



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

**GASES DE BOSE DÉBILMENTE INTERACTUANTES EN UNA
TRAMPA CUADRUPOLEAR LINEAL**

TESIS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE
DOCTORA EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:

NADIA SANDOVAL FIGUEROA

TUTOR:

DR. VÍCTOR MANUEL ROMERO ROCHÍN
IFUNAM

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR

DRA. ROCÍO JÁUREGUI RENAUD
IFUNAM

DRA. ROSARIO PAREDES GUTIÉRREZ
IFUNAM

CIUDAD UNIVERSITARIA, CIUDAD DE MÉXICO
ENERO, 2017



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
INSTITUTO DE FÍSICA

Los abajo firmantes certifican que han leído y recomiendan a la Universidad Nacional Autónoma de México la aceptación de la tesis titulada “**Gases de Bose débilmente interactuantes en una trampa cuadrupolar lineal**” escrita por **Nadia Sandoval Figueroa** como cumplimiento parcial de los requisitos para obtener el grado de **Doctora en Ciencias (Física)**.

Fecha: Enero, 2017

Sinodal Externo:

Dr. Mariano López de Haro

Tutor Principal:

Dr. Víctor Manuel Romero Rochín

Sinodales:

Dr. Octavio Héctor Castaños Garza

Dr. José Ignacio Jiménez Mier y Terán

Dr. Víctor Manuel Velázquez Aguilar

Dr. Gerardo García Naumis

Dra. Rocío Jáuregui Renaud

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

Fecha: **Enero, 2017**

Autor: **Nadia Sandoval Figueroa**

Título: **Gases de Bose débilmente interactuantes en una
trampa cuadrupolar lineal**

Grado: **Dr.** Año: **2017**

La autorización es concedida a la Universidad Nacional Autónoma de México para distribuir y copiar con fines no comerciales, el título anterior a la solicitud de personas o Instituciones.

Firma del Autor

A Fernando, mi corazón.

Índice General

Índice General	v
Índice de figuras	vii
Resumen	xi
Introducción	1
1. Termodinámica. Presión y volumen generalizados	13
1.1. Variables intensivas y extensivas	14
1.2. Límite termodinámico y volumen efectivo V_{eff}	15
1.2.1. Volumen generalizado y límite termodinámico para un gas con-	
finado en un potencial armónico	18
1.2.2. Volumen efectivo V_{eff} y volumen generalizado \mathcal{V}	21
1.3. Gas ideal clásico en una trampa cuadrupolar lineal	22
1.4. Presión generalizada	24
1.5. Gas ideal cuántico de bosones en una trampa cuadrupolar lineal	30
1.5.1. Condensación de Bose-Einstein	34
1.5.2. Límite clásico	44
2. El desarrollo del Virial de la ecuación de estado	47
2.1. Desarrollo del Virial para potenciales confinantes	48
2.2. Coeficientes del Virial clásicos	56
2.2.1. Potencial Lennard-Jones	61
2.3. Coeficientes del Virial cuánticos	63
2.4. Aproximación de densidad local	68
3. Gases de Bose débilmente interactuantes	71
3.1. Ecuaciones autoconsistentes de Hartree-Fock	72

3.2.	Colisiones binarias en la aproximación de onda S	79
3.2.1.	La longitud de dispersión	83
3.2.2.	Potencial de interacción a bajas temperaturas	84
3.3.	Ecuaciones de Hartree-Fock en la aproximación de onda S	86
3.3.1.	Aproximación de Thomas-Fermi	90
3.4.	El gas homogéneo débilmente interactuante	91
4.	Gas en un potencial cuadrupolar lineal	95
4.1.	Gas en un potencial cuadrupolar lineal en la aproximación de Hartree-Fock, solución computacional	95
4.2.	Discusión sobre la transición BEC dentro de la aproximación de Hartree-Fock	112
4.2.1.	Temperatura de Transición	113
4.2.2.	Presión, ecuación de estado	113
5.	Conclusiones	125
5.1.	Presión generalizada \mathcal{P} y Volumen generalizado \mathcal{V}	126
5.2.	El desarrollo del Virial de la ecuación de estado	127
5.3.	Gases de Bose débilmente interactuantes	128
5.4.	La ecuación de estado en los diferentes modelos	128
A.	Conceptos básicos de termodinámica	131
A.1.	Conceptos de termodinámica	131
A.2.	Identidades termodinámicas	132
B.	Funciones especiales	135
B.1.	Función Gamma	135
B.2.	Función de Bose	135
C.	Variables adimensionales	137
D.	Programas	139
	Bibliografía	154

Índice de figuras

1.	Imagen reportada en <i>Science</i> , 1995 , <i>269</i> , 198, muestra la distribución de velocidades para temperaturas de $400nK$, $200nK$, y $50nK$	3
2.	Los átomos emergen desde un horno, son desacelerados y atrapadas en una trampa magnéto-óptica (MOT, Magnetic Optical Trap). La trampa magnética es la cuadrupolar y la configuración Ioffe (QUIC, Quadrupole and Ioffe configuration). El campo magnético es presentado con detalle, donde z esta en centímetros y el campo B en Teslas.	7
3.	Se muestra la evolución del experimento hasta el BEC, el número de átomos y a que temperatura se encuentra.	9
1.1.	Se muestra el potencial armónico (ecuación 1.17) para una dimensión y $\omega_x = 1$	19
1.2.	Se muestra el potencial cuadrupolar lineal (ecuación 1.29) para una dimensión y $A_x = 1$	23
1.3.	Definición de la presión.	25
1.4.	Función de Bose, $g_{9/2}(\alpha)$	36
1.5.	Gráfica de la fracción del condensado de un gas ideal de Bose confinado en una trampa cuadrupolar lineal.	39
1.6.	Gráfica de la entropía de un gas ideal de Bose confinado en una trampa cuadrupolar lineal.	40

1.7.	Gráfica de la presión generalizada adimensional p de un gas ideal cuántico de Bose confinado en una trampa cuadrupolar lineal. Tanto la presión p como la temperatura t están en unidades adimensionales, según el apéndice C. La temperatura crítica es: $t_c = 0.261598$ para una densidad $\frac{N}{\Xi} = 1$	41
1.8.	Gráfica de la capacidad calorífica de un gas ideal de Bose confinado en una trampa cuadrupolar lineal. Cabe notar la discontinuidad en la temperatura crítica T_c y que a altas temperaturas, $C_V \rightarrow \frac{9}{2}Nk$, que corresponde a su valor clásico.	42
1.9.	Gráfica de la compresibilidad isotérmica de un gas ideal de Bose confinado en una trampa cuadrupolar lineal. Para temperaturas abajo de la temperatura crítica $t_c \approx 0.261598$ no esta definida. La línea punteada roja corresponde a la función $y = 1/x$, como muestra la gráfica, la compresibilidad isotérmica para temperaturas arriba de la temperatura crítica tiene un comportamiento que sigue la Ley de Curie.	43
2.1.	Se muestra un potencial de interacción de corto alcance $U(r)$. La línea roja muestra el comportamiento típico de un potencial de Van der Waals, el cual decae como $f(r) = -1/r^6$	49
2.2.	Se muestra la función de Mayer para un potencial Lennard-Jones, con $\sigma = 1$ y $\varepsilon = -1$	60
2.3.	Potencial de Lennard-Jones con $\sigma = 1$ y $\varepsilon = -1$	62
2.4.	Gráficas de la presión usando la primera aproximación del desarrollo del Virial. La presión \mathcal{P}' y la temperatura t son adimensionales. La línea de puntos corresponde a un potencial de paredes rígidas, la línea punteada corresponde a un potencial armónico y la línea llena a un potencial cuadrupolar. La segunda gráfica es un acercamiento para $t = 0.4 - 1.0$	64

2.5.	Las gráficas corresponden al segundo coeficiente del Virial clásico. La primera imagen corresponde a un potencial armónico y la segunda a un potencial cuadrupolar.	65
4.1.	Se muestra la gráfica de la ecuación de estado, el eje vertical representa la presión generalizada adimensional $\mathcal{P}(a^3/\epsilon_0^4)$. El intervalo de la temperatura adimensional kT/ϵ_0 es $(0, 0.5]$, de la densidad adimensional ρa^3 es $(0,20]$ y la presión generalizada adimensional $(0,14)$	98
4.2.	Para obtener las variables termodinámicas de nuestro sistema primero se calcula el perfil de densidad dada un densidad y una temperatura. El error es la diferencia entre el valor de la integración numérica del perfil de densidad y el valor dado inicialmente de la densidad.	100
4.3.	En la gráfica se muestra el perfil de densidad de un gas de bosones en una trampa cuadrupolar lineal en la teoría autoconsistente de Hartree-Fock, la aproximación de onda S y de Thomas-Fermi, obtenido con el programa <i>denhf.f</i> . La densidad es $\frac{N}{V} \frac{a^3}{\epsilon_0^3} = 10$ y la temperatura es $\frac{kT}{\epsilon_0} = 0.25$, le corresponde $\alpha = 4.2274$. El perfil de densidad ρ' y la coordenada r' están adimensionadas como se muestra en el Apéndice C.102	
4.4.	En la gráfica se muestra el perfil de densidad térmico de un gas de bosones en una trampa cuadrupolar en la teoría autoconsistente de Hartree-Fock, obtenido con el programa <i>denhf.f</i> y las raíces adicionales obtenidas con ayuda del programa <i>Mathematica</i>	103
4.5.	El potencial químico de un gas de bosones en una trampa cuadrupolar en la teoría autoconsistente de Hartree-Fock. La línea verde corresponde a un densidad de $\frac{N}{V} \frac{a^3}{\epsilon_0^3} = 11$, la línea azul a $\frac{N}{V} \frac{a^3}{\epsilon_0^3} = 10$ y la roja a $\frac{N}{V} \frac{a^3}{\epsilon_0^3} = 9$	105
4.6.	Se muestran la gráfica de isócoras para una densidad desde $\frac{N}{V} \frac{a^3}{\epsilon_0^3} = 1$ hasta $\frac{N}{V} \frac{a^3}{\epsilon_0^3} = 7$, se exhibe la línea de transición.	106

4.7.	Se muestran del lado izquierdo las graficas correspondientes a la densidad térmica, la energía y la capacidad calorífica, obtenidas a partir de las ecuaciones autoconsistentes de Hartree-Fock. Del lado derecho las correspondientes a las expuestas por Minguzzi <i>et al.</i> , donde la linea corresponde a una solución perturbativa de orden cero, los guiones al primer orden y los círculos a la solución numérica completa.	109
4.8.	Se muestra la gráfica correspondiente a la entropía S	110
4.9.	Se muestra la gráfica de la compresibilidad isotérmica para un gas de bosones atrapados en un potencial cuadrupolar lineal en la teoría autoconsistente de Hartree-Fock.	111
4.10.	Se muestra la densidad térmica y la densidad del estado base como función de la temperatura, en el modelo de gas ideal y la aproximación de Hartree-Fock.	114
4.11.	Se muestra el cociente entre la densidad del estado base y la densidad total para el modelo de gas ideal y Hartree-Fock, las temperaturas críticas para ambos casos son diferentes.	114
4.12.	En la figura podemos ver la gráfica de la presión generalizada para diferentes regímenes, para una densidad $\rho = 10$ en unidades adimensionales.	117
4.13.	Se muestra el potencial químico para diferentes regímenes, las unidades son adimensionales	118
4.14.	En la figura podemos ver la gráfica de energía para diferentes regímenes. Las unidades son adimensionales.	119
4.15.	En la figura podemos ver la gráfica de la entropía para diferentes regímenes. Las unidades son adimensionales.	122
4.16.	En la figura podemos ver la gráfica de la capacidad calorífica para diferentes regímenes. Las unidades son adimensionales.	123
4.17.	En la figura podemos ver la gráfica de la compresibilidad isotérmica para diferentes regímenes. Las unidades son adimensionales.	124

Resumen

En este trabajo discutimos la transición de gas normal a la condensación de Bose-Einstein (BEC) de un gas de Bose ultrafrío confinado en una trampa cuadrupolar lineal, considerando interacciones atómicas de contacto dentro de la aproximación de Hartree-Fock. Revisamos brevemente el marco teórico de la termodinámica de un gas confinado por un potencial no uniforme para mostrar cómo debe formularse el equilibrio mecánico en términos de variables generalizadas de volumen y presión \mathcal{V} y \mathcal{P} , que reemplazan el volumen usual y la presión hidrostática de un sistema uniforme. Este desarrollo es válido dentro del desarrollo del Virial del gran potencial. Calculamos el perfil de densidad dentro de la aproximación Hartree-Fock como función de la temperatura T y el volumen molar generalizado $v = \mathcal{V}/N$. Con esta información podemos calcular todas las propiedades termodinámicas del sistema y analizamos el comportamiento del gas a través de la transición BEC. Hallamos que la transición es completamente suave y que no muestra signos de comportamiento crítico.

Abstract

We discuss the normal gas to Bose-Einstein Condensation (BEC) transition of an ultracold Bose gas in a linear quadrupolar trap with contact interatomic interactions within the Hartree-Fock approximation. We briefly review the theoretical framework of the thermodynamics of a gas confined by a non-uniform potential to show how mechanical equilibrium must be formulated in terms of generalized volume and pressure variables \mathcal{V} and \mathcal{P} , that replace the usual volume and hydrostatic pressure of a uniform system. This scheme is validated with the derivation of the Virial expansion of the grand potential. We solve for the density profile within Hartree-Fock as a function of temperature T and molar volume $v = \mathcal{V}/N$. With this information we are able to calculate all the thermodynamic properties of the system and analyze the behavior of the gas through the BEC transition. We find that the transition is completely smooth showing no sign of critical behavior.

Introducción

El siglo XX fue llamado el siglo de la física gracias a los grandes descubrimientos y avances en esta rama de la ciencia. Uno de los expositores más destacados y sin duda el más famoso es Albert Einstein recordado por la Teoría de la Relatividad General y por el *año maravilloso*, 1905, en el cual publicó cinco de los artículos científicos que marcarían el paso en la evolución de la física en el siglo pasado.

El punto neurálgico de la presente tesis tiene como primer antecedente dos artículos, uno del propio Albert Einstein publicado en 1925 que lleva como título: *Quantentheorie des einatomigen ideal en Gases* [1], y otro artículo escrito por Satyendra Nath Bose llamado: *Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese* [2]; en los cuales predicen la condensación de Bose-Einstein (BEC por sus siglas en inglés).

La condensación de Bose-Einstein es considerada en los libros de texto como un estado de agregación de la materia en el cual la mayoría de las partículas se encuentran en su estado de mínima energía. Pero su relevancia es palpable hasta la década de los 1980 y 1990, en particular con el Premio Nobel de Física del año 1997 otorgado a Steven Chu, Claude Cohen-Tannoudji y William D. Phillips por encontrar un método con el cual podían enfriar átomos con las energías muy bajas, cercanas a la mínima, necesarias para encontrar a la materia en este estado de agregación, BEC.

El estudio de los BEC se aplica en la investigación de otros fenómenos como: trampas magneto-ópticas, redes ópticas [3], cavidades ópticas [4] y ondas gravitacionales [5]. Las aplicaciones de la tecnología creada para la manipulación de los átomos a bajas energías aún está por llegar y antes se debe tener un buen sustento teórico del comportamiento de la materia a estas energías.

La contribución del presente trabajo doctoral se enfocó en encontrar las ecuaciones de estado en diferentes modelos y regímenes de un gas confinado a bajas energías, para conocer su comportamiento teórico dentro de una trampa y así poder predecir cuales serán los cambios físicos al modificar las condiciones originales del gas; y con esto, contribuir al entendimiento de uno de los temas más interesantes del siglo XX en física, los condensados de Bose-Einstein.

