerá del *peso* ω_i que tenga A_i para cada subensemble, es decir,

$$\langle A \rangle = \sum_{i=1}^N \omega_i A_i . \quad (4.47)$$

Para este tipo de sistema se requiere pasar de la descripción del sistema en términos de un vector de estado a una que requiere un conjunto apropiado de vectores de estado y sus pesos correspondientes. En 1927 Landau y von Neumann independientemente introdujeron la llamada matriz de densidad ρ , la cual permite la descripción de este tipo de sistemas y que se define como

$$\rho = \sum_{ij} \omega_{ij} |i\rangle \langle j| . \quad (4.48)$$

Entonces, con base en lo anterior, el valor esperado del operador A , promediado sobre los diferentes estados $|i\rangle$ se obtiene tomando la traza del producto de ρ y A , es decir

$$\langle A \rangle = \text{tr}[\rho A] = \sum_i \omega_i \langle i|A|i\rangle . \quad (4.49)$$

Los pesos ω_i son positivos y están normalizados. Esto significa que la matriz de densidad ρ es un operador hermítico positivo, es decir, sus eigenvalores son positivos. Además, la traza de ρ (la suma de sus eigenvalores) es igual a 1.

La matriz de densidad es ampliamente utilizada en física estadística debido a que resulta una buena herramienta para describir sistemas de muchos cuerpos. Además, debido a que ρ es un operador que caracteriza al sistema completo es posible obtener la evolución del sistema a partir de la ecuación de Schrödinger

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho(t)] \quad (4.50)$$

Definición de BEC en un sistema con interacciones

La matriz de densidad tiene una gran cantidad de aplicaciones, por ejemplo resulta útil para la descripción del condensado de Bose-Einstein. Para ello, es necesario considerar un número macroscópico de partículas que ocupan todas el mismo estado cuántico. Además, se debe tomar en cuenta la existencia de un potencial de interacción entre ellas.

La descripción de este tipo de sistema fue dada por Penrose y Onsager y en ella se considera un gran número N de bosones caracterizados por coordenadas \mathbf{r}_i ($i = 1, 2, \dots, N$). Aunque hemos visto en las secciones anteriores que la interacción que describe apropiadamente a los gases alcalinos a bajas temperaturas se puede aproximar por $V_{ef}(r) = g\delta(r)$, en este caso supondremos que el potencial de interacción es arbitrario e incluso puede ser dependiente del tiempo.

Ahora bien, un estado puro s del sistema de muchos cuerpos al tiempo t puede ser descrito por la función de onda

$$\Psi_N^s(t) \equiv \Psi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) , \quad (4.51)$$

donde, Ψ_s es una función simétrica ante el intercambio de cualquier par de partículas i, j . Pero también, el estado más general del sistema puede ser escrito como una mezcla de diferentes estados puros s con pesos p_s .

Entonces, es posible describir este sistema mediante una matriz de densidad. Consideremos en particular, la matriz de densidad para una sola partícula $\rho_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ definida por

$$\begin{aligned} \rho_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) &\equiv N \sum_s p_s \int d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_N \Psi_s^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) \Psi_s(\mathbf{r}', \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) \\ &\equiv \langle \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}', t) \rangle \quad (\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1, \mathbf{r}' \equiv \mathbf{r}'_1) , \end{aligned} \quad (4.52)$$

donde se han introducido los operadores de campo $\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)$ y $\psi(\mathbf{r}', t)$ que representan a los operadores de creación y aniquilación a_μ^\dagger y a_μ respectivamente².

²En este caso se ha considerado una base de vectores $|\mu\rangle$ con eigenestados $|\mathbf{r}\rangle$ del operador de coordenadas.

De la definición anterior para la matriz de densidad es posible ver que ρ_1 tiene la propiedad de ser Hermítica, es decir $\rho_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) \equiv \rho_1^*(\mathbf{r}', \mathbf{r}; t)$, y por lo tanto puede ser diagonalizada. Entonces, podremos escribir que

$$\rho_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = \sum_i n_i(t) \chi_i^*(\mathbf{r}, t) \chi_i(\mathbf{r}', t), \quad (4.53)$$

donde las funciones $\chi_i(\mathbf{r}, t)$ forman, para un tiempo dado t , un conjunto ortogonal y completo. Es importante notar que en general, las eigenfunciones χ_i de la matriz de densidad ρ_1 y sus eigenvalores n_i son funciones del tiempo.

Ahora bien, en base a los eigenvalores que se obtengan para el número de ocupación promedio n_i es posible distinguir entre la fase condensada y la fase normal para el gas de Bose. En particular se puede decir que:

1. Si todos los eigenvalores n_i de ρ_1 al tiempo t son del “orden de la unidad” (no de N) entonces decimos que el sistema es normal al tiempo t . (es decir, no está en la fase condensada).
2. Si hay un solo eigenvalor del “orden de N ”, y el resto es del orden de la unidad, entonces decimos que el sistema exhibe una fase condensada (BEC).

Estrictamente hablando, las frases “orden de la unidad” y “orden de N ” son ambiguas y no se encuentran cuantitativamente definidas. Con el fin de hacer más claro el significado de estas frases es necesario introducir el límite termodinámico, es decir, para un gas en un volumen Ω , si $N \rightarrow \infty$, $\Omega \rightarrow \infty$ y $N/\Omega = \text{const}$. Entonces, el enunciado de que n_i sea de orden de N puede ser definido de manera equivalente a que la cantidad n_i/N sea una constante. De forma similar, que n_i sea de orden uno implica que $n_i/N \rightarrow 0$.

De acuerdo con lo anterior, el primer enunciado implica que si para todos los estados i del sistema se cumple que el número promedio de ocupación es despreciable comparado con el número total de partículas en el sistema N , entonces no existe ningún estado poblado macroscópicamente y el gas se encuentra en la fase normal. Por el contrario, si existe un estado para el cual el número de ocupación promedio sea comparable con el número de partículas total N del sistema, se estará hablando de un gas en fase condensada.

El anterior fue un ejemplo del uso que se le puede dar a la matriz de densidad. Sin embargo, más adelante veremos que sus alcances son mayores. Así por ejemplo, la deducción de la ecuación maestra que gobierna la evolución temporal de los estados de ocupación de un sistema de bosones puede ser bien caracterizado mediante la matriz de densidad ρ .

4.4. Ecuación maestra

La dinámica del gas de Bose con interacción muchas veces es descrita a través de una ecuación maestra que involucra la evolución temporal de la matriz de densidad asociada al sistema. A continuación veremos los aspectos generales de esta descripción.

Para derivar la ecuación maestra de un gran número de bosones es necesario que los grados de libertad relevantes se encuentren completamente caracterizados por vectores de

estado $|i\rangle$ o matrices de densidad y que la evolución temporal del sistema completo se pueda representar mediante el operador unitario $U(t) = e^{-iHt}$.

Consideremos un sistema compuesto por dos subsistemas S (Sistema) y B (Baño). Entonces, el Hamiltoniano de los sistemas combinados, es decir $S + B$ se escribirá como $H = H_S + H_B + V$. Donde H_S es el hamiltoniano del sistema, H_B el del baño y V representa un término de interacción entre ambos.

El objetivo de la ecuación maestra es encontrar la dinámica del sistema al tomar la trazar sobre los grados de libertad del baño. Sin embargo, esto no siempre es posible o resulta demasiado complicado, por lo que se vuelve necesario hacer aproximaciones sobre el sistema. Por ejemplo, una primera aproximación es suponer que la interacción entre partículas V es lo suficientemente débil como para que la teoría de perturbaciones sea aplicable.

A continuación veremos algunas de las características y suposiciones básicas que se requieren para encontrar la ecuación maestra que gobierna la dinámica del sistema S .

4.4.1. Ecuación de movimiento general

Supongamos un sistema que puede ser descrito a través de una matriz de densidad ρ cuya evolución en el esquema de interacción se puede escribir como

$$i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{\rho} = [\tilde{V}(t), \tilde{\rho}] , \quad (4.54)$$

donde $\tilde{\rho}(t) \equiv U_0^\dagger \rho U_0$, $\tilde{V}(t) \equiv U_0^\dagger V U_0$, y $U_0 = e^{-i(H_S + H_B)t/\hbar}$.

Esta evolución es muy general, y su solución puede ser formalmente escrita como

$$\tilde{\rho}(t) = \tilde{\rho}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt_1 [\tilde{V}(t_1), \tilde{\rho}(t_1)] . \quad (4.55)$$

Iterando esta ecuación una vez se llegará a

$$\tilde{\rho}(t) = \tilde{\rho}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt_1 [\tilde{V}(t_1), \tilde{\rho}(0)] + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_0^t \int_0^{t_1} dt_1 dt_2 [\tilde{V}(t_1), [\tilde{V}(t_2), \tilde{\rho}(t_2)]] . \quad (4.56)$$

La anterior es la forma más general de expresar la solución para la ecuación dinámica del sistema. Sin embargo, para simplificar los cálculos que se quieran realizar a partir de ella es necesario hacer uso de aproximaciones como la de Born o la de Markov. A continuación describimos brevemente cada una de ellas.

Aproximación de Born: acoplamiento débil.

La aproximación de Born consiste en expresar a la matriz de densidad (en este caso) en forma iterativa. Entonces, ρ será una serie convergente con la siguiente forma

$$\tilde{\rho}(t) = \tilde{\rho}(0) + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_0^t dt_1 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n [\tilde{V}(t_1), \dots, [\tilde{V}(t_n), \tilde{\rho}(0)]] . \quad (4.57)$$

Ahora bien, si suponemos que la interacción entre el baño y el sistema es débil será posible cortar la serie hasta segundo orden en V . Además, dado que requerimos conocer la dinámica del sistema, será necesario calcular el valor esperado de ρ tomando la traza sobre el baño, es decir

$$\tilde{\rho}'(t) = \tilde{\rho}'(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt_1 Tr_B [\tilde{V}(t_1), \tilde{\rho}(0)] + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_0^t \int_0^{t_1} dt_1 dt_2 Tr_B [\tilde{V}(t_1), [\tilde{V}(t_2), \tilde{\rho}(0)]] , \quad (4.58)$$

donde $\tilde{\rho}'(t) \equiv Tr_B [\tilde{\rho}(t)]$.

Aproximación de Markov: memoria corta

Esta aproximación para la ecuación maestra tiene que ver con la *memoria del baño* y consiste en considerar que las correlaciones temporales en la dinámica son muy cortas. Es decir, el tiempo t de observación del sistema es mucho mayor que el tiempo de correlación τ . Debido a lo anterior suele decirse que el sistema pierde la memoria sobre su pasado y solo recuerda el estado anterior. Matemáticamente esto se escribe como:

$$\int_0^t d\tau Tr_B [\tilde{V}(t) \tilde{V}(\tau) \rho_B] = \int_0^t d\tau Tr_B [\tilde{V}(t-\tau) \tilde{V}(0) \rho_B] \approx \int_0^\infty d\tau Tr_B [\tilde{V}(t-\tau) \tilde{V}(0) \rho_B] . \quad (4.59)$$

Entonces, la función de correlación entre dos puntos se vuelve considerable sólo cuando $t \approx \tau$ y por lo tanto es válido extender el límite superior de integración a infinito. En otras palabras, las interacciones entre pares de partículas se dan en un intervalo de tiempo muy corto en comparación con el tiempo de evolución del sistema.

4.5. Modelos actuales para el gas de Bose

Los modelos teóricos utilizados actualmente en la descripción de la dinámica del gas de Bose ya sea en su fase normal o condensada, se basan principalmente en las teorías expuestas anteriormente. En algunos casos incluso se combinan algunos modelos o aproximaciones para tener una descripción más general del comportamiento del sistema de bosones.

El grupo de C. W. Gardiner y P. Zoller principalmente se han enfocado en describir la dinámica de un condensado de Bose con interacciones en una trampa armónica mediante la formulación de una ecuación maestra basada en la teoría cinética cuántica. En esta descripción se supone un potencial de interacción de la forma $V_{int} = g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, es decir, se considera el régimen de bajas energías y onda s . Con ayuda de dicha ecuación maestra es posible describir no sólo el comportamiento sino también la formación del condensado. Además, se ha comprobado que tiene como casos límite la ecuación de Boltzmann y la de Gross-Pitaevskii. La mayoría de las veces el modelo suele complementarse mediante simulaciones numéricas que modelan la ecuación cinética y proveen una visión gráfica de la dinámica del la formación del condensado. Al respecto se pueden consultar las referencias

[3] a [7] y [19] a [21].

Otros métodos para describir al gas de Bose normal o en su fase condensada involucran a la ecuación de Gross-Pitaevskii, la aproximación de Hartre-Fock-Bogoliuvov [22, 23], e incluso las funciones de Green [24].

Generalmente suele considerarse como buena aproximación de la interacción entre partículas al potencial de contacto $V_{int} = g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Además, debido a que la mayoría de los modelos pretenden reproducir los resultados experimentales, casi siempre se consideran potenciales de atrapamiento de tipo armónico.

Hasta la fecha, las distintas teorías presentadas de forma general en este capítulo han demostrado ser una buena descripción para la dinámica del gas de Bose cuando son comparados con los resultados obtenidos experimentalmente.

Con estos resultados en mente es posible pasar al tema central de esta tesis: la deducción de la ecuación cinética cuántica que modele la dinámica de un gas de Bose con interacciones.

CAPÍTULO 5

Ecuación cinética cuántica para un gas de Bose-Einstein

Como se describió en el capítulo anterior, la transición al estado condensado en un gas bosónico ocurre a una temperatura crítica T_c que depende de la densidad del gas. Debido a que esta temperatura de transición suele ser muy baja, no fue sino hasta el año de 1995 que mediante técnicas de enfriamiento por medios ópticos y magnéticos, Eric Cornell y Carl Weiman lograron la transición al condensado de Bose-Einstein en un gas de ^{85}Rb bajando la temperatura a 170nK a una densidad de $2,6 \times 10^{12}$ átomos/ cm^3 . El método que implementaron para alcanzar dicha temperatura es el de enfriamiento por evaporación¹ que consiste en remover a las partículas más energéticas y una vez que estas han escapado del sistema, el resto rethermaliza a una temperatura menor.

Inmediatamente después de que las partículas han sido removidas, el gas atómico se encuentra fuera de equilibrio y es necesario que transcurra un tiempo de alrededor de 2s para que el gas nuevamente alcance su estado de equilibrio mediante colisiones entre sus átomos. Entonces, una vez que el gas se encuentra a temperatura T_c , sufre la transición al condensado.

El objetivo central de este trabajo es describir el proceso dinámico que conduce al gas de Bose al estado de equilibrio en el que ocurre la transición a la fase condensada. Dicho estudio dará lugar a la deducción de la ecuación cinética cuántica que describe al gas de Bose con interacciones. En particular consideraremos las colisiones elásticas que tienen lugar cuando las partículas más energéticas han sido removidas mediante enfriamiento por evaporación, pues como resultado de la interacción entre partículas el sistema alcanzará un nuevo estado de equilibrio. Aunado a esto, debemos hacer énfasis en que una descripción teórica del fenómeno de condensación debe describir apropiadamente la transición al condensado, por lo que la ecuación dinámica que se obtenga debe ser válida tanto para temperaturas por encima como por debajo de T_c . Por lo tanto, consideraremos por separado cada uno de estos casos.

¹Este método ha sido explicado con más detalle en el capítulo 3

5.1. Descripción del sistema

Consideremos un sistema compuesto por N bosones de masa m confinados en un potencial armónico homogéneo en tres dimensiones. Dicho potencial se representa mediante la ecuación:

$$V_{ar}(\bar{r}) = \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2) . \quad (5.1)$$

Los átomos del gas interactúan esencialmente mediante colisiones, además, debido a que el gas de Bose en consideración es muy diluido, es válido tomar en cuenta solamente las colisiones entre pares de partículas. El Hamiltoniano más general en el esquema de segunda cuantización que incluye interacciones entre pares de partículas está dado por la siguiente relación

$$H = \int d^3r \Psi^\dagger(\bar{r}) H_0 \Psi(\bar{r}) + \int \int d^3r d^3r' \Psi^\dagger(\bar{r}) \Psi^\dagger(\bar{r}') V(\bar{r}, \bar{r}') \Psi(\bar{r}) \Psi(\bar{r}') , \quad (5.2)$$

donde $H_0 = T + V$ es el hamiltoniano del gas ideal atrapado en un potencial de tipo armónico.

Para la descripción de este sistema se escoge como conjunto completo $\{\varphi_\nu(\bar{r})\}$ a las eigenfunciones del oscilador armónico en tres dimensiones. Así, $\Psi^\dagger(\bar{r})$ y $\Psi(\bar{r})$ son los operadores de campo escritos en términos de las funciones de onda $\varphi_\nu(\bar{r})^2$ de una partícula en el oscilador armónico y se escriben como:

$$\begin{aligned} \Psi^\dagger(\bar{r}) &= \sum_{\nu} \varphi_{\nu}^{\dagger}(\bar{r}) a_{\nu}^{\dagger} \\ \Psi(\bar{r}) &= \sum_{\nu} \varphi_{\nu}(\bar{r}) a_{\nu} , \end{aligned} \quad (5.3)$$

con a_{ν}^{\dagger} y a_{ν} los operadores de creación y aniquilación que cumplen con las reglas de conmutación usuales para bosones $[a_{\mu}^{\dagger}, a_{\nu}^{\dagger}] = [a_{\mu}, a_{\nu}] = \delta_{\mu\nu}$.

