



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**  
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS  
INSTITUTO DE FÍSICA

TERMODINÁMICA DE GASES CUÁNTICOS DE BOSE CONFINADOS EN  
REDES ÓPTICAS: ENSEMBLES, CANÓNICO VS MICROCANÓNICO

TESIS  
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:  
MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:  
ARIEL AYALA RAMÍREZ

TUTOR PRINCIPAL:  
DRA. ROSARIO PAREDES GUTIÉRREZ  
INSTITUTO DE FÍSICA, UNAM

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR:  
  
DR. PABLO BARBERIS BLOSTEIN  
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATEMÁTICAS APLICADAS Y EN  
SISTEMAS, UNAM

DR. FRANCISCO JAVIER SEVILLA PÉREZ  
INSTITUTO DE FÍSICA, UNAM

MÉXICO, D. F. AGOSTO 2014



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.

# Dedicatoria

*A mis compañeros del basquet  
por recorrer conmigo el rocoso camino de la maestría.*

*A Igor, Josefina, Alondra, Pato y Cata, mi querida familia,  
que me han acompañado durante este trayecto.*

*A Filippo por estar conmigo en las buenas y en las malas,  
y porque no estaría donde estoy sin ti.*



# Agradecimientos

Un agradecimiento especial a mi directora de tesis, la Dra. Rosario Paredes Gutiérrez, por su guía, apoyo y amistad. Gracias por su experiencia, asesorías, disposición y confianza en mí. También un distinguido agradecimiento al Dr. Victor Romero Rochín, por su apoyo. Muchas gracias a ambos por sus enseñanzas, las cuales contribuyeron indiscutiblemente en mi formación y por la amabilidad con la que siempre me trataron.

Agradezco a mi comité tutorial y a mi jurado de tesis: el Dr. Pablo Barberis Blostein, el Dr. Francisco Sevilla Pérez, el Dr. Luis Olivares Quiroz, la Dra. Vicenta Sánchez Morales y el Dr. Remigio Cabrera Trujillo, por sus atinadas observaciones y sugerencias en la mejora de este trabajo.

A Igor Ayala Pliego y a Gabriela Torres Prieto, un especial agradecimiento por el interés mostrado y la ayuda técnica recibida.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por la beca que me brindó durante mis estudios de maestría, con la cual me fue posible financiar mi posgrado.



# Índice general

<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>1. Condensados de Bose-Einstein</b>	<b>4</b>
1.1. La condensación de Bose-Einstein . . . . .	5
1.2. Redes ópticas unidimensionales . . . . .	10
1.3. Temperaturas negativas . . . . .	17
<b>2. Estados de equilibrio de un gas de bosones en redes ópticas unidimensionales</b>	<b>21</b>
2.1. Estados de equilibrio . . . . .	21
2.2. Ensembles en la Física Estadística . . . . .	26
2.3. Gas de Bose-Einstein en un potencial armónico . . . . .	31
2.4. El Hamiltoniano efectivo para un gas de Bose en potenciales unidimensionales finitos . . . . .	36
2.5. Estados estacionarios en redes ópticas . . . . .	38
2.6. Temperaturas negativas en sistemas con grados de libertad cinéticos . . . . .	42
<b>3. Propiedades termodinámicas de un gas de Bose-Einstein con interacción en potenciales unidimensionales</b>	<b>46</b>

3.1. Temperatura y entropía . . . . .	47
3.2. El promedio térmico de la población . . . . .	52
<b>4. Conclusiones</b>	<b>59</b>
<b>A. Deducción del Hamiltoniano de Bose-Hubbard en potenciales unidimensionales finitos</b>	<b>61</b>
<b>B. Un poco más sobre temperaturas negativas</b>	<b>70</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>76</b>

# Introducción

La primera realización de un condensado de Bose-Einstein (y la primera observación de un estado cuántico macroscópico en un sistema de muchos cuerpos), en 1995, marca una nueva era, no solo en la física atómica, sino en la física cuántica. La razón es que los gases atómicos ultrafríos tienen conexiones naturales con otros problemas como el estudio de electrones en redes cristalinas o la superfluidez, con la ventaja de que su estudio teórico y experimental resulta mucho más sencillo.

En efecto, los parámetros experimentales importantes (como la interacción entre los átomos, el número de éstos o la geometría de la trampa) en tales gases pueden ser fácilmente ajustables y controlarse con mucha mayor precisión que en cualquier otro sistema cuántico, como en un sólido. De esta manera, los gases ultrafríos se colocan en una posición en la cual se pueden construir puentes entre la física atómica, óptica cuántica, materia condensada y física de estado sólido.

Uno de los efectos más prominentes en este respecto es la realización experimental de una junta de Josephson en condensados de Bose-Einstein débilmente acoplados. El transporte de átomos ha mostrado la existencia de una transición de fase cuántica de un régimen superfluido a un régimen de aislante de Mott que depende de las interacciones interatómicas y de las poblaciones iniciales en los pozos.

Existen dos aproximaciones teóricas para estudiar las juntas de Josephson que describen razonablemente bien el comportamiento dinámico y la transición de fase: una aproximación de campo medio a través de la ecuación de Gross-Pitaevskii y una descripción completamente cuántica por medio del Hamiltoniano de Bose-Hubbard. En esta tesis seguiremos el camino teórico dado por el Hamiltoniano de Bose-Hubbard, puesto que las propiedades de  $N$  cuerpos pueden ser estudiadas con este esquema, particularmente las propiedades de un cuerpo, que son las que nos dan la temperatura, la entropía y el número de partículas de un sistema.

El Hamiltoniano de Bose-Hubbard también nos proporciona una manera de aprovechar que un gas de bosones en una red óptica es un sistema descrito por el ensemble microcanónico, dado que es un sistema cerrado con un número fijo de partículas con energía total fija. Los eigenestados del Hamiltoniano son, entonces, los apropiados para describir el valor esperado para las propiedades de pocos cuerpos y encontrar después los valores esperados en el ensemble canónico.

El propósito de esta tesis es estudiar los valores esperados de las propiedades de un cuerpo en un gas de bosones atrapado en una red óptica de dos, tres y cuatro pozos, concretamente la temperatura, la entropía y la población, tanto en su fase superfluida como en su fase de aislante, mediante el ensemble canónico, aprovechando que los ensambles microcanónico y canónico son equivalentes en el equilibrio. Esta equivalencia también se investiga comparando el promedio de la población de partículas obtenido en ambos ensambles.

La tesis se organiza de la siguiente manera:

En el primer capítulo, tras un pequeño repaso general a la condensación de Bose-Einstein de un gas ideal, se discute brevemente las interacciones

presentes en un gas real, las cuales le dan el carácter dinámico al condensado cuando se encuentra atrapado en una red óptica. Para redondear, se aborda un poco el funcionamiento experimental de las redes ópticas. Finalmente, introducimos el concepto de temperatura negativa.

En la primera parte del segundo capítulo, se introducen los conceptos y herramientas teóricas necesarias para el presente trabajo: estados de equilibrio, ensembles estadísticos y el Hamiltoniano de Bose-Hubbard. En la segunda parte, se establecen dos propiedades del sistema: que los estados del Hamiltoniano en la base de número exhiben la propiedad de estacionariedad cuando evolucionan en el tiempo y que, experimentalmente, a los estados del sistema se les puede asociar una temperatura negativa.

En el tercer capítulo, se encuentran la temperatura y entropía del sistema hallando que éste presenta estados de temperatura negativa. Como se discutirá a fondo, las temperaturas negativas descubiertas usando el Hamiltoniano de Bose-Hubbard se deben al acotamiento de estados natural que se genera al considerar la aproximación de pocos modos. Asimismo, se estudia la población de partículas en el ensemble canónico y en el microcanónico y se muestra que el sistema exhibe la no equivalencia entre ambos, lo cual probablemente se debe también a las limitaciones del modelo.

Por último, se lleva a cabo una síntesis con los resultados encontrados.

# Capítulo 1

## Condensados de Bose-Einstein

Este capítulo está dedicado a establecer el trasfondo teórico en el cual transcurre este trabajo de tesis. Esto incluye la física básica de la condensación de Bose-Einstein en redes ópticas, así como una revisión de la historia de sistemas con temperaturas negativas.

Tanto las propiedades estadísticas de los bosones como de la del Condensado de Bose-Einstein de un gas ideal son temas tratados en todos los libros esenciales de Física Estadística [13], [10], por lo que solo resumiremos los conceptos elementales de la condensación. En cambio, lo que hace verdaderamente merecedor de estudio al Condensado de Bose-Einstein es el hecho de que en los experimentos reales el gas es no ideal y las interacciones entre los bosones son responsables de la mayoría de sus propiedades. La sección 1.1 está dedicada a revisar, por un lado, el caso ideal y, por el otro, el caso más importante y realista de átomos ultrafríos en un potencial confinante con interacción. En la sección 1.2 se estudia cómo se forma este potencial, que para nuestros fines de esta tesis es una red óptica, y se describe brevemente de qué manera se realizan las mediciones sobre el Condensado en la red óptica. Finalmente, se revisa el concepto de temperatura negativa y su relación con

el sistema a estudiar.

## 1.1. La condensación de Bose-Einstein

### Condensación de Bose-Einstein de un gas ideal libre homogéneo

La distribución de partículas en estados  $|m\rangle$  con energías  $\epsilon_m$  de un sistema en equilibrio termodinámico se puede tratar fácilmente en el ensemble gran canónico. La energía total de una cierta configuración  $\{n_m\}$  se obtiene al sumar sobre todos los niveles de energía por su número de ocupación  $E_{tot} = \sum_{m=0}^{\infty} n_m \epsilon_m$  y el total de partículas está dado por la suma del número de ocupación  $N_{tot} = \sum_m n_m$ . La función de partición  $\Xi(T, V, \mu)$ , donde  $T$  es la temperatura,  $\mu$  es el potencial químico y  $V$  es el volumen, se obtiene al sumar el factor de Boltzmann  $\exp\left(\frac{-E + \mu N}{k_B T}\right)$  sobre todas las posibles configuraciones

$$\Xi(T, V, \mu) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{n_m}^{\infty} \prod_m^{\infty} e^{(\alpha - \beta \epsilon_m) n_m}. \quad (1.1)$$

El potencial químico  $\mu$  es la energía necesaria para añadir o quitar una partícula del sistema y donde por simplicidad definimos  $\alpha = \mu/k_B T$  y  $\beta = 1/k_B T$ . Notando que la doble suma puede reemplazarse por una sola suma en los números de ocupación, la función de partición queda

$$\Xi_B(T, V, \mu) = \prod_m^{\infty} \frac{1}{1 - e^{\alpha - \beta \epsilon_m}}. \quad (1.2)$$

Una vez conocida la función de partición, se pueden obtener todas las relaciones termodinámicas siguiendo las reglas usuales. Así, el gran potencial

$\Omega_B(T, V, \mu)$  es

$$\Omega_B(T, V, \mu) = -kT \ln(\Xi_B(T, V, \mu)) = kT \sum_m^{\infty} \ln(1 - e^{\alpha - \beta \epsilon_m}), \quad (1.3)$$

y el número medio de partículas es

$$N = \frac{\partial \Omega_B(T, V, \mu)}{\partial \mu} = \sum_m^{\infty} \frac{1}{e^{\beta \epsilon_m - \alpha} - 1}; \quad (1.4)$$

como se debe verificar que  $\sum_m^{\infty} n_m = N$ , se tiene que

$$n_m = \frac{1}{e^{\beta \epsilon_m - \alpha} - 1}, \quad (1.5)$$

que es la llamada distribución de Bose-Einstein.

De esta distribución se deduce que el potencial químico tiene que ser menor que el nivel fundamental individual  $\epsilon_0 = 0$  para que  $n_m$  sea positiva para todos los estados y para que el número de ocupación  $n_0$  no diverja. Esto significaría que para  $T \rightarrow 0$  todos los números de ocupación y que, por tanto,  $N_{tot}$  serían 0. Para resolver el dilema, es requisito que para  $T \rightarrow 0$ , el potencial químico  $\mu$  se pegue a  $\epsilon_0$  de una manera tal que el estado más bajo de una sola partícula tenga una ocupación macroscópica sin llegar a ser infinita.

Si las energías del sistema, para  $N$  suficientemente grande, se pegan lo bastante, en el límite termodinámico la diferencia de energías tiende a 0 y se obtiene una distribución continua de estados y se puede definir una densidad de estados  $f(E)$ . Para partículas libres en una caja de volumen  $V$ ,  $f(E)$  es

$$f(E) = \frac{V}{(2\pi)^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E}. \quad (1.6)$$

En el límite termodinámico, el número total de partículas y el volumen del sistema divergen, por lo que resulta mejor calcular la densidad

$$N^* = \frac{1}{V} \int_0^\infty \frac{f(E)}{e^{\beta\epsilon_m - \alpha} - 1} dE + \frac{1}{V} \frac{e^\alpha}{1 - e^\alpha} = \frac{g_{3/2}(z)}{\lambda_{dB}^3} + \frac{1}{V} \frac{e^\alpha}{1 - e^\alpha}, \quad (1.7)$$

donde se ha separado la contribución del estado base debido a que no es posible contarlos en la integral, pues  $f(E) = 0$ . También se ha introducido las funciones de Bose, definidas por

$$g_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty dx \frac{x^{n-1}}{e^{x-z} - 1}. \quad (1.8)$$

Bajas temperaturas y/o altas densidades significan que el potencial químico aumenta, acercándose al estado base  $\epsilon_0$ , que es su cota superior. La densidad en los estados excitados se satura con un valor máximo de

$$N_{exc}^* = \frac{g_{3/2}(0)}{\lambda_{dB}^3}. \quad (1.9)$$

Si a partir de este punto se aumenta la densidad a volumen y temperatura constantes, las partículas añadidas ya no pueden ocupar estados excitados y tienen que poblar el estado base del sistema, formando el Condensado de Bose-Einstein.

Si en vez de aumentar la densidad se disminuye la temperatura, también es posible saturar los estados excitados. A la temperatura crítica  $T_c$ , en que ocurre el condensado, el número de partículas en el sistema es igual al número máximo de átomos en los estados excitados. Por debajo de esta temperatura, se escribe

$$N = N_c(T_c) + \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega}\right)^3 g_{3/2}(0), \quad (1.10)$$

donde  $N_c$  es la contribución a la población debida a las partículas en el estado base. Entonces, obtenemos la expresión

$$\frac{N_c(T_c)}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \quad (1.11)$$

para la fracción de partículas que se encuentran en el estado base, dependiendo de la temperatura.

## Interacciones en un gas de bosones

En principio, un gas de bosones ideal alcanza la condensación de Bose-Einstein al disminuir la temperatura y/o al aumentar la "densidad". No obstante, para que el sistema sea estable en la vida real, las colisiones de más de dos cuerpos deben ser suficientemente raras (es decir, debe acercarse bastante a un gas ideal), lo que solo es posible a bajas densidades, por lo que la realización de un Condensado de Bose-Einstein necesitó técnicas experimentales que permitieran alcanzar la región ultrafría (desde  $1 \mu\text{K}$  hasta temperaturas cada vez más cercanas al 0).

Experimentalmente, sin embargo, las colisiones son cruciales para que funcione la técnica del enfriamiento por evaporación, con la cual finalmente se lograría la condensación de Bose-Einstein. Los efectos de la interacción van mucho más allá de la producción del condensado; a pesar de la extremadamente baja densidad, la aparente débil interacción es responsable por toda la dinámica del sistema, simplemente porque todas las otras energías son aun más pequeñas.

Debido a la baja densidad y temperatura de los gases ultrafríos, las in-

teracciones relevantes son colisiones que pueden ser descritas por un solo parámetro, la longitud de dispersión de onda  $s$  [2], que es independiente de los detalles del potencial de interacción. Entonces, el potencial de interacción interpartícula se aproxima por un pseudopotencial, también llamado potencial de contacto y que tiene la forma

$$U(x) = \frac{4\pi\hbar^2\alpha_s}{m}\delta(x) = g\delta(x), \quad (1.12)$$

siendo  $m$  la masa reducida de dos átomos;  $\alpha_s$ , la longitud de dispersión, y  $\delta(x)$ , la función delta de Dirac.

Se puede notar que el potencial de contacto es de corto alcance e isotrópico y, por tanto, similar al de esferas duras. En efecto, puesto que la longitud de onda de De Broglie de las partículas se hace tan grande en el régimen ultrafrío, los átomos parecen estar chocando en todo momento, por lo que es suficiente un potencial con el menor alcance posible.

En presencia de una resonancia de Feshbach magnética, la longitud de dispersión depende de la intensidad del campo magnético aplicado externamente  $B$  como[19]

$$\alpha_s(B) = \alpha_{gb} \left( 1 - \frac{\Delta B}{B - B_0} \right). \quad (1.13)$$

Aquí,  $\alpha_{gb}$  es la longitud de dispersión de fondo (que representa el valor fuera de la resonancia),  $B_0$  denota la posición de la resonancia donde la longitud de dispersión diverge y  $\Delta B$  es el ancho de la resonancia.

Debido a la dependencia de la longitud de dispersión con el campo magnético, éste se puede calibrar experimentalmente al variar la resonancia de Feshbach vía el campo magnético externo y entonces, mediante la Ec. (1.12), puede decidirse externamente si el potencial de contacto es repulsivo ( $\alpha_s > 0$ ) o

atractivo ( $\alpha_s < 0$ ).

## 1.2. Redes ópticas unidimensionales

Las interacciones no son el único efecto experimental al que es sometido un Condensado de Bose-Einstein; también lo es el potencial de confinamiento, pues éste es posible crearlo en el laboratorio a través de un haz de luz láser e inclusive pueden crearse potenciales periódicos. La teoría de como la luz es capaz de atrapar los átomos se describe brevemente a continuación.

### Fuerzas ópticas para atrapar partículas

Uno de los factores esenciales que hacen posible la realización del Condensado de Bose-Einstein es la posibilidad de atrapar el gas en un recipiente que no lo caliente y, por tanto, destruya. Esto se logra al crear potenciales conservativos llamados trampas ópticas dipolares o simplemente trampas dipolares, las cuales utilizan la fuerza conservativa que resulta de la interacción dispersiva de los momentos eléctricos dipolares que son inducidos por luz altamente desintonizada con la luz misma.

Más explícitamente, las trampas dipolares están basadas en el principio de la interacción entre un campo eléctrico oscilante con polarización  $\epsilon$ , frecuencia  $\omega$  y amplitud  $E(\mathbf{r}, t)$  de un haz láser y los átomos del gas, que al estar expuestos al campo se les induce un momento dipolar eléctrico  $\mathbf{p}(\mathbf{r}, t)$ . El momento dipolar oscila con la frecuencia del láser  $\omega$  y se relaciona con el campo eléctrico de la siguiente forma:

$$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad (1.14)$$

donde  $\alpha$  es una polarizabilidad compleja que depende de la frecuencia del

láser.

Si el campo tiene forma

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \epsilon E \mathbf{r} e^{i\omega t} + \epsilon E^* \mathbf{r} e^{-i\omega t}, \quad (1.15)$$

la polarizabilidad se acopla con el campo eléctrico vía el potencial

$$U(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} \langle \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} \rangle_t = -\frac{1}{2\epsilon_0 c} \text{Re}(\alpha) I(\mathbf{r}), \quad (1.16)$$

donde los brackets representan el promedio temporal de un ciclo y la intensidad de la luz es  $I(\mathbf{r}) = 2\epsilon_0 c |E(\mathbf{r})|^2$ .