Antecedentes históricos y teóricos de la condensación de Bose-Einstein.

La condensación de Bose-Einstein es una manifestación de la naturaleza cuántica de la materia en forma macroscópica. A continuación mencionaremos algunos antecedentes históricos para la obtención de un condensado de Bose-Einstein en el laboratorio y bosquejaremos los fundamentos de la Mecánica Cuántica y de la Física Estadística.

Las partículas cuánticas se separan en: bosones y fermiones. Los bosones son aquellos cuyos estados se describen por una función de onda simétrica y los fermiones son los definidos por una función de onda antisimétrica. Además, los bosones tienen spin entero y los fermiones un spin semientero.

Las diferencias entre los comportamientos clásicos y cuánticos de las partículas son observadas cuando la longitud térmica de de Broglie, λ , es del orden o menor

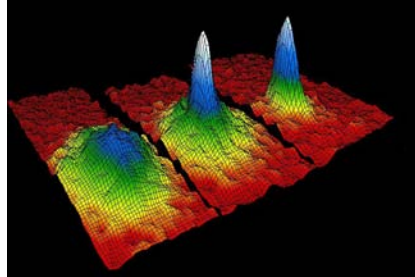


Figura 1: Imagen reportada en *Science*, **1995**, *269*, 198, muestra la distribución de velocidades para temperaturas de $400nK$, $200nK$, y $50nK$.

que la distancia intermolecular del sistema $d = (V/N)^{1/3}$ donde V es el volumen que ocupa el gas y N el número de átomos que lo componen. La longitud térmica λ está definida como [6],

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}} \quad (1)$$

donde h es la constante de Planck, m la masa de la partícula, k es la constante de Boltzmann y T es la temperatura a la cual se encuentra el sistema. Como consecuencia, a una densidad N/V fija, las diferencias entre bosones y fermiones se manifiestan a bajas temperaturas, como es el caso de la condensación de Bose-Einstein o el gas degenerado de Fermi-Dirac.

La condensación del gas de bosones fue predicha por Albert Einstein y Satyendra Nath Bose [1, 2] en la década de 1920. Ellos mostraron que a partir de una temperatura crítica, un número comparable al total de partículas de un gas estaría en el mismo estado cuántico, el más bajo posible.

La condensación de Bose-Einstein fue una curiosidad teórica por varios años. Una de las primeras personas en tomarles importancia fue F. London en la década de los

treinta [7] al relacionar el BEC con la superfluidez del helio líquido.

Pero fue hasta la década de 1980 [8] cuando se empezó a estudiar la posibilidad de obtener un condensado de Bose-Einstein en el laboratorio. En particular nos interesa el artículo de V. Bagnato [9] donde se estudia el BEC en un potencial externo, calculando la densidad de estados, la temperatura crítica y la capacidad calorífica. Este artículo es uno de los primeros en obtener cantidades termodinámicas de los gases ultrafríos.

El Premio Nobel de Física en 1997 fue otorgado por encontrar un método por el cual se podrían atrapar átomos fríos con luz LASER [10]. Eric Cornell y Carl Weiman [11, 12] desarrollaron el enfriamiento por evaporación en 1995 para confinar por primera vez átomos ultrafríos de rubidio-87, a temperaturas de unas decenas de nanoKelvin (nK) y así obtener el fenómeno del BEC. Un segundo trabajo por W. Ketterle [13] reportó un BEC con átomos de sodio. Lo que siguió fue una cascada de experimentos confirmando la realización del BEC en los laboratorios. En el 2001, el Premio Nobel de Física fue para Eric A. Cornell, Wolfgang Ketterle y Carl E. Wieman por obtener el BEC en gases diluidos de átomos alcalinos y por su estudio de las propiedades del condensado (figura 1). Hoy día se realizan una variedad de experimentos de gases ultrafríos en todo el mundo en diferentes tipos y combinaciones de trampas.

Los experimentos nos llevan a desarrollar teorías que describan a los gases dentro de potenciales de confinamiento que no son triviales ya que no se comportan como un gas homogéneo dentro de una trampa de paredes rígidas. Los gases confinados son no homogéneos en su distribución espacial, que depende de la forma del potencial de confinamiento, y por tanto, la definición de sus variables termodinámicas debe ser realizada con cuidado. Con esta motivación es que nosotros realizamos esta tesis

doctoral, para analizar la termodinámica de los gases ultrafríos atrapados, en particular los gases de bosones. Usando nuevas variables termodinámicas asociadas con las trampas, obtendremos la ecuación de estado, la capacidad calorífica y otras susceptibilidades. En particular estudiaremos un gas confinado en una trampa cuadrupolar lineal. Todo esto para tener un mejor entendimiento de estos sistemas y para futuras manipulación con ellos. Como antecedente tenemos el trabajo de Romero-Rochín [14], define nuevas variables termodinámicas para el caso de un gas de átomos interactuantes confinados en una trampa armónica, presentando la ecuación de estado para un gas ultrafrío interactuante de átomos de Bose en la aproximación de Hartree-Fock.

Átomos alcalinos. El sistema que analizaremos durante la tesis doctoral es un gas de átomos atrapados. En los experimentos se han usado principalmente átomos de sodio y rubidio los cuales son átomos alcalinos que estudiaremos a continuación.

Los átomos alcalinos, los cuales se ubican en la columna I de la tabla periódica, están compuestos por una parte formada de capas electrónicas internas completas y un único electrón en una órbita poco ligada. Por ejemplo, la configuración electrónica del sodio (Na) en su estado fundamental es [15],

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1. \quad (2)$$

Excluyendo al hidrógeno, los átomos alcalinos tienen en su estado fundamental una configuración electrónica del tipo ${}^1S_0 ns$ donde 1S_0 representa la parte de capas cerradas (momento angular de espín $s = 0$, momento angular orbital $l = 0$, momento angular total $j = 0$).

La parte ns representa al único electrón de valencia, por lo que el estado base

electrónico es un doblete en la estructura hiperfina. Este desdoblamiento es característico de los alcalinos. La longitud de onda de la transición ($ns \rightarrow np$) está en el intervalo 500 – 700 nm. Por ejemplo la línea-D amarilla del sodio es un doblete con una separación de alrededor de 2.1 eV (17 cm^{-1}).

Recordemos que el momento angular total electrónico es $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, y el spin nuclear es \vec{I} , tal que el momento angular total del átomo es $\vec{F} = \vec{I} + \vec{J}$ [16]. Al aplicar un campo magnético \vec{B} se presenta el efecto Zeeman de estructura hiperfina. En la aproximación de acoplamiento IJ la interacción toma la forma de

$$\mathcal{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad (3)$$

donde $\mu = M_F g_F \mu_B$ es el momento total del átomo, μ_B es el magnetón de Bohr, g_F es un factor análogo al factor g de Landé y M_F es la proyección del momento angular.

Al aplicar el campo magnético se rompe la degeneración $(2I + 1)(2J + 1)$ que existe en el doblete. Para el caso del estado base de los átomos alcalinos se tiene que sus momentos angular y de spin del electrón $J = S = 1/2$ y para ^{87}Rb o ^{23}Na el momento de spin del núcleo es $I = 3/2$ [17].

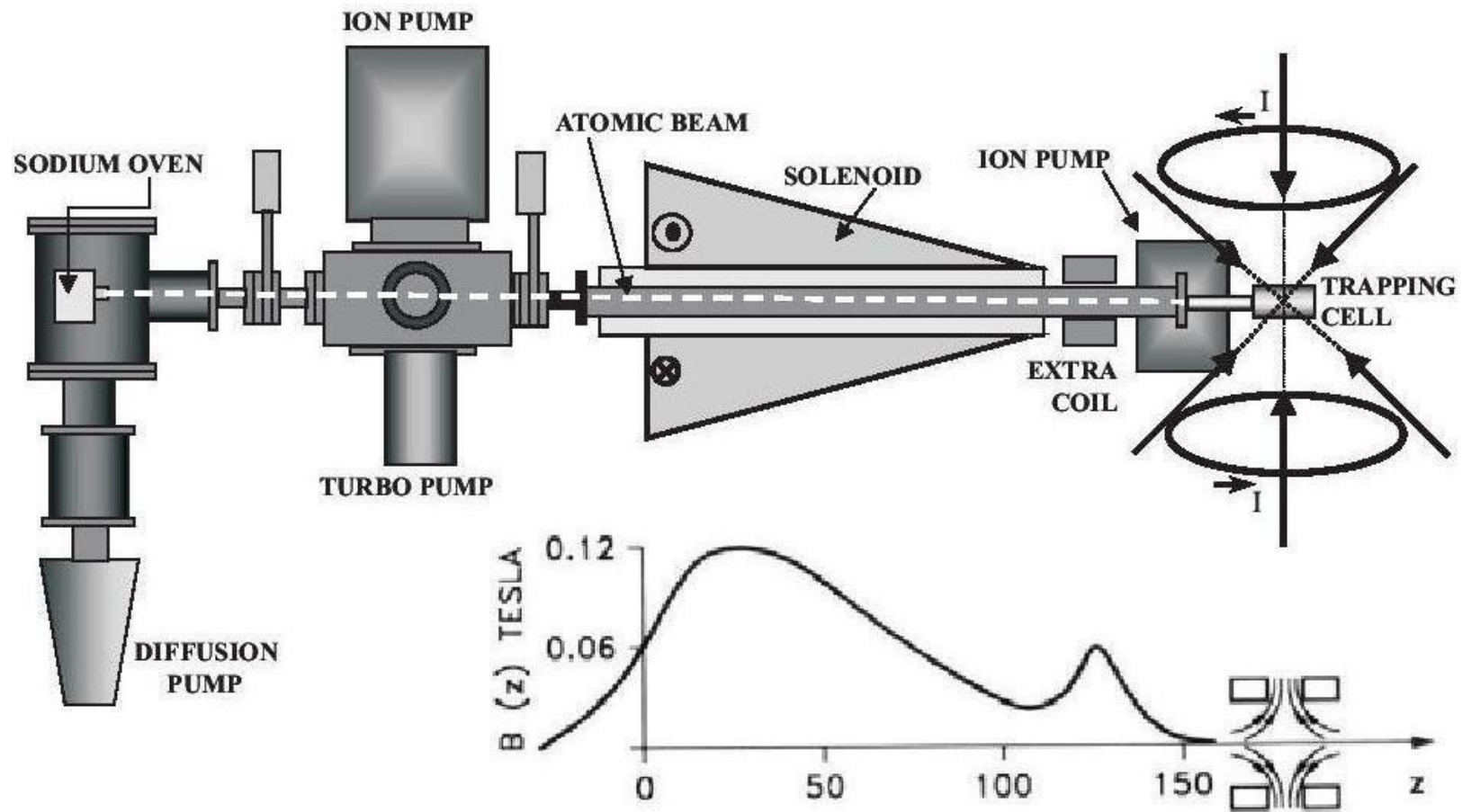


Figura 2: Los átomos emergen desde un horno, son desacelerados y atrapadas en una trampa magnéto-óptica (MOT, Magnetic Optical Trap). La trampa magnética es la cuadrupolar y la configuración Ioffe (QUIC, Quadrupole and Ioffe configuration). El campo magnético es presentado con detalle, donde z esta en centímetros y el campo B en Teslas.

Trampas. Existen diferentes tipos de trampas, como las ópticas que usan láseres, las trampas magnéticas como la cuadrupolar, la Ioffe-Pritchard o combinaciones como la QUIC (Quadrupole and Ioffe configuration), en la cual el campo magnético tiene la forma [17],

$$|\vec{B}(\vec{r})| = B_o + \frac{1}{2}\alpha\rho^2 + \frac{1}{2}\beta z^2, \quad (4)$$

dónde \vec{B} es el campo magnético, α y β son parámetros relacionados con la trampa, ρ y z son coordenadas cilíndricas y B_o es una constante.

El potencial que siente un átomo en un estado hiperfino, debido a este campo magnético es,

$$V(\rho, z) = const + \frac{1}{2}M\omega_r^2\rho^2 + \frac{1}{2}M\omega_z^2z^2, \quad (5)$$

con M la masa de las partículas, ω_r y ω_z parámetros en las coordenadas cilíndricas relacionados con la trampa; el valor de $\omega_r \equiv 2\pi\nu_r$ es idéntico para los estados $F = 2, m_F = 1$ y $F = 1, m_F = -1$.

En la actualidad existen varios experimentos BEC, con ^{87}Rb , ^{23}Na , ^7Li , entre otros. Por ejemplo en los experimentos de Bagnato *et al.* [18] usan átomos de sodio en una trampa magneto-óptica (MOT por sus siglas en inglés, Magnetic Optical Trap). El proceso para enfriarlos se presenta en la figura (2); la última parte consiste en el enfriamiento por evaporación, que se refiere al proceso en el cuál a los átomos con las más altas energías se les invierte la dirección de su proyección de spin, de tal manera que sienten un potencial repulsivo y abandonan el sistema donde se encuentran. Los átomos que permanecen en la trampa llegan a un estado de equilibrio térmico debido a las colisiones elásticas entre ellos. Con esto se logra llegar a la temperatura crítica para el BEC (figura 3). El experimento típicamente comienza con 10^9

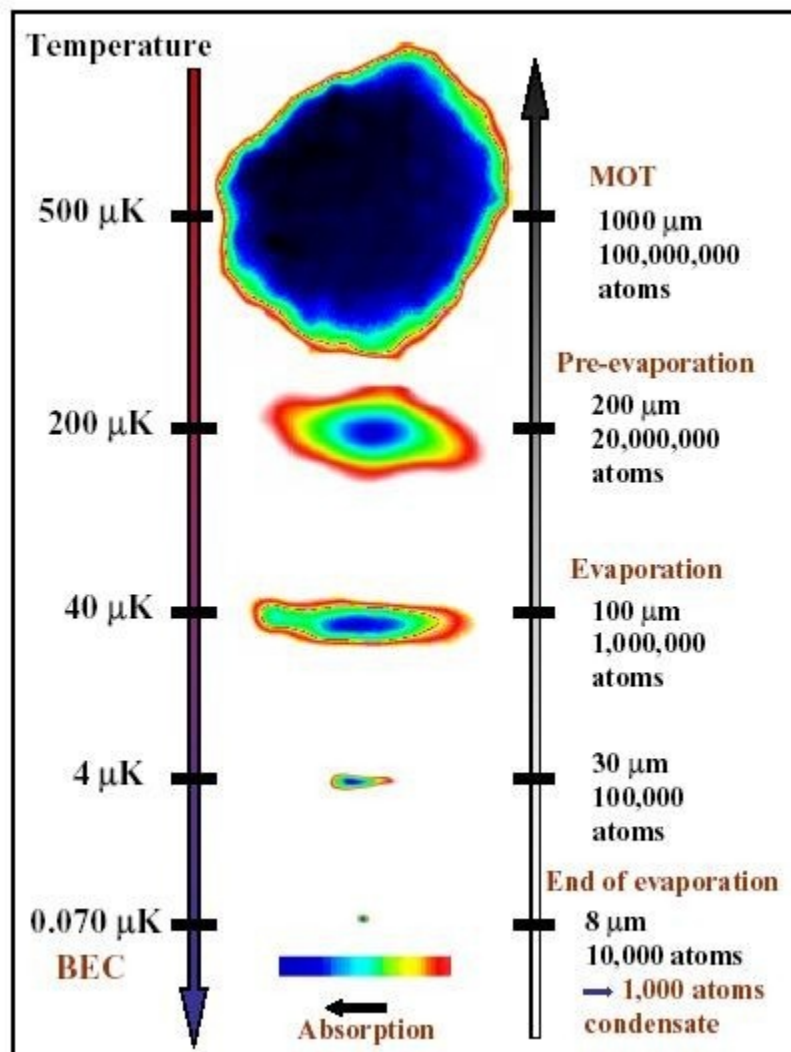


Figura 3: Se muestra la evolución del experimento hasta el BEC, el número de átomos y a que temperatura se encuentra.