El Hamiltoniano $H = H_0 + V$ se puede escribir como

$$H = \sum_{\nu} \epsilon_{\nu} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} + \sum_{\nu\kappa\eta\delta} I_{\nu\kappa\eta\delta} a_{\nu}^{\dagger} a_{\kappa}^{\dagger} a_{\eta} a_{\delta} , \quad (5.4)$$

donde $H_0 = \sum_{\nu} \epsilon_{\nu} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}$ y ϵ_{ν} son las energías para el oscilador armónico en un estado ν . Es decir,

$$\epsilon_{\nu} = \hbar\omega \left(\nu_x + \nu_y + \nu_z + \frac{3}{2} \right) . \quad (5.5)$$

El término de matriz $I_{\nu\kappa\eta\delta}$ que toma en cuenta las colisiones de dos partículas que inicialmente se encuentran en los estados ν y μ y después de la dispersión terminan en los estados η y δ corresponde a $\langle \eta\delta | V | \nu\mu \rangle$.

²Las funciones de onda para el oscilador armónico dependen de la frecuencia ω según la formula: $\varphi_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n(x) \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right)$, donde $H_n(x)$ son los polinomios de Hermite

Cabe resaltar que los estados ν , μ , η y δ son cantidades vectoriales tales que $\bar{\nu} = \nu_x + \nu_y + \nu_z$.

Debido a la condición de gas diluido y a que se considera el régimen de bajas temperaturas, es válido suponer que las colisiones entre partículas están regidas por un potencial de corto alcance en el límite de bajas energías, es decir, los átomos del gas sienten un potencial tal que $rV(r) \rightarrow 0$ cuando $r \rightarrow \infty$. Como vimos en el capítulo anterior, es posible aplicar la aproximación de Born a bajas energías en el límite de *onda s* ($l = 0$). Así, el potencial que reproduce de manera correcta la interacción entre pares de partículas estará dado por

$$V(\bar{r}, \bar{r}') = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \delta(\bar{r} - \bar{r}') , \quad (5.6)$$

donde a_s es la longitud de dispersión.

Dado que la magnitud de interacción se definió como $g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}$, la expresión anterior se reduce a

$$V(\bar{r}, \bar{r}') = g\delta(\bar{r} - \bar{r}') . \quad (5.7)$$

Entonces, el término de interacción se escribe como:

$$I_{\nu\kappa\eta\delta} = \langle \nu\mu | V | \eta\delta \rangle = g \int d^3r \varphi_\nu(\bar{r}) \varphi_\mu(\bar{r}) \varphi_\eta(\bar{r}) \varphi_\delta(\bar{r}) \quad (5.8)$$

Como se ha explicado anteriormente, uno de los objetivos principales de este trabajo es describir la dinámica que tiene lugar después de que las partículas más energéticas han sido removidas del sistema mediante el proceso de evaporación. Para ello es importante exigir que los átomos que escapan de la trampa no colisionen con los átomos que permanecen en ella y por lo tanto no haya un intercambio de energía.

Entonces, justo después de la remoción de las partículas más energéticas, se tienen las siguientes características:

1. El sistema se encuentra fuera de equilibrio y por lo tanto no es posible asociarle una temperatura.
2. El gas no está descrito por la distribución de Bose.
3. Las partículas dentro de la trampa satisfacen

$$N = \sum_{\epsilon}^{\epsilon - \text{corte}} n_{\epsilon}$$

$$E_{tot} = \sum_{\epsilon}^{\epsilon - \text{corte}} \epsilon n_{\epsilon} ,$$

donde $\epsilon - \text{corte}$ representa el valor máximo que toma la energía después del proceso de evaporación.

La formulación de Boltzmann supone que el sistema alcanza el equilibrio termodinámico a través de colisiones elásticas y una vez que se llega a dicho estado, las colisiones ya

no son necesarias para su descripción. Entonces, aunque en nuestra descripción el gas está inicialmente fuera de equilibrio, después de un tiempo t alcanza dicho estado y es posible definir una temperatura. De esta forma la transición al condensado ocurrirá en equilibrio termodinámico a una temperatura T_c y las partículas que se encuentran en los estados excitados obedecerán nuevamente la distribución de Bose.

Con todo lo anterior a la mano pasemos a la deducción de la ecuación cinética que describe al gas de Bose con interacciones.

5.2. Deducción de la ecuación cinética

Para describir el proceso a través del cual un gas de Bose alcanza el estado de equilibrio, seguiremos la formulación de Boltzmann tomando en cuenta la naturaleza cuántica del sistema que estamos estudiando.

En equilibrio, es posible expresar cantidades físicas como la energía o el número de ocupación promedio en términos de operadores de una sola partícula, es decir

$$\hat{O}_1^N = \sum_{i=1}^N \hat{O}_i ,$$

donde \hat{O}_i representa al operador de una sola partícula.

En el formalismo de segunda cuantización este operador toma la forma

$$O_1^N = \sum_{\alpha\beta} a_\alpha^\dagger a_\beta \langle \alpha | O_1 | \beta \rangle , \quad (5.9)$$

donde α y β representan dos estados en general de una partícula. En nuestro caso, estos índices se refieren a estados de una partícula en el oscilador armónico.

El valor esperado del operador O_1^N está dado por

$$\langle O_1^N \rangle = Tr O_1^N \rho(t) = Tr \sum_{\alpha\beta} a_\alpha^\dagger a_\beta \langle \alpha | O_1 | \beta \rangle \rho(t) , \quad (5.10)$$

donde $\rho(t)$ representa a la matriz de densidad del sistema de N cuerpos.

En la representación de número es posible reescribir el valor esperado como

$$\langle O_1^N \rangle = \sum_{\{n_i\}} \langle \{n_i\} | \sum_{\alpha\beta} a_\alpha^\dagger a_\beta \langle \alpha | O_1 | \beta \rangle \rho(t) | \{n_i\} \rangle . \quad (5.11)$$

Lo cual a su vez se puede expresar en la siguiente forma

$$\langle O_1^N \rangle = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | O_1 | \beta \rangle \sum_{\{n_i\}} \langle \{n_i\} | a_\alpha^\dagger a_\beta \rho(t) | \{n_i\} \rangle . \quad (5.12)$$

De la igualdad anterior es posible identificar a la segunda suma con

$$\sum_{\{n_i\}} \langle \{n_i\} | a_\alpha^\dagger a_\beta \rho(t) | \{n_i\} \rangle = \langle \beta | \rho_1(t) | \alpha \rangle , \quad (5.13)$$

donde $\rho_1(t)$ representa la matriz de densidad reducida de un solo cuerpo.

En el caso en el que $\alpha = \beta$, la relación anterior cumple con

$$\langle \alpha | \rho_1(t) | \alpha \rangle = \sum_{\{n_i\}} \langle \{n_i\} | a_\alpha^\dagger a_\alpha \rho(t) | \{n_i\} \rangle . \quad (5.14)$$

Identificando al operador de número $\hat{n} = a_\alpha^\dagger a_\alpha$ y recordando la definición de traza de la matriz de densidad tendremos que

$$\langle \alpha | \rho_1(t) | \alpha \rangle = Tr \hat{n}_{\alpha\alpha} \rho(t) = \langle n_\alpha \rangle . \quad (5.15)$$

Vemos entonces que los términos de la diagonal de la matriz de densidad reducida resultan ser el valor esperado del número de ocupación en el estado α .

Con el fin de simplificar los cálculos más adelante, hagamos las siguientes identificaciones

$$\langle \beta | \rho_1(t) | \alpha \rangle \equiv \Gamma(\beta, \alpha, t) \equiv \Gamma_{\alpha\beta}(t) = Tr \rho(t) a_\alpha^\dagger a_\beta . \quad (5.16)$$

Si además llamamos a la cantidad $a_\alpha^\dagger a_\beta = \hat{\gamma}_{\alpha\beta}$, tendremos que

$$\Gamma(\beta, \alpha, t) = Tr \rho(t) \hat{\gamma}_{\alpha\beta} . \quad (5.17)$$

Debido a que estamos buscando una ecuación cinética para el número de ocupación promedio, es necesario considerar la derivada temporal de $\Gamma_{\alpha\beta}(t)$. Entonces

$$\frac{\partial}{\partial t} \Gamma_{\alpha\beta}(t) = Tr \frac{\partial \rho}{\partial t} \hat{\gamma}_{\alpha\beta} . \quad (5.18)$$

De la mecánica cuántica sabemos que la ecuación de Schrödinger para la matriz de densidad se escribe como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho(t)] ,$$

donde H es el hamiltoniano del sistema que en este caso está dado por la expresión (5.4).

Sustituyendo este resultado en la expresión para la derivada temporal de $\Gamma_{\alpha\beta}(t)$ (5.18) tendremos que

$$\frac{\partial}{\partial t} \Gamma_{\alpha\beta}(t) = -\frac{i}{\hbar} Tr [H, \rho(t)] \gamma_{\alpha\beta} = -\frac{i}{\hbar} Tr [H\rho(t) - \rho(t)H] \gamma_{\alpha\beta} . \quad (5.19)$$

Utilizando el hecho de que ante la traza se pueden hacer permutaciones cíclicas, es posible reagrupar la ecuación anterior de la siguiente forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \Gamma_{\alpha\beta}(t) = \frac{i}{\hbar} Tr \{ \rho(t) [H, \gamma_{\alpha\beta}] \} . \quad (5.20)$$

Para el caso en que $\alpha = \beta$ se obtiene que la ecuación para el número promedio de ocupación es

$$\frac{\partial}{\partial t} n_\alpha(t) = \frac{i}{\hbar} Tr \{ \rho(t) [H, n_\alpha] \} . \quad (5.21)$$

Ahora bien, aunque la anterior es en sí una ecuación cinética para el número de ocupación, debemos ser capaces de escribirla en términos de las variables conocidas de nuestro sistema particular. Esto es, en términos del hamiltoniano $H = H_0 + V$ dado por la expresión (5.4) que considera los operadores de creación y aniquilación para el oscilador armónico cuántico y del potencial de interacción entre partículas. Para ello, comencemos por escribir a $\rho(t)$ en el esquema de interacción,

$$\hat{\rho}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}\hat{\rho}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} . \quad (5.22)$$

De igual forma tendremos que para el potencial $V(t)$

$$\hat{V}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}\hat{V}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} . \quad (5.23)$$

En esta representación se encuentra que

$$\frac{\partial \rho_I}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[V_I(t), \rho_I(t)] . \quad (5.24)$$

Renombrando las expresiones anteriores como $\rho_I = \tilde{\rho}$ y $V_I = \tilde{V}$ podemos escribir a la relación anterior como

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[\tilde{V}(t), \tilde{\rho}(t)] . \quad (5.25)$$

Integrando en el intervalo que va desde t_0 hasta t tendremos que,

$$\int_0^t d\tau \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial \tau} = \frac{-i}{\hbar} \int_0^t d\tau [\tilde{V}(\tau), \tilde{\rho}(\tau)] . \quad (5.26)$$

Entonces,

$$\tilde{\rho}(\tau) = \tilde{\rho}(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^\tau d\tau' [\tilde{V}(\tau'), \tilde{\rho}(\tau')] . \quad (5.27)$$

La solución a la ecuación anterior puede hallarse de manera iterativa, es decir, podemos sustituir repetidamente el valor de $\tilde{\rho}(t)$ en el conmutador que aparece en la integral y obtener así una serie de tantos términos como queramos. Ahora bien, como vimos en el capítulo anterior, es posible suponer a las interacciones entre pares de partículas como una perturbación. Es decir, se puede emplear la aproximación de Born para interacciones débiles y por lo tanto considerar únicamente los términos a primero orden en V . Esto es,

$$\tilde{\rho}(t) \simeq \tilde{\rho}(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau [\tilde{V}(\tau), \tilde{\rho}(0)] . \quad (5.28)$$

Ahora que tenemos una expresión para la matriz de densidad reducida podemos regresar a la representación de Schrödinger. Para ello es necesario hacer uso de la transformación canónica de modo tal que,

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t) &\equiv e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\tilde{\rho}(t)e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} \simeq e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\tilde{\rho}(0)e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} \\ &\quad - \frac{-i}{\hbar}e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} \int_0^t d\tau [\tilde{V}(\tau), \tilde{\rho}(0)]e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} . \end{aligned} \quad (5.29)$$

Si multiplicamos la ecuación por el factor $e^{\frac{i}{\hbar}H_0\tau}e^{-\frac{i}{\hbar}H_0\tau}$, es posible reordenarla en la siguiente forma:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_G(t) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau [e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-\tau)} \hat{V} e^{\frac{i}{\hbar}H_0(t-\tau)}, \hat{\rho}_G(t)] , \quad (5.30)$$

donde hemos definido

$$\hat{\rho}_G(t) \equiv e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t)} \hat{\rho}(0) e^{\frac{i}{\hbar}H_0(t)} . \quad (5.31)$$

Haciendo el cambio de variable $\tau' = \tau - t$,

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_G(t) - \frac{i}{\hbar} \int_{-t}^0 d\tau' [e^{\frac{i}{\hbar}H_0(\tau')} \hat{V} e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(\tau')}, \hat{\rho}_G(t)] . \quad (5.32)$$

Si ahora hacemos otro cambio de variable en el que $\tau'' = -\tau'$

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_G(t) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau'' [e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(\tau'')} \hat{V} e^{\frac{i}{\hbar}H_0(\tau'')}, \hat{\rho}_G(t)] . \quad (5.33)$$

Sustituyendo los resultados anteriores en la derivada temporal (5.20) para $\Gamma_{\alpha\beta}(t)$ llegaremos a que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \Gamma_{\alpha\beta}(t) &= \frac{i}{\hbar} Tr \{ \rho_G(t) [H_0, \gamma_{\alpha\beta}] \} + \frac{i}{\hbar} Tr \{ \rho_G(t) [V, \gamma_{\alpha\beta}] \} \\ &\quad - \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 Tr \int_0^t d\tau [e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(\tau)} V e^{\frac{i}{\hbar}H_0(\tau)}, \rho_G(t)] [H_0, \gamma_{\alpha\beta}] \\ &\quad - \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 Tr \int_0^t d\tau [e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(\tau)} V e^{\frac{i}{\hbar}H_0(\tau)}, \rho_G(t)] [V, \gamma_{\alpha\beta}] , \end{aligned} \quad (5.34)$$

la cual también se puede escribir en la siguiente forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \Gamma_{\alpha\beta}(t) &= \frac{i}{\hbar} Tr \{ \rho_G(t) [H_0, \gamma_{\alpha\beta}] \} + \frac{i}{\hbar} Tr \{ \rho_G(t) [V, \gamma_{\alpha\beta}] \} \\ &\quad + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t d\tau Tr \{ \rho_G(t) [e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(\tau)} V e^{\frac{i}{\hbar}H_0(\tau)}, [H_0, \gamma_{\alpha\beta}]] \} \\ &\quad + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t d\tau Tr \{ \rho_G(t) [e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(\tau)} V e^{\frac{i}{\hbar}H_0(\tau)}, [V, \gamma_{\alpha\beta}]] \} . \end{aligned} \quad (5.35)$$

Dado que estamos buscando la ecuación cinética que gobierna la dinámica del número de ocupación promedio, es necesario evaluar la ecuación anterior para el caso en que $\alpha = \beta$. En la representación de número, $H_0 = \sum_{\nu} \epsilon_{\nu} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}$ y $\gamma_{\alpha\alpha} = a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}$, por lo que el conmutador $[H_0, \gamma_{\alpha\alpha}]$ es nulo. Así, la expresión para la ecuación cinética se reduce a

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \Gamma_{\alpha\alpha}(t) &= \frac{i}{\hbar} Tr \{ \rho(t)_G [V, \gamma_{\alpha\alpha}] \} + \\ &\quad \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t d\tau Tr \{ \rho_G(t) [\exp^{-\frac{i}{\hbar}H_0(\tau)} V \exp^{\frac{i}{\hbar}H_0(\tau)}, [V, \gamma_{\alpha\alpha}]] \} . \end{aligned} \quad (5.36)$$

de donde podemos ver que la dinámica del gas dependerá en gran medida de las colisiones entre partículas.

Debido a que se está trabajando con la matriz de densidad reducida de una partícula, o en otras palabras, se tomó la traza sobre el baño (el resto de partículas) se puede hacer uso de la aproximación de Markov. Como mencionamos anteriormente, el gas alcanza el equilibrio mediante colisiones, sin embargo, el tiempo de correlación entre ellas es muy pequeño en comparación con el tiempo en el que el sistema relaja al equilibrio. Analicemos esto de la siguiente forma, a saber

$$\int_0^{\infty} d\tau = \int_0^{t_0} d\tau + \int_{t_0}^{\infty} d\tau , \quad (5.37)$$

donde t_0 es el tiempo en el que ocurre la colisión.

De acuerdo con nuestra afirmación acerca de la correlación entre colisiones, la integral $\int_{t_0}^{\infty} d\tau$ se puede despreciar. Entonces

$$\int_0^{\infty} d\tau = \int_0^{t_0} d\tau . \quad (5.38)$$

Es decir, el límite superior en la integral se puede extender a infinito. Esta es la aproximación de Markov mencionada en el capítulo anterior y de acuerdo con ella la ecuación cinética se escribe como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \Gamma_{\alpha\alpha}(t) &= \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \{ \rho_G(t) [V, \gamma_{\alpha\alpha}] \} + \\ \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_0^{\infty} d\tau &\text{Tr} \{ \rho_G(t) [e^{-\frac{i}{\hbar} H_0(\tau)} V e^{\frac{i}{\hbar} H_0(\tau)}, [V, \gamma_{\alpha\alpha}]] \} . \end{aligned} \quad (5.39)$$

Como mencionamos anteriormente, debemos escribir esta ecuación en términos de variables conocidas. Con el fin de desarrollar y simplificar el conmutador que aparece en la ecuación anterior escribamos al potencial en la representación de la interacción, esto es

$$e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} V e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} = \frac{1}{2} \sum_{\nu\mu\eta\delta} I_{\nu\mu\eta\delta} a_{\nu}^{\dagger}(t) a_{\mu}^{\dagger}(t) a_{\eta}(t) a_{\delta}(t) , \quad (5.40)$$

donde cada uno de los operadores $a^{\dagger}(t)$ y $a(t)$ cumple con la ecuación cinética siguiente

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_k(t) = [a_k(t), H_0] = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} [a_k, H_0] e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} . \quad (5.41)$$

Utilizando las reglas de conmutación para los operadores de creación y aniquilación se encuentra que

$$[a_k, H_0] = \sum_{\nu} \epsilon_{\nu} [a_k, a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}] = \epsilon_k a_k . \quad (5.42)$$

Lo cual reduce la ecuación cinética (5.41) para cada uno de ellos a

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_k(t) = \epsilon_k a_k(t) .$$

La anterior es una ecuación diferencial de primer orden cuya solución es $a_k(t) = a_k e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_k t}$ para el operador de aniquilación y $a_k(t)^\dagger = a_k^\dagger e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon_k t}$ para el de creación.