La energía potencial es entonces proporcional tanto a la intensidad como a la parte real de la polarizabilidad, la cual contiene la componente en fase de la oscilación dipolar, responsable de la dispersión. La dependencia espacial del potencial  $U(\mathbf{r})$  conlleva una fuerza dipolar que también es dependiente de la posición  $F(\mathbf{r})$  y como ésta es conservativa, basta sacar el gradiente del potencial

$$\mathbf{F}(r) = \frac{1}{2\epsilon_0 c} \text{Re}(\alpha) \nabla I. \quad (1.17)$$

Para obtener una expresión para la polarizabilidad, se usa el modelo de Lorentz, en el cual una electrón de masa  $m$  y carga  $-e$  está atado elásticamente al núcleo de un átomo con frecuencia característica  $\omega_0$ , que es igual a la frecuencia de la transición óptica, de manera que simula un oscilador armónico con amortiguamiento  $\Gamma$ .

Si, además, tomamos en cuenta la naturaleza cuántica del sistema, es decir, consideramos que el átomo posee niveles de energía (con solo dos de ellos que solo hay dos de ellos con diferencia de energía  $\Delta E = \hbar\omega_0$ , en el modelo más sencillo), y que interactúa con fotones que tienen una energía

$\hbar\omega$ , entonces, con esta aproximación semiclásica, se puede mostrar que la polarización  $\alpha$  puede escribirse como[9]

$$\alpha(\omega) = 6\pi\epsilon_0 c^2 \frac{\Gamma/\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i(\omega^3/\omega_0^2)} \Gamma, \quad (1.18)$$

donde  $\Gamma$  es la tasa de amortiguamiento en resonancia debida a la pérdida de energía por radiación del electrón en su decaimiento. Con esto, el potencial dipolar queda explícitamente escrito como

$$U_{dip}(\mathbf{r}) = -\frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \left( \frac{\Gamma}{\omega_0 - \omega} + \frac{\Gamma}{\omega_0 + \omega} \right) I(\mathbf{r}). \quad (1.19)$$

También, al considerar la luz del láser como un flujo de fotones con energía  $\hbar\omega$ , la potencia absorbida  $P = \dot{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{E}$  puede ser considerada como un proceso repetitivo de absorción-emisión de fotones con tasa de dispersión

$$\Gamma_{dis} = \frac{P}{\hbar\omega} = \frac{1}{\hbar\epsilon_0 c} \text{Im}(\alpha) I, \quad (1.20)$$

que, usando la Ec.(1.18), queda

$$\Gamma_{dis}(\mathbf{r}) = \frac{3\pi c^2}{2\hbar\omega_0^3} \left( \frac{\Gamma}{\omega_0 - \omega} + \frac{\Gamma}{\omega_0 + \omega} \right)^2 I(\mathbf{r}). \quad (1.21)$$

Se observa que en resonancia,  $\omega = \pm\omega_0$ , no tiene sentido hablar de un potencial dipolar. Sin embargo, experimentalmente los láseres son sintonizados cerca de la resonancia, de manera que se puede suponer  $\frac{\omega}{\omega_0} \approx 1$  y  $|\omega - \omega_0| = \delta \ll \omega_0$ , con lo cual la expresión para el potencial dipolar y la tasa de dispersión se reducen a

$$U(\mathbf{r}) = \frac{3\pi c^2 \Gamma}{2\omega_0^3 \delta} I(\mathbf{r}) \quad (1.22)$$

y

$$\Gamma_{dis}(\mathbf{r}) = \frac{3\pi c^2}{2\hbar\omega_0^3} \left(\frac{\Gamma}{\delta}\right)^2 I(\mathbf{r}). \quad (1.23)$$

De la Ec. (1.22) se nota que si  $\delta < 0$  (desintonización roja), el potencial dipolar es negativo y el campo atrae a los átomos. Por tanto, los mínimos de potencial se encuentran en las posiciones de máxima intensidad. Para el caso de  $\delta > 0$  (desintonización azul), el potencial es positivo y el campo repele a los átomos. Los mínimos de potencial corresponden a los mínimos de intensidad.

También se observa que la tasa de dispersión va como  $I/\delta^2$ , mientras que el potencial va como  $I/\delta$ . Basta, entonces, trabajar con frecuencias suficientemente desintonizadas para reducir la dispersión mientras se mantiene una profundidad razonable en la trampa, dos de los criterios importantes para el diseño de trampas.

Comúnmente, para atrapar átomos en trampas ópticas dipolares, se utiliza un haz de luz láser cuya sección transversal es gaussiana. Entonces, consideremos un haz láser gaussiano propagándose en la dirección  $z$  con longitud de onda  $\lambda$  y potencia  $P_0$ . En un plano perpendicular a  $z$ , la intensidad radial del haz láser puede ser escrita como

$$I(z, r) = I_0 \frac{1}{1 + \left(\frac{z}{z_R}\right)^2} \exp\left(\frac{-2r^2}{w_0^2} \frac{1}{1 + (z/z_R)^2}\right), \quad (1.24)$$

donde  $r$  y  $z$  son sendas posiciones radial y longitudinal con respecto al foco del haz. La intensidad cae dentro de la distancia  $w_0$  (el ancho mínimo del haz en el foco) del eje óptico, desde su máximo valor  $I_0$  en el foco, hasta  $I_0/e^2$ , lo que lleva a una forma gaussiana. La intensidad dependde, a lo largo del eje de simetría, del alcance de Rayleigh  $z_R$ , el cual está definido como

$$z_R = \frac{\pi w_0^2}{\lambda}. \quad (1.25)$$

El ancho del haz en la posición  $z$  a lo largo del eje de propagación es

$$w(z) = w_0 \sqrt{1 + \left(\frac{z}{z_R}\right)^2}. \quad (1.26)$$

Entonces, podemos escribir el potencial como

$$U(r, z) = U_0 \frac{1}{1 + \left(\frac{z}{z_R}\right)^2} \exp\left(\frac{-2r^2}{w_0^2} \frac{1}{1 + (z/z_R)^2}\right) \quad (1.27)$$

donde la profundidad del pozo  $U_0$  puede ser calculada usando  $I_0$ .

## Creación de redes ópticas unidimensionales

Considérese ahora, dos haces de láser que se contrapropagan de manera que las secciones transversales gaussianas se sobrepongan. En este caso, se forma un patrón de interferencia en donde en medio de una onda estacionaria de longitud  $\lambda$ , el potencial  $\lambda/2$ -periódico (red) visto por los átomos en esta onda estacionaria es

$$U(x) = U_0 \sin^2(kx), \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (1.28)$$

Si se ubica el origen de coordenadas en un pozo específico, y se desarrolla el potencial a segundo orden, se obtiene lo siguiente:

$$U(x) \simeq U_0 k^2 x^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, \quad (1.29)$$

donde  $\omega = \sqrt{\frac{2U_0 k^2}{m}}$ .

Se observa que entonces es posible tratar el potencial que confina a los átomos como un potencial armónico.

Esta aproximación armónica es válida si el pozo tiene suficiente profundidad para contener varios estados ligados y la temperatura es lo bastante baja para que solo los estados al fondo del pozo se encuentren ocupados, es decir,  $kT < \hbar\omega \ll U_0$ .

## Mediciones en redes ópticas

Realizar experimentos con condensados de Bose-Einstein en redes ópticas solo tiene algún sentido si se es capaz de extraer información del sistema una vez que la experiencia ha sido realizada. El método más popular (aunque totalmente destructivo) para obtener información de una muestra atómica en un trampa es llamado tiempo de vuelo, con el cual se puede adquirir información acerca del número de átomos en la trampa o la temperatura del ensemble, que además, caracterizan el sistema.

Con este método la trampa se apaga y los átomos son soltados en una trayectoria balística. Después de una fase de expansión balística suficientemente larga (del orden de los milisegundos), la distribución resultante, que se obtiene por medio de diferentes métodos de imagen, refleja directamente la distribución de velocidades en el momento en que se apaga la trampa. Esto debe hacerse rápida y adiabáticamente para que la muestra no se caliente.

El número total de átomos se determina al ajustar una función de distribución al perfil de densidad de la imagen e integrar la función sobre todo el plano de la imagen. La temperatura del gas se determina a partir del ancho de la misma distribución.

En el caso de un gas se halle lejos de la temperatura crítica del condensado, la distribución de densidad en un potencial atrapante  $U(\vec{r})$  viene dada

directamente por el factor de Boltzmann

$$N^*(\vec{r}) = N_0^* e^{-\beta U(\vec{r})}, \quad (1.30)$$

donde  $N^{*0}$  es la densidad pico de la nube térmica.

Para un potencial armónico  $U(\vec{r}) = \frac{m}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)$ , la distribución resultante es gaussiana en todas direcciones:

$$N^*(\vec{r}) = N_0^* e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} e^{-\frac{z^2}{2\sigma_z^2}}, \quad (1.31)$$

con  $\sigma_i = \sqrt{\frac{k_B T}{\omega_i^2 m}}$ . La temperatura del gas, entonces, se obtiene como

$$T = \frac{m}{k_B} \sigma_i^2 \omega_i^2. \quad (1.32)$$

En el caso de que la nube se encuentre en su fase condensada, hay que recordar que la mayor parte de la población de partículas se encuentra en el estado base. Como el estado base de  $N$  partículas que no interactúan es simplemente la multiplicación  $\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \prod_i \phi(\vec{r}_i)$  de funciones de una sola partícula

$$\phi(\vec{r}) = \frac{m\omega^{3/4}}{\pi\hbar} e^{-\frac{m}{2\hbar}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)}, \quad (1.33)$$

la distribución de densidad

$$N^* = N |\phi|^2 \quad (1.34)$$

es gaussiana con tamaño independiente del número de partículas. En este caso, el ancho está dado por  $\sigma_i = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_i}}$ .

Comparando este ancho con el de una nube térmica (1.31), en donde  $k_B T \gg \hbar\omega$ , es notorio que la distribución de un gas en su estado conden-

sado siempre es más estrecha que una distribución puramente térmica. La aparición de un pico agudo en la distribución de densidad es, por lo tanto, una clara muestra de la presencia del condensado de Bose-Einstein en un gas confinado.

La distribución de momentos se puede calcular al integrar la distribución de densidad sobre todo el espacio. Para la nube térmica, el resultado es una distribución que siempre es isotrópica, mientras que los átomos condensados están localizados con una incertidumbre de  $h^3$  en el espacio fase, por lo que su distribución de momentos en un potencial anisotrópico es anisotrópico también.

Entonces, si un gas es liberado al apagar una trampa (no esférica) y se expande libremente, la manera en que lo hace es una clara indicación de si el gas es térmico o está en un estado condensado. Después de un largo tiempo de expansión, un gas térmico siempre tendrá una forma esférica debido a su distribución isotrópica. El condensado, por otra parte, se expande anisotrópicamente con un momento más grande en dirección a donde inicialmente obedecía al confinamiento más fuerte.

### 1.3. Temperaturas negativas

La primera mención de temperaturas negativas parece deberse a Purcell y Pound [14], que en 1951 usaron este concepto para describir la inversión de población en sistemas de espín nuclear. En 1956, Ramsay [15] lo formaliza y discute varias de sus consecuencias, entre ellas, una modificación a la Segunda Ley de la Termodinámica y, de modo más notable, la posibilidad (teórica) de construir máquinas de Carnot con eficiencias mayores a uno. Más recientemente, se logró un estado macroscópico al que le correspondería una

temperatura negativa en un gas de bosones ultrafrío en una red óptica.

A continuación, se discutirán brevemente las temperaturas negativas, como se reportaron en sistemas de espín para usarlas de base en la discusión de temperaturas negativas en sistemas de gases ultrafríos en el siguiente capítulo.

## Sistema de dos niveles

En principio hay que recordar que si  $S$  y  $E$  son la entropía y energía de un sistema macroscópico, respectivamente, la temperatura de éste está dada por

$$\frac{1}{T} = \left( \frac{\partial S}{\partial E} \right)_X, \quad (1.35)$$

donde el subíndice indica que la parcial debe realizarse manteniendo constantes las variables  $X$  adecuadas al sistema.

La Ec. (1.35) puede obtenerse usando solo la Termodinámica pues a ésta no le importa de que están hechos (atómicamente) los sistemas, sino las propiedades macroscópicas de estos.

Sin embargo, en gran cantidad de sistemas estudiados por la Física, tomar en cuenta la estructura atómica es ineludible, por lo cual, la Segunda Ley de la Termodinámica tiene un origen estadístico en el que la entropía queda definida a través de la cantidad de estados microscópicos accesibles  $\Gamma(E, X)$ :

$$S(E, X) = k_B \ln \Gamma(E, X).^1 \quad (1.36)$$

Si el espectro de energía crece monótonamente, la entropía también lo

---

<sup>1</sup>Esta entropía se refiere a un sistema abierto o cerrado con energía promedio  $E$ . Si el sistema es cerrado la energía no cambia, en tanto que si es abierto, la energía fluctúa respecto a su valor promedio.

hará y la temperatura será necesariamente positiva. En sistemas clásicos esto siempre es cierto, pues el espectro de energía solo está acotado por abajo (el estado base), mientras que el número de estados disponibles es infinito<sup>2</sup>. En sistemas cuánticos, sin embargo, se puede tener espectros de energía finitos y, por tanto, acotados por arriba y por abajo.

Por ejemplo, si en un sistema de núcleos de espín  $1/2$  sujetos a un campo magnético externo se puede lograr despreciar las energías cinéticas y de interacción mutua (es decir, si tenemos un sistema de fermiones en sitios distinguibles de una red, tal como en el experimento de Purcell), entonces solo la energía de espín cuenta y podemos considerar al sistema como uno de dos niveles. En estas condiciones, la energía total más baja solo se logra con toda la población en el estado más bajo, es decir, solo puede alcanzarse de una manera, por lo que corresponde a  $S = 0$ . De la misma manera, la energía total más alta solo es posible con todos los elementos del sistema en el estado más alto, lo cual, de nuevo, solo se logra de una manera y corresponde a  $S = 0$ . Las energías intermedias se alcanzan con algunos elementos en el estado más bajo y el resto en el estado más alto; esto puede claramente lograrse de diferentes maneras y le corresponde entonces una entropía mayor. Por tanto, entre los estados de mayor y menor energía, la entropía crece, llega a un máximo y luego disminuye; todo esto conforme la energía crece.

Este comportamiento se muestra en la Fig. 1.1. Como puede verse, conforme aumenta la energía del sistema (se calienta), la temperatura pasa de  $T = 0^+$  a  $T = \infty^+$ . Conforme se calienta más el sistema, la temperatura pasa a  $T = \infty^-$  y entonces se vuelve menos negativa hasta terminar con la temperatura más “caliente.”  $T = 0^-$ . En otras palabras, las temperaturas negativas son más “calientes” que cualquier temperatura positiva, incluyendo

---

<sup>2</sup>Principalmente debido a la energía cinética.

la temperatura infinita.

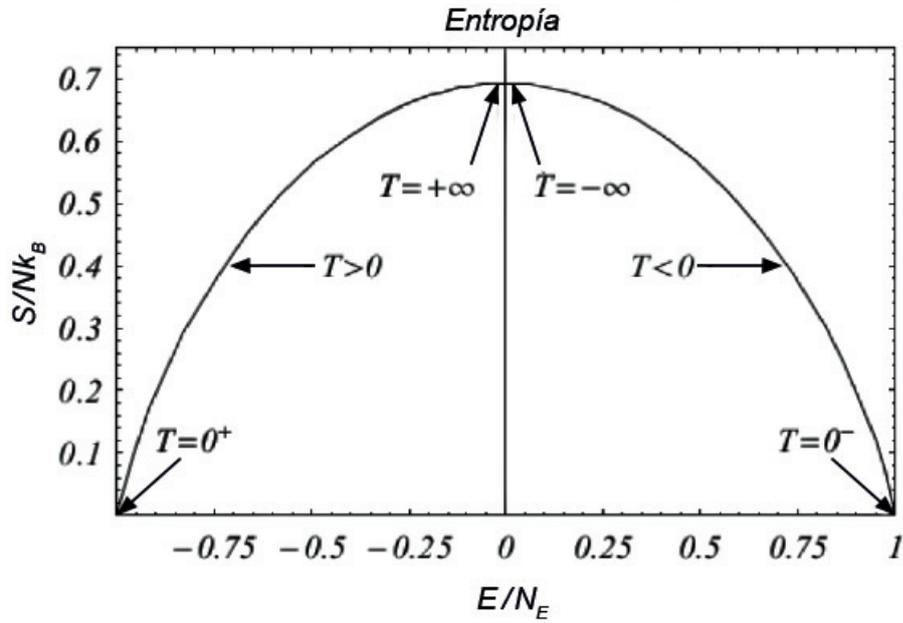


Figura 1.1: Gráfica de entropía como función de la energía interna en un sistema con dos niveles de energía. El máximo corresponde a  $(\frac{\partial S}{\partial E})_X = 0$ , en donde los dos estados están igualmente poblados.

En el experimento de Purcell, los espines nucleares fueron alineados paralelamente con un campo magnético externo. Entonces, el campo se invirtió tan rápidamente que los espines permanecieron en su posición original, volviéndose ahora antiparalelos y, en consecuencia, caracterizando un estado con temperatura negativa.

# Capítulo 2

## Estados de equilibrio de un gas de bosones en redes ópticas unidimensionales

Este capítulo está dedicado a analizar las propiedades intrínsecas de los eigenestados de un sistema y, partir de esto, argüir la existencia de estados de equilibrio en el sistema.

### 2.1. Estados de equilibrio

Es una experiencia de todos los días el que sistemas macroscópicos aislados, después de un cierto tiempo, se aproximen a algún estado estable sin importar qué tan lejos de este punto se encontraban. La evolución temporal puede ser rápida o con lentitud glacial, pero en todos los sistemas existe la tendencia a alcanzar un estado terminal al que llamamos estado de equilibrio.

Dicho más precisamente, cada vez que se realice un experimento, aunque es previsible que haya fluctuaciones (especialmente para variables microscópi-

cas), sobre una gran cantidad de repeticiones del experimento, en promedio, todos los valores esperados (temporales o sobre un ensemble) de las cantidades macroscópicas físicas medibles<sup>1</sup> necesarias para la descripción del sistema se estabilizan.

Este hecho fenomenológico es el que permite el desarrollo de la Termodinámica, pues solo en estos estados de equilibrio tiene sentido hablar de la energía interna o de la temperatura. Equilibrio significa un estado de balance, un sistema cerrado que está en equilibrio no experimentará cambios al transcurrir el tiempo. Vale la pena remarcar que tiene sentido hablar de la falta de cambios en el equilibrio únicamente en sistemas termodinámicos, que son los que están compuestos de un número macroscópico de partículas.

En efecto, el tamaño de los sistemas que se estudian en los laboratorios de átomos ultrafríos es del orden de  $10^4$  partículas, lejos del número de partículas ( $\sim 10^{23}$ ) de los sistemas físicos típicos. Este hecho, junto con las limitaciones propias del Hamiltoniano de Bose-Hubbard, el modelo usado en estos sistemas que reduce dramáticamente el espacio de Hilbert de un sistema de  $N$  cuerpos<sup>2</sup>, produce comportamientos de recurrencia que no son compatibles con el concepto de estado de equilibrio.