átomos a $500 \mu K$ y termina a $70 nK$ con unos 10^4 - 10^5 átomos en la BEC. Se encuentra que la temperatura crítica es de $T_c \sim 61 nK$ y el estado base corresponde a $6.7 nK$.

La tesis se organiza de la siguiente manera:

En el capítulo 1 se revisa el marco teórico de la termodinámica para definir las variables termodinámicas generalizadas, *el volumen generalizado* \mathcal{V} y *la presión generalizada* \mathcal{P} , para las trampas inhomogéneas. Estas fueron introducidas por Romero-Rochín [14, 19, 20] para el potencial armónico y después en su forma general para otros potenciales como el cuadrupolar, el Pöschl-Teller y el general [9]. Con ellas podremos encontrar cantidades termodinámicas como la capacidad calorífica y la susceptibilidad, de ahí su importancia.

En el capítulo 2 se generaliza el desarrollo del Virial para un gas confinado. Este desarrollo es totalmente general, es aplicable para el caso clásico o cuántico con interacciones de corto alcance entre pares de partículas. En el caso clásico se encuentran los coeficientes del Virial y se realiza un ejemplo con el potencial de interacción Lennard-Jones. Para el caso cuántico se repite el procedimiento de Landau [21] para el caso de un gas confinado. Un resultado importante de la tesis se muestra al final de este capítulo: la exactitud de la *aproximación de densidad local*. Usando la teoría del desarrollo del Virial para el gran potencial se demuestra este hecho.

En el capítulo 3, desarrollaremos la teoría necesaria para obtener las ecuaciones autoconsistentes de Hartree-Fock en la aproximación de onda S. En este proceso revisaremos la aproximación de Thomas-Fermi, que se aplica a sistema de bajas energías. Consecuentemente veremos una primera aplicación al gas homogéneo.

En el capítulo 4 estudiamos el caso de una gas de bosones interactuantes en

un potencial cuadrupolar lineal usando la teoría desarrollada en el capítulo 3. Para resolver las ecuaciones autoconsistentes encontradas se realizaron cálculos numéricos, los resultados se muestran en forma de gráficas. Se realiza una comparación entre los diferentes modelos del gas: clásico ideal, cuántico ideal y la teoría de campo medio de Hartree-Fock en la aproximación de interacciones de contacto a bajas energías . Además se discute la definición de la temperatura de transición y se compara ésta con la transición de un líquido a un superfluido.

Por último en los apéndices de esta tesis encontramos: en el apéndice A se muestran conceptos básicos de termodinámica que son usados en el desarrollo de la presente tesis, así como la definición de la función de Bose en el apéndice B. En el apéndice C se explica el cambio de variable y las ecuaciones adimensionales utilizadas en los programas computacionales. En el apéndice D se muestra uno de los principales programas para obtener los valores numéricos de la presión, temperatura y densidad de un gas de Bose atrapado usando la aproximación de Hartree-Fock.

En la presente tesis doctoral revisamos el marco teórico termodinámico de un gas confinado por un potencial no uniforme para mostrar cómo debe formularse el equilibrio mecánico en términos de variables generalizadas. Se dedujeron las ecuaciones de estado para un gas en una trampa cuadrupolar lineal en el caso clásico y cuántico ideal. Se generalizó el desarrollo del Virial para un gas inhomogéneo en cualquier régimen (clásico y cuántico). Además, se revisó la teoría de un gas interactuante en la aproximación de campo medio con las ecuaciones autoconsistentes de Hartree-Fock en la aproximación de interacción de contacto a bajas energías; y se encontraron las soluciones numéricas a dichas ecuaciones. Asimismo, demostramos que la *aproximación*

de densidad local es exacta dentro del límite termodinámico usando el desarrollo del Virial del gran potencial. Con todo esto se puede hacer un análisis de las propiedades termodinámicas de un gas inhomogéneo como lo mostraremos a continuación.

Parte del trabajo realizado durante la tesis doctoral se publicó en los artículos:

- *Thermodynamics of trapped gases: Generalized mechanical variables, equation of state, and heat capacity* Physical Review E **78** 061129 (2008)
- *BEC transition of a weakly interacting ultracold Bose gas in a linear quadrupolar trap* Revista Mexicana de Física 56 (**3**) 223-230 Junio 2010

los cuales cuentan con más de veinte citas, según el portal *Google Académico*. Los artículos que los citan refieren a las variables globales o la aproximación de Hartree-Fock en su mayoría.

La tesis doctoral se desarrollo entre los años 2003 a 2008; la escritura de la presente tesis, la elaboración y publicación de los artículos de investigación se realizó entre 2008 y 2010. La defensa de la tesis se realizó en enero de 2017, por cuestiones personales del autor.

Capítulo 1

Termodinámica. Presión y volumen generalizados

Enrico Fermi define a la termodinámica [22] como la ciencia dedicada principalmente al estudio de la transformación de calor a trabajo mecánico y su transformación opuesta de trabajo mecánico a calor. Su origen está ligado con la Revolución Industrial, como una ciencia totalmente empírica que agrupaba leyes y postulados obtenidos de la observación y experimentación de la materia. La termodinámica sigue siendo fenomenológica con cuatro leyes empíricas y su sustento teórico a nivel microscópico se encuentra en la física estadística. Los sistemas pueden ser descritos con una ecuación de estado y ecuaciones constitutivas o con una sola ecuación de un potencial termodinámico, los cuales cumplen las leyes de la termodinámica. Podemos estudiar casi cualquier sistema macroscópico, siempre y cuando esté el tiempo suficiente en estados de equilibrio.

En este capítulo se recopilan los fundamentos de la termodinámica y de la física estadística, conceptos y preceptos usados en el desarrollo de la presente tesis sobre los gases ultrafríos confinados en trampas inhomogéneas. Se demostrará que las variables termodinámicas generalizadas son las variables termodinámicas apropiadas para los

gases confinados. En particular, estudiaremos los gases ideal clásico y cuántico para introducir la presión y el volumen generalizado.

1.1. Variables intensivas y extensivas

El estado termodinámico de un sistema puede ser expresado por algunos parámetros llamados *variables termodinámicas*. Se pueden usar diferentes variables para especificar un estado del sistema, sin embargo, sólo unas pocas de estas son independientes entre sí. En la práctica se escogen aquellas que se puedan medir en el laboratorio y obtener así relaciones entre ellas. Las variables termodinámicas pueden ser *intensivas* o *extensivas*; las variables extensivas cambian siempre que el tamaño del sistema cambia; las intensivas no. El número de partículas N es una variable extensiva y junto con el volumen V son las variables *naturales* para ser extensivas. La energía interna E y la entropía S son variables extensivas; además, son funciones homogéneas de primer orden de sus variables extensivas como una consecuencia de la primera y segunda ley de la termodinámica [23] (apéndice A.2).

Si tomamos un sistema puro con una sólo componente química tal que la entropía sea una función de las variables extensivas E , V y N , la propiedad extensiva de las partículas también se puede expresar como

$$S(\gamma E, \gamma V, \gamma N) = \gamma S(E, V, N), \quad (1.1)$$

cuando se cambia E por γE , V por γV y N por γN donde γ es un número real. Esto se cumple para cualquier potencial termodinámico [21].

El volumen V es una variable termodinámica que denota el tamaño del sistema, sin embargo esta afirmación sólo es correcta cuando tenemos un sistema encerrado

por paredes rígidas. Para otro tipo de confinamiento, como las trampas magneto ópticas, donde la trampa no tiene un espacio definido, las variables adecuadas para caracterizar el tamaño del sistema tendrán que ver con el potencial de la trampa como veremos más adelante.

1.2. Límite termodinámico y volumen efectivo V_{eff}

La conexión entre la termodinámica y la física estadística es el límite termodinámico, es decir, cuando el sistema es macroscópico, *ergo* cuando N es del orden del número de Avogadro $N_A = 6.22 \times 10^{23}$. Únicamente en este límite es válida la definición de energía libre de Helmholtz en términos de la función de partición [21]. Usaremos este hecho para encontrar una variable extensiva apropiada, análoga al volumen.

Tomando un sistema clásico de N partículas no interactuantes de masa m , dentro de un potencial externo $V_{ext}(\vec{r})$, cuyo Hamiltoniano es

$$H(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N) = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N V_{ext}(\vec{r}_i), \quad (1.2)$$

su función de partición $Z(T, \mathcal{V}, N)$ [21] está dada por,

$$Z(T, \mathcal{V}, N) = \frac{1}{h^{3N} N!} \int d^N \vec{r} d^N \vec{p} e^{-\beta \left[\sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N V_{ext}(\vec{r}_i) \right]}, \quad (1.3)$$

con $\beta = \frac{1}{kT}$, k la constante de Boltzmann, T la temperatura, h la constante de Planck y \mathcal{V} es una variable generalizada asociada al potencial externo V_{ext} aún por definir.

La integral que corresponde a los momentos en la ecuación (1.3) da un término

λ^{-3N} , con λ la longitud térmica de de Broglie [6]

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}}, \quad (1.4)$$

mientras que la integral con respecto a las posiciones nos permite escribir

$$\left(\int d\vec{r} e^{-\beta V_{ext}} \right)^N \equiv [V_{eff}(\beta)]^N, \quad (1.5)$$

definimos el volumen efectivo como

$$V_{eff}(\beta) \equiv \int d\vec{r} e^{-\beta V_{ext}} \quad (1.6)$$

el cual es una función de la temperatura. Más adelante demostraremos que

$$V_{eff} \equiv \mathcal{V} \zeta(\beta) \quad (1.7)$$

donde \mathcal{V} es el volumen generalizado e introducimos en esta tesis la función zeta $\zeta(\beta)$, una función intensiva de la trampa y de sus propiedades.

Conjuntando lo anterior, la función de partición es

$$Z(T, \mathcal{V}, N) = \frac{1}{N!} \left(\frac{V_{eff}}{\lambda^3} \right)^N. \quad (1.8)$$

La energía libre de Helmholtz está definida por [21]

$$F(T, \mathcal{V}, N) = -kT \log Z(T, \mathcal{V}, N). \quad (1.9)$$

Sustituimos la función de partición encontrada en la definición anterior la cual nos da la siguiente expresión

$$F(T, \mathcal{V}, N) = -kT \left[-\log(N!) + N \log \left(\frac{V_{eff}}{\lambda^3} \right) \right]. \quad (1.10)$$

Tomando en cuenta que el sistema es macroscópico, es decir que el número de partículas es grande, podemos usar la aproximación de Stirling [24] que dice que para una ν grande

$$\log(\nu!) = \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \log \nu - \nu + \frac{1}{2} \log(2\pi) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\nu}\right). \quad (1.11)$$

Usando la aproximación de Stirling la energía libre de Helmholtz toma la forma

$$F(T, \mathcal{V}, N) = -kT \left[N \log \left(\frac{V_{eff}}{\lambda^3} \right) - \left(N + \frac{1}{2} \right) \log N + N - \frac{1}{2} \log(2\pi) - \dots \right] \quad (1.12)$$

y la energía libre de Helmholtz por partícula es

$$\frac{F(T, \mathcal{V}, N)}{N} = -kT \left[\log \left(\frac{V_{eff}}{N\lambda^3} \right) + 1 - \left(\frac{1}{2N} \right) \log N - \frac{1}{2N} \log(2\pi) - \dots \right]. \quad (1.13)$$

La energía libre de Helmholtz representa un potencial termodinámico que debe cumplir con ser extensivo, es decir, debe ser una función homogénea de primer grado en N . Por lo cual el cociente F/N (ecuación 1.13) debe ser intensivo; sin embargo, esto no sucede ya que el lado derecho de la ecuación (1.13) depende de N .

Ahora tomamos el límite termodinámico a una temperatura dada, incrementando el número de partículas. El término

$$\log \frac{V_{eff}}{N\lambda^3} \quad (1.14)$$

diverge, a menos que $V_{eff} \rightarrow \infty$. Esto significa que el límite termodinámico es cuando $V_{eff} \rightarrow \infty$, $N \rightarrow \infty$ pero la densidad $\rho = N/V_{eff}$ es constante, es decir

$$\lim_{V_{eff} \rightarrow \infty, N \rightarrow \infty} \frac{F}{N} = -kT \left[\log \left(\frac{V_{eff}}{N\lambda^3} \right) + 1 \right]. \quad (1.15)$$

Hemos encontrado un potencial termodinámico que cumple con la primera y segunda ley de la termodinámica al ser extensivo y una función homogénea de primer grado. Cabe notar que el límite se realiza sobre la energía libre de Helmholtz por partícula ya que esta cantidad debe ser intensiva y finita.

Esta expresión se cumple para cualquier gas confinado en un potencial $V_{ext}(\vec{r})$ tal que la integral de la ecuación (1.6) sea finita. A continuación veremos los ejemplos para un gas en un potencial armónico y cuadrupolar y con esto encontraremos el volumen generalizado \mathcal{V} así como la función $\zeta(\beta)$ correspondiente a cada potencial.

1.2.1. Volumen generalizado y límite termodinámico para un gas confinado en un potencial armónico

Para un gas confinado en un potencial armónico el volumen deja de estar asociado a un confinamiento material, por lo que la densidad del gas es inhomogénea y el potencial concentra a la mayor parte del gas en una región del espacio. Definimos la relación entre el volumen que ocupa el gas y la variable termodinámica asociada como

$$V_{eff} \equiv \mathcal{V}\zeta(\beta) \quad (1.16)$$

lo cual mencionamos con anterioridad. En esta sección encontraremos la energía libre de Helmholtz para un gas clásico confinado en un potencial armónico y la variable termodinámica asociada al volumen.

Al tomar el potencial externo armónico

$$V_{ext}(\vec{r}) = \frac{m}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2), \quad (1.17)$$

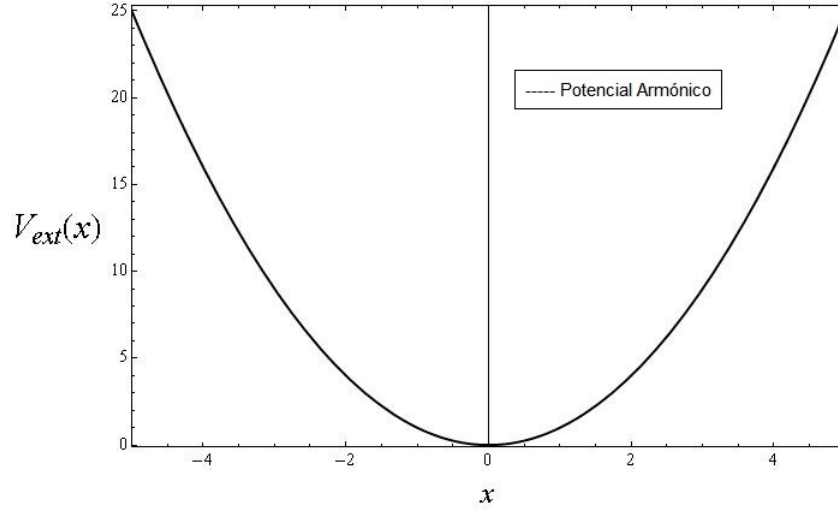


Figura 1.1: Se muestra el potencial armónico (ecuación 1.17) para una dimensión y $\omega_x = 1$.

con ω_x , ω_y y ω_z los parámetros de la trampa en los ejes x , y y z cartesianos, se obtiene la función de partición

$$Z(T, \mathcal{V}, N) = \frac{1}{h^{3N} N!} \int d^N \vec{r} d^N \vec{p} e^{-\beta \left[\sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \frac{m}{2} (\sum_{i=1}^N \omega_x^2 x_i^2 + \omega_y^2 y_i^2 + \omega_z^2 z_i^2) \right]}. \quad (1.18)$$

La integral de los momentos da un término λ^{-3N} , mientras que la parte de las coordenadas es

$$\left(\int d\vec{r} e^{-\beta V_{ext}} \right)^N = \left[\left(\frac{2\pi}{m\beta} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{\omega_x \omega_y \omega_z} \right]^N = \left[\left(\frac{2\pi}{m\beta} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{\omega^3} \right]^N, \quad (1.19)$$

y el volumen efectivo es

$$V_{eff} = \int d\vec{r} e^{-\beta V_{ext}} = \left(\frac{2\pi}{m\beta} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{\omega^3}, \quad (1.20)$$

donde $\omega^3 \equiv (\omega_x \omega_y \omega_z)$ [14, 20, 25].