Entonces, la ecuación (5.40) puede escribirse en la forma

$$V(t) = \frac{1}{2} \sum_{\nu\mu\eta\delta} I_{\nu\mu\eta\delta} a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger a_\eta a_\delta e^{\frac{i}{\hbar}t(\epsilon_\nu + \epsilon_\mu - \epsilon_\eta - \epsilon_\delta)} \quad (5.43)$$

Dado que ahora tanto V como $\gamma_{\alpha\beta}$ están escritos en términos de a_k y a_k^\dagger , es viable desarrollar los conmutadores que aparecen en la ecuación cinética (5.36). Para ello podemos hacer uso del Teorema de Wick³ que nos permitirá desarrollar y simplificar los productos de operadores de creación y aniquilación que surjan al evaluar dichos conmutadores.

Después del desarrollo y la simplificación de cada conmutador se obtiene la ecuación cinética que gobierna la dinámica de los números de ocupación promedio para un gas de Bose en el que las interacciones entre partículas han sido tratadas como una perturbación. Esto es,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle n_\kappa \rangle(t)}{\partial t} = & \frac{4\pi}{\hbar} \sum_{\nu\eta\xi} \{ I_{\nu\kappa\eta\xi}^2 \delta(\epsilon_\kappa + \epsilon_\nu - \epsilon_\eta - \epsilon_\xi) \times \\ & (n_\xi n_\eta (1 + n_\kappa + n_\nu) - n_\nu n_\kappa (1 + n_\eta + n_\xi)) \\ & + 2I_{\nu\kappa\xi\nu} I_{\eta\xi\eta\kappa} \delta(\epsilon_\kappa - \epsilon_\xi) n_\nu n_\eta (n_\xi - n_\kappa) \} . \end{aligned} \quad (5.44)$$

Como se mencionó al inicio de este capítulo, la ecuación cinética debe describir apropiadamente al gas de Bosones antes y después de la transición al condensado. Para ello debe cumplir con la conservación del número de partículas y la energía total del sistema. Además, para el gas en equilibrio se debe cumplir que el número de ocupación promedio de partículas por estado obedezca la distribución de Bose

$$n_\kappa = \frac{1}{e^{\beta\epsilon_\kappa - \alpha} - 1} . \quad (5.45)$$

Entonces, debemos verificar que la ecuación (5.44) cumpla con cada uno de estos requisitos.

Supongamos temperaturas mayores que T_c y por lo tanto valores puramente negativos del potencial químico, es decir, $\alpha < 0$. Bajo estas consideraciones se puede probar que para 3, 2 y 1 dimensiones la solución estacionaria de la ecuación cinética corresponde a la distribución de Bose y además cumple con la conservación del número de partículas y de la energía total del sistema. Lo anterior nos da la evidencia de que la ecuación (5.44) para el número de ocupación promedio reproduce apropiadamente al gas de Bose por encima de la temperatura de transición T_c .

Consideremos ahora únicamente al estado base y analicemos su comportamiento. En este caso tendremos que la ecuación cinética toma la forma:

³El teorema de Wick indica que el producto temporal de una serie de operadores de creación y aniquilación es igual a la suma de todos los posible productos normales generalizados que se pueden formar con ellos.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \langle n_0 \rangle(t)}{\partial t} = & \frac{4\pi}{\hbar} \sum_{\nu\eta\xi} \{ I_{\nu 0 \eta \xi}^2 \delta(\epsilon_0 + \epsilon_\nu - \epsilon_\eta - \epsilon_\xi) \times \\
& (n_\xi n_\eta (1 + n_0 + n_\nu) - n_\nu n_0 (1 + n_\eta + n_\xi)) \\
& + 2I_{\nu 0 \xi \nu} I_{\eta \xi \eta 0} \delta(\epsilon_0 - \epsilon_\xi) n_\nu n_\eta (n_\xi - n_0) \} .
\end{aligned} \tag{5.46}$$

Para probar la solución estacionaria, debemos revisar los siguientes casos

1. $\alpha \neq 0$ con $\alpha < 0$
2. $\alpha = 0$.

Podemos ver que el caso 1 se encuentra contenido en la discusión hecha anteriormente cuando $T > T_c$. Es decir, para $\alpha \neq 0$ la solución estacionaria corresponde a la distribución de Bose para el número de ocupación promedio, por lo que sólo nos resta revisar el caso 2 en el que el potencial químico es cero y $T < T_c$.

De igual forma que en el caso para $\alpha < 0$ y $T > T_c$ podemos suponer al gas en equilibrio, entonces, al sustituir la distribución de Bose para el número de ocupación (5.45) en la ecuación cinética para el estado base (5.46) llegamos que la única forma de que sea válida es que $e^{\beta\epsilon_\xi} \rightarrow \infty$, y por lo tanto que $T \rightarrow 0$.

Este resultado no nos brinda la información adecuada, pues es claro que a temperatura cero todas las partículas ocuparán el estado base. Aunado a lo anterior, en los casos de dos y tres dimensiones espaciales se obtiene que el número de ocupación en el estado base es infinito si $\alpha = 0$ contradiciendo así, el hecho de que el número de partículas en el sistema es una cantidad finita N .

Por lo tanto, hemos encontrado que la distribución de Bose a $T < T_c$ no es solución a la ecuación cinética en el caso estacionario. Además, por debajo de la temperatura de transición T_c se pierde la conservación del número de partículas en el sistema. Entonces debemos reformular nuestra ecuación cinética para el caso en que el potencial químico es cero. Es decir, debemos hacer un análisis cuidadoso del sistema para temperaturas por debajo de T_c .

Comencemos por repasar el caso de un gas ideal de Bose en un potencial armónico. Como vimos en la sección anterior, cuando el potencial químico μ se hace cero y la temperatura en el sistema iguala a T_c , la relación para el número de partículas $N = \mathcal{V} \left(\frac{kT}{\hbar^3} \right) g_3(0)$ deja de ser válida. Esto se debe a que la contribución del estado base comienza a ser importante y no puede ignorarse, es decir, el número de partículas en los estados excitados disminuye de forma considerable y por lo tanto se vuelve necesario escribir a N en términos de N_e y N_0 , y se debe determinar el número de partículas en los estados excitados mediante la diferencia $N - N_0$.

En el caso del gas con interacciones no tenemos una forma explícita para el número total de partículas como en el caso ideal, pero tenemos control (aunque de forma indirecta) de las partículas que se encuentran ya sea en los estados excitados o en el estado base

mediante el potencial de interacción $V(t)$.

Debemos notar que este potencial supone la conservación del número de partículas, es decir, después de la transición ($\mu = 0$ y $T = T_c$) se considera fijo al número de partículas en los estados excitados. Entonces, el potencial de interacción dado por (5.43) contradice el hecho de que las partículas comiencen a poblar el estado base y dejen despoblados casi por completo los estados excitados. Entonces, para reformular nuestra ecuación debemos incluir los términos de interacción que no conservan el número de partículas en los estados excitados. Para ello proponemos separar (en el potencial de interacción) los estados excitados del estado base, es decir

$$\begin{aligned}
V = & \sum_{\mu\nu\eta\zeta \neq 0} I_{\mu\nu\eta\zeta} a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger a_\eta a_\zeta + I_{0000} a_0^\dagger a_0^\dagger a_0 a_0 + 2 \sum_{\mu\eta\zeta \neq 0} I_{\mu 0\eta\zeta} a_\mu^\dagger a_0^\dagger a_\eta a_\zeta \\
& + 2 \sum_{\nu\mu\eta \neq 0} I_{\mu\nu\eta 0} a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger a_\eta a_0 + \sum_{\nu\mu \neq 0} I_{\mu\nu 00} a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger a_0 a_0 + \sum_{\eta\zeta \neq 0} I_{00\eta\zeta} a_0^\dagger a_0^\dagger a_\eta a_\zeta \\
& + 4 \sum_{\mu\eta \neq 0} I_{\mu 0\eta 0} a_\mu^\dagger a_0^\dagger a_\eta a_0 + 2 \sum_{\mu \neq 0} I_{\mu 000} a_\mu^\dagger a_0^\dagger a_\eta a_0 + 2 \sum_{\eta \neq 0} I_{00\eta 0} a_0^\dagger a_0^\dagger a_\eta a_0 , \quad (5.47)
\end{aligned}$$

y una vez hecho esto, podemos reescribir el potencial de forma que sólo se tomen en cuenta los estado excitados, esto es

$$\begin{aligned}
V = & \sum_{\mu\nu\eta\zeta} I_{\mu\nu\eta\zeta} a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger a_\eta a_\zeta + 2 \sum_{\mu\eta\zeta} I_{\mu\eta\zeta} a_\mu^\dagger a_\eta a_\zeta \\
& + 2 \sum_{\nu\mu\eta} I_{\mu\nu\eta} a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger a_\eta + \sum_{\nu\mu} I_{\mu\nu} a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger + \sum_{\eta\zeta} I_{\eta\zeta} a_\eta a_\zeta \\
& + 4 \sum_{\mu\eta} I_{\mu\eta} a_\mu^\dagger a_\eta + 2 \sum_{\mu} I_{\mu} a_\mu^\dagger a_\eta + 2 \sum_{\eta} I_{\eta}^\dagger a_\eta . \quad (5.48)
\end{aligned}$$

Debido a que hemos modificado la forma del potencial de interacción, debemos volver a desarrollar los conmutadores que aparecen en la forma general de la ecuación cinética (5.39).

Recordando la ecuación cinética para la matriz de densidad reducida es

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \Gamma_{\alpha\beta}(t) = & \frac{i}{\hbar} Tr \{ \rho(t)_G [V, \gamma_{\alpha\alpha}] \} \\
& + \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_0^t d\tau Tr \{ \rho_G(t) [e^{-\frac{i}{\hbar} H_0(\tau)} V e^{\frac{i}{\hbar} H_0(\tau)}, [V, \gamma_{\alpha\alpha}]] \} ,
\end{aligned}$$

donde el término que tenemos que volver a calcular corresponde a

$$[e^{-\frac{i}{\hbar} H_0(\tau)} V e^{\frac{i}{\hbar} H_0(\tau)}, [V, \gamma_{\kappa\kappa}]]$$

donde V es el nuevo potencial propuesto en (5.2).

Siguiendo un procedimiento totalmente análogo al empleado para llegar a la ecuación cinética (5.44) para temperaturas superiores a la de transición T_c , encontramos que por debajo de $T - C$ la dinámica del gas de Bose está dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle n_\kappa \rangle(t)}{\partial t} = & \frac{4\pi}{\hbar} \sum_{\nu\eta\xi \neq 0} \{ I_{\nu\kappa\eta\xi}^2 \delta(\epsilon_\kappa + \epsilon_\nu - \epsilon_\eta - \epsilon_\xi) \times \\ & (n_\xi n_\eta (1 + n_\kappa + n_\nu) - n_\nu n_\kappa (1 + n_\eta + n_\xi)) \\ & + 2I_{\nu\xi\nu} I_{\eta\xi\eta\kappa} \delta(\epsilon_\kappa - \epsilon_\xi) n_\nu n_\eta (n_\xi - n_\kappa) \} \\ - \frac{16\pi}{\hbar} \sum_{\eta\xi \neq 0} & \{ I_{\kappa\eta\xi}^2 \{ \delta(\epsilon_\kappa - \epsilon_\eta - \epsilon_\xi) [2n_\kappa n_\eta + n_\kappa - n_\eta n_\xi] \\ & + \delta(\epsilon_\xi - \epsilon_\eta - \epsilon_\kappa) [2n_\kappa n_\eta - 2n_\xi - 2n_\xi n_\kappa - 2n_\eta n_\xi] \} . \end{aligned} \quad (5.49)$$

Esta nueva ecuación corresponde entonces a la evolución temporal de los estados excitados por debajo de la temperatura de transición y tiene que cumplir con las condiciones exigidas anteriormente. Es fácil mostrar que en este caso la solución estacionaria corresponde a la distribución de Bose

$$n_\kappa = \frac{1}{\exp^{\beta\epsilon_\kappa - \alpha} - 1} .$$

Además, se cumple la conservación de la energía y el número de partículas totales del sistema.

Entonces el hecho de introducir en el hamiltoniano, o mas acertadamente dicho, en el potencial de interacción la condición de que por debajo de T_c no se conserva el número de partículas en los estados excitados, nos lleva a la ecuación cinética que describe la dinámica de la fase condensada del gas de Bose.

De esta forma hemos llegado a un par de ecuaciones que describen de manera adecuada al gas de bosones antes y después de la transición al estado condensado.

Podemos resumir lo anterior diciendo que para temperaturas superiores a la de transición T_c , el número de ocupación promedio por estado queda determinado por la ecuación,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle n_\kappa \rangle(t)}{\partial t} = & \frac{4\pi}{\hbar} \sum_{\nu\eta\xi} \{ I_{\nu\kappa\eta\xi}^2 \delta(\epsilon_\kappa + \epsilon_\nu - \epsilon_\eta - \epsilon_\xi) \times \\ & (n_\xi n_\eta (1 + n_\kappa + n_\nu) - n_\nu n_\kappa (1 + n_\eta + n_\xi)) \\ & + 2I_{\nu\kappa\xi\nu} I_{\eta\xi\eta\kappa} \delta(\epsilon_\kappa - \epsilon_\xi) n_\nu n_\eta (n_\xi - n_\kappa) \} \end{aligned} \quad (5.50)$$

mientras que para temperaturas menores que T_c , la dinámica de la fase condensada está descrita por:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \langle n_\kappa \rangle(t)}{\partial t} &= \frac{4\pi}{\hbar} \sum_{\nu\eta\xi \neq 0} \{ I_{\nu\kappa\eta\xi}^2 \delta(\epsilon_\kappa + \epsilon_\nu - \epsilon_\eta - \epsilon_\xi) \times \\
&\quad (n_\xi n_\eta (1 + n_\kappa + n_\nu) - n_\nu n_\kappa (1 + n_\eta + n_\xi)) \\
&\quad + 2I_{\nu\xi\nu} I_{\eta\xi\eta\kappa} \delta(\epsilon_\kappa - \epsilon_\xi) n_\nu n_\eta (n_\xi - n_\kappa) \} \\
&- \frac{16\pi}{\hbar} \sum_{\eta\xi \neq 0} \{ I_{\kappa\eta\xi}^2 \{ \delta(\epsilon_\kappa - \epsilon_\eta - \epsilon_\xi) [2n_\kappa n_\eta + n_\kappa - n_\eta n_\xi] \\
&\quad + \delta(\epsilon_\xi - \epsilon_\eta - \epsilon_\kappa) [2n_\kappa n_\eta - 2n_\xi - 2n_\xi n_\kappa - 2n_\eta n_\xi] \} .
\end{aligned} \tag{5.51}$$

En el siguiente capítulo mostraremos el comportamiento de ambas ecuaciones a partir de una simulación numérica para el número promedio de partículas por estado.

CAPÍTULO 6

Simulación numérica del proceso de enfriamiento por evaporación

En el capítulo anterior se dedujeron las ecuaciones cinéticas que describen la dinámica del gas de Bose con interacciones a temperaturas por arriba y por debajo de la de transición T_c . Un resultado importante es que la descripción del gas difiere entre la fase normal y la condensada. En particular se encontró que para el gas de Bose normal, es decir, por encima de la temperatura crítica T_c y con potencial químico μ negativo, la evolución temporal del número de ocupación promedio por estado obedece la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle n_\kappa \rangle(t)}{\partial t} = & \frac{4\pi g}{\hbar} \sum_{\nu\eta\xi} \{ I_{\nu\kappa\eta\xi}^2 \delta(\epsilon_\kappa + \epsilon_\nu - \epsilon_\eta - \epsilon_\xi) \times \\ & (n_\xi n_\eta (1 + n_\kappa + n_\nu) - n_\nu n_\kappa (1 + n_\eta + n_\xi)) \\ & + 2I_{\nu\kappa\xi\nu} I_{\eta\xi\eta\kappa} \delta(\epsilon_\kappa - \epsilon_\xi) n_\nu n_\eta (n_\xi - n_\kappa) \} \end{aligned} \quad (6.1)$$

Como se describió anteriormente, esta ecuación describe la dinámica tanto de las partículas en los estados excitados como en el estado base, además satisface la conservación del número de partículas y energía totales. Más aún, la solución estacionaria para el número de ocupación promedio n_κ en el estado κ corresponde a la distribución de Bose-Einstein para una gas ideal sin interacciones. Sin embargo, una vez que ocurre la transición, el sistema es tal que debe ser descrito mediante la ecuación (5.51).

Nuestra descripción de la dinámica del sistema por debajo de T_c considera únicamente a los estados excitados y tiene la propiedad de no conservar el número de partículas en ellos. Sin embargo, se sigue conservando la energía y número de partículas totales, con lo cual se asegura que las partículas que abandonan los estados excitados vayan al estado base.