Las redes ópticas son un ejemplo de esto último, particularmente en el caso de la dinámica de un gas de bosones ultrafrío con interacción en una red óptica [2]. En este sistema se observa que la evolución temporal de alguna cantidad física, por ejemplo, el valor esperado de la población de partículas para cada pozo, pasa de ser una cantidad que oscila de forma consistente con la condición inicial<sup>3</sup> a un estado en el que las partículas del gas dejan de moverse entre los pozos y el promedio en la población se estabiliza. La pobla-

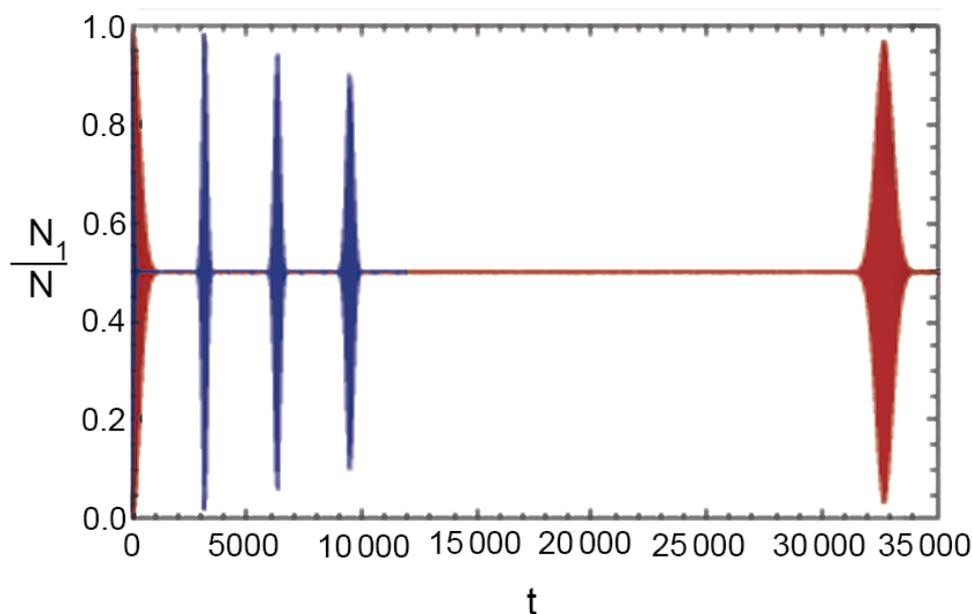
---

<sup>1</sup>Por ejemplo, temperatura o número de partículas.

<sup>2</sup>Más adelante explicaremos con mayor detalle el Hamiltoniano y sus limitaciones.

<sup>3</sup>Por supuesto, si esta condición inicial es un eigenestado del sistema, entonces la población de cada pozo permanece constante y no hay oscilación.

ción, sin embargo, no mantiene un estado constante al correr el tiempo, pues se observan recurrencias, es decir, se observan nuevamente las oscilaciones coherentes con regularidad casi periódica. El comportamiento de recurrencia es dependiente del número de partículas en el sistema, pues entre mayor es la población, los tiempos de relajación y recurrencia también aumentan.



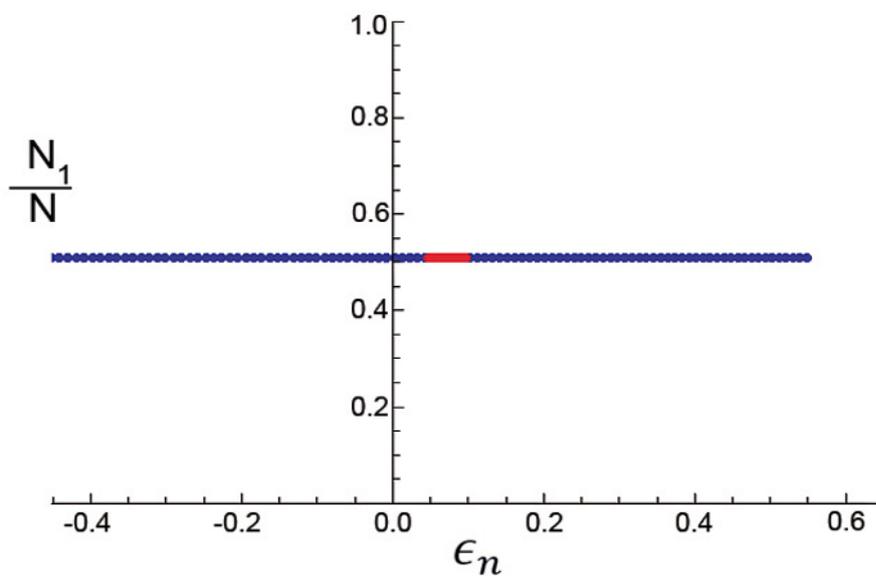
*Figura 2.1:* Evolución del sistema para dos poblaciones totales diferentes,  $N = 100$  (azul) y  $N = 1000$  (rojo). Cuando aumenta la población, también aumenta el tiempo que tarda en decaer al equilibrio, así como el tiempo de separación entre las recurrencias. Tomado de [2].

Sin embargo, es posible pensar en los estados a los que decae el sistema como de equilibrio por varias razones. Primero, porque para tiempos suficientemente largos, los resultados de medir la población en puntos arbitrarios son esencialmente los mismos. Segundo, debido a su dependencia de la población, las recurrencias son tan poco frecuentes después de cierto tiempo que virtualmente desaparecen. Finalmente, los estados terminales tienen un comportamiento cualitativamente igual al dado por los eigenestados del

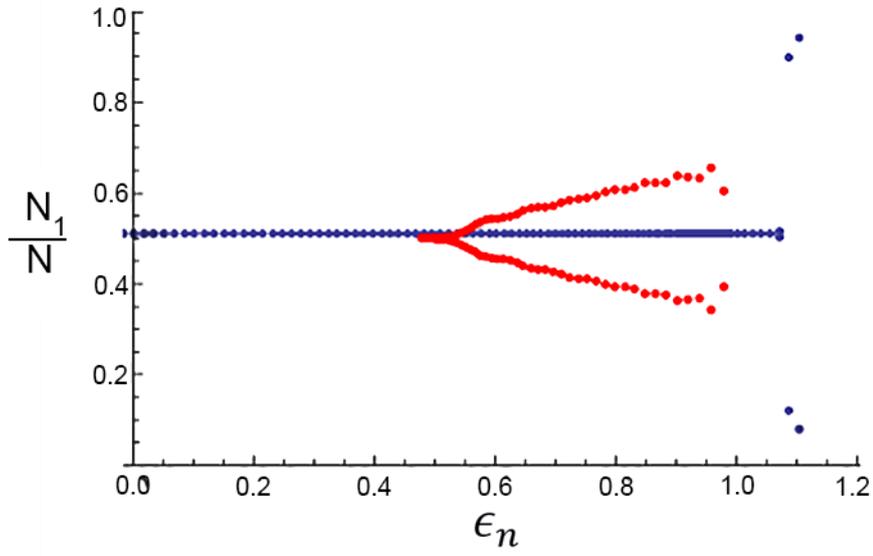
sistema, que por definición son estados que no cambian con el tiempo.

Para concretar esta idea, obsérvese el comportamiento de dos gases de  $N = 100$  y  $1000$  bosones, respectivamente, en un pozo doble, modelados a través de un Hamiltoniano de Bose-Hubbard con un espacio de Hilbert de tamaño  $N + 1$ . En la Fig. 2.1 se observa claramente que las recurrencias tienden a desaparecer al aumentar la cantidad de partículas en los pozos.

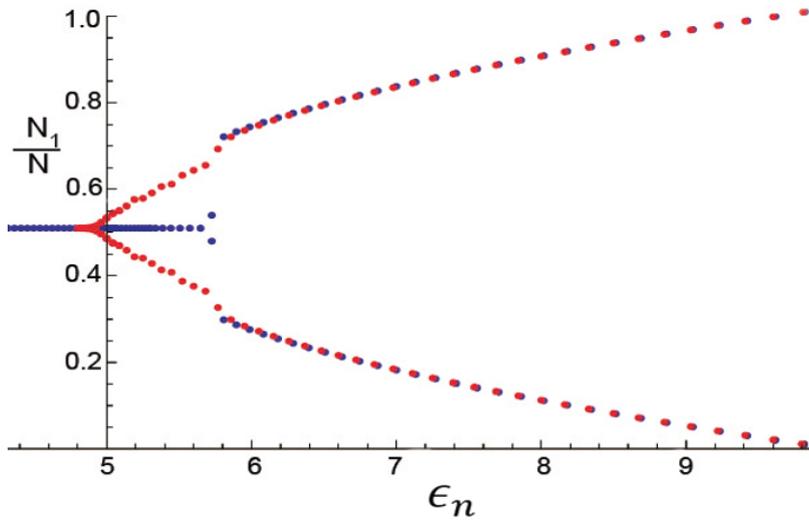
A su vez, en la Fig. 2.2 es notorio que el comportamiento de la población, cuando el sistema evoluciona y llega al equilibrio, coincide en general con el comportamiento de la población de los eigenestados en el sentido de que al incrementarse la interacción entre las partículas, ambos estados presentan una transición del superfluido al de autoatrapamiento como función de la energía.



(a)  $\Lambda = 0.1$



(b)  $\Lambda = 1.0$



(c)  $\Lambda = 10.0$

Figura 2.2: Comparación del valor esperado de la población de partículas en un potencial de dos pozos, entre el promedio temporal en la base de número (rojo) y de eigenestados (azul) como función de la energía de interacción entre partículas. Tomado de [2].

Esto muestra que aunque los valores esperados pueden mostrar fluctua-

ciones alrededor del estado fijo (y con independencia del tiempo), cuantitativamente estas desviaciones son pequeñas en comparación con el valor particular que tiene el valor esperado la mayor parte de de tiempo. En este sentido, el sistema, ciertamente, se equilibra.

## 2.2. Ensembles en la Física Estadística

### Ensemble microcanónico

Un ensemble es un conjunto de microestados; cada microestado es una descripción completa de un posible estado del sistema. Clásicamente, esto significa conocer todas las posiciones y momentos de cada partícula; cuánticamente, sería conocer la función de onda de todas las partículas. Por otro lado, un macroestado es una caracterización del mismo sistema pero descrito a través de una cantidad pequeña de variables llamadas variables de estado (y al menos una de las variables es extensiva), es decir, corresponde a una descripción macroscópica del sistema.

Los dos modelos describen el mismo sistema si el macroestado está caracterizado por una distribución de probabilidad<sup>4</sup> sobre un conjunto dado de microestados (el ensemble); en función del ensemble considerado, la distribución toma una forma u otra.

En el ensemble microcanónico, cada microestado tienen el mismo número de partículas ( $N$ ), el mismo volumen ( $V$ ) y la misma energía ( $E$ ), es decir, todos son sistemas aislados. Entonces, si  $\Omega = \Omega(N, V, E)$  es el número de posibles estados (que, en este caso, es también la degeneración del sistema), la probabilidad de seleccionar un estado al azar del ensemble es simplemente  $P(N, V, E) = 1/\Omega$ .

---

<sup>4</sup>Probabilidad de encontrar el sistema en algún microestado.

Los promedios de una propiedad  $\hat{x}$  en el ensemble son, entonces, simplemente calculados como promedios sin peso sobre los valores  $x_i$ , es decir,

$$\langle \hat{x} \rangle = \sum_{i=1}^{\Omega} i^{\Omega} P x_i = \frac{1}{\Omega} \sum_i x_i. \quad (2.1)$$

La entropía en este ensemble se obtiene directamente del número de microestados accesibles

$$S(N, V, E) = k_B \ln \Omega(N, V, E), \quad (2.2)$$

donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann. Todas las otras variables termodinámicas del sistema, o variables que definen el macroestado, se pueden obtener a partir de las relaciones conocidas de la Termodinámica. Por ejemplo, la temperatura ( $T$ ), presión ( $P$ ) y potencial químico ( $\mu$ ) se obtienen usando

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S(N, V, E)}{\partial E}, \quad (2.3)$$

$$\frac{P}{T} = \frac{\partial S(N, V, E)}{\partial V} \quad (2.4)$$

y

$$-\frac{\mu}{T} = \frac{\partial S(N, V, E)}{\partial E}. \quad (2.5)$$

## Ensemble canónico

En el ensemble canónico se considera, ahora, que los microestados son sistemas cerrados isotérmicos, es decir, que cada uno de ellos tiene la misma cantidad de partículas ( $N$ ), volumen ( $V$ ) y temperatura ( $T$ ), por lo que se

puede considerar que para cada sistema el resto de los microestados funciona como baño térmico.

Al aislar esta colección de microestados, la cantidad de miembros del ensemble  $\mathcal{N}$ , su volumen total y su energía total  $\mathcal{E}$  quedan fijas, es decir,

$$\mathcal{N} = \sum_{i=1} i n_i, \quad (2.6)$$

$$\mathcal{E} = \sum_i E_i n_i, \quad (2.7)$$

donde  $E_i$  es la energía de cada microestado y  $n_i$  el número de sistemas en ese microestado.

Para un macroestado, los sistemas del ensemble son indistinguibles, por lo que para cada distribución  $\{n_i\}$  el número de estados del ensemble consistente con la distribución es

$$\Omega_T(\{n_i\}) = \frac{\mathcal{N}!}{\prod_i n_i!}. \quad (2.8)$$

La distribución más probable es la que maximiza  $\Omega_T(\{n_i\})$ , pues en el límite  $\mathcal{N} \rightarrow \infty$  la probabilidad de otra distribución es despreciable. Entonces, se maximiza  $\Omega_T(\{n_i\})$  con las constricciones dadas por las Ecs. (2.6) y (2.7), lo que da una distribución más probable:

$$n_i = \mathcal{N} e^{-\alpha - \beta E_i}. \quad (2.9)$$

Aquí  $\alpha$  y  $\beta$  son los multiplicadores de Lagrange usados para maximizar la Ec. (2.8) con constricciones. La probabilidad de obtener un estado es

$$P_j = \frac{n_j}{\mathcal{N}} = \frac{n_j}{\sum_j n_j} = \frac{e^{-\beta E_j}}{\sum_j e^{-\beta E_j}}. \quad (2.10)$$

$Z(\beta) = \sum_j e^{-\beta E_j(N,V)}$  es llamada la función de partición canónica y cumple la misma función que  $\Omega(N, V, E)$ . En efecto, comparando esta función con las fórmulas de la Termodinámica, se puede mostrar que  $\beta = 1/k_B T$  y que la energía libre de Helmholtz  $F$  es

$$F(N, V, T) = -\frac{\ln Z(N, V, T)}{k_B T}, \quad (2.11)$$

con lo cual es posible obtener toda la termodinámica del sistema. Por ejemplo, las ecuaciones de estado son

$$S = -\frac{\partial F(N, V, T)}{\partial T}, \quad (2.12)$$

$$P = -\frac{\partial F(N, V, T)}{\partial V} \quad (2.13)$$

y

$$\mu = \frac{\partial F(N, V, T)}{\partial N}. \quad (2.14)$$

Al igual que en el caso del ensemble microcanónico, podemos encontrar los promedios de alguna propiedad a través de la función de partición. Así, la energía media es

$$\langle E \rangle = \sum_j E_j P_j = \frac{1}{Z} \sum_j E_j e^{-\beta E_j}. \quad (2.15)$$

## Equivalencia entre ensembles

En el ensemble microcanónico, el macroestado del sistema queda especificado a través de un número fijo de partículas, un volumen fijo y una energía fija ( $N$ ,  $V$  y  $E$ , respectivamente). En el ensemble canónico, sin embargo, el

mismo macroestado está definido por los parámetros  $N$ ,  $V$  y  $T$ , y la energía es variable; en principio, puede tomar valores desde cero a infinito.

Los dos ensembles, no obstante, conllevan el mismo comportamiento termodinámico, ya que como se puede mostrar [13], las fluctuaciones de la energía en el ensemble canónico van como  $1/\sqrt{N}$ , por lo que en el límite termodinámico los posibles valores de la energía quedan siempre muy cerca del valor máximo de la distribución  $E_{max}$ , es decir, la gran mayoría de todas las energías de los sistemas que conforman el ensemble canónico tienen en realidad la misma energía: la energía fija del ensemble microcanónico.

Con base en este resultado, es posible realizar algunas cuentas que muestren la relación entre los diversos elementos de los ensembles.

Entonces, reescribiendo la Ec. (2.2) como  $\Omega = e^{\beta TS}$ , notamos que

$$e^{-\beta F} = e^{\beta TS} e^{-\beta E} = \Omega e^{-\beta E}, \quad (2.16)$$

es decir,

$$Z(N, V, T) = \sum_i \Omega(N, V, E_i) e^{-\beta E_i}. \quad (2.17)$$

Podemos interpretar el ensemble canónico como una colección de ensembles microcanónicos, cada uno con energía  $E_i$ , pesados por  $e^{-\beta E_i}$ .

Al usar el valor máximo de la energía, se puede eliminar la suma de la Ec. (2.17):  $F \cong \ln \Omega(N, V, E_{max}) - \beta E_{max}$ , con lo cual escribimos

$$\ln Z = -F\beta = \ln \Omega(N, V, E_{max}) - \beta E_{max}. \quad (2.18)$$

Y como  $F = E - ST$ , la ecuación anterior queda:

$$S = k_B \ln \Omega(N, V, E_{max}), \quad (2.19)$$

recuperando el resultado del ensemble microcanónico.

### 2.3. Gas de Bose-Einstein en un potencial armónico

Hasta ahora ninguna clase de fuerza externa o entre los átomos se ha tomado en cuenta al hacer las cuentas del condensado para el caso de un gas ideal (un número de partículas no interactuantes). En contraste, los experimentos son realizados en trampas ópticas con un número finito de átomos que interactúan entre sí.

Considérese un sistema compuesto de un gas ideal de  $N$  bosones de volumen fijo  $V$  en un reservorio térmico a temperatura  $T$ . Estas variables sugieren el uso del ensemble canónico para encontrar las propiedades termodinámicas del sistema; sin embargo, este camino presenta obstáculos de carácter matemático que dificultan el problema sin agregar nada al entendimiento de la física. Por esta razón, se aprovecha la equivalencia entre ensambles para simplificar el problema y se utiliza entonces el ensemble gran canónico.

La función de partición del ensemble gran canónico es

$$\Xi(T, V, \mu) = \sum_N e^{\alpha N} \sum_m e^{-\beta E_m}, \quad (2.20)$$

donde  $\mu$  es el potencial químico y  $\alpha = \mu/k_B T$ .

Ahora bien, la energía total del sistema es la suma de las energías individuales del gas. Entonces, si  $n$  bosones se encuentran en el estado  $m$  (es decir, el número de ocupación  $n_m$ ), la energía total del sistema es

$$E = \sum_m n_m \varepsilon_m, \quad (2.21)$$

siempre y cuando la cantidad de partículas permanezca constante:

$$\sum_m n_m = N. \quad (2.22)$$

Usando las dos ecuaciones anteriores,  $\Xi(T, V, \mu)$  puede reescribirse en términos de los números de ocupación como

$$\Xi(T, V, \mu) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{n_m} \prod_m e^{(\alpha - \beta \epsilon_m) n_m}. \quad (2.23)$$

Considerando que la doble suma puede reemplazarse por una sola suma en los números de ocupación y que esta suma es geométrica, la Ec. (2.20) queda:

$$\Xi_B(T, V, \mu) = \prod_m \frac{1}{1 - e^{\alpha - \beta \epsilon_m}}. \quad (2.24)$$

Para que la serie en efecto converja, se necesita que la condición  $|e^{\alpha - \beta \epsilon_m}| < 1$  se cumpla, lo cual es cierto si

$$\mu < \epsilon_m \quad \forall m. \quad (2.25)$$

El potencial químico  $\mu$  tiene que ser menor que todas las energías del gas, en particular, debe ser menor que el nivel fundamental individual  $\epsilon_0$ , que se toma como 0.