Usando el mismo argumento de la sección anterior, la condición para que F/N sea finita es tomar el límite $N \rightarrow \infty$, $V_{eff} \rightarrow \infty$, manteniendo el cociente N/V_{eff} y

la temperatura T constantes, obtenemos

$$\lim_{V_{eff} \rightarrow \infty, N \rightarrow \infty} \frac{F}{N} = -kT \left[\log \left(\frac{V_{eff}}{N\lambda^3} \right) + 1 \right] \quad (1.21)$$

en este caso el límite termodinámico se cumple cuando

$$V_{eff} = \left[\left(\frac{2\pi}{m\beta} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{\omega^3} \right] \gg N\lambda^3 \quad y \quad \frac{V_{eff}}{N} = \text{constante}. \quad (1.22)$$

Dado que m es el valor de la masa de las partículas la cual se considera fija, 2π es una constante y la temperatura es intensiva, se utiliza la variable ω^{-3} [14, 25] como variable termodinámica extensiva análoga al volumen para el caso de un potencial armónico. Las variables que caracterizan a cada potencial de confinamiento son los parámetros ω_x , ω_y y ω_z , que pueden ser variados según el experimento. Podemos identificar a estos parámetros de la trampa con el volumen generalizado [14]

$$\mathcal{V} = \frac{1}{\omega^3} \quad (1.23)$$

como la variable extensiva asociada al volumen. Además definimos la función $\zeta(\beta)$ para el potencial armónico como

$$\zeta(\beta) = \left(\frac{2\pi}{m\beta} \right)^{\frac{3}{2}}. \quad (1.24)$$

Por lo tanto, el límite termodinámico para un sistema con un potencial externo armónico es

$$N \rightarrow \infty \quad \mathcal{V} \rightarrow \infty \quad \frac{N}{\mathcal{V}} = \text{cte}. \quad (1.25)$$

Esto se generaliza para cualquier potencial externo que confina a un gas y al cual se caracteriza con el volumen generalizado \mathcal{V} .

1.2.2. Volumen efectivo V_{eff} y volumen generalizado \mathcal{V}

Cabe notar que el volumen efectivo V_{eff} no es una variable termodinámica independiente, ya que depende explícitamente de la temperatura T y del volumen generalizado \mathcal{V} , sin embargo nos da una medida del volumen que ocupa físicamente el gas en el espacio. También podemos calcular el volumen aproximado que ocupa el gas usando la distribución de probabilidad de las posiciones. Esta distribución es gaussiana, el primer momento da cero y el segundo momento es el cuadrado de la desviación estándar. Sacando la raíz del segundo momento obtendremos un radio aproximado de la esfera que ocupa el gas. Compararemos a continuación este volumen con el volumen efectivo que obtenemos de la función de partición Z .

La definición para el valor esperado de una función f es [24],

$$\langle f \rangle = \frac{\int d\vec{r} d\vec{p} f(\vec{r}, \vec{p}) e^{-\beta H(\vec{r}, \vec{p})}}{\int d\vec{r} d\vec{p} e^{-\beta H(\vec{r}, \vec{p})}}, \quad (1.26)$$

Calculamos el segundo momento para una partícula confinada en un potencial armónico, cuyo Hamiltoniano es $H(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{m}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)$,

$$\langle |\vec{r}|^2 \rangle = \frac{\int d\vec{r} d\vec{p} |\vec{r}|^2 e^{-\beta \left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{m}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \right]}}{\int d\vec{r} d\vec{p} e^{-\beta \left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{m}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \right]}} = \frac{3kT}{m\omega^2}, \quad (1.27)$$

por lo que el volumen V del gas será aproximadamente

$$V \cong \frac{4\pi}{3} \langle |\vec{r}|^2 \rangle^{\frac{3}{2}} \quad \implies \quad V \cong \frac{4\pi}{3} \left(\frac{3kT}{m\omega^2} \right)^{\frac{3}{2}}. \quad (1.28)$$

Comparando la ecuación anterior con la ecuación del volumen efectivo V_{eff} (1.22), encontramos que difieren por un factor de $\sqrt{\frac{\pi}{6}}$. Identificamos el volumen efectivo V_{eff} con el volumen que ocupa el gas físicamente V . Sin embargo, la variable termodinámica apropiada es el volumen generalizado \mathcal{V} al ser independiente, la cual es proporcional al volumen efectivo V_{eff} .

1.3. Gas ideal clásico en una trampa cuadrupolar lineal

Continuando con el trabajo de Romero-Rochín [19] del estudio de gases atrapados en un potencial armónico, en la presente tesis estudiaremos los gases en una trampa cuadrupolar lineal semejante a la que usa el grupo de Bagnato *et al.* [26] cuyo laboratorio se encuentra en la Universidad de São Paulo.

En esta sección definiremos el volumen generalizado de una trampa cuadrupolar lineal siguiendo el desarrollo de la sección anterior y con esto encontramos el comportamiento termodinámico de una gas ideal clásico en dicha trampa.

Tenemos un gas clásico con N partículas confinado en un potencial cuadrupolar lineal [27, 28]

$$V_{ext}(\vec{r}) = \sqrt{(A_x x)^2 + (A_y y)^2 + (A_z z)^2}, \quad (1.29)$$

con A_x , A_y y A_z los parámetros asociados a la trampa en coordenadas cartesianas, cuya función de partición es

$$Z(T, \mathcal{V}, N) = \frac{1}{h^{3N} N!} \int d^N \vec{r} d^N \vec{p} e^{-\beta \left[\sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N \sqrt{(A_x x_i)^2 + (A_y y_i)^2 + (A_z z_i)^2} \right]}, \quad (1.30)$$

y definimos

$$A^3 = (A_x A_y A_z), \quad (1.31)$$

que está asociada con el campo magnético que genera el potencial de confinamiento [26]. Calculamos el volumen efectivo llevando a cabo la misma identificación que en

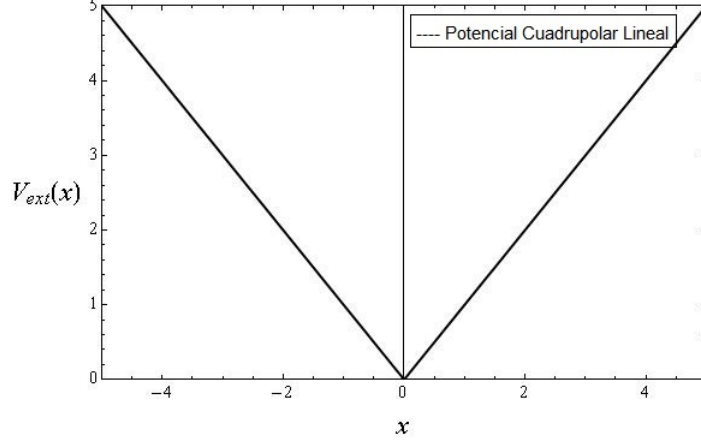


Figura 1.2: Se muestra el potencial cuadrupolar lineal (ecuación 1.29) para una dimensión y $A_x = 1$.

la sección previa,

$$V_{eff} = \frac{8\pi}{(\beta A)^3}, \quad (1.32)$$

en este caso definimos la variable termodinámica asociada a la trampa como $\mathcal{V} = A^{-3}$ y la función $\zeta(\beta) = \frac{8\pi}{\beta^3}$.

En el límite termodinámico encontramos que la función libre por partícula tiene la forma

$$\frac{F}{N}(T, \mathcal{V}, N) = -kT \left(\log \left[\left(\frac{kT}{\lambda} \right)^3 \frac{\mathcal{V}}{N} 8\pi \right] + 1 \right). \quad (1.33)$$

Y utilizando las siguientes identidades termodinámicas (apéndice A.2)

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z(T, \mathcal{V}, N), \quad (1.34)$$

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{\mathcal{V}, N}, \quad \mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{\mathcal{V}, T}, \quad C_{\mathcal{V}} = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{\mathcal{V}, N} \quad (1.35)$$

deducimos: la energía interna E , la capacidad calorífica a *volumen cuadrupolar* constante $C_{\mathcal{V}}$, la entropía S y el potencial químico μ

$$E(T, \mathcal{V}, N) = \frac{9}{2}NkT \quad (1.36a)$$

$$C_{\mathcal{V}}(T, \mathcal{V}, N) = \frac{9}{2}Nk \quad (1.36b)$$

$$S(T, \mathcal{V}, N) = Nk \left(\log \left[\left(\frac{kT}{\lambda} \right)^3 \frac{\mathcal{V}}{N} 8\pi \right] + \frac{11}{2} \right) \quad (1.36c)$$

$$\mu(T, \mathcal{V}, N) = -kT \log \left[\left(\frac{kT}{\lambda} \right)^3 \frac{\mathcal{V}}{N} 8\pi \right]. \quad (1.36d)$$

Hemos encontrado un potencial termodinámico, la energía libre de Helmholtz con el cual calculamos toda la termodinámica de un sistema clásico ideal en un potencial externo de confinamiento.

1.4. Presión generalizada

Para el caso de un gas en un potencial externo definimos el *volumen generalizado* \mathcal{V} a través de la relación [14, 19, 20]

$$\mathcal{V} = \frac{1}{\zeta(\beta)} \int e^{-\beta V_{ext}(\vec{r})} d\vec{r} \quad (1.37)$$

donde la integral del lado derecho es el volumen efectivo V_{eff} y la función $\zeta(\beta)$ dependerá de la forma del potencial externo y la temperatura T . Como ejemplos de volúmenes generalizados tenemos

$$\mathcal{V} = \begin{cases} V & \text{Paredes rígidas.} \\ \omega^{-3} = (\omega_x \omega_y \omega_z)^{-1} & \text{Potencial armónico.} \\ A^{-3} = (A_x A_y A_z)^{-1} & \text{Potencial cuadrupolar.} \end{cases} \quad (1.38)$$

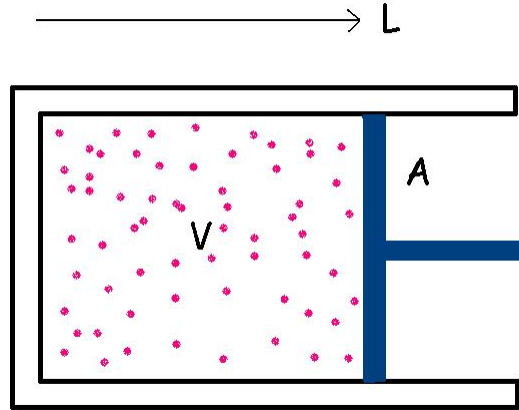


Figura 1.3: Definición de la presión.

y la función zeta para cada caso es,

$$\zeta(\beta) = \begin{cases} 1 & \text{Paredes rígidas.} \\ \left(\frac{2\pi}{\beta m}\right)^{\frac{3}{2}} & \text{Potencial armónico.} \\ \frac{8\pi}{\beta^3} & \text{Potencial cuadrupolar.} \end{cases} \quad (1.39)$$

En la sección (1.2) comprobamos que el volumen generalizado cumple con ser una variable termodinámica extensiva. Su sentido físico tiene que ver con cómo se confina el gas, cómo podemos concentrarlo en una pequeña región del espacio o al contrario, hacerlo muy diluido al variar dicha variable. Esto lo podremos conectar más adelante con la compresibilidad, pero primero estudiaremos su variable canónica conjugada, la presión generalizada.

Un fluido siempre tiene presión como resultado de muchas colisiones moleculares. A continuación usaremos la figura (1.3) para definir la presión siguiendo el procedimiento de Schwabl [29].

Un pistón móvil que se encuentra a una distancia L desde el origen del sistema de coordenadas, permite variaciones en el volumen $V = LA$, donde A es la sección transversal del pistón. Las paredes del contenedor están representadas por un potencial de paredes rígidas y la coordenada espacial de la i -ésima partícula que se mueve perpendicular al pistón es x_i , por lo cual el potencial total de la pared está dado por

$$V_{piston} = \sum_i v(x_i - L) = \begin{cases} 0 & 0 < x_i < L \\ \infty & x_i \geq L \end{cases} \quad (1.40)$$

de modo que las partículas del gas impiden que el piston lo comprima.

Schwabl define a \mathcal{F}_i como la fuerza que ejerce cada molécula sobre el pistón, encontrando que la fuerza total es

$$\mathcal{F} = \sum_i \mathcal{F}_i = \sum_i -\frac{\partial v}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial L} \sum_i v(x_i - L) = \frac{\partial H}{\partial L} \quad (1.41)$$

donde H es el Hamiltoniano del sistema.

La presión se define como el promedio de la fuerza por unidad de área que las moléculas ejercen sobre una pared, en este caso sobre el pistón [29]

$$P \equiv -\frac{\langle \mathcal{F} \rangle}{A} = -\left\langle \frac{\partial H}{\partial V} \right\rangle. \quad (1.42)$$

Generalizamos el resultado de Schwabl para un gas confinado en un potencial externo $V_{ext}(\vec{r})$ tal que la presión la definimos en términos del Hamiltoniano como

$$\mathcal{P} = -\left\langle \frac{\partial H}{\partial \mathcal{V}} \right\rangle = -\left\langle \frac{\partial}{\partial \mathcal{V}} \sum_i V_{ext}(\vec{r}_i) \right\rangle. \quad (1.43)$$

Para un gas confinado en una trampa cuadrupolar, encontramos que la presión es

$$\mathcal{P} = - \left\langle \frac{\partial}{\partial \mathcal{V}} \sum_i \sqrt{(A_x x_i)^2 + (A_y y_i)^2 + (A_z z_i)^2} \right\rangle, \quad (1.44)$$

la derivada es con respecto al volumen generalizado \mathcal{V} , sin embargo no se cambiarán las proporciones del gas; puedo definir $A_z = A$, $A_y = \gamma A$ y $A_x = \alpha A$, por lo cual el volumen generalizado es

$$\mathcal{V} = \frac{1}{A_x A_y A_z} = \frac{1}{\alpha \gamma A^3} \quad (1.45)$$

y la presión generalizada es la derivada parcial con respecto al volumen generalizado \mathcal{V} del potencial que depende de la forma

$$\mathcal{P} = - \left\langle \frac{\partial A}{\partial \mathcal{V}} \sum_i \sqrt{(\alpha x_i)^2 + (\gamma y_i)^2 + (z_i)^2} \right\rangle, \quad (1.46)$$

la derivada se reduce a

$$\frac{\partial A}{\partial \mathcal{V}} = \alpha \gamma \frac{\partial (A^{-3})^{-\frac{1}{3}}}{\partial \left(\frac{1}{A^3}\right)} = -\frac{1}{3} (\alpha \gamma A^3) A = -\frac{1}{3 \mathcal{V}} A \quad (1.47)$$

y la presión es igual a

$$\mathcal{P} = \frac{1}{3 \mathcal{V}} \left\langle \sum_i \sqrt{(A_x x_i)^2 + (A_y y_i)^2 + (A_z z_i)^2} \right\rangle. \quad (1.48)$$

Por otro lado podemos identificar

$$\begin{aligned} \vec{r} \cdot \nabla V_{ext}(\vec{r}) &= \sum_{j=1,2,3} x_j \partial_{x_j} V_{ext}(\vec{r}) = \sum_{j=1,2,3} x_j \frac{2x_j A_j^2}{2\sqrt{(A_x x)^2 + (A_y y)^2 + (A_z z)^2}} \\ &= \sqrt{(A_x x)^2 + (A_y y)^2 + (A_z z)^2}, \end{aligned} \quad (1.49)$$

con $x_1 = x$, $x_2 = y$ y $x_3 = z$.