La dinámica del número de ocupación promedio por estado para temperaturas $T < T_c$ se describe a través de la ecuación:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \langle n_\kappa \rangle(t)}{\partial t} = & \frac{4\pi}{\hbar} \sum_{\nu\eta\xi \neq 0} \{ I_{\nu\kappa\eta\xi}^2 \delta(\epsilon_\kappa + \epsilon_\nu - \epsilon_\eta - \epsilon_\xi) \times \\
& (n_\xi n_\eta (1 + n_\kappa + n_\nu) - n_\nu n_\kappa (1 + n_\eta + n_\xi)) \\
& + 2I_{\nu\xi\nu} I_{\eta\xi\eta\kappa} \delta(\epsilon_\kappa - \epsilon_\xi) n_\nu n_\eta (n_\xi - n_\kappa) \} \\
- \frac{16\pi}{\hbar} \sum_{\eta\xi \neq 0} & \{ I_{\kappa\eta\xi}^2 \{ \delta(\epsilon_\kappa - \epsilon_\eta - \epsilon_\xi) [2n_\kappa n_\eta + n_\kappa - n_\eta n_\xi] \\
& + \delta(\epsilon_\xi - \epsilon_\eta - \epsilon_\kappa) [2n_\kappa n_\eta - 2n_\xi - 2n_\xi n_\kappa - 2n_\eta n_\xi] \} .
\end{aligned} \tag{6.2}$$

Aunque se ha hecho referencia a las ecuaciones que describen al gas (6.1) y (6.2) en términos de la temperatura, en este trabajo la transición entre la fase normal y la condensada se encuentra señalada por el potencial químico μ . No obstante, las afirmaciones hechas en los párrafos anteriores son correctas, pues como vimos en el capítulo 2, el punto en que el potencial químico toma el valor de $\mu = 0$ concuerda con aquel en que se define la temperatura de transición T_c ¹. Es decir, es indistinto hablar de temperatura crítica o potencial químico $\mu = 0$ debido a la correlación que existe entre ambos. Tomando lo anterior en consideración, en adelante nuestro análisis se dará únicamente en términos de μ .

Al igual que todo modelo, las ecuaciones cinéticas (6.1) y (6.2) pretenden reproducir los resultados obtenidos en el laboratorio para gases bosónicos ultrafríos. En particular, el presente trabajo se ha centrado en describir por un lado la termalización que tiene lugar cuando se realiza el enfriamiento por evaporación en el que se retira a las partículas más energéticas del sistema, y por el otro, la transición del gas a la fase condensada en la que una cantidad macroscópica de átomos pueblan el estado base. Pese a que se ha podido comprobar analíticamente la conservación de N y E así como también la condición de equilibrio, la meta final de nuestro desarrollo es encontrar las soluciones para cada ecuación. Es decir, los números de ocupación promedio por estado como función del tiempo. Sin embargo, debido a la complejidad de ambas ecuaciones (pues en principio se tiene un número infinito de ecuaciones diferenciales acopladas para los números de ocupación), la solución analítica resulta impracticable. Entonces se vuelve necesario recurrir a un cálculo numérico que resuelva las ecuaciones para cada uno de los casos: $\mu < 0$ y $\mu = 0$.

En el presente capítulo se expondrán de forma detallada las características principales del método numérico utilizado para complementar el estudio del gas de Bose con interacciones, así como los resultados que se han obtenido a partir de él.

¹Estrictamente hablando, la transición al condensado ocurre cuando el potencial químico μ alcanza un valor constante.

6.1. Consideraciones físicas de la simulación

Se puede notar fácilmente que la simulación numérica para el par de ecuaciones que describen al gas antes y después de la transición al condensado, requiere de la solución de un gran número de ecuaciones diferenciales acopladas, pues las sumas en (6.1) y (6.2) en principio corren hasta infinito. Sin embargo, al tomar en cuenta la naturaleza del problema físico que estamos describiendo, es posible reducir a un número finito los niveles κ y por lo tanto disminuir también el número de ecuaciones a resolver. Es por ello que una de las consideraciones más importantes en nuestra descripción tiene que ver con el número de niveles energéticos del gas.

Una forma de evaluar la cantidad de niveles requeridos para nuestro sistema a cierta temperatura T , es haciendo una comparación con el experimento. Como vimos en el segundo capítulo, para obtener el condensado el gas debe enfriarse a temperaturas de $\sim 10^{-6}\text{K}$ y posteriormente, mediante el proceso de evaporación se debe reducir la temperatura hasta $\sim 10^{-9}\text{K}$. Debido a que durante la evaporación el gas permanece en un potencial de tipo armónico, el número de niveles puede estimarse mediante la razón entre kT y $\hbar\omega$. Donde la cantidad kT es una energía asociada con las partículas y $\hbar\omega$ con el potencial de confinamiento.

Antes del proceso de evaporación, el número de niveles en el sistema toma un valor aproximado de

$$\frac{kT}{\hbar\omega} = \frac{1,3807 \times 10^{-23} \text{JK}^{-1} \cdot 1 \times 10^{-6} \text{K}}{1,0546 \times 10^{-34} \text{Js} \cdot 2\pi \cdot 200 \text{s}} \sim 100, \quad (6.3)$$

Una vez que aparece el condensado, la cantidad de niveles del sistema se aproxima a

$$\frac{kT}{\hbar\omega} = \frac{1,3807 \times 10^{-23} \text{JK}^{-1} \cdot 1 \times 10^{-9} \text{K}}{1,0546 \times 10^{-34} \text{Js} \cdot 2\pi \cdot 4 \times 10^6 \text{s}} \sim 10. \quad (6.4)$$

Entonces, en principio nuestra descripción debería contemplar 100 niveles antes del proceso de evaporación y 10 después de él. Sin embargo, existen limitaciones que tienen que ver directamente con la capacidad de almacenamiento de datos y por ende con el número de niveles que se pueden considerar en la simulación.

Uno de los principales frenos en la implementación del programa para las ecuaciones cinéticas es el cálculo de los términos de interacción $I_{\nu\mu\eta\delta}$, pues ellos involucran la integración del producto de cuatro funciones de onda del oscilador armónico en tres dimensiones, esto se traduce en que la cantidad de datos a almacenar puede llegar a ser muy alta. Además, debido a que se debe considerar la degeneración energética, el cálculo se vuelve mucho más complejo. El aspecto más importante que se debe tener en cuenta es que la simulación debe arrojar resultados coherentes con los observados experimentalmente. Es decir, se debe poder reproducir hasta cierto punto la física del problema.

Como en cualquier programa de computo, el primer reto es traducir el problema matemático al lenguaje adecuado. En este caso se decidió trabajar en fortran, aunque en principio el programa pudo haber sido escrito en cualquier otro lenguaje. Por razones que se creen convenientes, la explicación del programa seguirá la estructura del mismo.

El primer punto que se debe considerar es el número de niveles energéticos que tendrá el sistema, pues como mencionamos anteriormente, la complejidad del cálculo dependerá en gran medida de ello. Para un gas de bosones en un potencial armónico en tres dimensiones existe una degeneración tal que al nivel con energía ϵ_n le corresponde un número de estados igual a

$$g_n = \frac{(n+1)(n+2)}{2}, \quad (6.5)$$

por lo que el número total de estados del sistema completo estará dado por la suma

$$n_{tot} = \sum_{n=0}^{n'} \frac{(n+1)(n+2)}{2}, \quad (6.6)$$

donde n' representa el nivel más alto del sistema.

Así por ejemplo, un gas con 6 niveles energéticos tendrá en total 84 estados disponibles y por lo tanto para resolver la ecuación cinética se deberá encontrar la solución para un sistema de 84×3 ecuaciones diferenciales acopladas, donde el factor 3 hace referencia al carácter tridimensional del problema, el cual se debe a que cada estado n posee tres componentes, a saber n_x , n_y y n_z .

Entonces el cálculo de estados se vuelve la base de nuestro problema debido a la capacidad de almacenamiento de datos. En particular, en lo que se refiere al cálculo de las integrales del término de interacción $I_{\nu\mu\eta\delta}$. Debemos notar también que es necesario etiquetar a cada uno de ellos para los cálculos posteriores.

Una vez etiquetados todos y cada uno de los estados posibles del sistema, se pueden realizar las integrales del término de interacción que como vimos en el capítulo anterior, está dado por:

$$I_{\nu\mu\eta\delta} = g \int d^3r \varphi_\nu(\vec{r}) \varphi_\mu(\vec{r}) \varphi_\eta(\vec{r}) \varphi_\delta(\vec{r}). \quad (6.7)$$

donde φ_ν representa a las funciones de onda del oscilador armónico en tres dimensiones, es decir ν es una cantidad vectorial con componentes ν_x , ν_y y ν_z . Ahora bien, debido a que las funciones de onda para el oscilador armónico están dadas por

$$\varphi_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n(x) \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right), \quad (6.8)$$

donde $H_n(x)$ son los polinomios de Hermite y ω es la frecuencia del potencial armónico, es necesario definir estas cantidades antes de realizar la integración numérica. Cabe mencionar que en este trabajo se le asignó al factor $m\omega/\hbar$ el valor de 1 con el fin de simplificar los cálculos, sin embargo, se debe tener en cuenta que el costo a pagar es que las cantidades físicas obtenidas a partir de la simulación (tales como la temperatura y el potencial químico) no arrojarán valores numéricos que se puedan comparar directamente con el experimento, aunque es válido decir que su comportamiento deberá concordar con el observado en el laboratorio.

Con las integrales calculadas, el siguiente paso es escribir la ecuación cinética. Para ello se comenzó por implementar las deltas que aparecen en las energías. El método utilizado fue condicional, es decir, si se satisfacen las deltas entonces el programa realiza el cálculo

de las soluciones a la ecuación cinética.

El siguiente paso tiene que ver con el objetivo principal de la simulación, es decir, con encontrar el número de ocupación promedio por estado como función del tiempo. Este no sólo es el último paso sino que también es el más importante y se basa en el método de aproximaciones sucesivas de Euler. Dicho método se describe brevemente a continuación.

Método de Euler

El método de Euler resulta ser de gran ayuda para resolver problemas con valor inicial dado como:

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0 \quad (6.9)$$

Ahora bien, una computadora obviamente no puede aproximar una función en todo un intervalo $t_0 \leq t \leq t_0 + a$, ya que esto requeriría una cantidad infinita de información. Entonces, a lo más se pueden calcular valores aproximados y_1, y_2, \dots, y_N de $y(t)$ en un número finito de puntos t_1, t_2, \dots, t_N . Sin embargo, para efectos prácticos esto es suficiente pues a partir de y_1, y_2, \dots, y_N se puede obtener una buena aproximación para $y(t)$ en todo el intervalo $t_0 \leq t \leq t_0 + a$.

Si se conoce el valor que toma $y(t)$ en $t = t_k$, se podrá conocer el valor de la función en un intervalo posterior t_{k+1} haciendo $t_{k+1} = t_k + h$. Donde h es una cantidad muy pequeña. Así, una vez que se conoce el valor aproximado para $y(t)$ en t_{k+1} este valor puede ser utilizado ahora como valor inicial y aproximar nuevamente $y(t)$ en el tiempo $t_{k+2} = t_{k+1} + h$.

Antes de exponer los resultados, hagamos un breve resumen de los pasos que da el programa para encontrar el valor promedio de los números de ocupación por estado κ .

- Inicialmente se calculan todos los posibles estados para el gas con n niveles de energía. Dado que se trata de un gas de Bose atrapado en un potencial armónico tridimensional, se toma en cuenta que $n = n_x + n_y + n_z$. Es decir, se considera la degeneración en los estados y por lo tanto en las energías.
- Se calculan las funciones de onda del oscilador armónico y se etiquetan según los valores que tomen n_x, n_y y n_z .
- Se multiplican las funciones de onda considerando todas las posibles combinaciones de n_x, n_y y n_z y se realiza la integración.
- Se imponen las restricciones dadas por las deltas de forma que el programa realiza los cálculos únicamente si estas se satisfacen.
- Finalmente, se realiza la sumatoria sobre todos los posibles valores que tomen ν, κ, η y ξ y mediante el método de Euler se resuelve el sistema de ecuaciones acopladas para encontrar n_ν, n_κ, n_η y n_ξ como función del tiempo.

Es importante señalar que el tamaño del “paso” h dado en la evolución temporal mediante el método de Euler se debe escoger de forma tal que garantice la conservación del número de partículas y energía totales del sistema.

Hasta este momento nos hemos reducido a describir el carácter es meramente computacional de la simulación, sin embargo, existen algunos aspectos importantes que tienen que ver más con la física del problema. Tal es el caso de las condiciones iniciales, pues su elección debe ser la apropiada para que el programa arroje resultados correctos.

Para que un cálculo numérico represente bien a un modelo físico no basta con que sea preciso y eficiente, sino que los resultados obtenidos concuerden con la física del problema. Por esta razón se tomaron en cuenta las dos consideraciones siguientes:

1. Se debe tener como caso límite el comportamiento de gas ideal cuando el valor de la interacción entre partículas es nula.
2. Las condiciones iniciales deben reflejar un sistema físico que ha sufrido un proceso de enfriamiento por evaporación.
3. Se debe conservar tanto el número de partículas como la energía total del sistema.

El programa por si mismo no impone restricciones sobre las condiciones iniciales. Sin embargo, se ha encontrado que si no se eligen de forma cuidadosa se obtienen resultados sin contenido físico. Recordemos que el proceso que se está modelando consiste en un gas de bosones con temperatura baja pero inicialmente por encima de la temperatura de transición T_c . El proceso mediante el cual el gas es enfriado es el de la evaporación de las partículas más energéticas, es decir, las que se encuentran en los estados más elevados del sistema. Debido a que nuestro algoritmo representa a un gas de Bose con un número máximo de estados igual a n' , si se pretende reproducir un sistema enfriado evaporativamente, se debe tomar en cuenta que en los estados más altos del gas no existen partículas, pues estas se han retirado con el fin de enfriar al sistema a temperaturas cercanas a la de transición. Es por esta razón que las condiciones iniciales se deben restringir de forma tal que el número N total de partículas en el gas deben estar distribuidas en los estados más bajos de nuestro sistema.

Una forma de reproducir las condiciones del laboratorio consistió en obtener la distribución de las partículas en los diferentes estados para condiciones arbitrarias para posteriormente quitar a las partículas en el nivel más alto (n') y ejecutar nuevamente el programa con las nuevas condiciones iniciales simulando el enfriamiento por evaporación.

6.2. Extrapolación

La extrapolación es un proceso matemático que permite construir nuevos valores para los datos a partir de un conjunto discreto de datos conocidos. En nuestro caso, veremos que la extrapolación provee un predicción en el comportamiento del gas para niveles de energía superiores a $n = 6$.

Como se mencionó anteriormente, un aspecto importante de la simulación es el hecho de que el almacenamiento de datos limita la cantidad de integrales $I_{\nu\mu\eta\delta}$ a realizar, y por ende la cantidad de niveles energéticos a considerar para los átomos del gas. Además, se

ha mencionado que experimentalmente se requieren cerca de 100 niveles para un átomo en un gas de Bose a una temperatura del orden de los μK , mientras que para un átomo en un condensado ($T \sim nK$) este número se reduce a 10 niveles.

Ahora bien, antes de pasar a los resultados obtenidos para el gas de Bose por encima y por debajo de la temperatura de transición T_c , es conveniente exponer un resultado importante obtenido a partir de la simulación y que tiene que ver con la extrapolación de datos.

Inicialmente se consideró un sistema formado por una cantidad N de partículas distribuidas en los primeros seis niveles energéticos, es decir, se consideró al estado base y a los primeros cinco estados excitados ($n = 0, \dots, 5$). Una vez que el programa realizó los cálculos descritos en la sección anterior, se registraron los valores arrojados y se compararon con aquellos obtenidos a partir de considerar un sistema de átomos con 7 niveles de energía ($n=6$) y número de partículas N' . Para ambos sistemas se obtuvo la fracción de átomos por nivel respecto al número total de partículas, es decir n_i/N y n'_i/N' . Al comparar estos valores se encontró que para el estado base y los primeros cinco estados excitados (los comunes a ambos sistemas), las fracciones de átomos por nivel eran muy similares, es decir, el comportamiento de los dos sistemas resultó ser el mismo.

El anterior es un resultado importante, pues nos indica que es posible extrapolar los datos obtenidos de un sistema de átomos con \mathcal{N} niveles a uno que contenga un número mayor de ellos, es decir $\mathcal{N}' > \mathcal{N}$. Entonces, aunque por un lado la simulación nos limita en cuanto al número de niveles energéticos por átomo, es posible extender el análisis a sistemas con un mayor número de niveles mediante la extrapolación de datos.

6.3. Simulación para temperaturas mayores que T_c

Debido a que existen restricciones en la cantidad de niveles energéticos, se eligió realizar la simulación para un total de seis niveles cuya degeneración de acuerdo con la fórmula (6.6) es 84. Es decir, se tienen en total 84 estados disponibles para las partículas.

El primer paso consistió en verificar que el programa en realidad modelara un gas de bosones con interacción entre sus partículas, similar a los que se tienen en el laboratorio. Se encontró que al fijar en cero el valor de la interacción las partículas no modificaban sus condiciones iniciales, es decir, permanecían en el mismo estado al paso del tiempo de la misma forma que lo haría un gas ideal. Además, se pudo comprobar que en todo momento de la simulación se conserva tanto el número de partículas como la energía total del sistema.

El siguiente paso consistió en imponer las condiciones iniciales apropiadas para un gas de bosones. Para ello se ejecutó el programa en el que se impusieron de forma totalmente arbitraria valores iniciales para el número de ocupación y se permitió que el sistema relajara al equilibrio. Una vez hecho esto, se extrajeron las nuevas condiciones iniciales "truncando" la distribución encontrada (Fig. 6.1). Es decir, se eliminaron las partículas en

el nivel más alto con el fin de obtener un subconjunto de ellas distribuidas ya no arbitrariamente, sino de acuerdo a como lo harían los átomos de un gas de Bose atrapados en un potencial armónico.