Una vez conocida la función de partición, se pueden obtener todas las relaciones termodinámicas siguiendo las reglas usuales. Así, el gran potencial  $\Omega_B(T, V, \mu)$  es

$$\Omega_B(T, V, \mu) = -kT \ln(\Xi_B(T, V, \mu)) = kT \sum_m \ln(1 - e^{\alpha - \beta \epsilon_m}) \quad (2.26)$$

y el número medio de partículas es

$$N = \frac{\partial \Omega_B(T, V, \mu)}{\partial \mu} = \sum_m \frac{1}{e^{\beta \epsilon_m - \alpha} - 1}; \quad (2.27)$$

como se debe verificar que  $\sum n_m = N$ , se tiene que

$$n_m = \frac{1}{e^{\beta \epsilon_m - \alpha} - 1}, \quad (2.28)$$

que es la llamada distribución de Bose-Einstein.

Como ya quedo detallado en la sección 1.2, las trampas usadas para confinar los condensados de Bose-Einstein pueden ser aproximadas por medio de un potencial de oscilador armónico  $U = \frac{m}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)$ . Si las energías de este potencial para  $N$  suficientemente grande se pegan lo bastante, entonces es posible definir una densidad de estados (adimensionalizada) dada por  $f(E) = \frac{E^2}{2(\hbar\omega)^3}$  y cambiar la suma infinita sobre los microestados a una integral, con el detalle de que el estado base no contribuye a pesar de que entre más baja es la temperatura, más partículas se encontrarán en este estado. Por tanto, lo correcto es escribir explícitamente su contribución y reemplazar el resto de la suma por la integral. Entonces,

$$N = n_{m=0} + \sum_{m>0} n_m. \quad (2.29)$$

La energía media es

$$\bar{E} = \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} \bar{n}_{ijk} \rightarrow \int d\epsilon f(\epsilon) \epsilon_{ijk} \bar{n}_{ijk}, \quad (2.30)$$

donde  $\epsilon_{ijk} \equiv \frac{E_{ijk}}{\hbar\omega} = i + j + k$  es una energía adimensional y la densidad de estados para un potencial armónico es  $f(\epsilon) = \frac{\epsilon^2}{2(\hbar\omega)^3}$ .

Realizando el cambio de variable  $x = \beta\epsilon$  se obtiene la siguiente expresión

para la energía:

$$\bar{E} = 3k_B T \left( \frac{k_B T}{\hbar \omega} \right)^3 g_4(\alpha), \quad (2.31)$$

donde  $g_4(\alpha)$  es parte de las funciones de Bose, definidas por

$$g_n(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int dx \frac{x^{n-1}}{e^{x-\alpha} - 1}. \quad (2.32)$$

Al trabajar análogamente y tomando en cuenta que las funciones de Bose cumplen

$$\frac{dg_n(\alpha)}{d\alpha} = g_{n-1}(\alpha), \quad (2.33)$$

se obtienen los siguientes resultados para el gran potencial, la entropía y el número medio de partículas:

$$\Omega(T, \omega, \mu) = -k_B T \left( \frac{k_B T}{\hbar \omega} \right)^3 g_4(\alpha), \quad (2.34)$$

$$S(T, \omega, \mu) = k_B \left( \frac{k_B T}{\hbar \omega} \right)^3 (4g_4(\alpha) - \alpha g_3(\alpha)) \quad (2.35)$$

y

$$\bar{N} = \left( \frac{k_B T}{\hbar \omega} \right)^3 g_3(\alpha). \quad (2.36)$$

Obsérvese que en las expresiones para el potencial termodinámico y las ecuaciones de estado, su dependencia del volumen se ha cambiado por una dependencia de la frecuencia  $\omega$ . Este cambio no es meramente cosmético, pues  $\omega$  es la variable termodinámica correcta para describir el sistema.

En efecto, las "paredes" del sistema están definidas por el ancho del pozo de potencial y al variar la frecuencia de la trampa con  $N$  constante (al

comprimir o expandir las "paredes" de la trampa), el sistema se calienta o enfría, por lo que el trabajo solo puede ser hecho sobre el sistema al variar el potencial armónico, es decir, al variar  $\omega$ .

Más aun, es notorio que en las Ecs. (2.34) (2.35) y (2.36), al cambiar  $N$  por  $\lambda N$ ,  $E$  por  $\lambda E$  y  $S$  por  $\lambda S$ , con  $\mu$  y  $T$  fijas, entonces hay que cambiar  $1/\omega^3$  por  $1/\lambda\omega^3$  para mantener la extensividad de las ecuaciones de estado, con lo cual  $1/\omega^3$  también es extensiva.

De esta manera, en reemplazo del volumen, se identifica [16] a  $1/\omega^3$  como la variable extensiva adecuada para tratar la termodinámica de un gas de bosones en una trampa armónica.

Bajas temperaturas ( $T$ ) y/o altas "densidades" ( $N^* = N / (\frac{1}{\hbar\omega})^3$ ) significan que  $\alpha$  se acerca a 0, pero las funciones de Bose crecen monótonamente, por lo que existe una temperatura crítica  $T_c$  y una "densidad" crítica  $N_c^*$  tales que  $\alpha = 0$  y  $g_3(\alpha)$  alcanza su máximo. Para temperaturas y densidades por debajo de las críticas, las funciones de Bose dejan de tener sentido debido a la restricción del potencial químico (Ec. (2.28)). El número de partículas se escribe, entonces,

$$N = N_c + \left( \frac{k_B T}{\hbar\omega} \right)^3 g_3(0), \quad (2.37)$$

donde  $N_c$  es la contribución a la población debida a las partículas en el nivel fundamental y en donde ya no cuesta nada quitar o meter partículas pues el potencial químico está en su nivel más bajo  $\mu = 0$ . Entonces,

$$\frac{N_c}{N} = 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^3. \quad (2.38)$$

Esta ecuación da la fracción de partículas que se encuentran en el estado base. Para  $T > T_c$ , el nivel fundamental está termodinámicamente vacío, el

número de bosones es despreciable desde el punto de vista macroscópico, pero a partir de  $T = T_c$  la población empieza a crecer con valores del orden de  $N$  hasta llegar a  $T = 0$ , cuando todos los bosones están en el nivel fundamental. Este cambio brusco de comportamiento es típico de una transformación de fase; solo que los bosones no se condensan en el espacio real (de coordenadas), sino en el origen del espacio de estados.

## 2.4. El Hamiltoniano efectivo para un gas de Bose en potenciales unidimensionales finitos

Una vez conocida la interacción entre dos pares de partículas y el efecto del potencial de confinamiento externo sobre los átomos a muy bajas energías, se puede conocer el Hamiltoniano que describe dichos sistemas. Éste es llamado el Hamiltoniano de Bose-Hubbard, que fue originalmente introducido por Fisher *et al.*, [7] para describir la destrucción de la superfluidez debida a interacciones fuertes y desorden.

Más precisamente, el Hamiltoniano de Bose-Hubbard se obtiene de un Hamiltoniano de muchos cuerpos general con un pseudopotencial de interacción dado por la Ec. (1.12) con base en dos hipótesis: 1) que las energías involucradas son mucho menores que la separación entre la banda de energía más baja y la primera banda excitada, dada por  $\omega_0$  (es decir, solo se toma en cuenta aquélla) y 2) que las funciones de onda se encuentran esencialmente localizadas en cada pozo.

Con todo lo anterior, se construye el Hamiltoniano de Bose-Hubbard:

$$H = -\Delta \sum_{i=1}^{n-1} \left( b_i^\dagger b_{i+1} + b_{i+1}^\dagger b_i \right) + U \sum_{i=1}^n \hat{N}_i \left( \hat{N}_i - 1 \right), \quad (2.39)$$

donde  $\Delta$  es el factor de tunelaje entre sitios de la red vecinos y que incluye los términos de energía cinética y el potencial de confinamiento de la red óptica;  $b_i$  y  $b_i^\dagger$  son los operadores de creación y aniquilación en el sitio  $i$ , respectivamente;  $U$ , la energía de interacción de cada sitio, y  $\hat{N}_i = b_i^\dagger b_i$  es el operador local de número.

Como puede verse, el Hamiltoniano de Bose-Hubbard tiene dos tipos de energías que describen dos diferentes procesos compitiendo entre sí: la energía cinética  $\Delta$ , que es ganada por la deslocalización de los átomos sobre los sitios de la red y la interacción repulsiva  $U$ , que favorece que las partículas se queden en un solo sitio de la red.

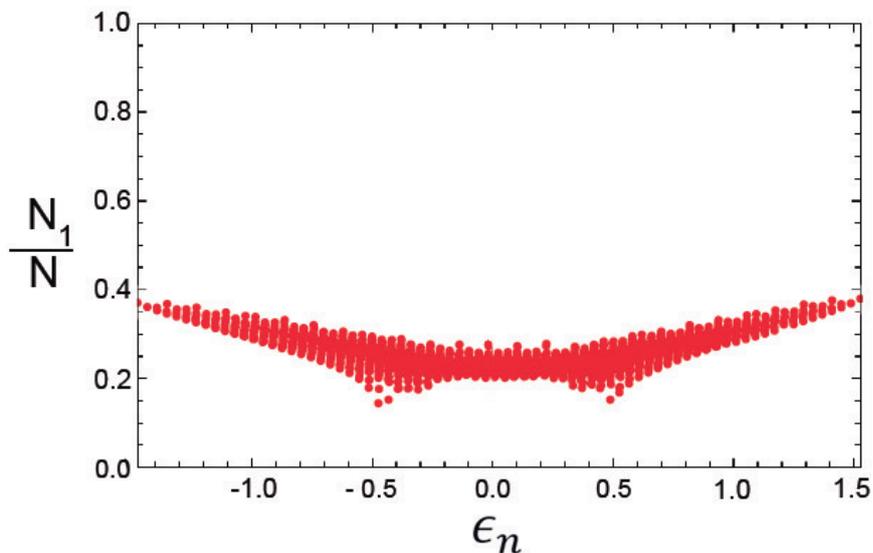
Por este motivo, usualmente se usa la razón entre la energía de interacción y la energía de tunelaje  $U/\Delta$  como el parámetro adecuado para describir el sistema, aunque en este trabajo se preferirá el parámetro  $\Lambda = \frac{UN}{\Delta}$ . En una red óptica con átomos fríos, la razón entre las dos energías puede cambiarse fácilmente al variar la profundidad de la red.

El Hamiltoniano de Bose-Hubbard no es un modelo que se pueda resolver en forma exacta, ni siquiera en una dimensión, por lo que la forma más eficaz de estudiarlo teóricamente es a través de métodos numéricos. Sin embargo, esto representa dificultades de cómputo, pues el número de eigenestados, dado por un número  $N$  de partículas y un número  $n$  de pozos en la red, es  $\frac{(N+n-1)!}{n!(n-1)!}$ , el cual se vuelve un número rápidamente inmanejable para cualquier computadora. Inclusive en el caso de fijar los pozos en un número pequeño, la cantidad de estados sería aproximadamente  $N^{n-1}$ , la cual no permite una simulación con un gran número de partículas y, por tanto, aumenta el riesgo de resultados incorrectos.

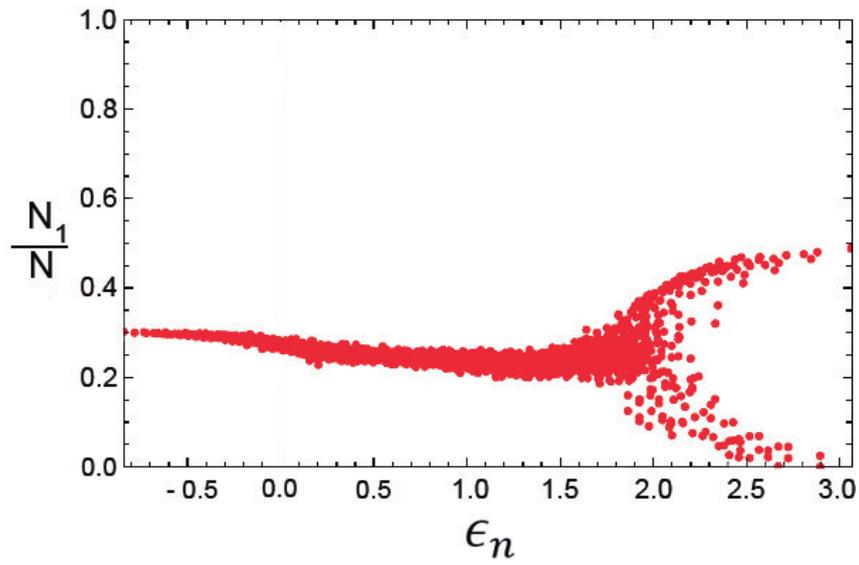
## 2.5. Estados estacionarios en redes ópticas

Como ya ha sido establecido en estudios anteriores [2, 12], para ciertos estados iniciales, el sistema con Hamiltoniano (2.39) muestra una transición de un comportamiento superfluido al de uno de autoatrapamiento conforme las energías de tunelaje e interacción se vuelven comparables, o bien, cuando el parámetro  $\Lambda$  se incrementa de cero a un valor crítico  $\Lambda_c \approx 1$ .

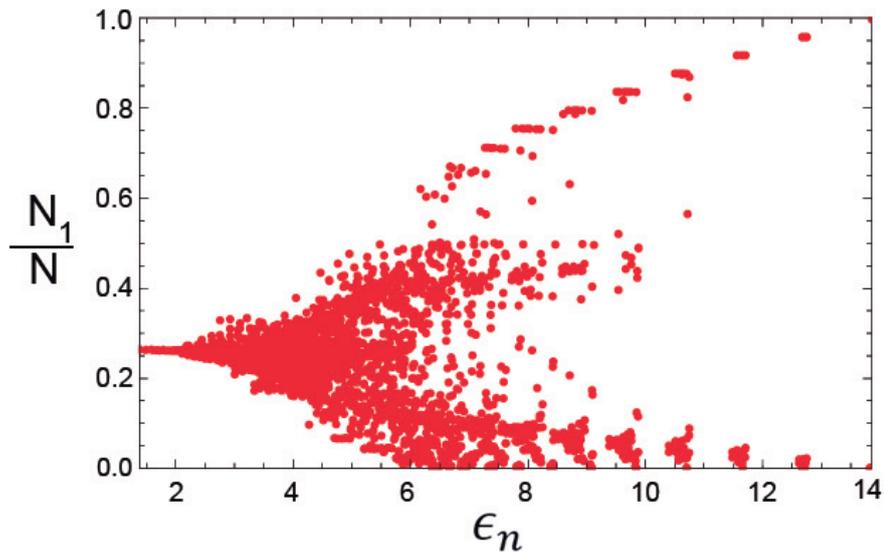
La transición también ocurre para valores fijos de  $\Lambda$  cuando se varía el estado inicial del sistema, pues esto es simplemente otra forma de variar la energía de éste. De hecho, ya se han reportado experimentos [1] en los que se observan los estados de autoatrapamiento como función de la población inicial.



(a)  $\Lambda = 0.1$



(b)  $\Lambda = 3.0$



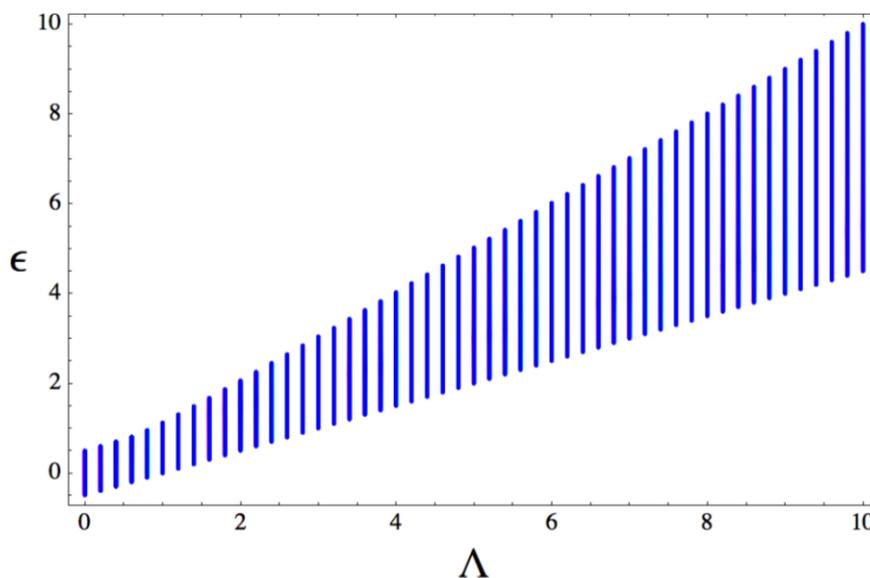
(c)  $\Lambda = 15.0$

Figura 2.3: Valor de esperado de la población del pozo 2,  $\langle N_2 \rangle$  para los eigenestados como función de las eigenenergías  $\epsilon_n$  para  $\Lambda = 0.1, 3.0$  y  $15.0$ , en el caso de un potencial de cuatro pozos y  $N = 25$ . Tomado de [2].

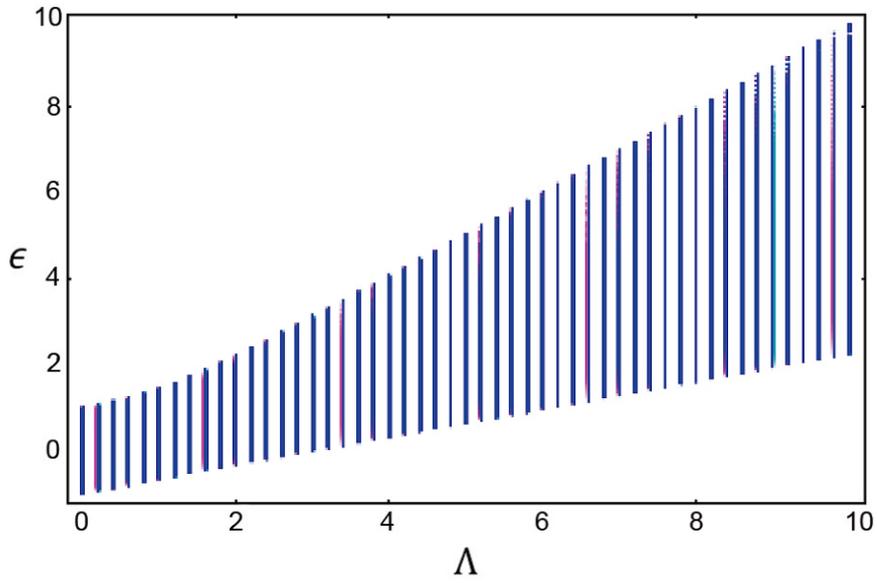
Esto puede apreciarse en la Fig. 2.3, donde se muestra la naturaleza intrínseca de los eigenestados conforme aumenta  $\Lambda$ . Para  $\Lambda$  pequeño, los estados estacionarios no manifiestan transición, mientras que para  $\Lambda$  mas grande, la aparición del estado de autoatrapamiento se hace patente con claridad. Hay que remarcar que en este caso la transición queda como función de la energía para  $\Lambda$  fijo, es decir, para cada  $\Lambda$  hay una energía  $\epsilon_c$  con la cual el sistema alcanza el autoatrapamiento.

El comportamiento queda resumido en los diagramas de fase que se ven en la Fig. 2.4. Las energías permitidas del sistema son las que se encuentran dentro del "área" delimitada por los eigenvalores  $\epsilon_0(\Lambda)$  y  $\epsilon_N(\Lambda)$ , que son el más chico y más grande, respectivamente, para una  $\Lambda$  dada.