Al conjuntar la ecuación (1.48) y (1.49) deducimos que la presión generalizada \mathcal{P} es

$$\mathcal{P} = \left\langle \frac{1}{3\mathcal{V}} \sum_i \vec{r}_i \cdot \nabla_i V_{ext}(\vec{r}_i) \right\rangle. \quad (1.50)$$

Reescribimos la presión generalizada como

$$\mathcal{P} = \left\langle \frac{1}{3\mathcal{V}} \int d\vec{r} \sum_i^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \vec{r}_i \cdot \nabla_i V_{ext}(\vec{r}_i) \right\rangle. \quad (1.51)$$

Introduciendo la *densidad de partículas* $\rho(\vec{r})$ en la posición \vec{r} también llamada *perfil de densidad*

$$\rho(\vec{r}) = \left\langle \sum_i^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \right\rangle \quad (1.52)$$

la presión generalizada se escribe como

$$\mathcal{P} = \frac{1}{3\mathcal{V}} \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) \vec{r} \cdot \nabla V_{ext}(\vec{r}). \quad (1.53)$$

Por otro lado, usando la identidad [6]

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \mathcal{V}} \right)_{N,T} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial \mathcal{V}} \right\rangle \quad (1.54)$$

obtenemos la *presión generalizada* [14, 19, 20], la cual es la variable intensiva conjugada al volumen generalizado \mathcal{V} y se obtiene como

$$\mathcal{P} = - \left(\frac{\partial F}{\partial \mathcal{V}} \right)_{N,T}, \quad (1.55)$$

donde F es la energía libre de Helmholtz, pero su sentido físico tiene que ver con las fuerzas externas que actúan sobre el gas. En el caso de un gas ideal clásico en un potencial externo, encontramos que la ecuación de estado tiene la forma

$$\mathcal{P} = \frac{kTN}{\mathcal{V}}. \quad (1.56)$$

La ecuación (1.53) permite calcular la presión termodinámica de un gas confinado en una trampa descrito por un potencial $V_{ext}(\vec{r})$, una vez que conocemos el perfil de densidad. En la última parte de la presente tesis se realizará el cálculo para obtener el perfil de densidad en un modelo de campo medio. El perfil de densidad también se puede obtener de los experimentos [12, 13, 30, 31]. La relevancia de esta ecuación es que podemos obtener la ecuación de estado $\mathcal{P} = \mathcal{P}(\mathcal{V}/N, T)$ teórica o experimentalmente.

A partir de la definición termodinámica de la presión \mathcal{P} y de la ecuación (1.53), se observa que el producto $\mathcal{P}\mathcal{V}$ es igual a $(1/3)$ del promedio de la fuerza externa, según el Teorema del Virial. Para mostrar el significado físico que tiene la presión generalizada, recordemos la ley de Pascal [32]

$$\nabla \cdot \tilde{P}(\vec{r}) = -\rho(\vec{r})\nabla V_{ext}(\vec{r}), \quad (1.57)$$

donde $\tilde{P}(\vec{r})$ es el tensor de presiones del fluido.

Uno espera que el tensor de la presión sea función de la posición, $\tilde{P}(\vec{r}) = p(\vec{r})\mathbf{1}$, donde $\mathbf{1}$ es el tensor unidad y $p(\vec{r})$ la presión hidrostática local. Usando el Teorema del Virial para fuerzas externas [33] del lado derecho de la ecuación (1.57) y posteriormente integrando por partes encontramos

$$\begin{aligned} \int \text{Tr} \tilde{P} d\vec{r} &= \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) \vec{r} \cdot \nabla V_{ext}(\vec{r}) \\ &= 3\mathcal{P}\mathcal{V}. \end{aligned} \quad (1.58)$$

Es decir, la presión generalizada \mathcal{P} de un gas inhomogéneo confinado en un potencial externo, desempeña el mismo papel que la presión hidrostática p en un líquido homogéneo; es la cantidad responsable del equilibrio mecánico en el fluido.

1.5. Gas ideal cuántico de bosones en una trampa cuadrupolar lineal

Una vez que identificamos las variables generalizadas de un gas en un potencial externo de confinamiento, podemos calcular sus potenciales termodinámicos como la energía libre de Helmholtz en la sección (1.3), o el gran potencial para el caso de un gas ideal cuántico, como lo haremos a continuación.

Consideremos N partículas de un gas ideal de Bosones tal que su Hamiltoniano tiene la forma

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \hat{V}_{ext}(\hat{r}_i) \right), \quad (1.59)$$

y su ecuación de Schrödinger es

$$\hat{H}|\Psi_{\{k\}}\rangle = \varepsilon_{\{k\}}|\Psi_{\{k\}}\rangle, \quad (1.60)$$

donde $\varepsilon_{\{k\}}$ son los niveles de energía de una partícula correspondientes al estado $\{k\}$ y, por convención, la energía del estado base se define como cero $\varepsilon_{\{0\}} \equiv 0$. Más adelante justificaremos este punto.

El número de ocupación promedio de partículas $n_{\{k\}}$ en el estado $\{k\}$ es

$$n_{\{k\}} = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_{\{k\}} - \alpha} - 1}, \quad (1.61)$$

donde $\alpha = \mu/kT$. Dado que $n_{\{k\}}$ es un número de partículas, es definido positivo por lo cual el potencial químico μ y α son negativas o iguales a cero.

En el límite termodinámico podemos calcular la densidad de estados como la integral sobre el volumen en el espacio fase de la hipersuperficie de energía ε . Para un potencial de confinamiento $V_{ext}(\vec{r})$ la densidad de estados está dada por [9]

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_{\Gamma^*} \sqrt{\varepsilon - V_{ext}(\vec{r})} d\vec{r}, \quad (1.62)$$

con Γ^* el volumen de la hipersuperficie de energía ε . El número total de partículas es

$$N = \int_0^\infty \frac{\rho(\varepsilon)}{e^{\beta\varepsilon - \alpha} - 1} d\varepsilon. \quad (1.63)$$

Dada la densidad de estados podemos calcular la gran función de partición y obtener todas las cantidades termodinámicas. El comportamiento termodinámico depende fuertemente de la forma del potencial de confinamiento. Esto se refleja en la densidad de estados que es función de la energía ε como

$$\rho(\varepsilon) \sim \begin{cases} \varepsilon^{\frac{1}{2}} & \text{Paredes rígidas.} \\ \varepsilon^2 & \text{Potencial armónico.} \\ \varepsilon^{\frac{7}{2}} & \text{Potencial cuadrupolar.} \end{cases} \quad (1.64)$$

A continuación calcularemos las variables termodinámicas para un gas ideal cuántico en un potencial cuadrupolar, para ello calcularemos primero el perfil de densidad para sustituirla en el gran potencial.

Para un potencial cuadrupolar lineal, la densidad de estados se obtiene al sustituir el potencial de confinamiento (ecuación 1.29) en la expresión para el perfil de densidad (ecuación 1.62)

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_{\Gamma^*} dx dy dz \sqrt{\varepsilon - \sqrt{(A_x x)^2 + (A_y y)^2 + (A_z z)^2}}, \quad (1.65)$$

realizando dos cambios de variables, $A_x x \rightarrow x'$ y $\sqrt{x'^2 + y'^2 + z'^2} \rightarrow r$, la integral que se debe resolver es

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2\pi(2m)^{3/2}\mathcal{V}}{h^3} \int_{\Gamma'^*} dr 4\pi r^2 \sqrt{\varepsilon - r}, \quad (1.66)$$

donde el volumen generalizado es

$$\mathcal{V} = \frac{1}{A^3} = \frac{1}{A_x A_y A_z}, \quad (1.67)$$

como lo definimos anteriormente.

Calculando la integral y simplificando los términos, encontramos la expresión para la densidad de estados:

$$\rho(\varepsilon) = \varepsilon^{\frac{7}{2}} \left(\frac{2m\pi}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{8\pi\mathcal{V}}{\Gamma(\frac{9}{2})}. \quad (1.68)$$

Ahora obtendremos el gran potencial sustituyendo el perfil de densidad en la expresión [6]

$$\Omega(T, \mathcal{V}, \mu) = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} Z(T, \mathcal{V}, N) \quad (1.69)$$

$$= kT \int_0^{\infty} d\varepsilon \rho(\varepsilon) \log(1 - e^{\alpha - \beta\varepsilon}), \quad (1.70)$$

la cual queda como

$$\Omega(T, \mathcal{V}, \mu) = kT \int_0^{\infty} d\varepsilon \varepsilon^{\frac{7}{2}} \left(\frac{2m\pi}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{8\pi\mathcal{V}}{\Gamma(\frac{9}{2})} \log(1 - e^{\alpha - \beta\varepsilon}) \quad (1.71)$$

$$= -kT \frac{8\pi\mathcal{V}}{\beta^3} \frac{1}{\lambda^3} g_{11/2}(\alpha) \quad (1.72)$$

donde $g_n(\alpha)$ es la función de Bose

$$g_n(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} \frac{x^{n-1}}{e^{-\alpha+x} - 1} dx. \quad (1.73)$$

Sus propiedades se discuten en el apéndice B.2.

El gran potencial es un potencial termodinámico que permite calcular toda la termodinámica del gas de bosones, usando las identidades termodinámicas para la entropía S , presión generalizada \mathcal{P} , número de partículas N , compresibilidad isotérmica κ_T , energía interna E y la capacidad calorífica $C_{\mathcal{V}}$ [6]

$$S = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{\mathcal{V}, \mu} \quad \mathcal{P} = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mathcal{V}} \right)_{T, \mu} \quad N = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, \mathcal{V}} \quad (1.74)$$

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log \Omega(T, \mathcal{V}, \mu) \quad (1.75)$$

$$C_{\mathcal{V}} = T \left[\left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{\mu, \mathcal{V}} - \left(\frac{\partial S}{\partial \mu} \right)_{T, \mathcal{V}} \frac{\left(\frac{\partial N}{\partial T} \right)_{\mu, \mathcal{V}}}{\left(\frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{T, \mathcal{V}}} \right] \quad (1.76)$$

$$\kappa_T = -\frac{1}{\mathcal{V}} \left[\left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \mathcal{V}} \right)_{T, \mu} - \left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \mu} \right)_{T, \mathcal{V}} \frac{\left(\frac{\partial N}{\partial \mathcal{V}} \right)_{\mu, T}}{\left(\frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{T, \mathcal{V}}} \right]^{-1}. \quad (1.77)$$

Identificando las variables termodinámicas del gas cuántico $P \equiv \mathcal{P}$ y $V \equiv \mathcal{V}$ encontramos las expresiones algebraicas de las variables termodinámicas de un gas cuántico de bosones en una trampa cuadrupolar:

$$S(T, \mathcal{V}, \alpha) = Nk \left[\frac{11}{2} \frac{g_{11/2}(\alpha)}{g_{9/2}(\alpha)} - \alpha \right] \quad (1.78a)$$

$$\mathcal{P}(T, \mathcal{V}, \alpha) = kT \frac{8\pi}{\beta^3 \lambda^3} g_{11/2}(\alpha) \quad (1.78b)$$

$$N(T, \mathcal{V}, \alpha) = \frac{(kT)^3 \mathcal{V} 8\pi}{\lambda^3} g_{9/2}(\alpha) \quad (1.78c)$$

$$E(T, \mathcal{V}, \alpha) = \frac{9}{2} (kT)^{\frac{11}{2}} \mathcal{V} 8\pi \left(\frac{2\pi m}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} g_{11/2}(\alpha) \quad (1.78d)$$

$$C_{\mathcal{V}}(T, \mathcal{V}, \alpha) = \frac{9}{2} Nk \left[\frac{11}{2} \frac{g_{11/2}(\alpha)}{g_{9/2}(\alpha)} - \frac{9}{2} \frac{g_{9/2}(\alpha)}{g_{7/2}(\alpha)} \right] \quad (1.78e)$$

$$\kappa_T(T, \mathcal{V}, \alpha) = \frac{\mathcal{V}}{NkT} \frac{g_{7/2}(\alpha)}{g_{9/2}(\alpha)}. \quad (1.78f)$$

De las expresiones (1.78d, 1.78c, 1.78e) deducimos las siguientes relaciones entre las variables termodinámicas y la energía. Primero encontramos la energía que se puede escribir como

$$E = \frac{9}{2} NkT \frac{g_{11/2}(\alpha)}{g_{9/2}(\alpha)} \quad (1.79)$$

y la presión

$$\mathcal{P} = \frac{NkT}{\mathcal{V}} \frac{g_{11/2}(\alpha)}{g_{9/2}(\alpha)}. \quad (1.80)$$

Combinando las dos últimas expresiones, obtenemos la relación entre la energía, la presión y el volumen generalizados:

$$E = \frac{9}{2} \mathcal{P} \mathcal{V}. \quad (1.81)$$

Para temperaturas altas $T \gg 1$, *i.e.* en el límite clásico, todas las funciones de Bose se aproximan por $g_n(\alpha) \approx \exp(\alpha)$ (apéndice B.2) por lo que recuperamos: la ecuación de estado (ecuación 1.56), la energía y la capacidad calorífica (ecuación 1.36) desde un enfoque clásico.

1.5.1. Condensación de Bose-Einstein

En esta sección estudiaremos la ecuación del número de partículas de un gas de bosones en una trampa cuadrupolar, la cual dedujimos en la sección anterior. Este análisis se puede encontrar en los libros de Física Estadística modernos para el caso de un gas en una trampa de paredes rígidas [21, 6, 34]. La condensación de Bose-Einstein en un gas ideal se presenta únicamente para sistemas, en los cuales, la ecuación del número de partículas contiene una función de Bose $g_n(\alpha)$ con subíndice n mayor a uno. Esto, como lo veremos más adelante implica que la función de Bose converge para $\alpha = 0$, con una temperatura distinta a cero, lo cual expone teóricamente la condensación.