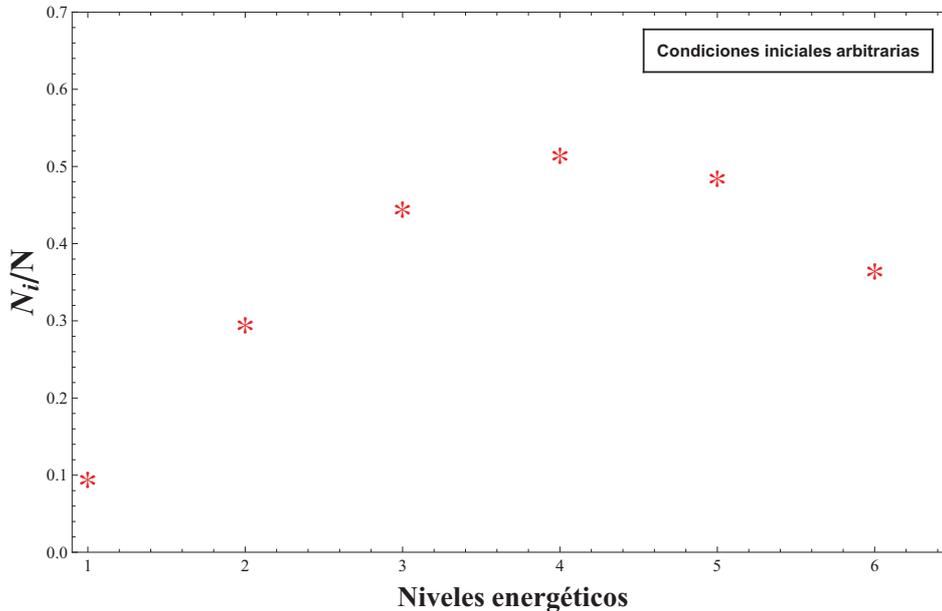


Figura 6.1: Distribución de partículas por nivel energético obtenida después de la evolución temporal, considerando un conjunto de condiciones iniciales arbitrarias. El número de partículas corresponde a la razón de las que se encuentran en el estado i y el total N del sistema. En este caso se consideraron 2075 partículas distribuidas en los primeros 6 niveles.

En la figura 6.1 se muestra un ejemplo de cómo se obtuvieron las condiciones iniciales. En un principio, el gas consistía de 2075 partículas distribuidas arbitrariamente en los 6 primeros niveles. Una vez que se ejecutó el programa, el sistema relajó a equilibrio y como veremos adelante, se encontró que su comportamiento concordaba con la distribución de Bose, por lo que nuestro nuevo sistema de 2075 partículas era ahora un gas de Bose a temperatura T , en el cual 688 partículas se encontraban en el último nivel energético ($n = 6$). Entonces, se eliminamos a las 688 partículas del nivel más alto y se tomaron como condiciones iniciales los valores obtenidos para los cinco niveles restantes. Con esto se garantizó que el gas a describir reproduzca de forma adecuada la dinámica de un gas de Bose real.

Como se ha mencionado anteriormente, la ecuación cinética para un gas que se halle a temperatura mayor que la de transición T_c , se ajusta a la distribución de Bose para el número de ocupación promedio cuando el sistema se encuentra en un estado estacionario. Este resultado se puede obtener de forma analítica, sin embargo, uno de los objetivos principales de esta tesis es poder simular la forma en la que el gas alcanza el equilibrio a través de colisiones.

Después de haber escogido las condiciones iniciales apropiadas para el gas de bosones, esto es, una vez que se tomaron los valores obtenidos para el número promedio de partículas por estado cuando el sistema relajó a equilibrio, se fijó un valor para la interacción y se dejó evolucionar el sistema durante un tiempo t . Es importante notar que la elección del valor de la interacción entre partículas se encuentra directamente relacionada con el tiempo que le lleva al sistema alcanzar la condición de equilibrio. En otras palabras, una interacción suficientemente débil disminuirá la tasa de colisiones entre partículas y por lo tanto se requerirá de mayor tiempo para la termalización. Sin embargo se debe tener en cuenta que la interacción no puede ser arbitrariamente grande, pues se podría perder información de la dinámica del gas al hacerlo llegar al equilibrio en un tiempo muy corto.

En este trabajo se fijó la magnitud de la interacción en el valor de 0.7, pues se observó que el tiempo que se requiere es razonable como para observar con detalle el proceso de termalización. Para esta interacción y las condiciones iniciales de la distribución truncada se encontró que efectivamente el gas alcanza un estado de equilibrio en el cual el número de ocupación promedio deja de variar.

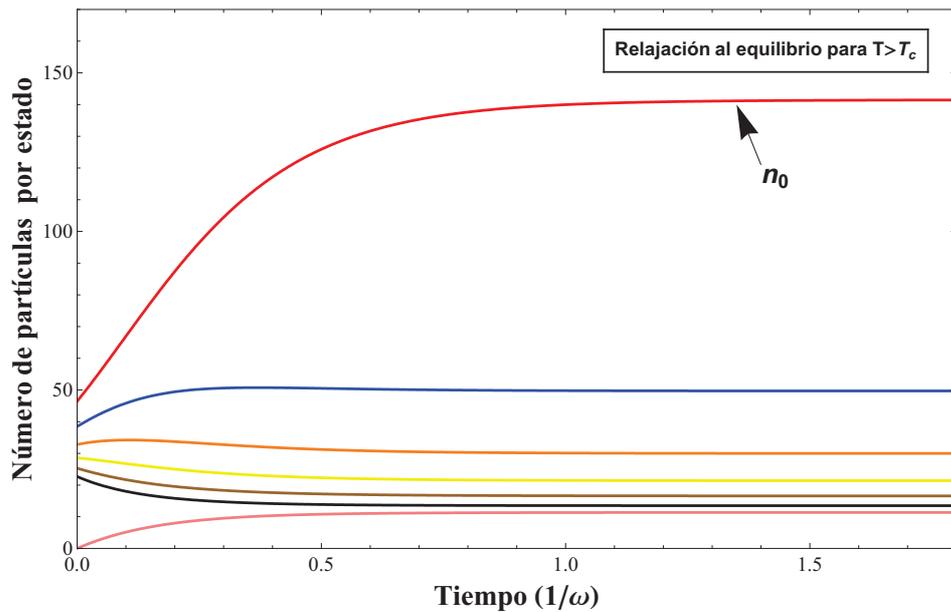


Figura 6.2: Número de ocupación promedio como función del tiempo. Las unidades para el intervalo de tiempo corresponden al inverso de la frecuencia, es decir $1/\omega$

La figura 6.2 muestra la dinámica del gas de Bose con seis niveles energéticos para un tiempo t cuyas unidades corresponden al inverso de la frecuencia ω del oscilador. Se puede observar que después de cierto tiempo, los números de ocupación promedio no varían más indicando una condición de equilibrio. La línea más alta representa la ocupación del estado base, la siguiente a la del primer estado excitado y así sucesivamente hasta llegar a la línea más baja que representa al sexto estado excitado ($n = 6$). Cada una de las líneas representa no a un nivel energético, sino a un estado representativo para cada uno de ellos.

Debemos recordar que el número total de estados para el gas que se está modelando es 84, de forma tal que una gráfica que incluyera a todos ellos no solo resultaría absurda, sino que representa una labor innecesaria.

De acuerdo con la gráfica, resulta engañoso el hecho de que para temperaturas por arriba de la de transición el estado base sea el más poblado y que para niveles más altos el número de partículas disminuya considerablemente. Sin embargo, este aparente problema se elimina al considerar la degeneración energética.

A partir de la ecuación para la degeneración energética (6.5), se puede ver que el número de estados aumenta para niveles cada vez más altos. Así por ejemplo, el sexto nivel consta de 28 estados mientras que el estado base consta de tan solo uno. La figura 6.3 muestra como aumenta la cantidad de niveles de acuerdo con el nivel energético. Podemos ver que mientras mayor sea el nivel, más grande es la degeneración.

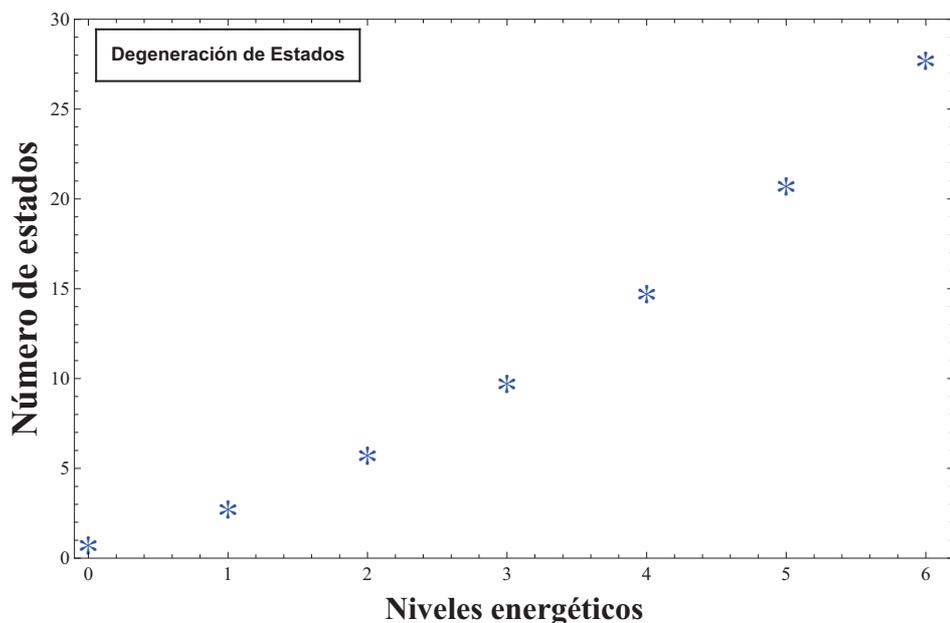


Figura 6.3: Degeneración de estados. Para cada nivel se tiene un número $n_i = (n_i + 1)(n_i + 2)/2$ de estados disponibles para las partículas.

Entonces, al sumar las contribuciones de cada uno de los estados al número total de partículas se obtiene el comportamiento esperado en el que el estado base se encuentra menormente poblado que cualquier otro nivel.

Ahora bien, para un nivel de energía dado, los estados asociados a él tendrán la misma probabilidad de ser ocupados, esto quiere decir que ellos son equivalentes entre sí. Por esta razón, es de esperarse que las condiciones de equilibrio resulten ser las mismas para los estados de un mismo nivel. Este hecho quedó totalmente comprobado a partir de nuestra

simulación, es por ello que nos referimos a las curvas obtenidas como “valores representativos por estado”.

Una vez que las partículas han alcanzado el equilibrio es válido afirmar que siguen la distribución de Bose dada por

$$n_{\kappa} = \frac{1}{e^{\beta\epsilon_{\kappa}-\alpha} - 1}, \quad (6.10)$$

de donde podemos ver que el número de ocupación por estado es función del potencial químico y la temperatura. Entonces, si los datos obtenidos para la condición de equilibrio son ajustados a esta distribución, será posible extraer a partir de ellos el valor para el potencial químico μ y la temperatura T asociados al sistema.

La figura 6.4 muestra una comparación entre los valores obtenidos para el gas de seis niveles en equilibrio (puntos) y la distribución de Bose (línea).

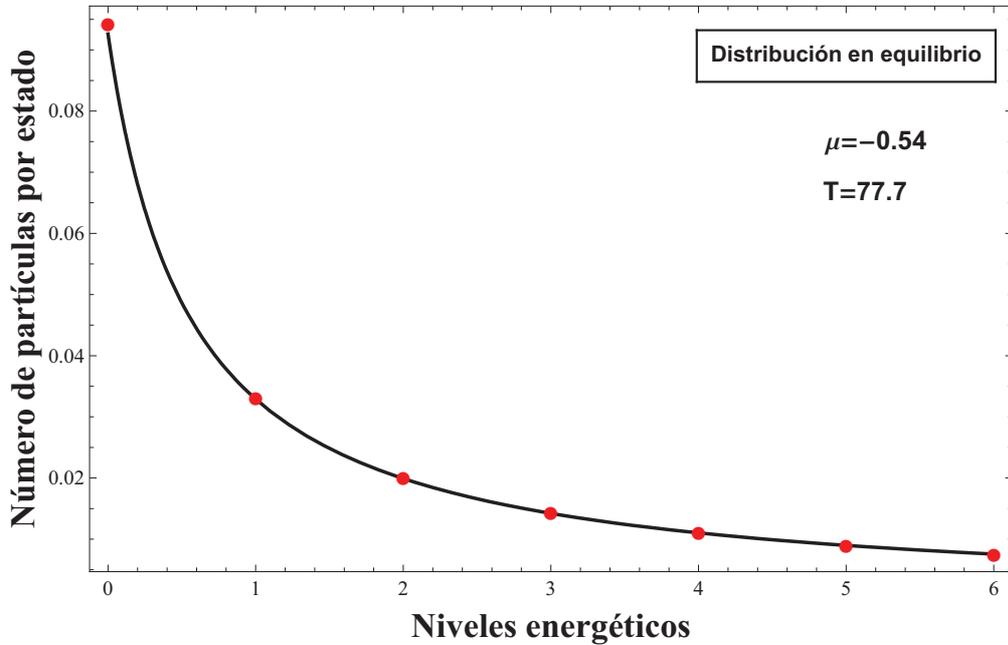


Figura 6.4: Ajuste realizado para un gas de bosones con seis niveles y un valor de interacción igual a 0.7.

Para realizar el ajuste se ha tomado en cuenta la degeneración del sistema, es decir, cada punto representa el número total de partículas por nivel o en otras palabras la densidad de estados. El número promedio de partículas por nivel está dado como una fracción de la cantidad total de ellas en el sistema.

En este caso se obtuvo un valor de $-0,54$ para el potencial químico μ y de $77,7$ para la temperatura T . Resulta importante aclarar que esta temperatura no representa un valor real que pueda ser asociado con el experimento, sino que simplemente es una magnitud que

depende de las condiciones iniciales de nuestro problema. Aún así, veremos más adelante que presenta el comportamiento adecuado al realizar el enfriamiento por evaporación.

6.4. Enfriamiento por evaporación

El objetivo principal de la simulación es el de reproducir la dinámica del gas al ser llevado a la fase condensada mediante el proceso de evaporación.

Como ya sabemos, el enfriamiento por evaporación consiste en retirar a las partículas más energéticas del sistema y posteriormente dejar que este alcance el equilibrio mediante colisiones. Experimentalmente, este proceso es repetitivo y se realiza tantas veces sea necesario hasta alcanzar la temperatura indispensable para que se observe la transición.

En nuestra simulación efectuamos el enfriamiento por evaporación de forma muy similar a la que se realiza en los experimentos de gases fríos. Para ello partimos de un sistema con condiciones iniciales que han sido escogidas truncando la distribución obtenida de un sistema arbitrario como se describió en la sección anterior. Posteriormente, se ejecutó el programa y se permitió que el sistema relajara a equilibrio a través de colisiones.

Una vez hecho lo anterior, se realizó un ajuste entre los valores de equilibrio arrojados por el programa y la distribución de Bose dada por (6.10). De él, se obtuvieron valores numéricos para la temperatura y el potencial químico del sistema.

El paso siguiente consiste en remover a las partículas más energéticas del sistema con el fin de reducir la temperatura del gas. Esto se logró de la siguiente forma: a partir de las condiciones de equilibrio resultantes en el paso anterior obtuvimos las nuevas condiciones iniciales mediante la eliminación de las partículas más energéticas, es decir, se fijó en cero el valor para el número de ocupación en el nivel con $n = 6$. Posteriormente se permitió al sistema relajarse a equilibrio y con los datos obtenidos se realizó un ajuste de donde se extrajeron nuevos valores para la temperatura y el potencial químico μ .

De igual manera a como se hace experimentalmente, este proceso se repitió varias veces y se observó el comportamiento de las distribuciones en equilibrio cada vez que se retiraban a las partículas más energéticas del sistema. La figura 6.5 muestra una serie de gráficas que simulan el enfriamiento por evaporación. En cada una de las gráficas se muestran los valores obtenidos para el potencial químico y la temperatura al ajustar los datos con la distribución de Bose. Se puede notar que durante el proceso evaporativo se obtienen valores cada vez más bajos para la temperatura y más próximos a cero para el potencial químico. Además, se observa que conforme disminuye la temperatura, cada vez menos partículas se encuentran en los niveles más altos.