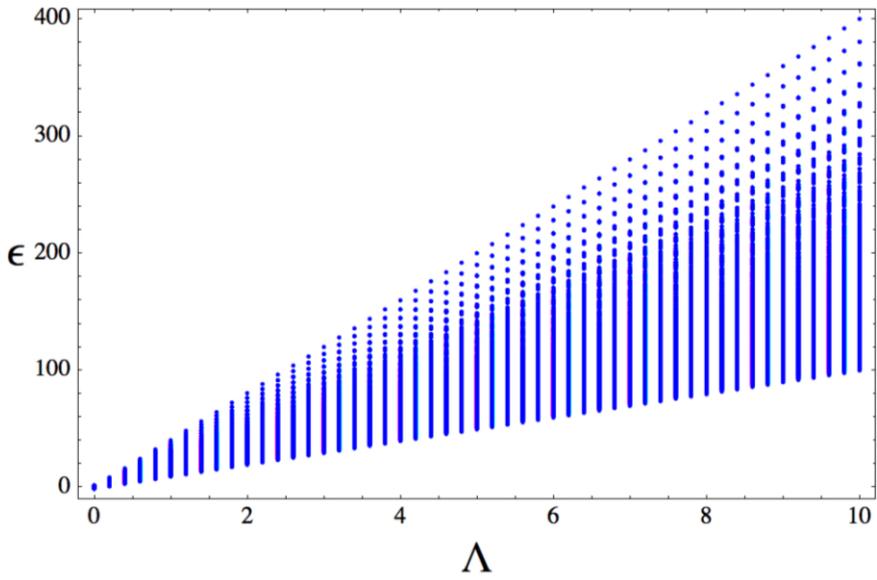
Para cuando  $\Lambda \geq \Lambda_c$ , siempre existe una energía crítica  $\epsilon_c(\Lambda)$  para la cual, si el sistema tiene cualquier otra energía, tal que  $\epsilon \geq \epsilon_c$ , éste se halla en un estado de autoatrapamiento, mientras que si la energía se encuentra debajo de su punto crítico, el sistema está en un estado deslocalizado.



(a) Dos pozos



(b) Tres pozos



(c) Cuatro pozos

Figura 2.4: Diagramas de fase del Hamiltoniano (2.39) para (a) dos pozos y  $N = 2000$  partículas, (b) tres pozos y  $N = 150$  y (c) cuatro pozos y  $N = 30$  partículas.

La región en la que se cumplen las condiciones  $\Lambda \geq \Lambda_c$  y  $\epsilon \geq \epsilon_c$  al mismo

tiempo se encuentra en donde la recta de energías  $\epsilon_N(\Lambda)$  cambia de pendiente.

## 2.6. Temperaturas negativas en sistemas con grados de libertad cinéticos

Hasta hace poco, los sistemas de espín eran los únicos en los que se podía, experimentalmente, lograr temperaturas negativas [14, 11], debido sobre todo, a que su espectro discreto provee de forma natural energías acotadas, con lo que las temperaturas negativas parecían ser solo una curiosidad.

Sin embargo, recientemente, la obtención experimental de un gas de bosones ultrafrío en un estado de temperatura negativa [3] ha atraído de nuevo la atención sobre el tema como un ejemplo en el que la temperatura negativa se da para grados de libertad de movimiento.

Aunque los átomos ultrafríos en trampas ópticas son sistemas aislados en los que los parámetros son totalmente controlables, la creación de un estado con temperatura negativa no resulta inmediata, pues no todas las energías principales de este tipo de sistemas son intrínsecamente acotadas.

En efecto, puede mostrarse que el sistema está descrito por el Hamiltoniano de Bose-Hubbard [2]:

$$H = -\Delta \sum_{i=1}^{n-1} \left( b_i^\dagger b_{i+1} + b_{i+1}^\dagger b_i \right) + U \sum_{i=1}^n \hat{N}_i \left( \hat{N}_i - 1 \right). \quad (2.40)$$

Aquí,  $\Delta$  representa el tunelaje entre pozos vecinos (lo que incluye tanto la energía potencial armónica  $V \propto \omega^2$  como la energía cinética  $T = p^2/2m$ );  $b_i$  y  $b_i^\dagger$  son los operadores de creación y aniquilación del pozo  $i$ , respectivamente;  $U$  es la energía de interacción de cada sitio, y  $\hat{N}_i$  es el operador de número por sitio. Suponiendo que los parámetros  $U$  y  $\Delta$  no divergen, la cantidad

de estados posibles está dada por las diferentes maneras de acomodar los  $N$  átomos en los  $n$  sitios de la red, es decir,  $\frac{(N+n-1)!}{N!(n-1)!}$ .

Puesto que este Hamiltoniano describe bosones en la banda más baja de la red, la energía cinética queda acotada por arriba y por abajo. Sin embargo, tanto el potencial armónico como el potencial de interacción solo tienen cota por abajo, pues los experimentos con Condensados de Bose-Einstein se realizan con redes ópticas desintonizadas al rojo ( $V > 0$ ), por facilidad, y con interacción repulsiva ( $U > 0$ ) para evitar que el condensado se colapse [5].

Para crear el estado de temperatura negativa, Braun *et al.* [3] convirtieron el potencial armónico en antiatrapante ( $V < 0$ ) y las interacciones en atractivas ( $U < 0$ ), dándoles así una cota superior y la posibilidad de que los átomos se encuentren en los estados energéticos más altos.

Para crear estas cotas de energía, Braun *et al.* [3] partieron de un gas ultrafrío en su fase superfluida en un potencial atrapante con interacción repulsiva. De ahí, aumentaron la intensidad de la interacción hasta llevar al gas a una transición de fase cuántica que lo dejó como un aislante de Mott [8]. Entonces, al igual que en los experimentos en sistemas de espín, rápidamente invirtieron tanto el signo de la interacción como el del potencial armónico. Finalmente, disminuyeron la intensidad de la interacción hasta que el gas dejó su fase de aislante de Mott y se volvió un superfluido atractivo, quedando en un estado de temperatura negativa.

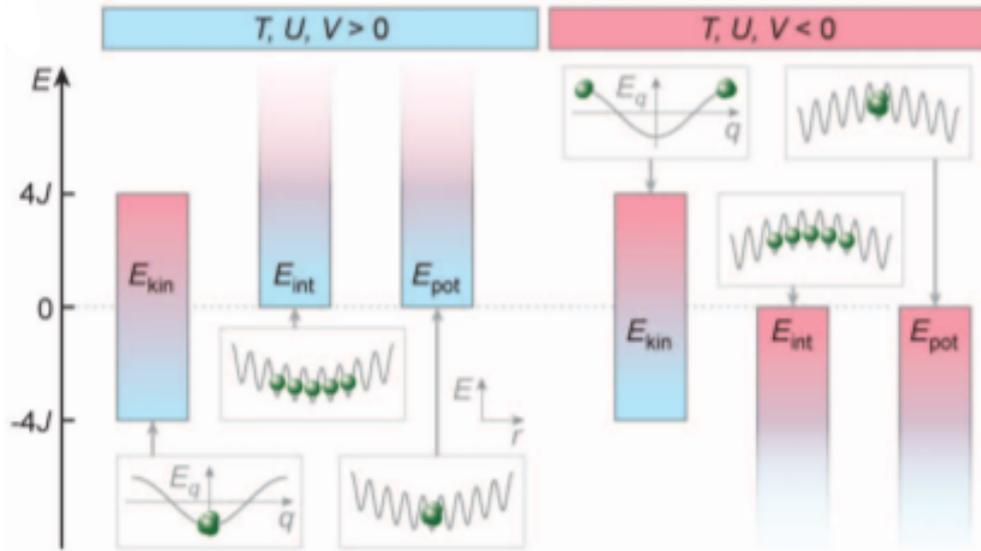


Figura 2.5: Energías correspondientes a los tres términos del Hamiltoniano para  $T > 0$  y  $T < 0$ .

A pesar de que la creación experimental de estos estados demuestra que son reales, vale la pena preguntarse qué tan cierto es que correspondan a temperaturas negativas.

En primer lugar, la forma en que se consiguen las temperaturas negativas es cuestionable. Pensando solo en términos de ocupación de niveles de energía, la receta de Braun de manipular los láser para obtener una antitrapa con interacciones atractivas y, por tanto, tornando las energías en acotadas por arriba, crea efectivamente estados de temperatura negativa. Sin embargo, si se piensa cuidadosamente, el proceso pierde sentido. El sistema inicial tiene una temperatura definida (la temperatura de la condensación  $\sim 10^{-9}K$ ); para que llegue a un estado de temperatura negativa debería obtener calor de algún lado<sup>5</sup>, pero lo único que se hace es invertir el signo de los potenciales de atrapamiento y de interacción.

<sup>5</sup>Recordemos que las temperaturas negativas son más calientes que todas las temperaturas positivas.

También, como ya se ha mencionado, es posible pensar un estado de equilibrio como un estado estable en el que al sistema le "gusta" estar y del cual no lo alejan pequeños cambios. En efecto, cuando se juntan dos sistemas en diferentes estados, ambos evolucionarán hasta un estado de equilibrio común que tenderá a estar más cercano al estado inicial del sistema más grande, por ejemplo, al modificar ligeramente el estado de una taza de agua caliente echándole una gota de agua fría, su estado final no habrá cambiado en forma significativa respecto al estado inicial. Sin embargo, esto no sucede con los sistemas de temperatura negativa; en cuanto se pone en contacto con cualquier otro sistema con temperatura "normal", el sistema con temperatura negativa muestra su inestabilidad abandonando su estado y acercándose al estado inicial con temperatura "normal" [17]. Esto siempre sucede sin importar si el sistema con temperatura "normal" tiene un tamaño muy pequeño respecto al sistema con temperatura negativa. Es como si la gota de agua enfriara toda la taza de agua caliente.

## Capítulo 3

# Propiedades termodinámicas de un gas de Bose-Einstein con interacción en potenciales unidimensionales

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos en el estudio de las variables termodinámicas de temperatura, entropía y población de un gas de  $N$  bosones con interacción en un potencial confinante de dos, tres y cuatro pozos en una dimensión, modelado mediante un Hamiltoniano de Bose-Hubbard (2.39).

Para empezar, se utiliza la equivalencia entre ensembles estadísticos para, a través del promedio del ensemble canónico, analizar el papel de la temperatura en el sistema. Después, a partir de las temperaturas encontradas se construye la función entropía y, finalmente, se encuentra los promedios térmicos de la población de partículas y son comparados con su valor esperado en la base de eigenestados.

### 3.1. Temperatura y entropía

Tal como ya se ha resumido, si un sistema está en equilibrio, tiene sentido hablar de caracterizarlo con variables termodinámicas. Aun más, si el equilibrio existe, el valor de estas variables debe ser el mismo en los diferentes ensembles estadísticos.

Así, aunque el sistema a estudiar esté aislado, con un número de partículas  $N$  y energía  $\epsilon$  dados y, por tanto, naturalmente descritos en el ensemble microcanónico, es posible encontrar los valores medios de otras variables del sistema usando el ensemble canónico. Entonces, el valor de la observable  $\hat{O}$  en este ensemble sería

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n^N \langle \phi_n | \hat{O} | \phi_n \rangle e^{-\epsilon_n/kT}, \quad (3.1)$$

donde  $Z$  es la función de partición canónica, y  $\phi_n$  y  $\epsilon_n$  son las soluciones a la ecuación de eigenvalores

$$\hat{H}(\Lambda) |\phi_n(\Lambda)\rangle = \epsilon_n(\Lambda) |\phi_n(\Lambda)\rangle. \quad (3.2)$$

Si la observable es  $\hat{H}$ , la Ec. (3.1) no solo permite conocer la energía (que además ya se sabe a través del ensemble microcanónico), sino que asocia una temperatura a esa energía

$$\epsilon = \frac{1}{Z} \sum_n^N \epsilon_n e^{-\epsilon_n/kT}. \quad (3.3)$$

Resolviendo para  $T$ , es posible, entonces, obtener las temperaturas de los estados estacionarios del sistema y, con esto, averiguar la entropía  $S$  y el promedio térmico de la población  $N$ .

Para ello, se recurre al siguiente procedimiento: primero, se resuelve la

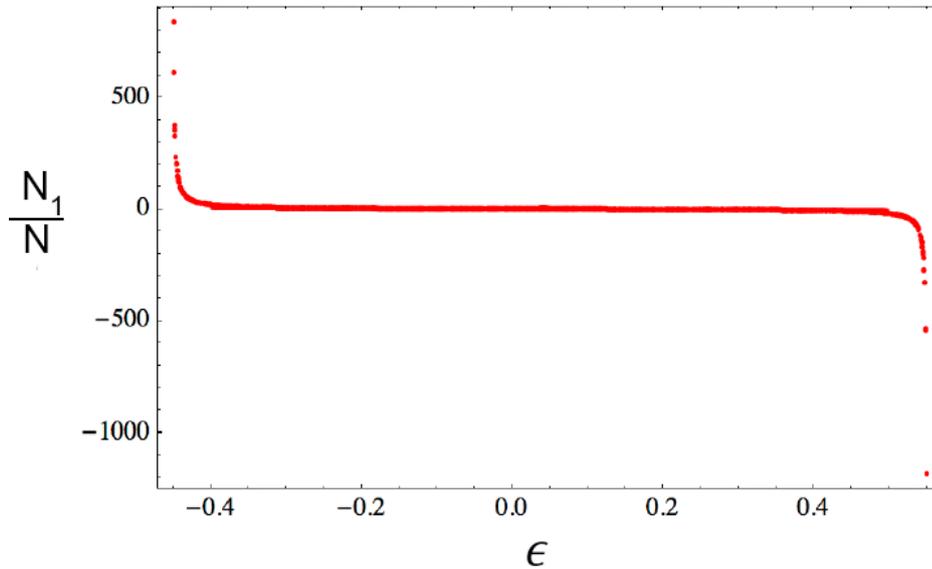
Ec. (3.2) para diferentes valores de  $\Lambda$ , debajo de la transición al autoatrapamiento, cerca de la transición y por encima de ésta.

Como energía media  $\epsilon$ , se seleccionan al azar valores permitidos en el diagrama de fase de la sección 2.5 para los valores dados del parámetro  $\Lambda$ . Con estas energías es posible resolver la ecuación

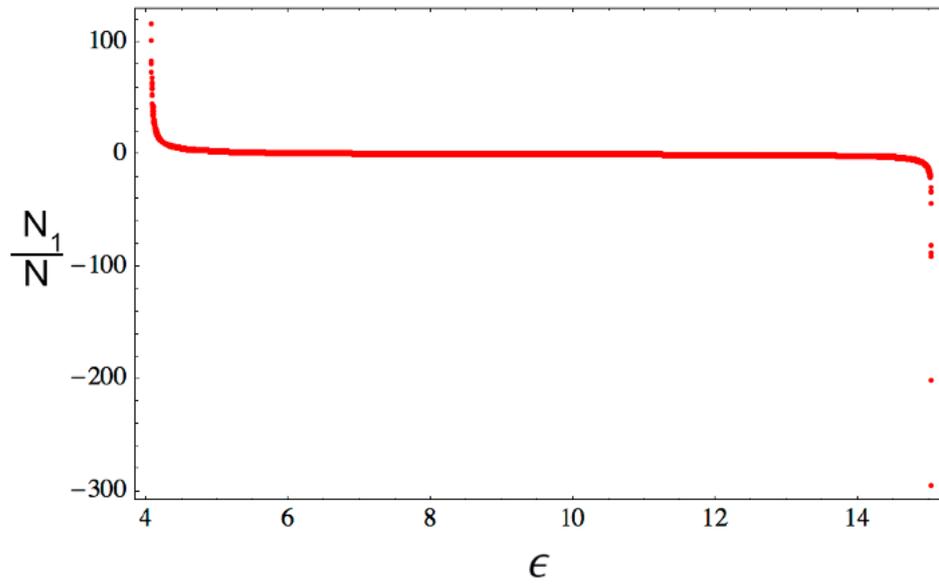
$$\epsilon = \frac{1}{Z} \sum_n^N \epsilon_n e^{-\epsilon_n/kT}, \quad (3.4)$$

para la temperatura en el ensemble canónico asociada al estado en el ensemble microcanónico, definido por su energía  $\epsilon$  y número de partículas  $N$ .

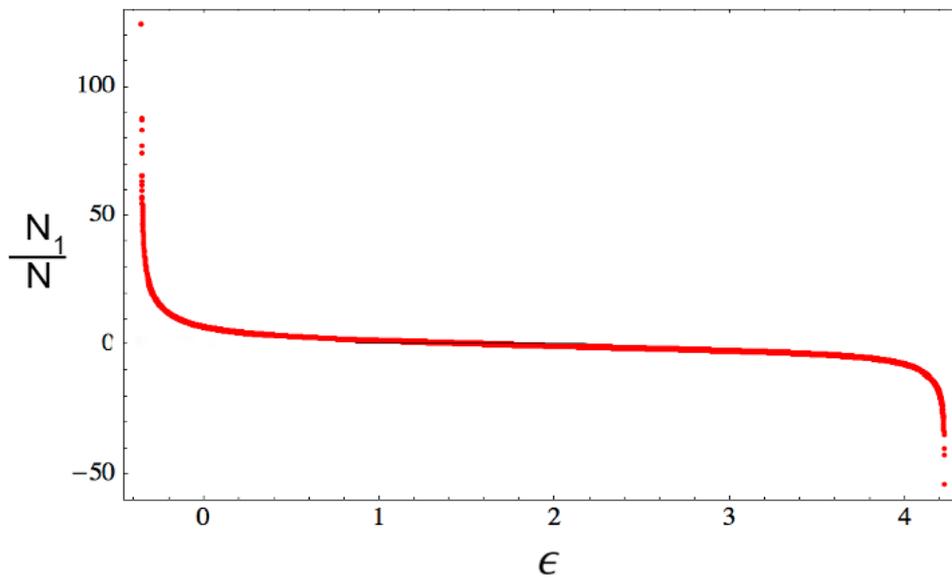
Este proceso se realiza para un sistema de dos, tres y cuatro pozos con poblaciones de  $N = 2000, 150$  y  $30$ , respectivamente. En la Fig. 3.1 se muestra la dependencia del inverso de la temperatura respecto a la energía, para cada caso. No se presentan los resultados para todos los valores de  $\Lambda$ , pues son cualitativamente los mismos.



(a) Dos pozos



(b) Tres pozos



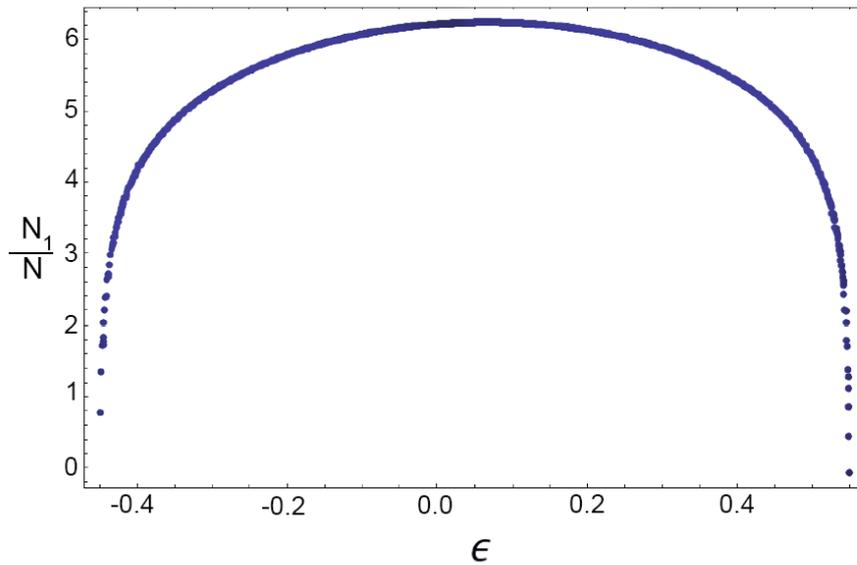
(c) Cuatro pozos

Figura 3.1: Inverso de la temperatura como función de la energía  $\epsilon$  para los casos de  $N = 2000$ ,  $N = 150$  y  $N = 30$ , para dos, tres y cuatro pozos. En todos los casos los cálculos fueron realizados usando  $\Lambda = 0.1, 1.0$  y  $10.0$ , aunque solo se presentan los resultados para  $\Lambda = 0.1$ .