Dado un sistema de N partículas no interactuantes que cumplen con la estadística de Bose-Einstein, en una trampa cuadrupolar, la ecuación del número de partículas

está dada por

$$N(T, \mathcal{V}, \alpha) = \frac{(kT)^3 \mathcal{V} 8\pi}{\lambda^3} g_{9/2}(\alpha). \quad (1.82)$$

Supongamos que nos encontramos en el laboratorio y somos capaces de mantener fija la variable \mathcal{V} . Además estamos a una temperatura tal que la longitud térmica de de Broglie es del orden de: $\sqrt[3]{V_{eff}}$ de dicha trampa. Usando un dispositivo imaginario somos capaces de disminuir a nuestra voluntad la temperatura, dejando fijas las variables termodinámicas \mathcal{V} y N . Bajo estas condiciones el número de partículas es proporcional a la función de Bose y a la temperatura con una potencia de 9/2

$$N \propto T^{\frac{9}{2}} g_{9/2}(\alpha). \quad (1.83)$$

Del lado izquierdo de la ecuación tenemos una constante y del lado derecho estamos disminuyendo la temperatura. Para que la ecuación se mantenga es necesario que la función de Bose aumente. La función de Bose es una función creciente como se observa en la figura (1.4), esto implica la siguiente afirmación: si $\alpha' > \alpha$, entonces $g_{9/2}(\alpha') > g_{9/2}(\alpha)$. Es decir, al disminuir la temperatura, α debe crecer ó $|\alpha|$ disminuir.

El dominio de la función de Bose es: $(-\infty, 0]$, el máximo valor que puede tomar α es cero y la función de Bose en este caso es: $g_{9/2}(0) \cong 1.05471$. Al continuar disminuyendo la temperatura, alcanzamos una temperatura crítica a la cual $\alpha = 0$ y la ecuación (1.82) toma la forma

$$N = (kT_c)^{\frac{9}{2}} \left(\frac{2\pi m}{h^2} \right) 8\pi \mathcal{V} g_{9/2}(0), \quad (1.84)$$

donde T_c es una temperatura crítica que depende del número de partículas N y el volumen generalizado \mathcal{V} . No sólo se ve afectada esta ecuación, todas las cantidades termodinámicas (ecuación 1.78) dependen de la función de Bose y consecuentemente tienen este valor crítico en la temperatura.

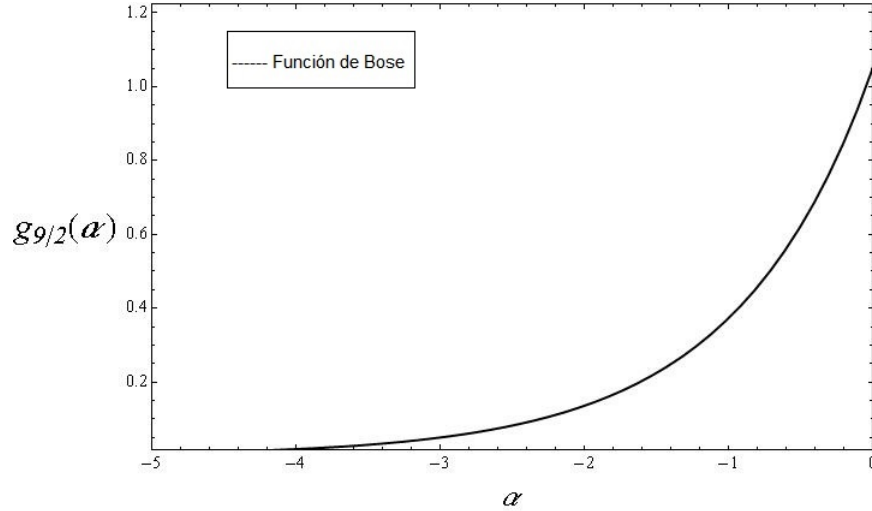


Figura 1.4: Función de Bose, $g_{9/2}(\alpha)$.

En realidad la ecuación (1.82) sólo es válida para temperaturas arriba de T_c , pues el lado derecho da el número de partículas en los estados excitados. Cuando $T < T_c$ el lado derecho disminuye hasta cero cuando $T \rightarrow 0$, por lo tanto el resto de las partículas debe encontrarse en el estado base. Veamos esto con detalle.

Podemos calcular la temperatura crítica a partir de la ecuación anterior

$$T_c = \frac{1}{k} \left(\frac{N}{\mathcal{V}} \frac{1}{g_{9/2}(0) 8\pi} \left[\frac{h^2}{2\pi m} \right]^{\frac{3}{2}} \right)^{\frac{2}{9}}. \quad (1.85)$$

En nuestro laboratorio imaginario la cantidad N/\mathcal{V} se mantiene constante, por lo cual la temperatura está definida para cualesquiera valores que nosotros escojamos. Como la temperatura T_c es distinta a cero, aún podemos seguir bajando la temperatura T y se alcanza una situación en la cual la ecuación (1.82) ya no se cumple.

Recordemos que normalizamos la energía del estado base a cero: $\varepsilon_{000} = 0$. Así, el

número de ocupación promedio del estado base es

$$n_{000} = \frac{1}{e^{-\alpha} - 1}, \quad (1.86)$$

para temperaturas por arriba de la temperatura crítica T_c . Empero la energía del estado base es diferente a cero, en la mayoría de los casos es pequeña [35] y es inversamente proporcional al volumen

$$\varepsilon_{000} \sim \begin{cases} \frac{1}{\mathcal{V}^{2/3}} & \text{Paredes rígidas.} \\ \frac{1}{\mathcal{V}^{1/3}} & \text{Potencial armónico.} \end{cases} \quad (1.87)$$

en general para un potencial de confinamiento, la energía del estado base dependerá del volumen como

$$\varepsilon_{000} \sim \frac{1}{\mathcal{V}^\gamma} \quad (1.88)$$

donde γ dependerá de la forma del potencial, por lo cual al tomar el límite termodinámico $\mathcal{V} \rightarrow \infty$ la energía del estado base tiende a cero $\varepsilon_{000} \rightarrow 0$. Bajo esta consideración es correcto calcular el perfil de densidad como una integral con límite inferior 0. Análogamente para el gran potencial, donde el límite inferior es 0, la integral tiene sentido cuando estamos en el límite termodinámico. Todas las cantidades termodinámicas (ecuación 1.78) no consideran las partículas del estado base. La termodinámica del sistema está definida por las partículas de los estados excitados.

Con estas consideraciones regresemos a nuestro experimento imaginario, cuanto tenemos temperaturas T por debajo de la temperatura crítica T_c .

Como hemos visto, la energía del estado base tiende a cero $\varepsilon_{000} \rightarrow 0$ cuando el volumen aumenta $\mathcal{V} \rightarrow \infty$ en el límite termodinámico, podemos afirmar que bajo estas consideraciones el estado base $\varepsilon_{000} \equiv 0$. Por lo tanto, la ecuación (1.82) no considera las partículas en el estado base, es decir, son partículas que no están en el

condensado, N_{NC}

$$N_{NC} = \frac{(kT)^3 \mathcal{V} 8\pi}{\lambda^3} g_{9/2}(0) \quad T < T_C, \quad (1.89)$$

y este número decrece conforme se baja la temperatura, $N_{NC} < N$. El número de partículas de nuestro sistema se mantiene constante, por lo cual las partículas faltantes deberán estar en el estado base

$$n_{000} = N - N_{NC}. \quad (1.90)$$

La ecuación (1.86) por debajo de la T_c no es físicamente correcta, *la ocupación del estado base para $T < T_c$ es del orden del número de partículas, es decir $N_0 \sim N$* , donde $N_0 \equiv n_{000}$ es el número de partículas que se encuentran en el estado base. Cuando esto sucede tenemos el fenómeno de la condensación de Bose-Einstein.

Para temperaturas mayores a la temperatura crítica, el número de partículas N coincide con el número de partículas en los estados excitados N_{NC} .

Reescribimos la ecuación del número de partículas para una temperatura T por debajo de la temperatura crítica T_c ,

$$N = N_0 + (kT)^{\frac{9}{2}} \mathcal{V} 8\pi \left(\frac{2\pi m}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} g_{9/2}(0), \quad (1.91)$$

y en términos de la fracción de partículas que se encuentran en el condensado con respecto al total

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{9}{2}}, \quad (1.92)$$

que está representada en la figura (1.5).

Para temperaturas por debajo de la T_c , las cantidades termodinámicas se obtienen al sustituir $\alpha = 0$ en las ecuaciones (1.78). La entropía depende del tamaño del gas

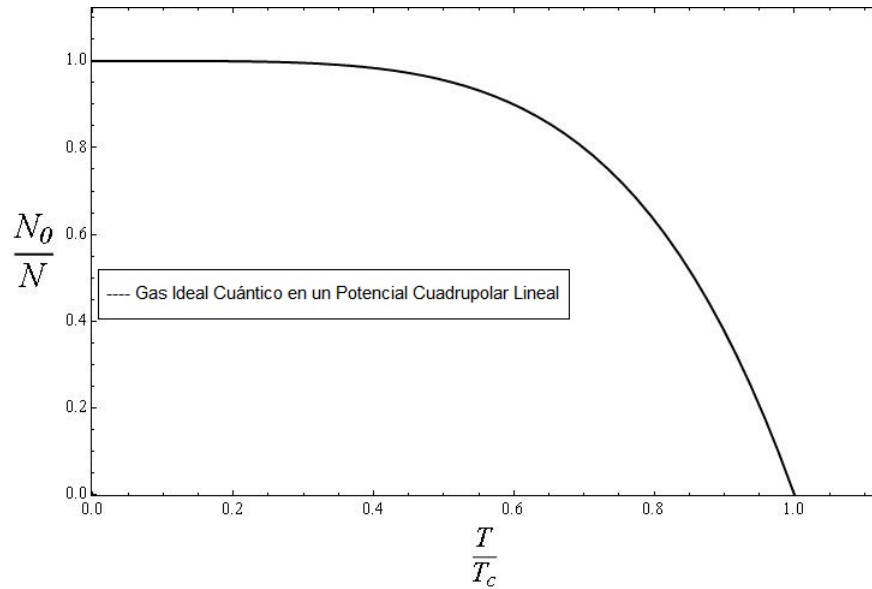


Figura 1.5: Gráfica de la fracción del condensado de un gas ideal de Bose confinado en una trampa cuadrupolar lineal.

y de la temperatura, mientras que la presión sólo depende de la temperatura y es independiente del volumen generalizado y el número de partículas

$$S(T, \mathcal{V}) = Nk \frac{11}{2} \frac{g_{11/2}(0)}{g_{9/2}(0)} \left(\frac{kT}{kT_c} \right)^{\frac{9}{2}}, \quad (1.93a)$$

$$\mathcal{P}(T) = kT \frac{8\pi}{\beta^3 \lambda^3} g_{11/2}(0) = (kT)^{\frac{11}{2}} 8\pi \left(\frac{2\pi m}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} g_{11/2}(0). \quad (1.93b)$$

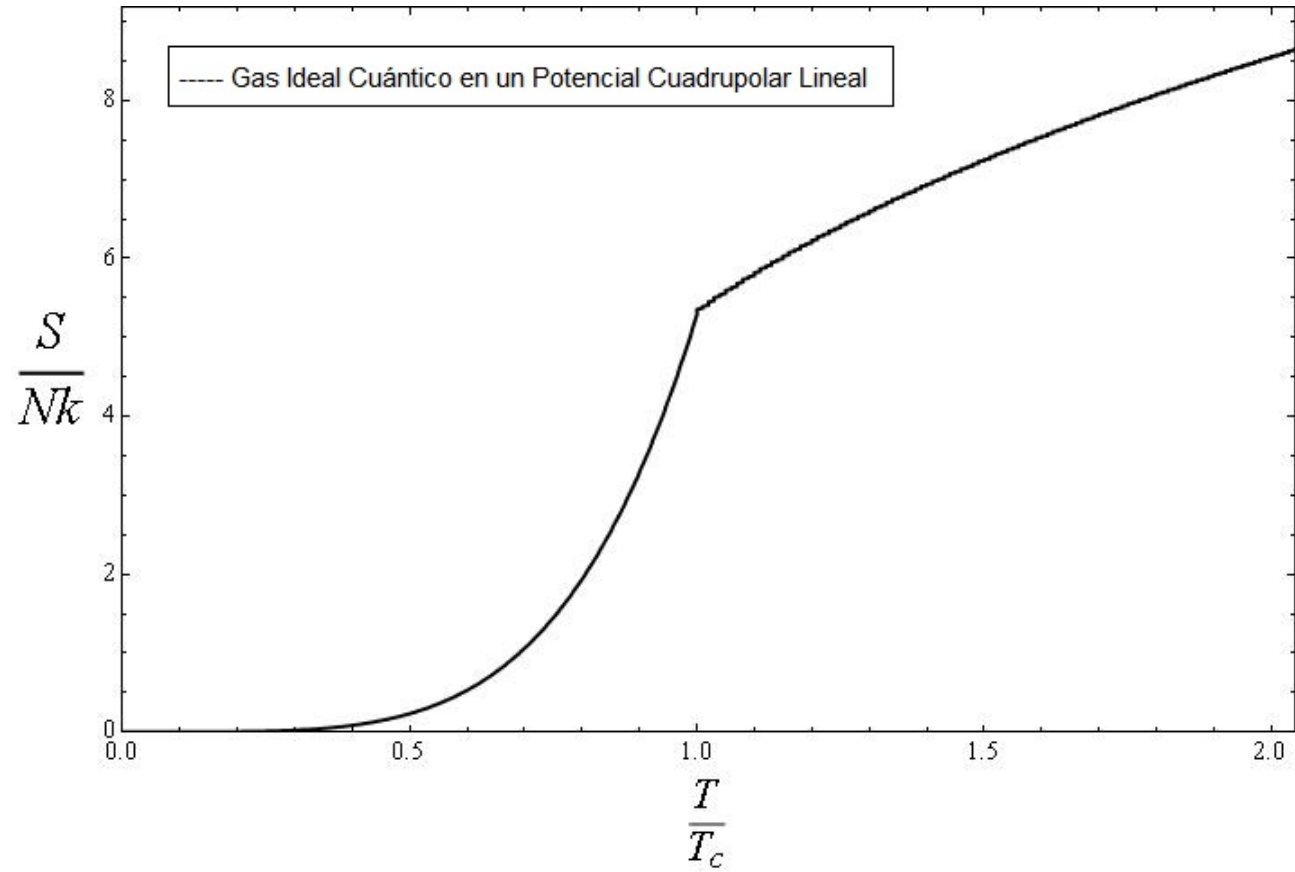


Figura 1.6: Gráfica de la entropía de un gas ideal de Bose confinado en una trampa cuadrupolar lineal.