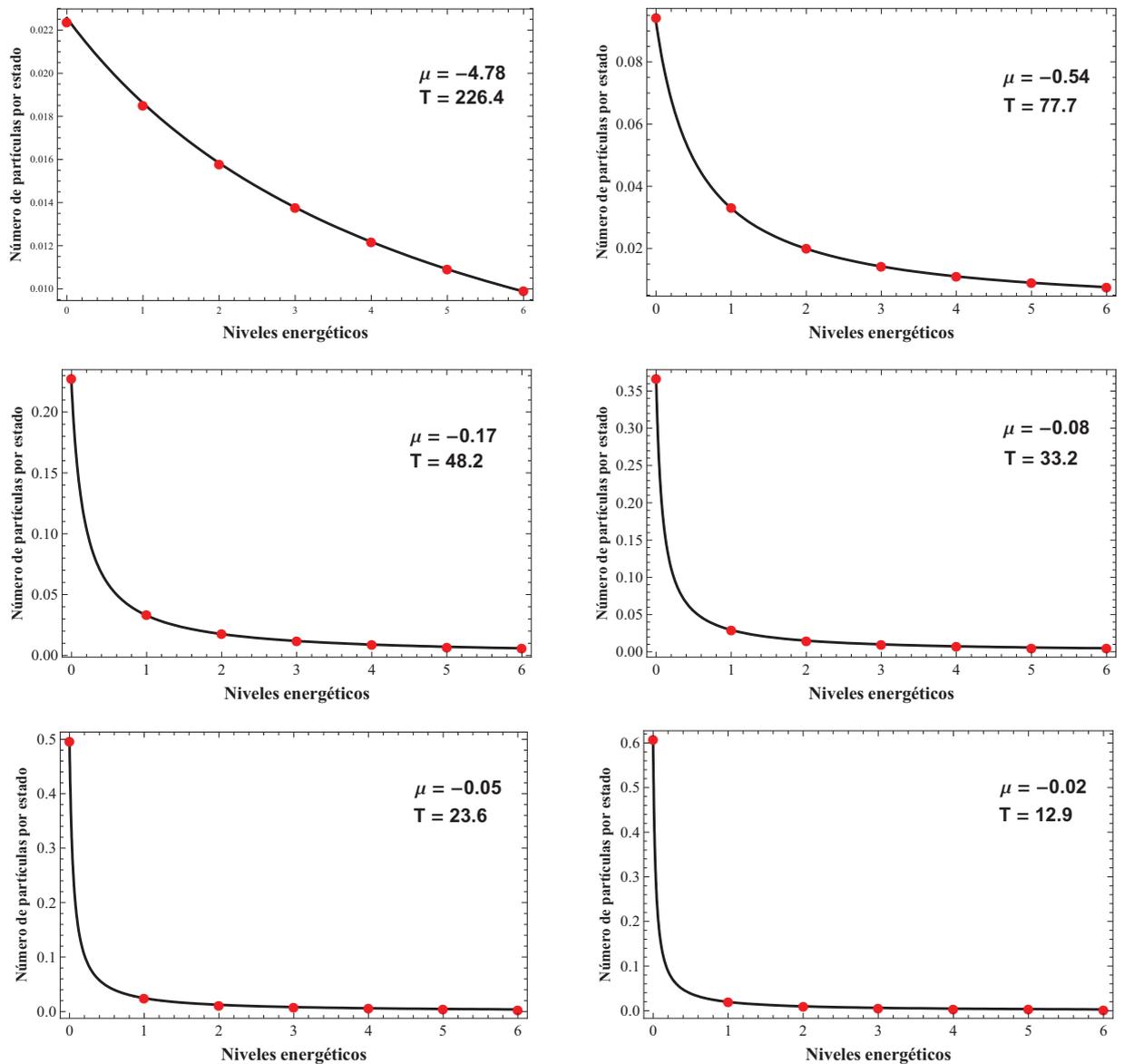


Figura 6.5: Simulación numérica del proceso de enfriamiento por evaporación. Se puede notar que al retirar a las partículas más energéticas del sistema, la temperatura desciende y el potencial químico se aproxima a cero.

6.5. Simulación para el condensado

Para temperaturas menores que la de transición T_c o potencial químico μ nulo, la dinámica del gas de Bose ya no puede ser descrita por la ecuación (6.1). En este caso es necesario recurrir a (6.2), la cual es una ecuación cinética que contempla únicamente a los estados excitados.

La fase condensada se estudió de manera totalmente análoga a la fase normal en la que las temperaturas son mayores que T_c . El análisis de datos fue similar, con la única consideración de que el valor del número promedio de partículas para el estado base se determinó mediante la diferencia del número total de partículas N en el sistema, y el total N_e de las que se encontraron en los estados excitados.

Como primer punto, vemos después de cierto tiempo t , el sistema alcanza un estado de equilibrio en el cual las partículas ya no modifican su estado. La figura 6.6 muestra la dinámica del condensado mediante la cual llega al equilibrio. Aunque la gráfica es similar a la obtenida en el caso de temperaturas por arriba de la de transición, se puede notar que en este caso disminuye radicalmente el número de partículas en los estados excitados. Este resultado se observa aún considerando la degeneración energética.

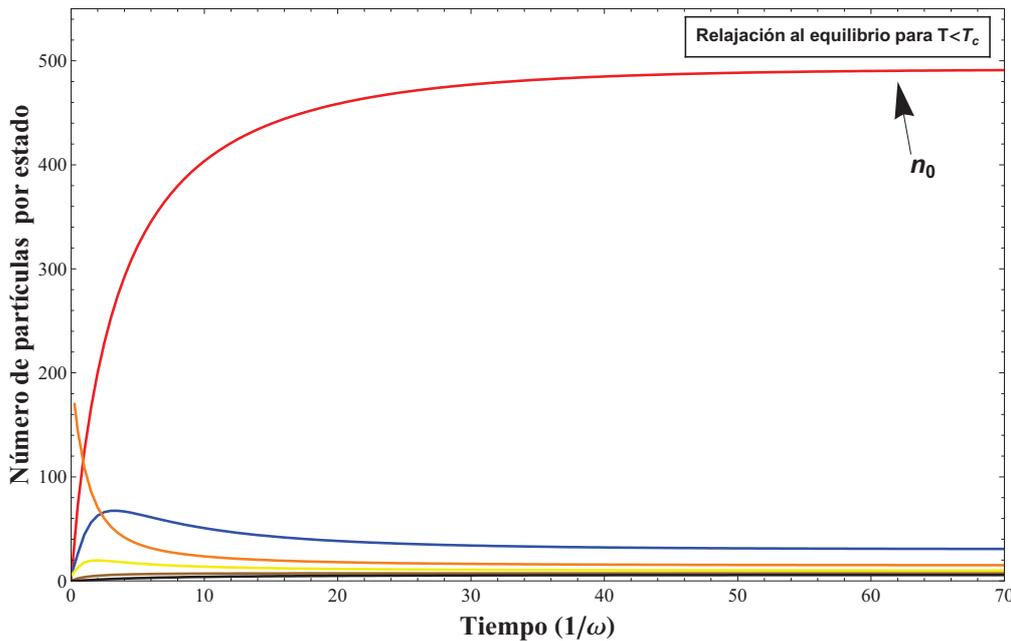


Figura 6.6: Relajación al equilibrio para un gas de Bose por debajo de la temperatura de transición.

De igual forma se pudo comprobar que la condición de equilibrio concuerda con la distribución de Bose para potencial químico cero (Fig. 6.7). Es decir

$$n_{\kappa} = \frac{1}{e^{\beta\epsilon_{\kappa}} - 1}. \quad (6.11)$$

En este caso el ajuste se realizó únicamente sobre los estados excitados. Esto tiene que ver con el hecho de que la ecuación cinética que se implementó no considera al estado base. Sin embargo, como mencionamos anteriormente, la cantidad de partículas en el estado de mínima energía queda determinada por la diferencia $N - N_e$.

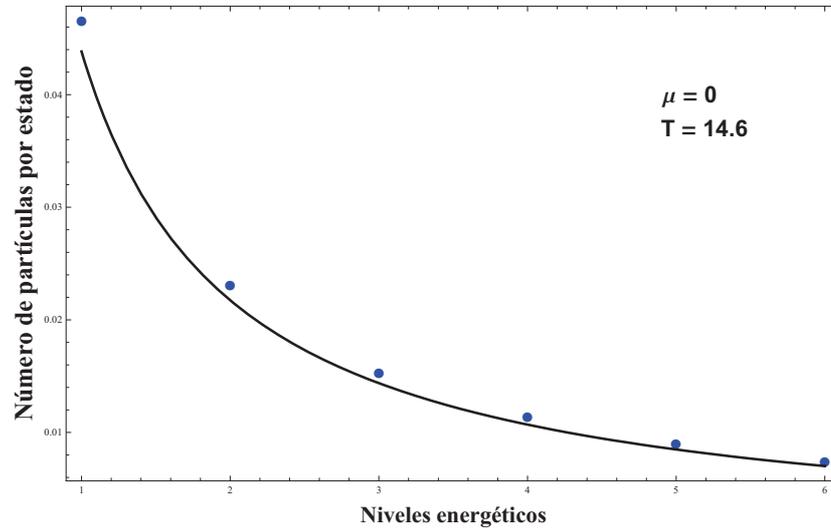


Figura 6.7: Ajuste realizado para un gas de Bose por debajo de la temperatura de transición. Los puntos representan los valores obtenidos a partir de la simulación.

El análisis hecho hasta este punto, ha sido individual para las ecuaciones cinéticas, es decir, se ha analizado la dinámica de las partículas por encima de la temperatura de transición T_c de manera independiente de la dinámica de las partículas por debajo de ella. Sin embargo, resulta muy interesante y necesario determinar la consistencia de las ecuaciones cinéticas (6.1) y (6.2) justo en el momento que se da la transición al condensado, es decir, cuando el potencial químico se anula.

El proceso que se siguió para investigar la concordancia de ambas ecuaciones fue el siguiente: Se dejó relajarse a equilibrio a un sistema con condiciones arbitrarias y a partir de los valores encontrados se escogieron las condiciones iniciales adecuadas. Estas nuevas condiciones de equilibrio se implementaron como condiciones iniciales tanto para el gas de Bose normal como para la fase condensada. Una vez que ambos sistemas alcanzaron el equilibrio se compararon sus distribuciones, es decir, se realizó un ajuste de la distribución de Bose y se determinaron las temperaturas; y en el caso del gas de Bose normal, el potencial químico.

Repetiendo varias veces este proceso con el fin de simular un enfriamiento por evaporación, se encontró que los valores para el número de ocupación promedio y la temperatura no concordaban si el potencial químico se encontraba alejado de cero. Por el contrario, en el caso en que μ era muy próximo a cero las temperaturas de ambos sistemas resultaban ser muy similares.

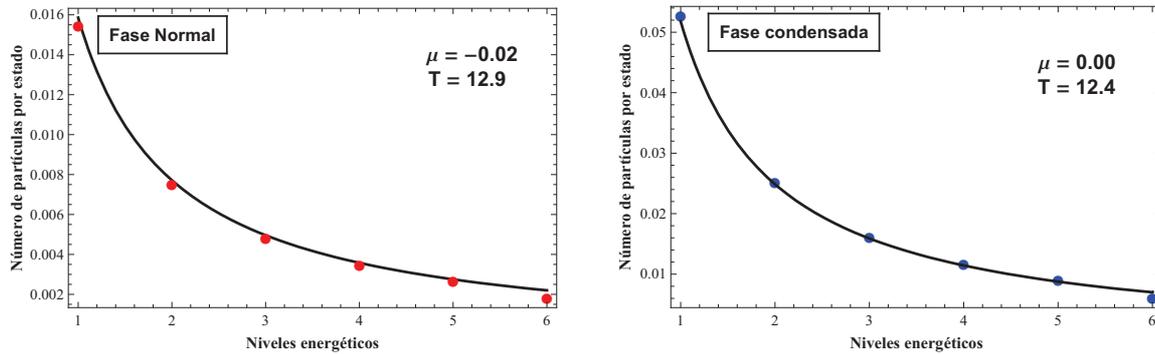


Figura 6.8: Traslape de las ecuaciones cinéticas que describen al gas de Bose.

La figura 6.8 muestra el “traslape” de las ecuaciones cinéticas, es decir, nos muestra el punto en el que comienzan a coincidir las descripciones, el cual es por supuesto, cuando se da la transición.

Entonces, podemos concluir este capítulo afirmando que el par de ecuaciones cinéticas que describen al gas de Bose no solo arrojan resultados correctos de acuerdo con la física del problema, sino que permiten reproducir de forma veraz el proceso de enfriamiento por evaporación que lleva a un gas a sufrir la transición al condensado.

CAPÍTULO 7

Conclusiones

En este trabajo se estudió la dinámica del gas de Bose con interacción confinado en un potencial armónico tridimensional. Dicho estudio inició con la descripción teórica del gas ideal de Bose, en la cual se encontraron las condiciones para que ocurra el fenómeno de la condensación. Además, se dedujeron las principales propiedades termodinámicas tales como la energía, presión y temperatura, y se discutió el significado que éstas tienen una vez que se ha dado la transición. Para el potencial de oscilador armónico en tres dimensiones, se vio que el inverso de la frecuencia ω , o mejor dicho, el cubo de esta cantidad; $(1/\omega)^3$, juega el mismo papel que la variable termodinámica de volumen V en el caso del potencial de paredes rígidas o caja. A esta variable se le da el nombre de volumen armónico \mathcal{V} y tiene por variable conjugada a la presión armónica \mathcal{P} cuyo significado físico es el mismo que el de la presión hidrostática P .

Debido a que la ocurrencia de la transición de fase en un gas ideal se encuentra íntimamente relacionada con la dimensionalidad del sistema y el potencial de confinamiento, se discutieron los casos del potencial de caja y el de tipo armónico en 1,2 y 3 dimensiones.

Con la finalidad de dar una descripción cercana a lo que se observa experimentalmente, se hizo una revisión de las bases teóricas que soportan los métodos experimentales requeridos para llevar al gas hasta la transición. En este punto se realizó una discusión general del enfriamiento láser que permite reducir la temperatura del gas considerablemente, sin embargo la atención se centró en el proceso de enfriamiento por evaporación en el que las partículas más energéticas son retiradas del sistema, pues es esta técnica la que conduce al gas directamente a la temperatura de transición y consecuentemente a la condensación. En esta parte se evidenció la necesidad de introducir al problema las interacciones que existen en un gas de Bose a bajas temperaturas y el uso de un potencial de tipo armónico.

Para determinar el tipo de interacción que existe entre las partículas del gas, se recurrió a la teoría cuántica en el régimen de bajas energías. Mediante este modelo se mostró que el potencial efectivo que sienten las partículas de un gas diluido es aquel que considera interacciones entre pares de ellas únicamente. Además, el alcance de dicho potencial es pequeño, de forma tal que puede ser aproximarlo por una función delta.

La descripción del proceso de termalización que tiene lugar una vez que se han extraído a las partículas más energéticas del sistema se realizó a través de una ecuación maestra para el número promedio de partículas por nivel. Utilizando el formalismo de segunda

cuantización se dedujo la ecuación para la matriz de densidad reducida de un cuerpo en la representación de número y se demostró que los términos diagonales de la matriz corresponden al número de ocupación promedio por estado.

Debido a la naturaleza de las interacciones, se hizo uso de la aproximación de Born, es decir, se consideró a las interacciones entre partículas como una perturbación del sistema. Más aún, para reproducir adecuadamente el enfriamiento por evaporación se consideró que las interacciones entre pares de partículas se dan en un intervalo de tiempo muy corto en comparación con el tiempo de evolución del sistema, o en otras palabras, se recurrió a la aproximación de Markov. Finalmente, se escribió al Hamiltoniano del sistema (que corresponde al de una partícula en un potencial armónico) y al potencial de interacción en términos del operador de número y se llegó a una ecuación cinética que modela la dinámica del gas.

Se encontró que dicha ecuación describe adecuadamente al gas de Bose por encima de la temperatura de transición T_c , pues conserva el número de partículas N y energía E totales del sistema, así mismo, el caso estacionario corresponde a la distribución de Bose para un gas en equilibrio termodinámico. Sin embargo, al analizar la solución estacionaria para la ecuación cinética por debajo de la temperatura de transición en una, dos y tres dimensiones, se evidenció la necesidad de considerar un potencial de interacción que no conserve el número de partículas en los estados excitados cuando el potencial químico μ se anula. Como consecuencia de lo anterior se obtuvieron dos ecuaciones cinéticas, cada una de las cuales corresponde a una fase del gas de bosones, es decir, antes y después de la temperatura de transición T_c .

Una vez que se tuvieron las ecuaciones cinéticas que gobiernan la dinámica del gas de Bose, se realizó una simulación numérica para cada una de ellas considerando un sistema formado por seis niveles energéticos. En la implementación de ambas ecuaciones, la evolución temporal estuvo modelada con el método de Euler de aproximaciones sucesivas. A partir de la simulación se encontró que para temperaturas por encima de la de transición T_c , la descripción dada por la correspondiente ecuación es adecuada. Más aún, se comprobó que las interacciones permiten al gas llegar al equilibrio, y que mediante un ajuste con la distribución de Bose es posible determinar el potencial químico y la temperatura de los datos arrojados.

Uno de los resultados más importantes es que se puede modelar el proceso de enfriamiento por evaporación a través de la ecuación cinética para el gas de Bose por arriba de la temperatura de transición. Para ello se retiraron las partículas más energéticas, es decir, la que se encontraban en los niveles más altos, y se repitió el proceso tantas veces como fue necesario. Los datos arrojados por el ajuste con la distribución de Bose cuando el sistema alcanzó el equilibrio, confirmaron que al extraer a las partículas más energéticas el sistema sufre un descenso en la temperatura. Más aún, en este proceso se evidencia que conforme se baja la temperatura, el potencial químico se acerca a cero, es decir, el sistema es llevado muy cerca de la transición al condensado.

De igual forma, los resultados encontrados para el condensado estuvieron de acuerdo con la teoría, es decir, para temperaturas por debajo de T_c las partículas comienzan a poblar de forma macroscópica el estado base dejando casi vacíos a los estados excitados. Análogamente al caso en que $T > T_c$, se encontró que se conservan la energía y el número de partículas totales del sistema, así mismo, en equilibrio termodinámico el sistema se

encuentra descrito por la distribución de Bose.

A través de un análisis combinado de ambas ecuaciones, se determinó que existe un punto en el cual se traslapan. Es decir, los datos para el potencial químico μ y la temperatura T son prácticamente los mismos cerca de la transición.

Una de las principales limitaciones que se presentaron en este trabajo estuvo relacionada con la capacidad de almacenamiento de datos durante la simulación, pues debido a la degeneración energética solo fue posible trabajar con un gas formado por seis niveles. Sin embargo, se encontró que es posible extrapolar los datos a sistemas de átomos con mayor número de niveles. Este es un resultado muy importante, pues para un gas a temperaturas cercanas a la de transición, se requieren 10 niveles energéticos para que el sistema se aproxime a uno real en el laboratorio. Entonces, con ayuda de la extrapolación sería posible una comparación directa con los datos experimentales reportados en la bibliografía.