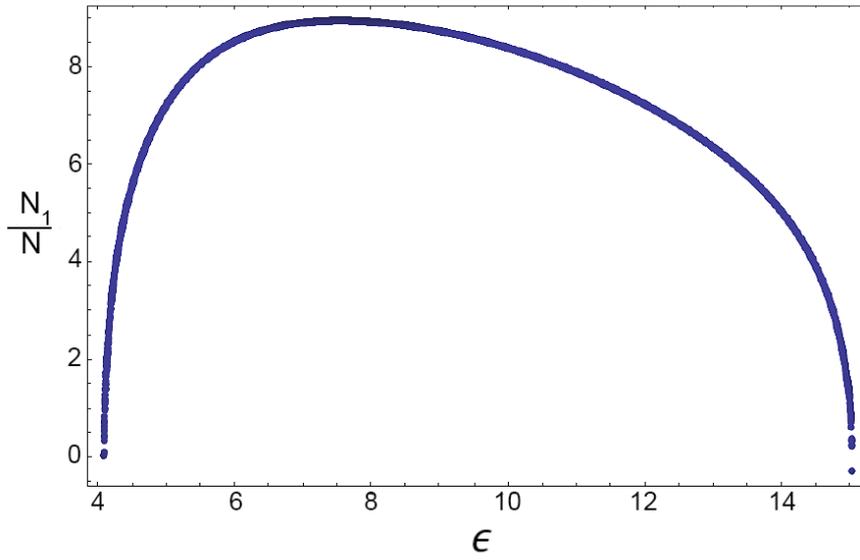
Al contar ya con la temperatura, resulta sencillo determinar la entropía de la relación de la relación

$$\frac{\partial S}{\partial \epsilon} = \frac{1}{T}. \quad (3.5)$$

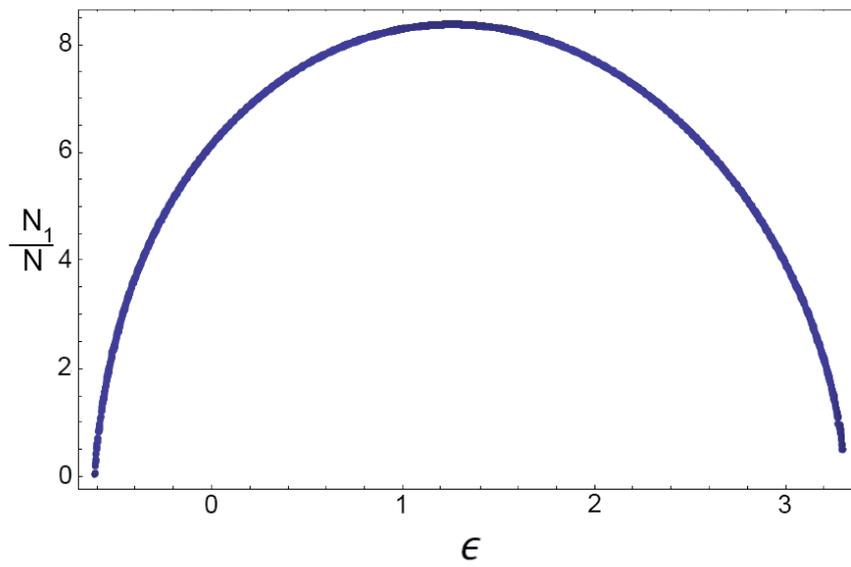
Las gráficas de la Fig. 3.2 muestran los resultados para la entropía de cada número de pozos, con los mismos valores de  $\Lambda$  y  $N$  usados para la temperatura.



(a) Dos pozos



(b) Tres pozos



(c) Cuatro pozos

Figura 3.2: La entropía como función de la energía  $\epsilon$  para dos, tres y cuatro pozos; todos con  $\Lambda = 0.1$ .

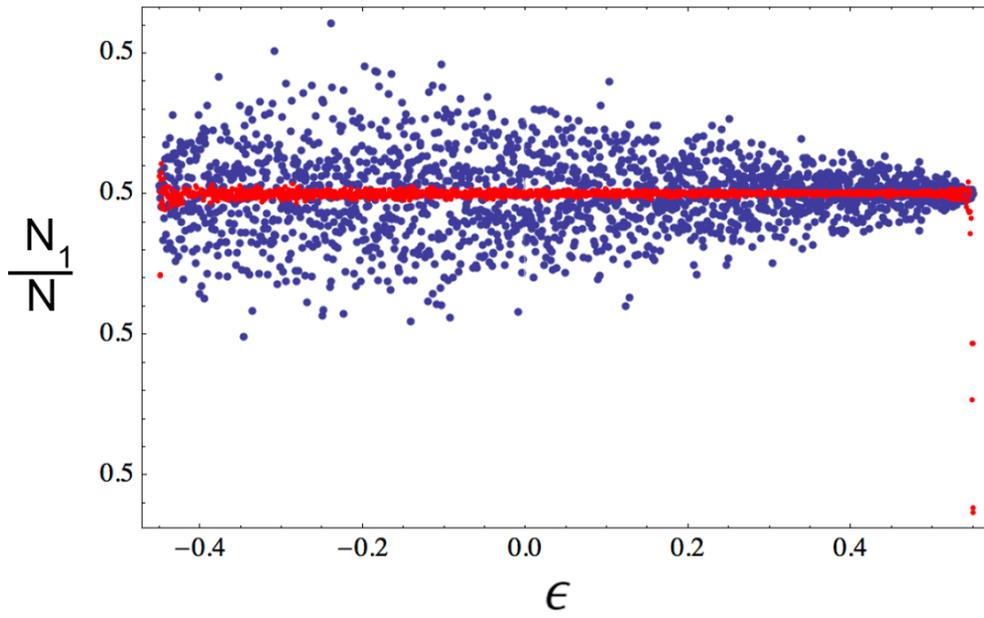
Como puede observarse, el sistema muestra estados los que la energía aumenta mientras que la entropía disminuye, es decir, de temperatura negativa. Esto es consistente con el hecho de que el sistema está modelado a través de un Hamiltoniano que solo ocupa la primera banda de energía y consiste de un número finito de partículas y, por tanto, tiene sus espectros de energía acotados por arriba y por abajo.

Sin embargo, el espectro de energías se "ve" acotado solo por las simplificaciones del modelo. El Hamiltoniano de Bose-Hubbard no toma en cuenta todas las energías presentes en el sistema, como las de los estados hiperfinos que causan que, experimentalmente, haya una cantidad infinita de modos electromagnéticos volviendo el espectro no acotado.

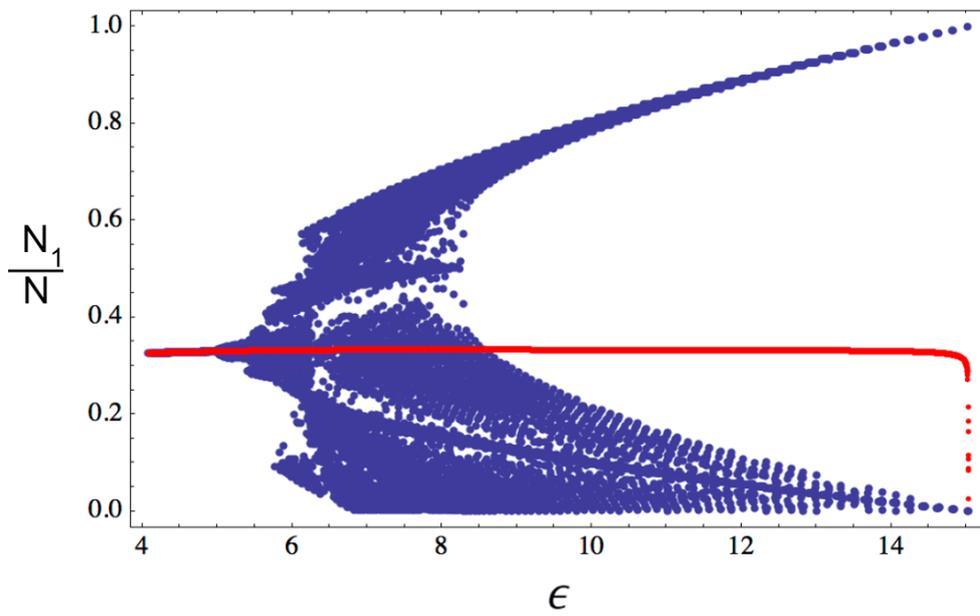
## 3.2. El promedio térmico de la población

Una vez obtenida la temperatura para cada estado, es posible, mediante la Ec. (3.1), determinar el valor promedio térmico (correspondiente al ensemble canónico) del número de partículas de alguno de los pozos  $\langle \hat{N}_i \rangle_T$  y compararlo con el valor esperado en la base de eigenestados (correspondiente al ensemble microcanónico)  $\langle \phi_n | \hat{N}_i | \phi_n \rangle$ .

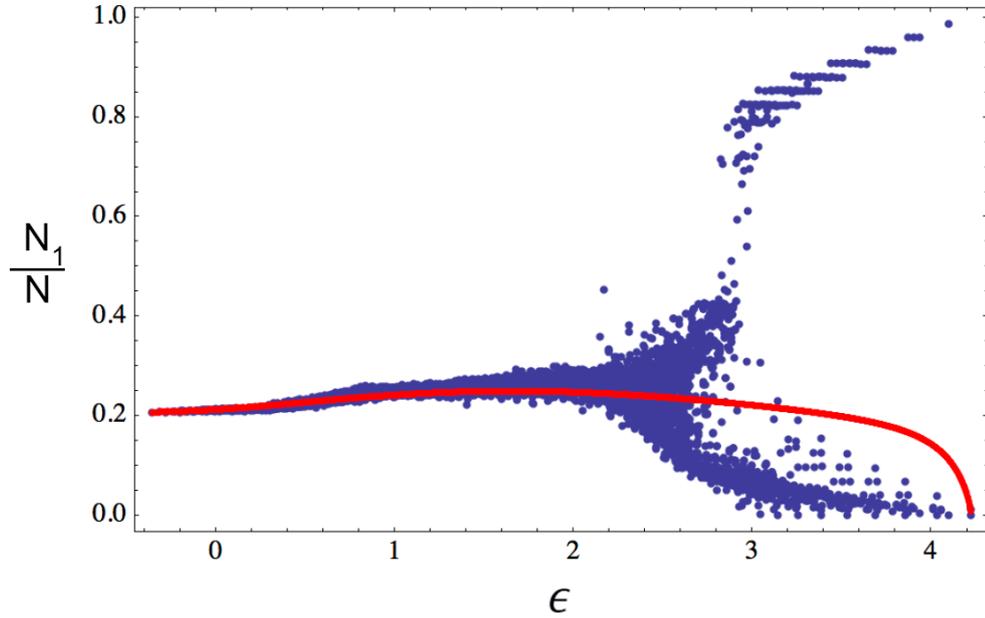
Los puntos rojos en las Figs. 3.3, 3.4 y 3.5 corresponden al promedio térmico, mientras que los puntos azules representan el promedio en los eigenestados. Esta vez se presentan los resultados para todos los casos, es decir, con  $N = 2000, 150$  y  $30$  para dos, tres y cuatro pozos, respectivamente, y  $\Lambda = 0.1, 1.0$  y  $10.0$ .



(a) Dos pozos



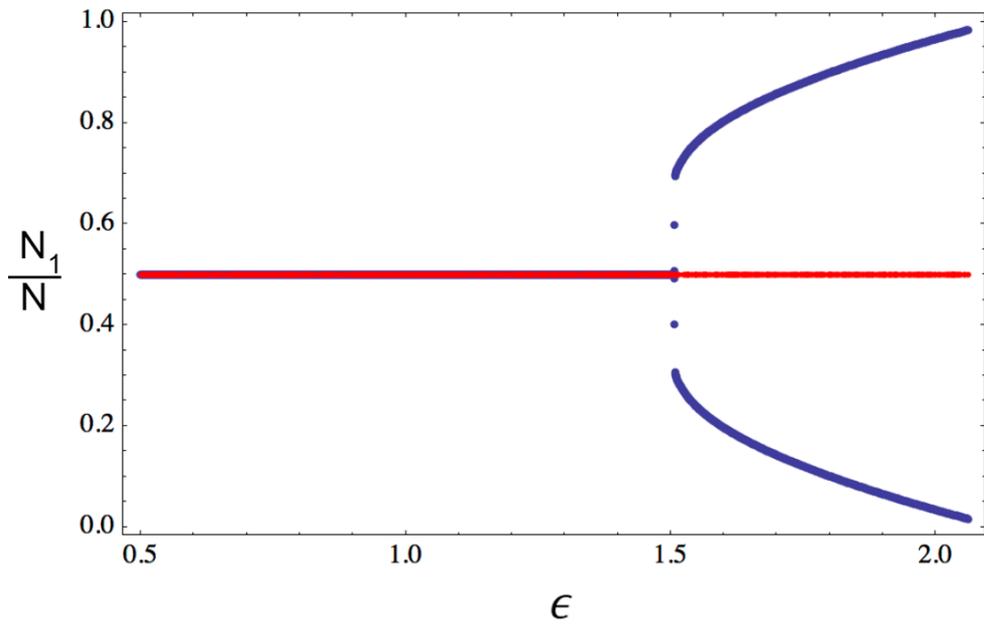
(b) Tres pozos



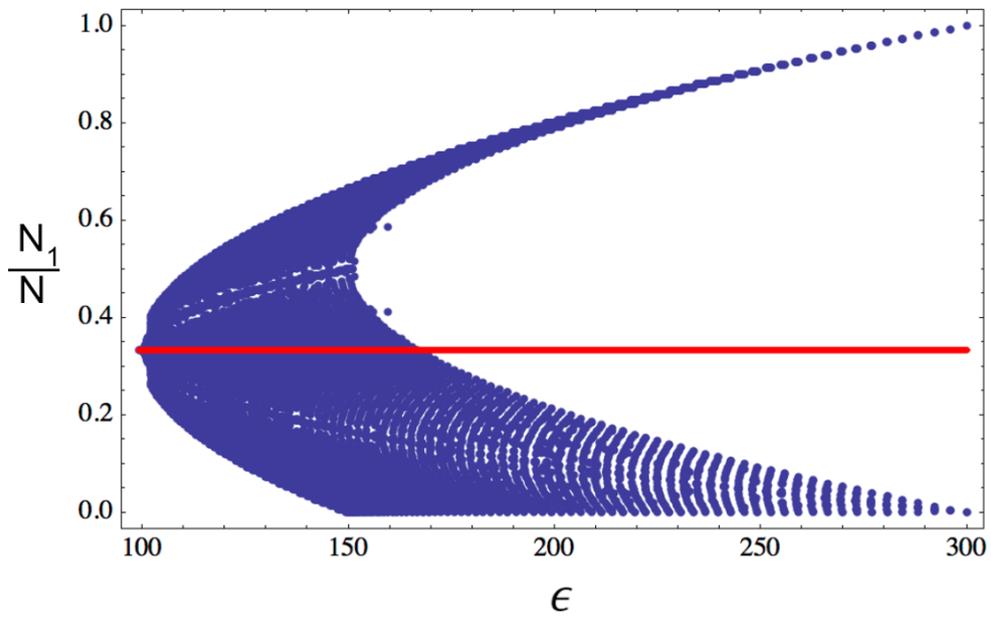
(c) Cuatro pozos

*Figura 3.3:* Comparación del promedio en la población de un pozo en los ensembles microcanónico (azul) y canónico como función de la energía (rojo) para dos, tres y cuatro pozos en el caso  $\Lambda = 0.1$ .

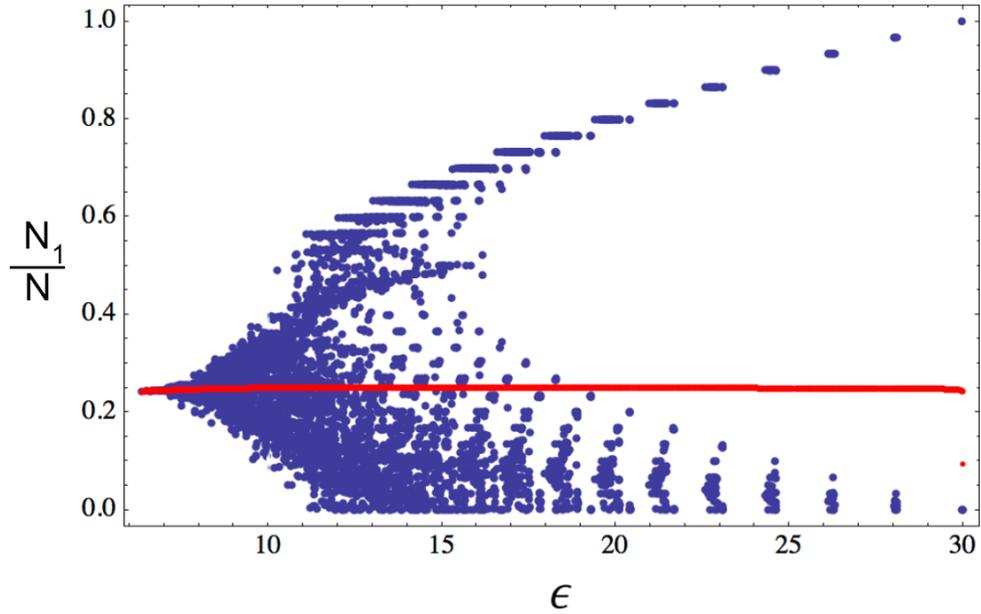
Obsérvese que las poblaciones de las descripciones microcanónica y canónica no concuerdan entre sí, particularmente por encima de la transición del estado deslocalizado al de autoatrapamiento. El promedio en el ensemble microcanónico tiene valores iniciales para las poblaciones de alrededor de  $N/2$ ,  $N/3$  y  $N/4$  de la población total, respectivamente, mostrando un comportamiento deslocalizado, pero para energías mayores, la población total se junta en alguno de los pozos exhibiendo el régimen del autoatrapamiento. Mientras tanto, el promedio térmico de la población nunca se aleja de los valores iniciales por abajo o por encima de la transición, es decir, se encuentra en el régimen deslocalizado para todas las energías.