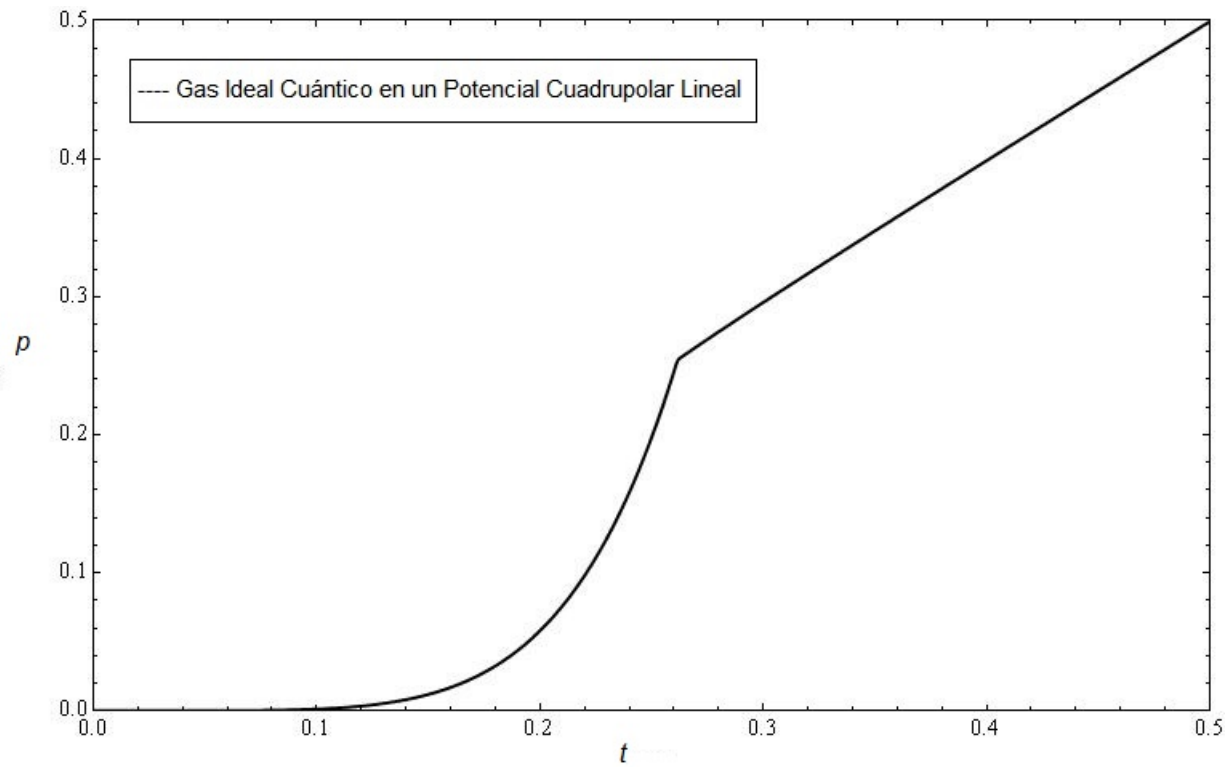


Figura 1.7: Gráfica de la presión generalizada adimensional p de un gas ideal cuántico de Bose confinado en una trampa cuadrupolar lineal. Tanto la presión p como la temperatura t están en unidades adimensionales, según el apéndice C. La temperatura crítica es: $t_c = 0.261598$ para una densidad $\frac{N}{L} = 1$.

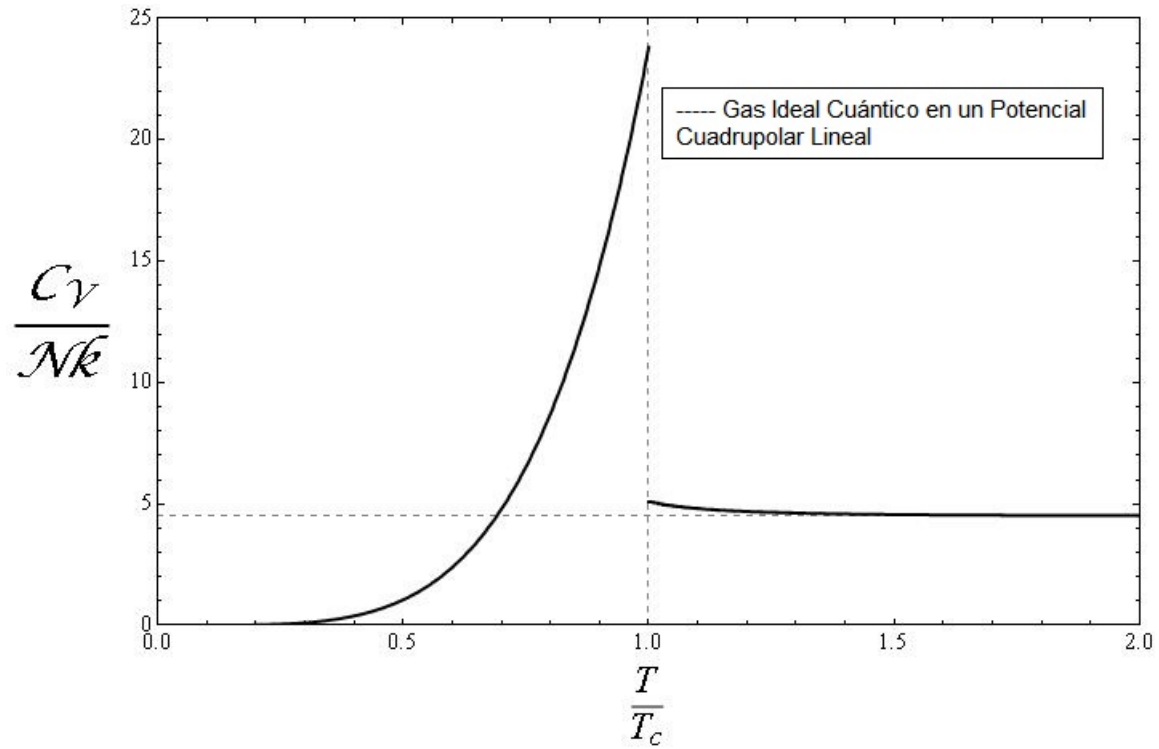


Figura 1.8: Gráfica de la capacidad calorífica de un gas ideal de Bose confinado en una trampa cuadrupolar lineal. Cabe notar la discontinuidad en la temperatura crítica T_c y que a altas temperaturas, $C_V \rightarrow \frac{9}{2}Nk$, que corresponde a su valor clásico.

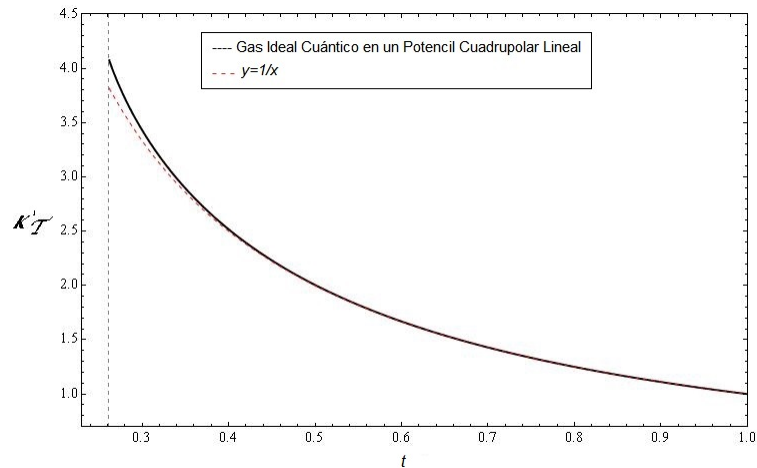


Figura 1.9: Gráfica de la compresibilidad isotérmica de un gas ideal de Bose confinado en una trampa cuadrupolar lineal. Para temperaturas abajo de la temperatura crítica $t_c \approx 0.261598$ no esta definida. La línea punteada roja corresponde a la función $y = 1/x$, como muestra la gráfica, la compresibilidad isotérmica para temperaturas arriba de la temperatura crítica tiene un comportamiento que sigue la Ley de Curie.

La capacidad calorífica C_V para temperaturas $T < T_c$ tiene el siguiente comportamiento

$$C_V(T, \mathcal{V}) = Nk \frac{9}{2} \frac{11}{2} \frac{g_{11/2}(0)}{g_{9/2}(0)} \left(\frac{kT}{kT_c} \right)^{\frac{9}{2}}, \quad (1.94)$$

en la temperatura crítica T_c , C_V tiene dos posibles valores

$$\frac{C_V}{Nk} = \frac{9}{2} \frac{11}{2} \frac{g_{11/2}(0)}{g_{9/2}(0)} \cong 24.0577 \quad \text{para} \quad T \rightarrow T_c^- \quad (1.95a)$$

$$\frac{C_V}{Nk} = \frac{9}{2} \left[\frac{11}{2} \frac{g_{11/2}(0)}{g_{9/2}(0)} - \frac{9}{2} \frac{g_{9/2}(0)}{g_{7/2}(0)} \right] \cong 5.10216 \quad \text{para} \quad T \rightarrow T_c^+. \quad (1.95b)$$

La compresibilidad isotérmica, definida como (apéndice A.2)

$$\kappa_T = -\frac{1}{\mathcal{V}} \left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial \mathcal{P}} \right)_{T,N} \quad T > T_c \quad (1.96)$$

no está definida, la razón de esto es que la presión es independiente del volumen para este intervalo de temperaturas. Para altas temperaturas la ecuación (1.78f) tiene un

comportamiento semejante al de un gas ideal clásico que sigue la Ley de Curie [36] $C_V \sim 1/T$ para una densidad dada.

1.5.2. Límite clásico

Las ecuaciones encontradas para el gas ideal deben concordar con las obtenidas en el modelo clásico, lo cual se comprueba al sustituir $g_n(\alpha) \approx \exp(\alpha)$ directamente en las ecuaciones (1.78). Formalmente se hace un desarrollo al usar la forma de sumatoria de la función de Bose, tomando únicamente los primeros términos. Esto se justifica al definir el límite clásico $z \ll 1$, donde $z = \exp(\alpha)$, es llamada la fugacidad.

Primero escribimos la ecuación para el número de partículas (ecuación 1.82)

$$N = (kT)^3 \frac{8\pi\mathcal{V}}{\lambda^3} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^{9/2}} \quad (1.97a)$$

$$N = (kT)^3 \frac{8\pi\mathcal{V}}{\lambda^3} \left\{ z + \frac{z^2}{2^{9/2}} + \frac{z^3}{3^{9/2}} + \cdots \right\}, \quad (1.97b)$$

despejamos la fugacidad

$$z = \rho \left(\frac{\lambda}{kT} \right)^3 \frac{1}{8\pi} - \frac{z^2}{2^{9/2}} - \frac{z^3}{3^{9/2}} - \cdots, \quad (1.98)$$

donde $\rho = N/\mathcal{V}$.

Escribimos los dos primeros ordenes de aproximación para la fugacidad

$$z^0 = \rho \left(\frac{\lambda}{kT} \right)^3 \frac{1}{8\pi} \quad (1.99a)$$

$$z^1 = \rho \left(\frac{\lambda}{kT} \right)^3 \frac{1}{8\pi} - \frac{1}{2^{9/2}} \rho^2 \left(\frac{\lambda}{kT} \right)^6 \frac{1}{(8\pi)^2}, \quad (1.99b)$$

estos los sustituiremos en la expresión para la presión

$$\mathcal{P} = (kT)^4 \frac{8\pi}{\lambda^3} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^{11/2}} \quad (1.100a)$$

$$= (kT)^4 \frac{8\pi}{\lambda^3} \left\{ z + \frac{z^2}{2^{11/2}} + \frac{z^3}{3^{11/2}} + \cdots \right\}, \quad (1.100b)$$

finalmente realizamos el álgebra necesaria y obtenemos una expresión para la presión en función de la densidad, que se suele llamar desarrollo del Virial cuántico

$$\mathcal{P} = \rho kT \left\{ 1 + \rho \left(\frac{\lambda}{kT} \right)^3 \frac{1}{8\pi} \left(\frac{1}{2^{11/2}} - \frac{1}{2^{9/2}} \right) \right\}, \quad (1.101)$$

esta expresión es a primer orden y es un desarrollo en el límite clásico, no hay que confundirlo con el desarrollo del Virial clásico que involucra interacciones entre las partículas, el cual veremos en el siguiente capítulo.

Capítulo 2

El desarrollo del Virial de la ecuación de estado

En el primer capítulo de la presente tesis demostramos que las variables generalizadas, la presión \mathcal{P} y el volumen \mathcal{V} son independientes y las adecuadas para caracterizar un gas en una trampa cuadrupolar lineal. Encontramos las ecuaciones de estado para un gas clásico y cuántico bajo la suposición de un gas diluido y no interactuante. Una vez que consideramos la interacción entre las partículas del gas no es posible resolver el problema matemático de forma exacta para un potencial de interacción arbitrario, debido a lo anterior es que recurriremos a métodos de aproximación discutidos a continuación y a lo largo de la presente tesis.

El desarrollo del Virial es un método aproximado sistemático que consiste en un desarrollo en potencias de la densidad $\rho = N/V$

$$\frac{p}{kT} = \frac{N}{V} \left[1 + B_2(T) \frac{N}{V} + B_3(T) \left(\frac{N}{V} \right)^2 + \dots \right], \quad (2.1)$$

donde los coeficientes del Virial B_n son funciones de la temperatura y provienen de las interacciones entre partículas [37]. Este método sirve si la densidad es pequeña, *i.*

e. si el gas es diluido.

En este capítulo abordaremos el caso de un gas diluido interactuante en la aproximación del desarrollo del Virial con dos objetivos: el primero es estudiar el desarrollo del Virial *per se* y el segundo obtener una primera aproximación a la ecuación de estado de un gas confinado interactuante. A continuación obtendremos el desarrollo del Virial para un gas confinado interactuante, posteriormente veremos los casos particulares de un gas confinado clásico en el potencial de Lennard-Jones y para un gas confinado cuántico. Finalmente, probamos la exactitud de la llamada “*aproximación de densidad local*”.

2.1. Desarrollo del Virial para potenciales confinantes

En libros avanzados de física estadística se estudia el desarrollo del Virial usando las funciones o cúmulos de Ursell U_n para gases homogéneos [23, 6, 38] el cual se puede aplicar tanto a un gas clásico como a un gas cuántico. A continuación mostraremos la deducción del desarrollo del Virial usando este procedimiento [39] para un gas confinado.

Tomando un sistema en equilibrio termodinámico a temperatura T , con potencial químico μ y Hamiltoniano H_N ; la gran función de partición Ω es

$$e^{-\beta\Omega} = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} \text{Tr}' e^{-\beta H_N}. \quad (2.2)$$

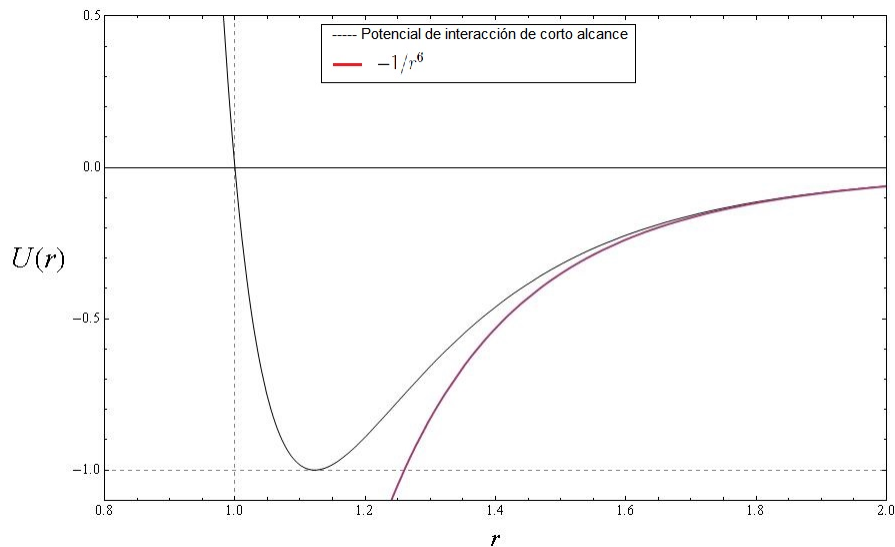


Figura 2.1: Se muestra un potencial de interacción de corto alcance $U(r)$. La línea roja muestra el comportamiento típico de un potencial de Van der Waals, el cual decae como $f(r) = -1/r^6$.

Para el caso clásico la *traza prima* es una integral sobre todo el espacio fase

$$\text{Tr}' e^{-\beta H_N} = \frac{1}{h^{3N} N!} \int d^N \vec{r} \int d^N \vec{p} e^{-\beta H_N}, \quad (2.3)$$

con el Hamiltoniano

$$H_N = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N V_{ext}(\vec{r}_i) + \sum_{i < j} U(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|), \quad (2.4)$$

donde m es la masa de las partículas, $V_{ext}(\vec{r})$ es el potencial de confinamiento y $U(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) = U(r)$ es el potencial de interacción entre las partículas considerado por pares y de corto alcance. Los potenciales de corto alcance decaen más rápido que $f(r) = -1/r$ y son típicamente de la forma $f(r) = -1/r^6$ como el potencial de Van der Waals, que se muestra en la figura (2.1).