Por otro lado, no existió restricción alguna en el número total N de partículas que forman al gas. Además se pudo comprobar que no es necesario una cantidad enorme de ellas, sino que más bien se debe escoger dicho número de forma tal que reproduzca de forma fidedigna a los gases con los que se trabaja en el laboratorio.

En cuanto a la interacción entre partículas se encontró que no puede ser arbitrariamente grande si es que no se quiere perder información de la dinámica de las partículas durante la simulación. Esto es debido a que el valor de la interacción determina el tiempo en el cual el sistema alcanza el equilibrio. Así, para interacciones pequeñas el gas requiere una mayor cantidad de tiempo para termalizar.

Aunque los resultados hasta aquí expuestos han sido acertados, se puede pensar en la posibilidad de ampliar el estudio del gas de Bose y la condensación a través de un programa que permita trabajar con un mayor número de estados, es decir, reducir el problema de almacenaje de datos. O bien, extrapolar los datos para el caso de sistemas con más niveles y poder comparar los valores para las cantidades físicas extraídas de la simulación; tales como la temperatura y el potencial químico, con los reportados en la literatura.

De forma ambiciosa también se puede pensar en describir el fenómeno de la condensación de Bose para un gas atrapado en un potencial armónico bidimensional, pues como sabemos, en este caso la transición que se observa experimentalmente no es precisamente la predicha por la teoría de Bose-Einstein, sino más bien, una transición de tipo Berezinskii-Kosterlitz-Thouless.

APÉNDICE **A**

Funciones de Bose

En el estudio teórico de un gas de Bose es frecuente encontrar integrales de la forma:

$$g_m(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(m)} \int_0^\infty \frac{x^{m-1}}{e^{(x-\alpha)} - 1} dx \quad (\text{A.1})$$

con $0 \leq e^\alpha \leq 1$, y $m \in \mathbb{R}$.

Debido a que juegan un papel muy importante en la descripción de la condensación de Bose-Einstein, han sido llamadas funciones de Bose y como veremos concuerda con la función Zeta de Riemman para un valor particular.

Las funciones de Bose presentan una dificultad debido a que no pueden resolverse explícitamente. Esto se debe a que no poseen una representación en términos de funciones "simples". Sin embargo, es posible conocer algunas de sus propiedades haciendo una manipulación matemática de ellas.

Comencemos por expandir el denominador que aparece en la integral

$$\begin{aligned} \frac{1}{e^{x-\alpha} - 1} &= e^{\alpha-x} \frac{1}{1 - e^{\alpha-x}} \\ &= e^{\alpha-x} \sum_{k=0}^{\infty} (e^{\alpha-x})^k \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} (e^\alpha)^k e^{-kx} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Entonces es posible escribir a (A.1) como

$$\begin{aligned} g_m(\alpha) &= \frac{1}{\Gamma(m)} \sum_{k=1}^{\infty} (e^\alpha)^k \int_0^\infty x^{m-1} e^{-kx} dx \\ &= \frac{1}{\Gamma(m)} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(e^\alpha)^k}{k^m} \int_0^\infty y^{m-1} e^{-y} dy \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

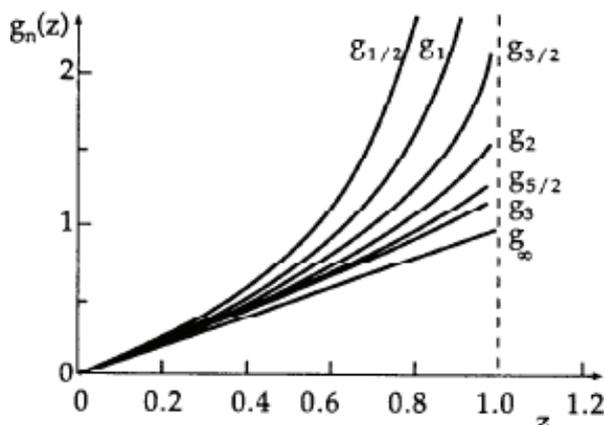


Figura A.1: Gráficas de g_m como función de α , en este caso $z = e^\alpha$. Dependiendo del valor que tome m , las funciones convergen o divergen

Vemos que la última integral es una función $\Gamma(m)$, por lo que (A.3) se reduce a

$$g_m(\alpha) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(e^\alpha)^k}{k^m} \quad \text{con} \quad 0 \leq e^\alpha \leq 1 \quad (\text{A.4})$$

Esta ecuación provee una relación entre la función Zeta de Riemann $\zeta(m)$ y las funciones $g_m(\alpha)$. Para $e^\alpha = 1$ ($\mu = 0$), tendremos que,

$$g_m(0) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^m} = \zeta(m) \quad m > 1 \quad (\text{A.5})$$

La serie anterior converge solamente para $m > 1$, lo cual no solo significa que las funciones $g_m(\alpha)$ están definidas solo en este intervalo, sino que son divergentes para $m \leq 1$ y $e^\alpha \rightarrow 1$. En los casos en que $m > 1$, $g_m(\alpha)$ es finita si $0 \leq e^\alpha \leq 1$.

A continuación se muestra una tabla con algunos de los valores de la función $\zeta(m)$

Cuadro A.1: Valores de la función Zeta de Riemann para $m > 1$

$\zeta(1) \rightarrow \infty$	$\zeta\left(\frac{3}{2}\right) \approx 2,612$
$\zeta(2) \approx 1,645$	$\zeta\left(\frac{5}{2}\right) \approx 1,341$
$\zeta(3) \approx 1,202$	$\zeta\left(\frac{7}{2}\right) \approx 1,127$
$\zeta(4) \approx 1,082$	$\zeta(6) \approx 1.004$

Con estos datos podemos hacernos una idea del comportamiento de las funciones $g_m(\alpha)$.

Vemos por ejemplo, que sin importar el valor de m , todas ellas comienzan en el origen. Además, si $m \leq 1$ divergen cuando $e^\alpha \rightarrow 1$.

En el caso en que $m > 1$ las funciones $g_m(\alpha)$ tienen un valor finito cuando $e^\alpha = 1$.

APÉNDICE **B**

Código fuente de la simulación

ECUACIÓN CINÉTICA PARA EL GAS DE BOSE PARA $T > T_c$

```
*****          CALCULO DEL NUMERO DE ESTADOS          *****

      In = 6
      Ia = 0

      DO InE = 0 , In
        DO IN1 = 0 , InE
          DO IN2 = 0 , InE - IN1

            IN3 = InE - IN1 - IN2
            Ia = Ia + 1

            Ienergia(Ia) = IN1 + IN2 + IN3
            Ienergiax(Ia) = IN1
            Ienergiay(Ia) = IN2
            Ienergiaz(Ia) = IN3

            WRITE(29,101)Ia, Ienergia(Ia), Ienergiax(Ia), Ienergiay(Ia),
*              Ienergiaz(Ia)

          END DO
        END DO
      END DO

*****          CALCULO DE LAS INTEGRALES          *****

*****
      DO IK = 1 , INn
        RCoor ( IK )= Rx
```

```

      Rx = Rx + RdX
    END DO
*****
    DO IJ = 1 , INn
      RCoor ( IJ )= Ry
      Ry = Ry + RdY
    END DO
*****
    DO IQ = 1 , INn
      RCoor ( IQ )= Rz
      Rz = Rz + RdZ
    END DO

**** Definición de las funciones de onda en X (Lo mismo para Y y Z) ****

    DO IK = 1 , INn

      RPSIOX( IK ) = (1.0D0/RPi)**(1.0D0/4.0D0)
&      * DEXP(-((RCoor(IK))**(2.0D0))/2.0D0)
      A1X = (2.0D0/DSQRT(RPi))**(1.0D0/2.0D0)
&      * DEXP(-0.5D0 *(RCoor(IK))**(2.0D0))
      RPSI1X( IK ) = A1X*(RCoor(IK))
      A2X = (1.0D0/(2.0*DSQRT(RPi)))*(1.0D0/2.0D0)
&      * DEXP(-0.5D0 *(RCoor(IK))**(2.0D0))
      RPSI2X( IK ) = A2X*(2.0*((RCoor(IK))**2.0D0)-1.0)
A3X = (1.0D0/(3.0*DSQRT(RPi)))*(1.0D0/2.0D0)
&      * DEXP(-0.5D0 *(RCoor(IK))**(2.0D0))
      RPSI3X(IK)=A3X*(2.0*((RCoor(IK))**3.0D0)-3.0*RCoor(IK))
A4X = (1.0D0/(24.0*DSQRT(RPi)))*(1.0D0/2.0D0)
&      * DEXP(-0.5D0 *(RCoor(IK))**(2.0D0))
      RPSI4X( IK ) = A4X*((4.0*(RCoor(IK))**4.0D0)-(12.0
&      * ((RCoor(IK))**2.0)) + 3.0D0)
A5X = (1.0D0/(64.0*DSQRT(RPi)))*(1.0D0/2.0D0)
&      * DEXP(-0.5D0 *(RCoor(IK))**(2.0D0))
      RPSI5X( IK ) = A5X*((4.0*(RCoor(IK))**5.0D0)-(20.0
&      * ((RCoor(IK))**3.0)) + 15.0D0*(RCoor(IK)))
A6X = (1.0D0/(720.0*DSQRT(RPi)))*(1.0D0/2.0D0)
&      * DEXP(-0.5D0 *(RCoor(IK))**(2.0D0))
      RPSI6X( IK ) = A6X*((8.0*(RCoor(IK))**6.0)-(60.0
&      * ((RCoor(IK))**4.0))+(90.0D0*RCoor(IK)**2.0D0)-15.0D0)

    DO S = 1, Ia

      IF ((Ienergiax(S)) .EQ. (0)) THEN
        RTempx(IK,S) = RPSIOX( IK )

```

```

END IF

IF ((Ienergiax(S)) .EQ. (1)) THEN
RTempx(IK,S) = RPSI1X( IK )
END IF

IF ((Ienergiax(S)) .EQ. (2)) THEN
RTempx(IK,S) = RPSI2X( IK )
END IF

IF ((Ienergiax(S)) .EQ. (3)) THEN
RTempx(IK,S) = RPSI3X( IK )
END IF

IF ((Ienergiax(S)) .EQ. (4)) THEN
RTempx(IK,S) = RPSI4X( IK )
END IF

IF ((Ienergiax(S)) .EQ. (5)) THEN
RTempx(IK,S) = RPSI5X( IK )
END IF

IF ((Ienergiax(S)) .EQ. (6)) THEN
RTempx(IK,S) = RPSI3X( IK )
END IF

END DO
END DO

***** Aqui se calculan las integrales RINT(NU,KAPA,ETA, EPSILON) *****

DO NEQ = 1 , Ia
DO I = 1 , Ia
DO J = 1 , Ia
DO K = 1 , Ia

RSUMAX = 0.0DO
RSUMAY = 0.0DO
RSUMAZ = 0.0DO

DO IK = 1, INn

RSUMAX = RSUMAX + (RTempx(IK,I)*RTempx(IK,NEQ)*
& RTempx(IK,J)*RTempx(IK,K)) * RdX
Rx = Rx + RdX

```

```

END DO

DO IJ = 1, INn
    RSUMAY = RSUMAY + (RTempy(IJ,I)*RTempy(IJ,NEQ)*
&                RTempy(IJ,J)*RTempy(IJ,K))* RdY
    Ry = Ry + RdY
END DO

DO IQ = 1, INn
    RSUMAZ = RSUMAZ + (RTempz(IQ,I)*RTempz(IQ,NEQ)*
&                RTempz(IQ,J)*RTempz(IQ,K))* RdZ
    Rz = Rz + Rdz
END DO

RINT1(I,NEQ,J,K) = RSUMAX*RSUMAY*RSUMAZ

```

```

    RSUMAXb = 0.000
    RSUMAYb = 0.000
    RSUMAZb = 0.000

DO IK = 1, INn
    RSUMAXb = RSUMAXb + (RTempx(IK,I)*RTempx(IK,NEQ)*
&                RTempx(IK,K)*RTempx(IK,I)) * RdX
    Rx = Rx + RdX
END DO

DO IJ = 1, INn
    RSUMAYb = RSUMAYb + (RTempy(IJ,I)*RTempy(IJ,NEQ)*
&                RTempy(IJ,K)*RTempy(IJ,I))* RdY
    Ry = Ry + RdY
END DO

DO IQ = 1, INn
    RSUMAZb = RSUMAZb + (RTempz(IQ,I)*RTempz(IQ,NEQ)*
&                RTempz(IQ,K)*RTempz(IQ,I))* RdZ
    Rz = Rz + Rdz
END DO

```

```
RINT2(I,NEQ,K,I) = RSUMAXb*RSUMAYb*RSUMAZb
```

```
*****
```

```
RSUMAXc = 0.000
RSUMAYc = 0.000
RSUMAZc = 0.000
```

```
DO IK = 1, INn
```

```
RSUMAXc = RSUMAXc + (RTempX(IK,J)*RTempX(IK,K)*
& RTempX(IK,J)*RTempX(IK,NEQ)) * RdX
Rx = Rx + RdX
```

```
END DO
```

```
DO IJ = 1, INn
```

```
RSUMAYc = RSUMAYc + (RTempY(IJ,J)*RTempY(IJ,K)*
& RTempY(IJ,J)*RTempY(IJ,NEQ)) * RdY
Ry = Ry + RdY
```

```
END DO
```

```
DO IQ = 1, INn
```

```
RSUMAZc = RSUMAZc + (RTempZ(IQ,J)*RTempZ(IQ,K)*
& RTempZ(IQ,J)*RTempZ(IQ,NEQ)) * RdZ
Rz = Rz + RdZ
```

```
END DO
```

```
RINT3(J,K,J,NEQ) = RSUMAXc*RSUMAYc*RSUMAZc
```

```
*****
```

```
END DO
END DO
END DO
END DO
```

```
*****
```

```
* Aqui se fijan: la interaccion, el tiempo total, el intervalo *
* de tiempo y las condiciones iniciales. *
*****
```

```
RCE1 = 0.000
```

```
RCE2 = 0.0D0
```

* Se fija el valor de la interacción Rg y el tiempo total ITf

```
Rg = 0.7D0  
ITf = 70000
```

* Se fija el intervalo de tiempo RDt

```
RTime = 0.0D0  
RDt = 0.00005D0
```

* Condiciones iniciales para los diferentes estados

```
RYO ( 1 ) = 0.0D0
```

```
DO I = 2 , 4  
RYO ( I ) = 50.0D0  
END DO
```

```
DO I = 5 , 10  
RYO ( I ) = 40.0D0  
END DO
```

```
DO I = 11 , 20  
RYO ( I ) = 30.0D0  
END DO
```

```
DO I = 21 , 35  
RYO ( I ) = 20.0D0  
END DO
```

```
DO I = 36 , 56  
RYO ( I ) = 25.0D0  
END DO
```

```
DO I = 57 , 84  
RYO ( I ) = 20.0D0  
END DO
```

```
RSUMNO = 0.0D0  
RSUMEO = 0.0D0
```

* Calculo de la energía y número de partículas iniciales

```

DO IL = 1, Ia
RSMNO= RYO(IL) + RSMNO
RSMEO = ((Ienergia(IL)+0.0DO)*RYO(IL)) + RSMEO
END DO

```

```

*****      Aqui comienza la evolucion temporal (Euler)      *****

```

```

* Se inicia un contador

```

```

      IW = 100
      ICont = 0

      DO IT = 1 , ITf
      ICont = ICont + 1
      RTime = RTime + RDt

```

```

*****

```

```

* Implementacion de la ecuacion cinetica para el gas de Bose

```

```

      DO NEQ = 1 , Ia
      A = 0.0DO
      B = 0.0DO

      DO I = 1 , Ia
      DO J = 1 , Ia
      DO K = 1 , Ia

      RCE1 = Ienergia(NEQ) + Ienergia(I)-Ienergia(J)-Ienergia(K)
      RCE2 = Ienergia(NEQ) - Ienergia(K)

      IF ((RCE1) .EQ. (0)) THEN
      A = A + RINT1(I,NEQ,J,K)**2.0DO
      &      * ( RYO( K ) * RYO( J ) * ( 1 + RYO( NEQ ) + RYO( I ) ) ) -
      &      RYO( I ) * RYO( NEQ ) * ( 1 + RYO( J ) + RYO( K ) ) )
      END IF

      IF ((RCE2) .EQ. (0)) THEN
      B = B + 2 * RINT2(I,NEQ,K,I) * RINT3(J,K,J,NEQ) *
      &      ( RYO( I ) * RYO( J ) * ( RYO( K ) - RYO( NEQ ) ) )
      END IF

      END DO
      END DO
END DO

```

```
END DO
```

```
REq(NEQ) = Rg ** 2.0D0 * (A + B)
```

```
END DO
```

```
* Metodo de Euler
```

```
DO M = 1, Ia
```

```
RY1(M) = RY0(M) + REq(M)*RDt
```

```
END DO
```

```
DO J = 1, Ia
```

```
RY0(J) = RY1(J)
```

```
END DO
```

```
RSUMN = 0.0D0
```

```
RSUME = 0.0D0
```

```
* Calculo del numero de partículas y energía finales
```

```
DO IL = 1, Ia
```

```
RSUMN = RY1(IL) + RSUMN
```

```
RSUME = ((Ienergia(IL)+0.0D0)*RY1(IL)) + RSUME
```

```
END DO
```

```
IF (ICont .EQ. IW) THEN
```

```
WRITE(28,*) RTime, RSUMN, RSUME
```

```
WRITE(30,102) RTime, RY1(1), RY1(2), RY1(3),
```

```
& RY1(6), RY1(7)
```

```
WRITE(31,102) RTime, RY1(12), RY1(13), RY1(22),
```

```
& RY1(23), RY1(38), RY1(39)
```

```
WRITE(33,102) RTime, RY1(58), RY1(59)
```

```
ICont = 0
```

```
END IF
```

```
END DO
```

```
END
```