(a) Dos pozos



(b) Tres pozos



(c) Cuatro pozos

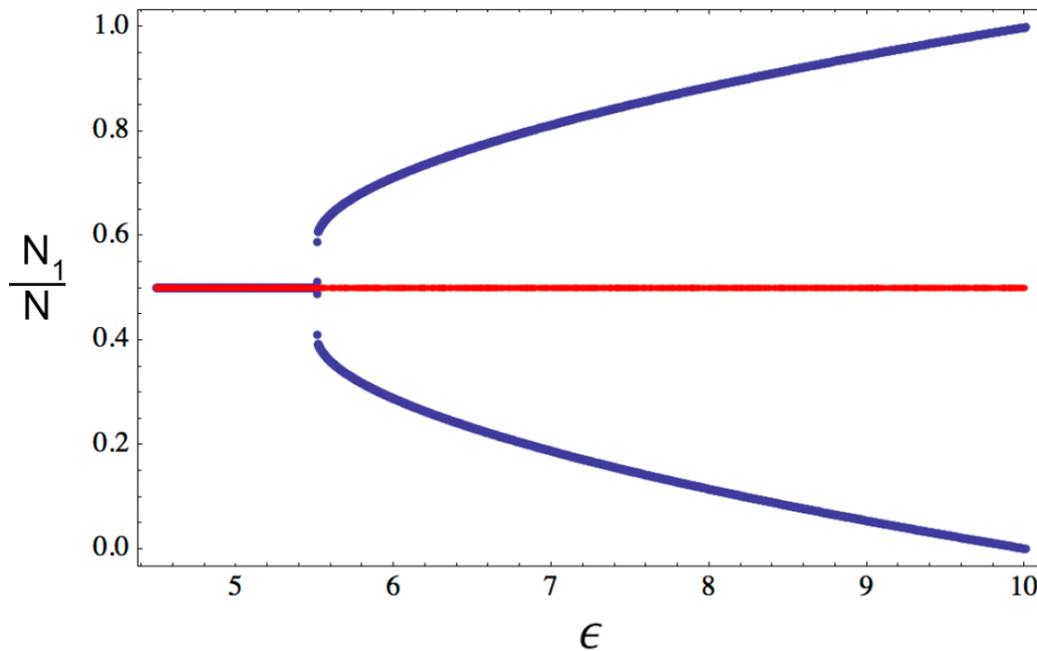
 Figura 3.4: Casos con  $\Lambda = 1.0$  para dos, tres y cuatro pozos.

Esta discrepancia puede interpretarse de manera análoga al fenómeno que se presenta en el modelo de Ising de dos dimensiones. En éste segundo, la magnetización no es naturalmente espontánea (rompimiento de simetría) y solo puede lograrse mediante un campo magnético externo. En el caso estudiado aquí, el momento en que la población se junta en alguno de los pozos (su "rompimiento de simetría") tampoco sucede espontáneamente y solo se ve en el modelo que toma en cuenta explícitamente las interacciones entre partículas.

Más probablemente, la discrepancia es debida, al igual que en el caso de las temperaturas negativas, a los fallos del modelo aplicado. Al usar el Hamiltoniano de Bose-Hubbard con una cantidad finita y pequeña de pozos (a lo que llamaremos un Hamiltoniano de pocos modos) se reduce significativamente la cantidad de estados del sistema. Esto genera dos problemas: el

primero es que se da lugar a un Hamiltoniano efectivo en el que existe una gran colección de átomos en el sistema en el mismo estado y que, por tanto, interactúan con la misma fuerza, es decir, las interacciones interpartículas aparecen como de largo alcance cuando éstas se encuentran en el mismo estado, lo que da lugar a un sistema donde la equivalencia entre ensembles no se cumple.

El otro problema surge al considerar que el ensemble microcanónico se construye no solo asumiendo una gran cantidad de partículas, sino también una gran cantidad de estados que estas partículas pueden ocupar. Es decir, es posible que con el Hamiltoniano de pocos modos no tenga sentido usar el ensemble microcanónico para encontrar las propiedades termodinámicas del sistema.



(a) Dos pozos

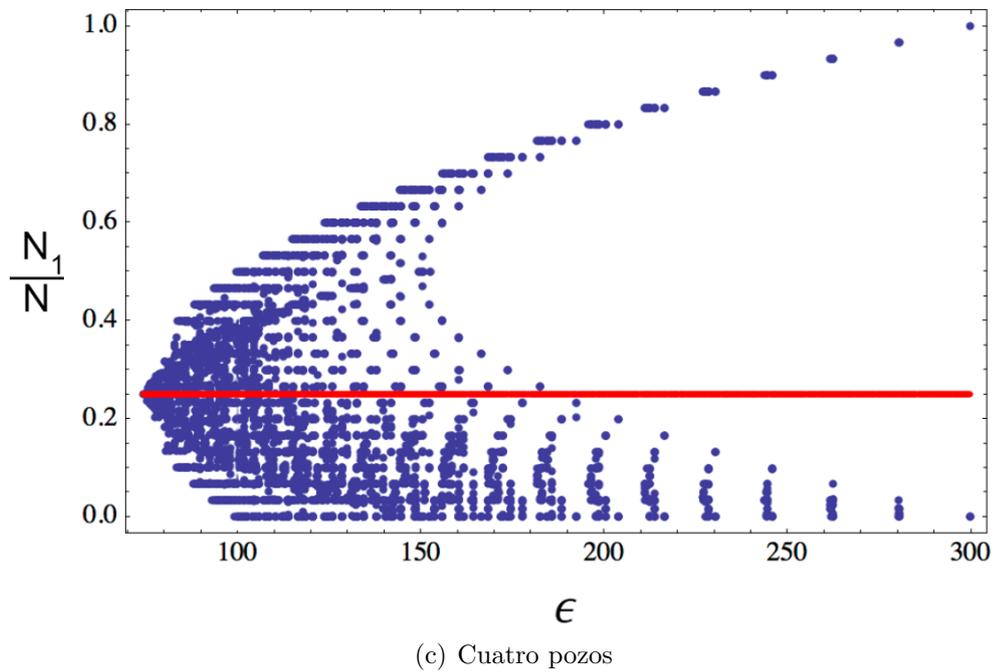
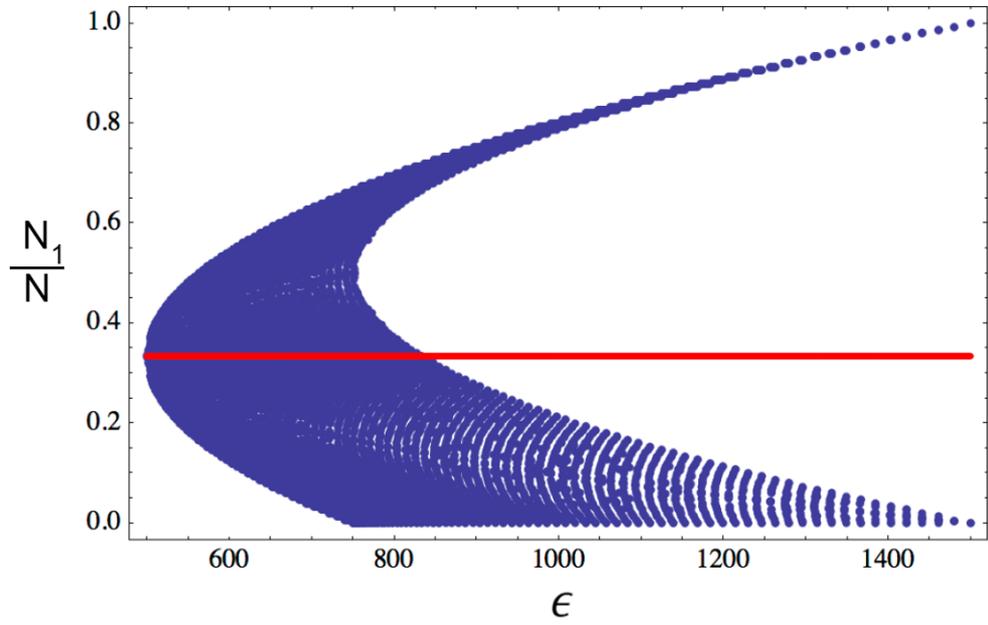


Figura 3.5: Casos con  $\Lambda = 10,0$  para dos, tres y cuatro pozos.

# Capítulo 4

## Conclusiones

Se ha realizado el análisis de las propiedades termodinámicas de un gas de  $N$  bosones interactuantes confinados en un potencial de dos, tres y cuatro pozos unidimensional a través del modelo de Bose-Hubbard correspondiente. Este análisis se concentro en el estudio de los promedios térmicos de las propiedades de un cuerpo (temperatura, entropía y población).

El uso del modelo de Bose-Hubbard supone las condiciones del ensemble microcanónico (sistema cerrado con energía definida). Dado que se puede considerar que el sistema estudiado cumple estas condiciones, la manera natural de analizarlo es a través del Hamiltoniano de Bose-Hubbard dos, tres y cuatro modos para cada caso.

Al servirse de este modelo, se arguyó que los estados de equilibrio son robustos en el sentido de que para cada valor de la energía, la evolución dinámica de las propiedades de pocos cuerpos de cualquier estado inicial arbitrario alcanza un estado estacionario. Este comportamiento se observa para  $N = 2000$  partículas en dos pozos,  $N = 150$  partículas en tres pozos y  $N = 30$  partículas en cuatro pozos, en donde la interacción y el tunelaje se caracteriza por el parámetro  $\Lambda = NU/\Delta$ , responsable de la transición del

régimen deslocalizado al de autoatrapamiento.

Se calcularon los diagramas de fase para cada número de pozos a fin de establecer el espacio de energías permitidas del sistema dado un valor de  $\Lambda$ . Como cada valor fijo de energía define un ensemble microcanónico, suponiendo que en equilibrio los ensembles microcanónico y canónico son equivalentes, se calculó la temperatura y la entropía asociadas a cada estado de equilibrio con valores de  $\Lambda$  de 0.1, 1.0 y 10.0 para los diferentes números de pozos, encontrando para todos los casos que ambas variables tienen un comportamiento consistente con el de sistemas con energía acotada por arriba y por abajo. Este resultado se atribuye a las limitaciones intrínsecas del modelo de Bose-Hubbard de pocos modos y no debería ser posible en la realidad, en la cual las diferentes energías involucradas no permiten una acotación de la energía total.

En relación con el promedio de la población  $\langle N_1 \rangle$ , se encontró que los resultados de la descripción microcanónica no concuerdan con los de la descripción canónica, particularmente por encima de la transición de la deslocalización al autoatrapamiento. Dicho de otra manera, el promedio térmico de la población, ya sea debajo o encima de la transición, es esencialmente  $N/NumPozos$ , mientras que el promedio en el ensemble microcanónico muestra efectivamente la transición.

Al igual que en el estudio de la temperatura y entropía, los resultados pueden atribuirse a las limitaciones del Hamiltoniano de Bose-Hubbard, aunque esta vez provienen, más probablemente, de usar el modelo reducido que describe los casos de dos, tres y cuatro pozos. Esto disminuye el número de estados que tiene el sistema, lo que provoca que se vea como uno en el que la equivalencia entre ensembles no se da o en el que simplemente no es posible usar el ensemble microcanónico.

# Apéndice A

## Deducción del Hamiltoniano de Bose-Hubbard en potenciales unidimensionales finitos

Conocida la interacción entre dos pares de partículas y el efecto del potencial de confinamiento sobre los átomos a muy bajas energías, se puede conocer la dinámica del gas deduciendo, de primeros principios, el Hamiltoniano que describe dichos sistemas, el Hamiltoniano de Bose-Hubbard.

Sea, entonces, un gas de bosones confinado en un potencial unidimensional formado por la interferencia de dos haces de láser desintonizados, de manera que la interferencia forma  $n$  pozos de potencial con paredes finitas y con simetría en el origen. Puesto que los bosones se encuentran confinados por un potencial óptico, se puede asumir que el gas se encuentra lo suficientemente frío y diluido como para que la interacción  $W$  entre ellos se encuentre descrita por

$$W(x) = \frac{4\pi\hbar^2\alpha_s}{m}\delta(x), \quad (\text{A.1})$$

donde  $\alpha_s$  es la longitud de dispersión y  $\delta(x)$  la función delta de Dirac.

Al incluirse el potencial de red  $V_L$ , el Hamiltoniano más general del sistema de  $N$  bosones escrito en segunda cuantización es

$$H = H_T + H_W, \quad (\text{A.2})$$

donde  $H_T$  es la parte del Hamiltoniano debida a la energía cinética  $T = \frac{p^2}{2m}$  y el potencial unidimensional  $V_L$

$$H_T = \sum_{ij} a_i^\dagger \langle \varphi_i | T + V_L | \varphi_j \rangle a_j, \quad (\text{A.3})$$

y  $H_W$  es la parte del Hamiltoniano debida a la interacción entre partículas

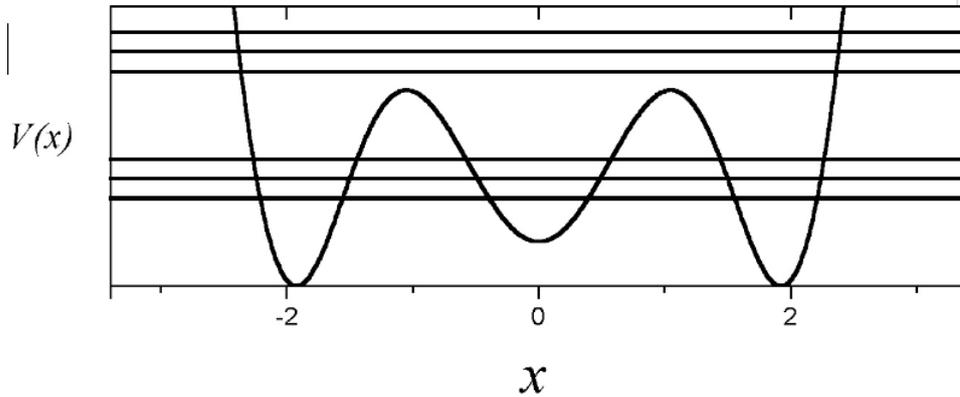
$$H_W = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger \langle \varphi_i \varphi_j | W | \varphi_k \varphi_l \rangle a_k a_l. \quad (\text{A.4})$$

Los operadores  $a_k$  y  $a_j^\dagger$  crean y aniquilan partículas en cada nivel de energía y cumplen la regla de conmutación usual  $[a_k, a_j^\dagger] = \delta_{k,j}$ , y  $|\varphi_i\rangle$  son un conjunto completo de funciones de onda ortonormales y estados estacionarios de  $T + V_L$ .

Se elije que el potencial  $V_L$  sea simétrico respecto al origen, lo que resulta en un potencial no periódico. En general, puede considerarse cualquier potencial siempre que cumpla con la condición de que dados  $n$  pozos, el espectro de energías sea tal que los  $n$  primeros niveles estén por debajo de las barreras del potencial. Además, se puede demostrar que para un potencial de  $n$  pozos, las energías se separan en bandas de  $n$  niveles de manera que la separación entre los niveles consecutivos de cada banda es mucho menor que

la separación entre las bandas [4] [10], de manera análoga al potencial de un cristal. La separación de energía, tanto entre las bandas como entre niveles consecutivos depende de la profundidad de los pozos y de la separación entre ellos.

Como el sistema es un gas de bosones que se encuentra a muy bajas temperaturas, solo los niveles más bajos de energía se encuentran ocupados, por tanto, solo se seleccionan para trabajar los  $n$  primeros estados asociados a la primera banda de energía, lo que se conoce como aproximación de  $n$  modos. Aunque en general las  $n$ -tuplas son tales que dos niveles en cada una no son equiespaciados, se puede garantizar que lo estén ajustando el ancho y la profundidad de los pozos (véase Fig. A.1 para el caso de  $n = 3$ ). Experimentalmente, esto se logra variando la intensidad y longitud de onda de los láser que forman el potencial.



*Figura A.1:* Trampa óptica de tres pozos. La amplitud de los pozos de los extremos es menor que la de los del centro aunque su profundidad es mayor, debido a que se necesita asegurar que los tres niveles más bajos de energía estén igualmente espaciados. Las energías correspondientes son:  $-\varepsilon_0 = 3.533$ ,  $-\varepsilon_1 = 3.704$  y  $-\varepsilon_2 = 3.881$ . El cuarto nivel  $-\varepsilon_3 = 8.999$  se encuentra por encima de los máximos de potencial ( $-V_0 = 7.04$ ).

Mediante el método de Split Operator [6], las  $n$  primeras funciones de onda estacionarias  $\varphi_i(x)$  y sus correspondientes energías pueden ser encontradas numéricamente, como se puede ver en la Fig. A.2.

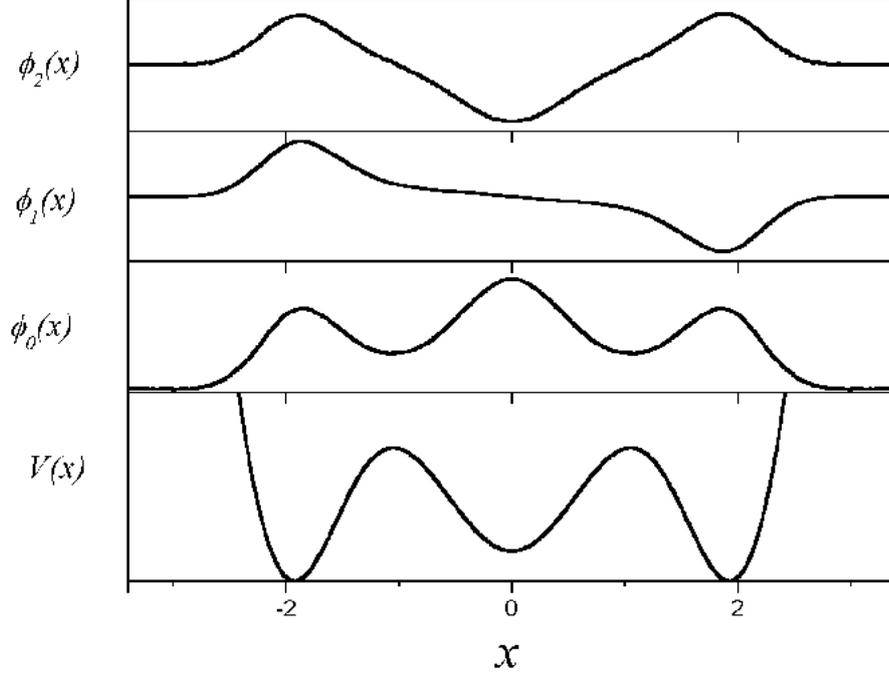


Figura A.2: Las funciones de onda  $\varphi_0(x)$ ,  $\varphi_1(x)$  y  $\varphi_2(x)$  para un potencial externo  $V_L = V_0 e^{-(x-2)^2/\sigma_1^2} + V_1 e^{-x^2/\sigma_2^2} + V_2 e^{-(x+2)^2/\sigma_1^2} + V_3 x^{10}$ . El primer estado estacionario  $\varphi_0$  es una función par sin nodos, el segundo estado  $\varphi_1$  es impar con un solo nodo y el tercer estado  $\varphi_2$  es una función par con dos nodos, como era de esperarse dada la simetría del potencial.

A pesar de que las funciones de onda  $\varphi_i(x)$  son eigenestados de  $H_T$ , el interés del presente trabajo reside en estudiar las poblaciones de partículas en cada pozo, por lo que resulta más conveniente hacerlo a través de una base de funciones ortonormales diferentes; esta base es tal que las funciones de onda de una partícula se encuentran localizadas en cada pozo. Entonces, se realizará una transformación de la base de eigenestados a una de estados localizados.