ECUACIÓN CINÉTICA PARA EL GAS DE BOSE PARA $T > T_c$

En este caso se utilizó un código análogo al anterior. Solamente se modificaron las integrales I_{nmlk} y la forma de la ecuación cinética.

```

PROGRAM ECUACION CINETICA PARA EL GAS DE BOSE POR DEBAJO DE Tc

*****  Aqui se calculan las integrales RINT(NU,KAPA,ETA, EPSILON)  *****

      DO NEQ = 2 , Ia
      DO I = 2 , Ia
      DO J = 2 , Ia
      DO K = 2 , Ia

          RSUMAX = 0.0DO
          RSUMAY = 0.0DO
          RSUMAZ = 0.0DO

      DO IK = 1, INn

          RSUMAX = RSUMAX + (RTempx(IK,I)*RTempx(IK,NEQ)*
&              RTempx(IK,J)*RTempx(IK,K)) * RdX
          Rx = Rx + RdX

      END DO

      DO IJ = 1, INn

          RSUMAY = RSUMAY + (RTempy(IJ,I)*RTempy(IJ,NEQ)*
&              RTempy(IJ,J)*RTempy(IJ,K))* RdY
          Ry = Ry + RdY

      END DO

      DO IQ = 1, INn

          RSUMAZ = RSUMAZ + (RTempz(IQ,I)*RTempz(IQ,NEQ)*
&              RTempz(IQ,J)*RTempz(IQ,K))* RdZ
          Rz = Rz + Rdz

      END DO

      RINT1(I,NEQ,J,K) = RSUMAX*RSUMAY*RSUMAZ

*****

      RSUMAXb = 0.0DO

```

```

        RSUMAYb = 0.0DO
        RSUMAZb = 0.0DO

    DO IK = 1, INn

        RSUMAXb = RSUMAXb + (RTempx(IK,I)*RTempx(IK,NEQ)*
&           RTempx(IK,K)*RTempx(IK,I)) * RdX
        Rx = Rx + RdX

    END DO

    DO IJ = 1, INn

        RSUMAYb = RSUMAYb + (RTempy(IJ,I)*RTempy(IJ,NEQ)*
&           RTempy(IJ,K)*RTempy(IJ,I)) * RdY
        Ry = Ry + RdY

    END DO

    DO IQ = 1, INn

        RSUMAZb = RSUMAZb + (RTempz(IQ,I)*RTempz(IQ,NEQ)*
&           RTempz(IQ,K)*RTempz(IQ,I)) * RdZ
        Rz = Rz + Rdz

    END DO

    RINT2(I,NEQ,K,I) = RSUMAXb*RSUMAYb*RSUMAZb

```

```

        RSUMAXc = 0.0DO
        RSUMAYc = 0.0DO
        RSUMAZc = 0.0DO

    DO IK = 1, INn

        RSUMAXc = RSUMAXc + (RTempx(IK,J)*RTempx(IK,K)*
&           RTempx(IK,J)*RTempx(IK,NEQ)) * RdX
        Rx = Rx + RdX

    END DO

    DO IJ = 1, INn

        RSUMAYc = RSUMAYc + (RTempy(IJ,J)*RTempy(IJ,K)*
&           RTempy(IJ,J)*RTempy(IJ,NEQ)) * RdY
        Ry = Ry + RdY

    END DO

```

```

DO IQ = 1, INn

RSUMAZc = RSUMAZc + (RTempz(IQ,J)*RTempz(IQ,K)*
&          RTempz(IQ,J)*RTempz(IQ,NEQ))* RdZ
          Rz = Rz + RdZ

END DO

RINT3(J,K,J,NEQ) = RSUMAXc*RSUMAYc*RSUMAZc

END DO
END DO
END DO

*****
*   Aqui se calcula la integral del termino nuevo                               *
*****

DO J = 2 , Ia
DO K = 2 , Ia

RSUMAX2 = 0.000
RSUMAY2 = 0.000
RSUMAZ2 = 0.000

DO IK = 1, INn

RSUMAX2 = RSUMAX2 + (RTempx(IK,NEQ)*RTempx(IK,J)*
&          RTempx(IK,K))*RdX
          Rx = Rx + RdX

END DO

DO IJ = 1, INn

RSUMAY2 = RSUMAY2 + (RTempy(IJ,NEQ)*RTempy(IJ,J)*
&          RTempy(IJ,K))*RdY
          Ry = Ry + RdY

END DO

DO IQ = 1, INn

RSUMAZ2 = RSUMAZ2 + (RTempz(IQ,NEQ)*RTempz(IQ,J)*
&          RTempz(IQ,K))*RdZ

```

```

                                Rz = Rz + Rdz
END DO

RINT(NEQ,J,K) = RSUMAX2*RSUMAY2*RSUMAZ2

END DO
END DO
END DO

*****   Aqui comienza la evolucion temporal (Euler)   *****

* Se inicia un contador

IW = 100
ICont = 0

    DO IT = 1 , ITf
    ICont = ICont + 1
    RTime = RTime + RDt

***** Implementacion de la ecuacion cinetica para los estados excitados ****

    DO NEQ = 2 , Ia
    RA = 0.000
    RB = 0.000

    DO I = 2 , Ia
    DO J = 2 , Ia
    DO K = 2 , Ia

        RCE1 = Ienergia(NEQ) + Ienergia(I)-Ienergia(J)-Ienergia(K)
        RCE2 = Ienergia(NEQ) - Ienergia(K)

        IF ((RCE1) .EQ. (0)) THEN
            RA = RA + RINT1(I,NEQ,J,K)**2.000
&            * ( RYO( K ) * RYO( J ) * ( 1 + RYO( NEQ ) + RYO( I ) ) -
&            RYO( I ) * RYO( NEQ ) * ( 1 + RYO( J ) + RYO( K ) ) )
        END IF

        IF ((RCE2) .EQ. (0)) THEN

```

```

      RB = RB + 2 * RINT2(I,NEQ,K,I) * RINT3(J,K,J,NEQ) *
&      ( RYO( I ) * RYO( J ) * ( RYO( K ) - RYO( NEQ ) ) )

```

```

      END IF

```

```

      END DO

```

```

      END DO

```

```

      END DO

```

```

      RD = 0.0DO

```

```

      DO J = 2 , Ia

```

```

        DO K = 2 , Ia

```

```

          RCE3 = Ienergia(NEQ) - Ienergia(J) - Ienergia(K)

```

```

          RCE4 = Ienergia(K) - Ienergia(J) - Ienergia(NEQ)

```

```

          IF ((RCE3) .EQ. (0)) THEN

```

```

            RC = RC + RINT(NEQ,J,K)**2.0DO*

```

```

&            ( 2.0DO * RYO( NEQ ) * RYO( J ) + RYO( NEQ ) -
&            RYO( J ) * RYO( K ) )

```

```

          END IF

```

```

          IF ((RCE4) .EQ. (0)) THEN

```

```

            RD = RD + RINT(NEQ,J,K)**2.0DO*

```

```

&            2.0DO*( RYO( NEQ ) * RYO( J ) - RYO( K ) -
&            RYO( K ) * RYO( NEQ ) - RYO( J ) * RYO( K ) )

```

```

          END IF

```

```

        END DO

```

```

      END DO

```

```

      REq(NEQ) = Rg ** 2.0DO * (RA + RB)

```

```

&      - 4.0DO * Rg ** 2.0DO * (RC + RD)

```

```

      END DO

```

```

* Metodo de Euler

```

```

      DO M = 2, Ia

```

```

        RY1(M) = RYO(M) + REq(M)*RDt

```

```

      END DO

```

```

      DO J = 2, Ia

```

```
RY0(J) = RY1(J)
END DO
```

```
RNEX = 0.0D0
REEX = 0.0D0
```

* Calculo del numero de particulas en los estados excitados y de la energia final

```
DO IL = 2, Ia
RNEX = RY1(IL) + RNEX
REEX = ((Ienergia(IL)+0.0D0)*RY1(IL)) + REEX
END DO
```

```
RY1(1) = RNTOT - RNEX
```

```
ICont = 0
```

```
END IF
```

```
END DO
```

```
END
```

Bibliografía

- [1] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, E. A. Cornell. *Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor*, Science **269**, 198 (1995).
- [2] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, W. Ketterle. *Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms*, Phys. Rev. Lett. **75**, 22 (1995).
- [3] C. W. Gardiner and P. Zoller. *Quantum kinetic theory I: A quantum kinetic master equation for ideal Bose condensation*. Phys. Rev. A **55**, (1997).
- [4] D. Jaksch, C. W. Gardiner, and P. Zoller. *Quantum kinetic theory II: Simulation of the quantum Boltzmann master equation*. Phys. Rev. A **56**, (1997).
- [5] C. W. Gardiner and P. Zoller. *Quantum kinetic theory III: Quantum kinetic master equation for strongly condensed trapped systems*. Phys. Rev. A **58**, (1998).
- [6] D. Jaksch, C. W. Gardiner, K. M. Gheri, and P. Zoller. *Quantum kinetic theory IV: Intensity and amplitude fluctuations of a Bose-Einstein condensate at finite temperature including trap loss*. Phys. Rev. A **58**, (1998).
- [7] C. W. Gardiner and P. Zoller. *Quantum kinetic theory V: Quantum kinetic master equation for mutual interaction of condensate and noncondensate*. Phys. Rev. A **61**, (2000).
- [8] W. Greiner, L. Neise, H. Stöcker. *Thermodynamics and statistical mechanics*. Springer, 2004.
- [9] Pathria R K 1997 *Statisticals Mechanics* (Oxford: Pergamon).
- [10] V. M. Romero-Rochín, V. S. Bagnato. *Thermodynamics of an ideal gas of bosons harmonically trapped: equation of state and susceptibilities*. Braz. Journal of Physics. **35**, 3A (2004)
- [11] R. R. Silva, E. A. L. Henn, K. M. F. Magalhaes, L. G. Marcassa, V. Romero-Rochin, V. S. Bagnato. *Definition and measurement of global thermodynamic variables for laser-cooled trapped gas*. Laser Physics **16**, 4 (2006)

- [12] H. J. Metcalf, P. van der Straten. *Laser cooling and trapping*. Springer, 1999.
- [13] C.J Pethick, H. Smith, *Bose Einstein condensation in dilute gases*. Cambridge University Press, 2002.
- [14] W. Demtröder. *Atoms, molecules and photons*. Springer, 2006.
- [15] Z. Hadzibabic, P. Krüger, M. Cheneau, B. Battelier, J. Dalibard. *Berezinskii-Kosterlitz-Thouless crossover in a trapped atomic gas*, Nature **441**, (2006)
- [16] P. Krüger, Z. Hadzibabic, J. Dalibard. *Critical point of an interacting two dimensional atomic Bose gas*, Phys. Rev. Lett. **99**, (2007)
- [17] A. J. Leggett. *Quantum liquids: Bose condensation and cooper pairing in condensed-matter systems*. Oxford University Press, 2006.
- [18] J. F. Annett. *Superconductivity, superfluids and condensates*. Oxford University Press, 2004.
- [19] C. W. Gardiner, P. Zoller, R. Ballagh, M. J. Davis. *Kinetics of Bose-Einstein condensation in a trap*. Phys. Rev. Lett. **79**, 10 (1997).
- [20] C. W. Gardiner, M. D. Lee, R. Ballagh, M. J. Davis, P. Zoller. *Quantum kinetic theory of condensate growth: comparison of experiment and theory*, Phys. Rev. Lett. **81**, 24 (1998)
- [21] M. D. Lee and C. W. Gardiner. *Quantum kinetic theory. VI. The growth of a Bose-Einstein condensate*. Phys. Rev. A **62**, (2000).
- [22] E. Zaremba, T. Nikuni, and A. Griffin. *Dynamics of trapped Bose gases at finite temperatures*. J. Low Temp. Physics **116**, (1999).
- [23] T. Bergeman, D. L. Feder, N. L. Balazs, B. I. Schneider. *Bose condensates in a harmonic trap near the critical temperature*. Cond. Mat. (2008)
- [24] J. Wachter, R Walser, J, Cooper, M. Holland. *Equivalence of kinetic theories of Bose-Einstein condensation*. Phys. Rev. A **64**, 5 (2001)
- [25] W. Ketterle, K. B. Davis, M. A. Joffe, A. Martin, D. E. Pritchard. *High Densities of cold atoms in a dark spontaneous-force optical trap*, Phys. Rev. Lett. **70**, 15 (1993).
- [26] W. Petrich, M. H. Anderson, J. R. Ensher, E. A. Cornell. *Stable, tightly confining magnetic trap for evaporative cooling of neutral atoms*, Phys. Rev. Lett. **74**, 17 (1995).
- [27] D. M. Stamper-Kurn, M. R. Andrews, A. P. Chikkatur, S. Inouye, H. J. Miesner, J. Stenger, W. Ketterle. *Optical confinement of a Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. Lett. **80**, 10 (1998)
- [28] S. Chu. *The manipulation of neutral particles*, Rev. Mod. Phys. **70**, 3, 685-706 (1998)

- [29] C. N. Cohen-Tannoudji. *Manipulating atoms with photons*, Rev. Mod. Phys. **70**, 3, 707-719 (1998)
- [30] W. D. Phillips. *Laser cooling and trapping of neutral atoms*, Rev. Mod. Phys. **70**, 3, 721-738 (1998)
- [31] M. Holland, J. Williams, J. Cooper. *Bose-Einstein condensation: kinetic evolution obtained from simulated trajectories*, Phys. Rev. A **55**, 5 (1997)
- [32] E. Zaremba, A. Griffin, T. Nikuni. *Two-fluid hydrodynamics for a trapped weakly interacting Bose gas*. Phys. Rev. A **57**, 6 (1998)
- [33] P. D. Drummond and J. F. Corney. *Quantum dynamics of evaporatively cooled Bose-Einstein condensates*. Phys. Rev. A **60**, 4 (1999).
- [34] M. J. Davis, C. W. Gardiner, and R. J. Ballagh. *Quantum kinetic theory VII: The influence of vapor dynamics on condensate growth*. Phys. Rev. A **62**, (2000).
- [35] R. Walser, J. Cooper, M. Holland. *Reversible and irreversible evolution of a condensed bosonic gas*. Phys. Rev. A **63**, 1 (2000)
- [36] D. J. Heinzen, Roahn Wynar, P. D. Drummond, and K. V. Kheruntsyan. *Superchemistry: Dynamics of coupled atomic and molecular Bose-Einstein condensates*. Phys. Rev. Lett. **84**, (2000).
- [37] O. M. Schmitt, D. B Tran Thoai, L. Bányai, P. Gartner, H. Haug. *Bose-Einstein condensation quantum kinetics for a gas of interacting excitons*. Phys. Rev. Lett. **86**, 17 (2001)
- [38] M. J. Davis, S. A. Morgan, K. Burnett. *Simulation of Bose fields at finite temperature*. Phys. Rev. Lett. **87**, 16 (2001)
- [39] D. L. Luxat, A. Griffin. *Coherent tunneling of atoms from Bose-condensed gases at finite temperatures*. Phys. Rev. A **65**, 4 (2002)
- [40] S. G. Bhongale, R. Walser, M. J. Holland. *Memory effects and conservation laws in the quantum kinetic evolution of a dilute Bose gas*. Phys. Rev. A **66**, 4 (2002)
- [41] J. F. Corney, P. D. Drummond. *Gaussian quantum Monte Carlo methods for fermions and bosons*. Phys. Reew. Lett. **93**, 26 (2004)
- [42] W.Bao, L.Pareschi, P.Markowich. *Quantum kinetic theory: modelling and numerics for Bose Einstein condensation, in Modelling and Computational methods for kinetic equations*. Birkhauser, (2004), pp.287-320.
- [43] P. D. Drummond, P. Deuar, K. V. Kheruntsyan. *Canonical Bose gas simulations with stochastic gauges*. Phys. Rev. Lett. **92**, 4 (2004)
- [44] P.Markowich, L.Pareschi. *Fast conservative and entropic numerical schemes for the Boson Boltzmann equation*. Numerische Mathematik, **99** (2005), pp.509-532.

- [45] P. B. Blakie and M. J. Davis. *Projected Gross-Pitaevskii equation for harmonically confined Bose gases at finite temperature*. Phys. Rev. A **72**, (2005).
- [46] A. A. Norrie, R. J. Ballagh, and C. W. Gardiner. *Quantum turbulence in condensate collisions: an application of the classical field method*. Phys. Rev. Lett. **94**, (2005).
- [47] M. J. Davis and P. B. Blakie. *Critical temperature of a trapped Bose gas: comparison of theory and experiment*. Phys. Rev. Lett. **96**, 6 (2006).
- [48] T. Bergeman. *Mean Field calculations of Bose-Einstein condensation of ^7Li atoms in a harmonic trap*. Cond. Mat. **96**, (2008)
- [49] C. J. Foot, *Atomic Physics*. Oxford University Press, 2005.
- [50] Huang K. 1987 *Statistical Mechanics* (New York: Wiley).
- [51] C. W. Gardiner and P. Zoller. *Quantum Noise*. Springer, Heidelberg, Berlin, 3rd edition, 2004.
- [52] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, I. E. Dzyaloshinski. *Methods of quantum field theory in statistical physics*. Dover, 1975.
- [53] L. de la Peña. *Introducción a la mecánica cuántica*. FCE, UNAM, 2006.
- [54] F. Bardou, J. P. Bouchaud, A. Aspect, C. Cohen-Tannoudji. *Lévy statistics and laser cooling*. Cambridge University Press, 2003.
- [55] R. R. Puri. *Mathematical methods of quantum optics*. Springer, 2001.
- [56] P. Meystre, M Sargent. *Elements of quantum optics*. Springer, 4ta edición, 2007.
- [57] D. F. Walls, G. J. Milburn. *Quantum optics*. Springer, 1994.