Dado que se ha escogido que los niveles de energía en el potencial de  $n$  pozos se encuentren igualmente espaciados, se puede establecer una analogía entre los eigenestados de la componente  $z$  del operador de momento angular

$J$  y las funciones de onda de una partícula asociadas al potencial de  $n$  pozos, pues como es bien sabido, las energías de la componente  $J_z$  están igualmente espaciadas. Si se toma un sistema de tres niveles (como el de dos partículas con espín 1/2) y se rotan 90 grados sus eigenestados  $|11\rangle$ ,  $|10\rangle$  y  $|00\rangle$ , los estados resultantes se escriben como una combinación lineal de los originales:

$$\frac{1}{2} \left[ |11\rangle + \sqrt{2}|10\rangle + |00\rangle \right], \quad (\text{A.5})$$

$$\frac{1}{2} \left[ |11\rangle - \sqrt{2}|10\rangle + |00\rangle \right] \quad (\text{A.6})$$

y

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[ |11\rangle + |00\rangle \right]. \quad (\text{A.7})$$

En general, para un sistema de  $n$  niveles, tómesese en cuenta la siguiente rotación:

$$\psi_i = \sum_{k=0}^{n-1} D_{i,k+1}^j \varphi_k, \quad (\text{A.8})$$

con los coeficientes dados por la matriz de rotación de Wigner [18]

$$D_{i,k+1}^j(\alpha, \beta, \gamma) = \langle j, k+1 | e^{-i\alpha j_z} e^{i\beta j_y} e^{-i\gamma j_x} | j, i \rangle, \quad (\text{A.9})$$

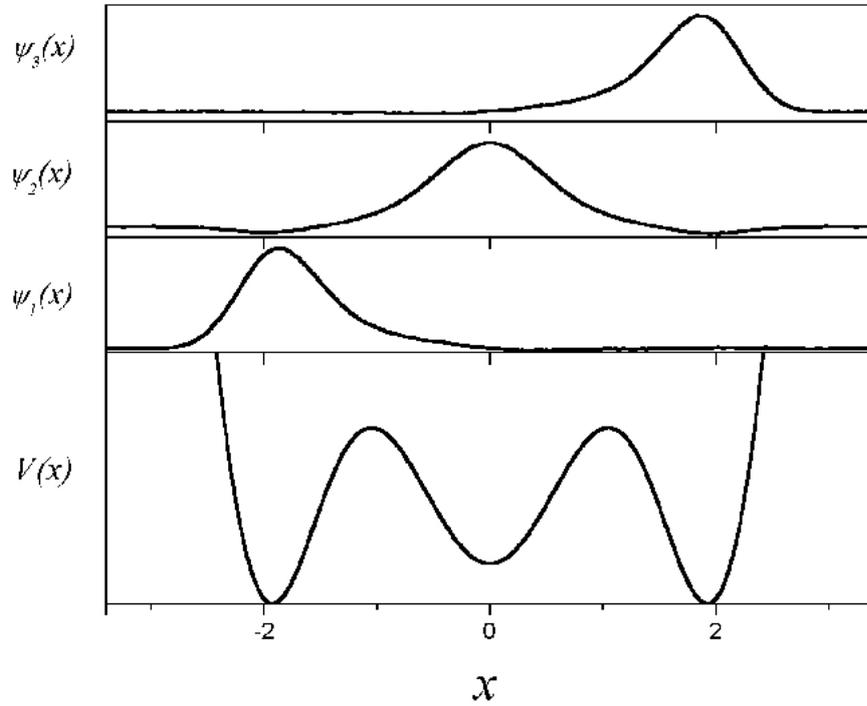
siendo  $\alpha = 0$ ,  $\beta = \frac{\pi}{2}$  y  $\gamma = \frac{\pi}{2}$ . Se identifica el número de pozos  $n$  con el número de momento angular  $j$ . El conjunto de estados a transformar  $\langle k+1 |$  el de los asociados a las funciones estacionarias  $\varphi_k$  y los estados rotados  $|i\rangle$  están asociados a las funciones de onda localizadas  $\psi_i$ .

El conjunto de funciones de onda  $\varphi_k$  son funciones estacionarias, con lo cual se cumple

$$(T + V_L) |\varphi_k\rangle = \epsilon_k |\varphi_k\rangle. \quad (\text{A.10})$$

Entonces, la parte sin interacción del Hamiltoniano se transforma en

$$H_T = \sum_k^{n-1} \epsilon_k a_k^\dagger a_k. \quad (\text{A.11})$$



*Figura A.3:* Funciones de onda localizadas al realizar la respectiva rotación. Visualmente, se aprecia que éstas son efectivamente localizadas. El traslape entre las funciones es menor al 6 %.

Al aplicar la rotación, el Hamiltoniano (A.11) se reescribe de la siguiente manera:

$$H_T = - \sum_{i,j}^{n-1} \Delta_{i,j} (b_i^\dagger b_j + b_j^\dagger b_i), \quad (\text{A.12})$$

donde  $\Delta_{i,j}$  es la tasa de tunelaje entre los sitios  $i$  y  $j$ . Como las funciones rotadas son localizadas (Fig. A.3), la tasa de tunelaje entre pozos no adyacentes es mucho más pequeña que la que existe entre sitios adyacentes, por lo cual, se puede tomar en cuenta solo la tasa para los vecinos más cercanos. Más aún, si los niveles de energía de la primera banda se encuentran igualmente espaciados, la tasa de tunelaje entre pozos no adyacentes es idénticamente cero. Entonces,

$$H_T = - \sum_{i=1}^{n-1} \Delta_{i,i+1} \left( b_i^\dagger b_{i+1} + b_{i+1}^\dagger b_i \right). \quad (\text{A.13})$$

Los coeficientes  $\Delta_{i,i+1}$  incluyen un factor que es el espaciamiento entre niveles de energía  $\varepsilon_k - \varepsilon_{k-1} = \Delta$  y otro factor propio de la transformación, en otras palabras, los coeficientes  $\Delta_{i,i+1}$  dependen de la posición  $i$ -ésima dentro del potencial.

Puesto que el conjunto de funciones resultante de la rotación  $\psi_i$  es localizado, sus correspondientes operadores  $b_i^\dagger$  ( $b_i$ ) crean (o destruyen) un bosón en el  $i$ -ésimo pozo.

En resumen, el Hamiltoniano de un gas de bosones ultrafrío en un potencial unidimensional, sin potencial de interacción entre partículas, puede ser escrito de manera no diagonal, de modo que su comportamiento quede determinado por el tunelaje de partículas entre pozos adyacentes.

Para la parte del Hamiltoniano que toma en cuenta la interacción entre partículas, reescribimos la Ec. (A.4) hasta los primeros  $n$  niveles:

$$H_W = \sum_{ijkl=0}^n w_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l, \quad (\text{A.14})$$

con

$$w_{ijkl} = \frac{g}{2} \int dx \varphi_i(x) \varphi_j(x) \varphi_k(x) \varphi_l(x). \quad (\text{A.15})$$

En general, las funciones de onda estacionarias  $\varphi_k$  tienen una paridad definida debido a que el potencial unidimensional  $V_L$  se escogió simétrico respecto al origen. En consecuencia, los coeficientes  $w_{ijkl}$  que tengan paridad total impar desaparecerán. Es decir,

$$H_W = \sum_{ijkl=0}^{n-1} w_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l; \quad i + j + k + l = 0, 2, 4, \dots \quad (\text{A.16})$$

Al igual que con el Hamiltoniano  $H_T$ , cuando se realiza la sustitución del conjunto de operadores de creación y aniquilación  $\{a_i^\dagger, a_k\}$  por el conjunto  $\{b_i^\dagger, b_i\}$ , aparecen términos de tunelaje entre diferentes pozos. Estos términos pueden ser ignorados, pues las funciones de onda resultantes de la rotación son efectivamente localizadas y el traslape entre ellas es aproximadamente cero. Es decir, cumplen que

$$\int \psi_i(x) \psi_j(x) = \delta_{ij}. \quad (\text{A.17})$$

Finalmente, el Hamiltoniano efectivo que describe un gas de  $N$  átomos de Bose con interacción entre partículas confinado en un potencial externo simétrico y con niveles de energía igualmente espaciados puede escribirse como

$$H = H_T + H_W, \quad (\text{A.18})$$

con

$$H_T = - \sum_{i=1}^{n-1} \Delta_{i,i+1} \left( b_i^\dagger b_{i+1} + b_{i+1}^\dagger b_i \right), \quad (\text{A.19})$$

$$H_W = U \sum_{i=1}^n \hat{N}_i \left( \hat{N}_i - 1 \right), \quad (\text{A.20})$$

donde  $U = \frac{g}{2} \int dx \psi_i^4(x)$ ,  $g = \frac{4\pi\hbar^2\alpha_s}{m}$  y  $\hat{N}_i$  es el operador de número para el  $i$ -ésimo pozo.

# Apéndice B

## Un poco más sobre temperaturas negativas

Por diferentes razones, el tema de las temperaturas negativas suele resultar bastante desconcertante la primera vez que alguien se encuentra con él, pues es un concepto altamente contraintuitivo. Para aclarar algunos de sus puntos más oscuros y explicar algunos problemas, es pertinente hacer las siguientes acotaciones más allá del principal de esta tesis.

Como ya se ha mencionado, todos los sistemas cuyos componentes poseen un espectro energético con un número finito de valores, exhiben temperaturas negativas. Dicho resultado es consecuencia del comportamiento de la entropía como función de la energía, cuya funcionalidad no se le pide que sea siempre creciente. En particular, los sistemas aquí considerados, comparten la característica de poseer un espectro acotado, dado que el modelo de Bose-Hubbard que hemos empleado para describirlos, parte de dicha hipótesis (se considera solamente la primera banda de energía de una red óptica de  $n$  pozos y por lo tanto una partícula tiene la posibilidad de ocupar un número limitado de estados).

Hay que aclarar que si bien el concepto de temperaturas negativas surge, como se menciona antes, como resultado la existencia de espectros de energía acotados propios de los sistemas cuánticos (como los compuestos por espines) y de las aproximaciones de los modelos para estudiar sistemas de muchos cuerpos, es la existencia de estados de equilibrio en sistemas macroscópicos reales la que justificaría plenamente su existencia genuina.

N.F. Ramsey[15] motivado por la capacidad experimental de lograr sistemas macroscópicos de espines todos con una misma polarización (como los realizados en resonancia magnética nuclear en la década de 1950, en los que un sistema de espines en estado de equilibrio inicial es polarizado por la acción de un campo externo[14]) y la inherente implicación de la existencia de temperaturas negativas, propuso una reformulación de la segunda ley de la termodinámica. En dicha formulación se considera al enunciado de Kelvin y su sentido inverso como prueba irrefutable de la validez de las temperaturas negativas. Sin embargo, los enunciados asumen intrínsecamente la idea de estabilidad, por lo que es la inestabilidad de los sistemas con temperaturas negativas, la que destruye la hipótesis que usa Ramsey para demostrar el enunciado inverso.

Ramsey propone que las temperaturas negativas son parte fundamental de la Física y no solo un resultado matemático posible debido a la definición de temperatura como la pendiente de la recta tangente a la curva  $S = S(E)$  y a la acotación del espectro de energía. En efecto, es fácil ver que tanto como la Primera Ley, como la Tercera Ley de la Termodinámica son consistentes con las temperaturas negativas. La Primera Ley simplemente porque no involucra la noción de temperatura y, por tanto, los conceptos de calor y trabajo son igualmente aplicables a temperaturas negativas. La Tercera Ley porque, tomando la convención de Ramsey[15] de que la escala adecuada de

temperatura de frío a caliente corre  $-\infty^\circ K, \dots, -0^\circ K, +0^\circ K, \dots, +\infty^\circ K$ ,<sup>1</sup>. La imposibilidad de llegar al 0 absoluto se cambia a la imposibilidad de alcanzar el menos infinito de temperatura.

Para el caso de la Segunda Ley de la Termodinámica, a continuación parafraseamos la versión atribuida a Kelvin junto con la formulación propuesta por Ramsey, y posteriormente enunciamos literalmente los argumentos dados por este autor.

El enunciado de Kelvin de la Segunda Ley establece que dado que, en un proceso, la conversión de todo el trabajo en calor es irreversible, lo que hace imposible construir una máquina que como único resultado convierta todo el calor en trabajo. Invertir este postulado, como se asienta en el trabajo de Ramsey, tiene como hipótesis que si siempre se puede convertir el calor en trabajo en forma irreversible entonces se puede construir una máquina en donde el trabajo se puede convertir en calor como único resultado. Para demostrar su enunciado Ramsey supone la existencia de baños térmicos con temperatura negativa. El postulado que debe ser usado para la segunda ley debe ser, según Ramsey:

”Es imposible construir una máquina cuyo único efecto sea 1) la extracción de calor de un reservorio a temperatura positiva y su conversión en trabajo o 2) el desecho de calor en un reservorio a temperatura negativa con el correspondiente trabajo hecho sobre la máquina”. [15]

La razón de este cambio se hace obvia al considerar la eficiencia de una máquina de Carnot entre dos reservorios con temperaturas negativas, uno a  $T_1$ , del cual la máquina absorbe calor  $Q_1$ , y otro a temperatura  $T_2$  menor, en donde se desecha el calor  $Q_2$ . La eficiencia de esta máquina es, entonces,

---

<sup>1</sup>Es decir, la medida de la temperatura adecuada debería ir como  $-1/T$

$$\eta = 1 - \frac{Q_2}{Q_1} = 1 - \frac{T_2}{T_1} < 0, \quad (\text{B.1})$$

pues al ser las dos temperaturas negativas  $|T_2| > |T_1|$ .

Este resultado significa que tenemos una máquina de Carnot que en vez de recibir calor del baño térmico más caliente y transformarlo en trabajo, es el trabajo el que debe suministrarse para mantener el ciclo. La máquina obtenida es realmente sorprendente si se considera su ciclo en sentido inverso pues entonces el trabajo se produce conforme el calor pasa del reservorio de menor temperatura al de mayor temperatura. Es decir, existe una máquina que en un ciclo cerrado no tiene ningún otro efecto que extraer calor de un baño térmico y convertirlo íntegramente en trabajo contradiciendo, por lo tanto, la segunda ley en la formulación de Kelvin sin contradecir la formulación de Ramsey.

Nótese que la formulación de Ramsey es la inversa de la formulación de Kelvin (p implica q, entonces q implica p), lo cual las hace lógicamente equivalentes. Sin embargo, debido a que en la Física la teoría queda subyugada al resultado experimental, las dos formulaciones son físicamente inconsistentes, tal como demuestra la existencia de una máquina con eficiencia mayor que uno. Dicho de otra forma, aunque la nueva formulación permite la existencia de temperaturas negativas no resuelve el problema de la existencia de una máquina nunca vista en la naturaleza.

Un problema adicional de la forma en que Ramsey aborda las temperaturas negativas es la ligereza con la cual asume la existencia de estados de equilibrio. El concepto de temperatura solo puede ser desarrollado a través de los procesos reversibles, los que, a su vez, provienen directamente de suponer estados de equilibrio. Ramsey sin embargo, solo menciona el caso específico de los espines, en el cual el tiempo en que se equilibra el sistema es corto

respecto al tiempo en que éste comienza a intercambiar energía con el resto del universo. El argumento, aun suponiendo que se cumple en todos los casos que reúnen las condiciones para las temperaturas negativas, es insuficiente. El equilibrio, más que el no cambio del estado del sistema en un cierto tiempo, es la resistencia del estado a cambiar debido a perturbaciones. Los estados a los que se les quiere asociar una temperatura negativa, sin embargo, son altamente susceptibles a las perturbaciones, sin importar lo pequeñas que estas sean. Como se muestra en [17], un estado con temperatura negativa al que se le permite entrar en contacto térmico con otro a temperatura positiva, terminará con una temperatura de equilibrio que siempre es positiva, sin importar la diferencia de tamaño (número de partículas) entre los dos sistemas, ni que cualquier temperatura negativa es, por definición, mucho más "caliente" que cualquier temperatura positiva. Es decir, los estados de temperatura negativa son incapaces de permanecer en ese estado, por lo que son naturalmente inestables

En conexión con el trabajo aquí abordado y su plausibilidad conviene establecer la relación existente entre la Física Estadística y la Termodinámica. Como es bien sabido, la Física Estadística nos provee del formalismo que conecta los sistemas de muchos cuerpos y las variables que caracterizan sus estados con la descripción de estos en términos de unas cuantas variables propias de la Termodinámica. Sin embargo, la solidez de la Física Estadística y, en particular las predicciones derivadas del esquema de los Ensembles, descansa en el hecho de la existencia de estados de equilibrio en sistemas macroscópicos. Pero un estado de equilibrio está caracterizado por ser estable, y es precisamente de esta propiedad de la que adolecen todos los sistemas cuánticos que exhiben temperaturas negativas. Al ponerlos en contacto con cualquier sistema, independientemente de su tamaño, tenderán a adquirir

una temperatura positiva como prescribe la Segunda Ley. En otras palabras, es una idealización la descripción de sistemas en aislamiento absoluto y la existencia genuina de temperaturas negativas.

# Bibliografía

- [1] M. Albiez, R. Gati, J. Fölling, S. Hunsmann, M. Cristiani y M. Obert-  
haler, «Direct observation of tunneling and nonlinear self-trapping in  
a single bosonic josephson junction», *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, 2005,  
010402.
- [2] A. Ayala, «Decoherencia en redes ópticas unidimensionales», tesis de  
licenciatura, UNAM, 2011.
- [3] S. Braun, J. P. Ronzheimer, M. Schreiber, S. S. Hodgma, T. Rom,  
I. Bloch y U. Schneider, «Negative absolute temperature for motional  
degrees of freedom», *Science*, vol. 339, 2013, 52–55.
- [4] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu y F. Laloe, *Quantum mechanics*, Wiley-  
Interscience, 1992.
- [5] E. Donley, N. Claussen, S. Thompson y C. Wieman, «Atom-molecule  
coherence in a bose-einstein condensate», *Nature*, vol. 417, 2002, 529.
- [6] M. Feit, J. Fleck y A. Steiger, «Solution of the schrödinger equation by  
a spectral method», *J. Comput. Phys.*, vol. 47, 1982, 412.
- [7] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein y D. S. Fisher, «Boson  
localization and the superfluid-insulator transition», *Phys. Rev. B*, vol.  
40, 1989, 546–570.

- 
- [8] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch y I. Bloch, «Quantum phase transition from a superfluid to a mott insulator in a gas of sultracold atoms», *Nature*, vol. 415, 2002, 39.
- [9] R. Grimm, M. Weidemuller y Y. B. Ovchinnikov, «Optical dipole traps for neutral atoms», *Adv. At. Mol. Opt. Phys.*, vol. 42, 2000, 95–170.
- [10] L. Landau y E. Lifshitz, *Course of theoretical physics: Statistical physics part 1*, Butterworth-Heinemann, 1980.
- [11] P. Medley, D. M. Weld, H. Miyake, D. E. Pritchard y W. Ketterle, «Spin gradient demagnetization cooling of ultracold atoms», *Phys. Rev. Lett.*, vol. 106, 2011, 195301.
- [12] R. Paredes, «Quantum phase transition from a superfluid to a mott insulator in a gas of ultracold atoms», *Nature*, vol. 415, 2002, 39.
- [13] R. Pathria, *Statistical mechanics*, Pergamon Press, 1972.
- [14] E. M. Purcell y R. V. Pound, «A nuclear spin system at negative temperature», *Phys. Rev.*, vol. 81, 1951, 279–280.
- [15] N. F. Ramsey, «Thermodynamics and statistical mechanics at negative absolute temperatures», *Phys. Rev.*, vol. 103, 1956, 20–28.
- [16] V. Romero-Rochin, «Equation of state of an interacting bose gas confined by a harmonic trap: the role of the "harmonic" pressure», *Phys. Rev. Lett.*, vol. 94, 2005, 130601.
- [17] V. Romero-Rochín, «Nonexistence of equilibrium states at absolute negative temperatures», *Phys. Rev. E*, vol. 88, 2013, 022144.

- [18] M. Rose, *Elementary theory of angular momentum*, John Wiley and Sons, 1957.
- [19] C. C. y R. Grimm y P. Julienne y E. Tiesinga, «Feshbach resonances in ultracold gases», *Rev. Mod. Phys.*, vol. 82, 2010, 1225–1286.