En el caso cuántico, la *traza prima* denota si el sistema tiene funciones simétricas

o antisimétricas,

$$\text{Tr}' e^{-\beta H_N} = \frac{1}{N!} \sum_P \epsilon^P \int d^N \vec{r} \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N | e^{-\beta H_N} | \vec{r}_{1P}, \vec{r}_{2P}, \dots, \vec{r}_{NP} \rangle, \quad (2.5)$$

donde $\epsilon = \pm 1$ para bosones o fermiones respectivamente y P denota las permutaciones de $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N$, por lo anterior existen $N!$ permutaciones; asimismo si la permutación es par $\epsilon^P = 1$ para ambos casos; en cambio si la permutación es impar $\epsilon^P = -1$ para bosones y $\epsilon^P = 1$ para fermiones.

Definimos las funciones W_n para un gas confinado como

$$W_n(1, 2, \dots, n) = \begin{cases} e^{-\beta H_n} & \text{Clásico} \\ \sum_P \epsilon^P \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n | e^{-\beta H_n} | \vec{r}_{1P}, \vec{r}_{2P}, \dots, \vec{r}_{nP} \rangle & \text{Cuántico} \end{cases} \quad (2.6)$$

Para encontrar el desarrollo del Virial de un gas confinado, reescribimos la ecuación (2.2) como [23, 38, 40]

$$-\beta\Omega = \sum_{n=1}^{\infty} e^{\beta\mu n} \frac{1}{n!} I_n, \quad (2.7)$$

donde las funciones I_n son

$$I_n = \begin{cases} \frac{1}{h^{3n}} \int d^n \vec{r} \int d^n \vec{p} U_n(\vec{r}_1, \vec{p}_1; \dots; \vec{r}_n, \vec{p}_n) & \text{Clásico} \\ \int d^n \vec{r} U_n(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) & \text{Cuántico} \end{cases} \quad (2.8)$$

con U_n las llamadas funciones de Ursell.

Las funciones de Ursell se encuentran recurrentemente [39]. Para el primer orden tenemos,

$$U_1(1) = W_1(1), \quad (2.9)$$

en segundo orden

$$U_2(1, 2) = W_2(1, 2) - U_1(1)U_1(2), \quad (2.10)$$

en tercer orden

$$\begin{aligned}
 U_3(1, 2, 3) = & W_3(1, 2, 3) - U_1(1)U_2(2, 3) - U_1(2)U_2(1, 3) - U_1(3)U_2(1, 2) - \\
 & U_1(1)U_1(2)U_1(3)
 \end{aligned}
 \tag{2.11}$$

y así sucesivamente.

Con lo anterior la deducción del desarrollo del Virial para un gas confinado se traduce a calcular el valor de cada contribución de las funciones I_n , asimismo calculando sistemáticamente las funciones I_n orden por orden deduciremos la forma general de dichas funciones. A continuación mostraremos los cálculos para las funciones I_1 e I_2 .

La definición de la integral I_1 es

$$I_1 = \int d^3r \langle \vec{r} | e^{-\beta H_1} | \vec{r} \rangle,
 \tag{2.12}$$

donde el Hamiltoniano de una partícula H_1 se obtiene como

$$H_1 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}).
 \tag{2.13}$$

Tomamos el límite termodinámico, lo cual equivale a usar la densidad de estados (ecuación 1.62) definida por Bagnato *et. al.* [9], con lo anterior calculamos la contribución de la función I_1 :

$$I_1 = \frac{1}{\lambda^3} \zeta(\beta) \mathcal{V};
 \tag{2.14}$$

esta expresión también se obtiene al considerar el caso clásico.

Más adelante mostraremos que el n -ésimo cúmulo [38] contará con una contribución debida al movimiento del centro de masa de n partículas igual a la ecuación (2.14).

Usando la definición de la función I_n para $n = 2$, la integral I_2 se escribe como

$$I_2 = \int d^3r_1 \int d^3r_2 (\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | e^{-\beta H_2} | \vec{r}_1, \vec{r}_2 \rangle + \epsilon \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | e^{-\beta H_2} | \vec{r}_2, \vec{r}_1 \rangle) - \int d^3r_1 \langle \vec{r}_1 | e^{-\beta H_1} | \vec{r}_1 \rangle \int d^3r_2 \langle \vec{r}_2 | e^{-\beta H_1} | \vec{r}_2 \rangle \quad (2.15)$$

donde $\epsilon = \pm 1$ para bosones o fermiones respectivamente. Los Hamiltonianos H_2 y H_1 son los correspondientes a una o dos partículas (ecuación 2.4).

A continuación calcularemos la contribución de la función I_2 . Para ello realizamos un cambio de variables; tomamos el centro de masa y las coordenadas relativas

$$\vec{R} = \frac{(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)}{2}, \quad (2.16)$$

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad (2.17)$$

con su momento canónico \vec{P} y \vec{p} respectivamente, obtenemos el Hamiltoniano

$$H_2 = \frac{\vec{P}^2}{2(2m)} + V_{ext}(\vec{R} + \frac{\vec{r}}{2}) + V_{ext}(\vec{R} - \frac{\vec{r}}{2}) + \mathcal{H}_2, \quad (2.18)$$

donde

$$\mathcal{H}_2 = \frac{\vec{p}^2}{2(m/2)} + U(r) \quad (2.19)$$

es el Hamiltoniano correspondiente a la coordenada relativa de dos partículas. A continuación tomamos el límite termodinámico, que consiste en aproximar

$$V_{ext}\left(\vec{R} + \frac{\vec{r}}{2}\right) + V_{ext}\left(\vec{R} - \frac{\vec{r}}{2}\right) \approx 2V_{ext}(\vec{R}). \quad (2.20)$$

Al tomar el volumen generalizado suficientemente grande $\mathcal{V} \rightarrow \infty$, los valores que puede tomar la coordenada del centro de masa R también se hacen arbitrariamente

grandes, mientras que la coordenada relativa r tiene un movimiento limitado espacialmente. Es fácil comprobar que para el caso clásico y temperaturas altas la coordenada relativa está limitada por las interacción interatómicas σ ; y para el caso de temperaturas bajas cuando el movimiento es cuántico está acotada por la longitud de onda térmica de de Broglie λ o la longitud de dispersión a . Esto lo ejemplificaremos de manera explícita en las siguientes dos secciones.

Al tomar el límite termodinámico y realizar la aproximación de la ecuación (2.20), el movimiento del centro de masa se separa del movimiento relativo

$$I_2 \approx \left(\int d\vec{R} \langle \vec{R} | e^{-\beta(\frac{\vec{P}^2}{2(2m)} + 2V_{ext}(\vec{R}))} | \vec{R} \rangle \right) \times \int d\vec{r} \left(\langle \vec{r} | e^{-\beta\mathcal{H}_2} | \vec{r} \rangle + \epsilon \langle \vec{r} | e^{-\beta\mathcal{H}_2} | -\vec{r} \rangle - \langle \vec{r} | e^{-\beta p^2/2(m/2)} | \vec{r} \rangle \right) \quad (2.21)$$

Notemos que el movimiento del centro de masa corresponde a un sistema de una partícula con masa nm en un potencial externo $nV_{ext}(\vec{R})$. Usando la densidad de estados, ecuación (1.62), en el límite termodinámico encontramos

$$I_2 = \frac{\mathcal{V}}{\lambda^6} \zeta(2\beta) b_2(T), \quad (2.22)$$

donde

$$\mathcal{V} \zeta(2\beta) = \int d\vec{R} e^{-2\beta V_{ext}(\vec{R})}, \quad (2.23)$$

y definimos la integral o cúmulo reducido $b_2(T)$ [38] como

$$b_2(T) = 2^{3/2} \lambda^3 \int d\vec{r} \left(\langle \vec{r} | e^{-\beta\mathcal{H}_2} | \vec{r} \rangle + \epsilon \langle \vec{r} | e^{-\beta\mathcal{H}_2} | -\vec{r} \rangle - \langle \vec{r} | e^{-\beta p^2/2(m/2)} | \vec{r} \rangle \right). \quad (2.24)$$

Podemos generalizar nuestros cálculos para la integral I_n , primero definimos las

nuevas coordenadas centro de masa y relativas como

$$\vec{R} = \frac{1}{n}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \cdots + \vec{r}_n), \quad (2.25)$$

$$\vec{r}^{(1)} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad (2.26)$$

$$\vec{r}^{(2)} = \vec{r}_2 - \vec{r}_3, \quad (2.27)$$

$$\vdots \quad (2.28)$$

$$\vec{r}^{(n-1)} = \vec{r}_{n-1} - \vec{r}_n, \quad (2.29)$$

y sus respectivos momentos canónicos conjugados.

El paso fundamental para nuestro cálculo, tanto para el gas cuántico como para el clásico, es tomar el límite termodinámico $\mathcal{V} \rightarrow \infty$. En este límite es válida la siguiente aproximación

$$V_{ext}(\vec{r}_1) + V_{ext}(\vec{r}_2) + \cdots + V_{ext}(\vec{r}_n) \approx nV_{ext}(\vec{R}), \quad (2.30)$$

recordando que las variables $(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n)$ se deben escribir en términos de las nuevas variables de centro de masa y relativas $(\vec{R}_1, \vec{r}^{(1)}, \vec{r}^{(2)}, \dots, \vec{r}^{(n-1)})$. Bajo esta aproximación podemos separar el movimiento del centro de masa del movimiento relativo.

El movimiento del centro de masa se torna cuasiclásico y su contribución a la integral I_n es proporcional a $\zeta(n\beta)\mathcal{V}/\lambda^{3n}$, el cual contiene la información del potencial de confinamiento, mientras que la contribución del movimiento relativo está relacionado con las integrales b_n que contienen la información de la interacción entre las partículas. Por lo tanto podemos concluir que para un potencial de confinamiento se cumple que

$$I_n = \frac{\mathcal{V}}{\lambda^{3n}} \zeta(n\beta) b_n. \quad (2.31)$$

En el límite termodinámico el movimiento del centro de masa puede estudiarse como semiclásico [21]. La expresión para el segundo coeficiente cuántico del Virial es consistente con la que obtendremos en la sección (2.3) y el formalismo de Landau [21]. Para colisiones lentas, relevantes en los gases ultrafríos, la integral b_2 depende de la longitud de dispersión a y se puede aplicar cerca de las resonancias de Feshbach [41] dónde $a \approx d$, con d la distancia entre partículas. Sin embargo cerca de un punto crítico o de transición como el límite unitario [42] ($a \gg d$) no tendrán validez nuestras aproximaciones. Para la descripción de la dispersión a bajas energías, cerca de las resonancias de Feshbach es válida para potenciales interatómicos $U(r)$ que decaen cómo o más rápido que $1/r^3$ [43]. En el límite termodinámico las interacciones también deben ser de corto alcance, de lo contrario b_2 no tiene sentido.

Podemos concluir, que dentro del límite termodinámico, el gran potencial se puede escribir como

$$\Omega = -kT\mathcal{V} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{\beta n\mu}}{n!} \frac{\zeta(n\beta)}{\lambda^{3n}} b_n, \quad (2.32)$$

esta expresión es general, se cumple para el caso clásico y el caso cuántico. Cabe destacar que la diferencia entre el caso cuántico y clásico recaerá en la definición de los cúmulos b_n . En ambos casos $b_1 = 1$.

La forma más simple de la ecuación (2.32) se encuentra en la mayoría de los libros de física estadística convencionales [6, 21, 23, 34, 38, 39] que corresponde a el caso de un gas clásico en un potencial de paredes rígidas, cuando $\mathcal{V} = V$ y $\zeta(n\beta) = 1$. Algunos generalizan esta ecuación para el caso cuántico usando las funciones de Ursell [40, 39]. Una contribución de esta tesis es extender esta ecuación para el caso de un gas en un potencial arbitrario confinante; sin embargo el problema final no está resuelto, su

dificultad recaerá en la forma del potencial que se elija y en calcular las integrales de los cúmulos b_n .

Para un gas ideal cuántico, es decir sin interacciones $U(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) = 0$, calculamos las integrales b_n , encontrando la siguiente expresión analítica

$$b_n = \epsilon^{n+1} \frac{n!}{n^{5/2}} \lambda^{3(n-1)} \quad (2.33)$$

y el gran potencial para un gas ideal cuántico es

$$\Omega = -kT \frac{\mathcal{V}}{\lambda^3} \sum_{n=1}^{\infty} e^{n\beta\mu} \zeta(n\beta) \frac{\epsilon^{n+1}}{n^{5/2}}. \quad (2.34)$$

En las siguientes dos secciones analizaremos los casos de un gas clásico y cuántico confinado, como ejemplo del formalismo que se desarrollo en la presente sección.

2.2. Coeficientes del Virial clásicos

En esta sección estudiaremos un gas clásico con interacciones de corto alcance en un potencial confinante y calcularemos los primeros coeficientes del Virial clásico para el potencial de Lennard-Jones.

Partiendo de la ecuación (2.7) y de la definición de las integrales I_n para el caso clásico, encontraremos el desarrollo del Virial. Comenzamos calculando la integral I_1 usando la definición de la función de Ursell $U_1(1) = W_1(1)$. La integral se reescribe como

$$I_1 = \frac{1}{h^3} \int d\vec{r} \int d\vec{p} e^{-\beta H_1} \quad (2.35)$$

$$= \frac{1}{\lambda^3} \zeta(\beta) \mathcal{V}, \quad (2.36)$$

que concuerda con el resultado obtenido en la sección anterior.

La segunda integral I_2 es

$$I_2 = \frac{1}{h^6} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \int d\vec{p}_1 \int d\vec{p}_2 [e^{-\beta H_2} - e^{-\beta H_1(\vec{r}_1, \vec{p}_1)} e^{-\beta H_1(\vec{r}_2, \vec{p}_2)}] \quad (2.37)$$

$$= \frac{1}{\lambda^6} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 e^{-\beta(V_{ext}(\vec{r}_1) + V_{ext}(\vec{r}_2))} (e^{-\beta U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)} - 1), \quad (2.38)$$

realizando un cambio de variable a coordenadas de centro de masa y relativas análogo a la sección anterior, la integral I_2 se transforma en

$$I_2 = \frac{1}{\lambda^6} \int d\vec{R} \int d\vec{r} e^{-\beta(V_{ext}(\vec{R} + \frac{\vec{r}}{2}) + V_{ext}(\vec{R} - \frac{\vec{r}}{2}))} (e^{-\beta U(\vec{r})} - 1), \quad (2.39)$$

el último factor de la anterior integral sólo depende de la coordenada relativa y del potencial de interacción de las partículas, es decir, contiene la información sobre la interacción de las partículas por pares.

Veamos como se comporta la integral I_2 para el caso de un oscilador armónico. Analicemos el potencial externo (ecuación 1.17)

$$\begin{aligned} V_{ext} \left(\vec{R} + \frac{\vec{r}}{2} \right) + V_{ext} \left(\vec{R} - \frac{\vec{r}}{2} \right) &= \\ &= \frac{2}{2} m \omega^2 \left(R^2 + \frac{r^2}{2} \right) \\ &= \frac{1}{2} (2m) \omega^2 R^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{m}{2} \right) \omega^2 r^2. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Tenemos las coordenadas de centro de masa separadas de las coordenadas relativas por lo cual la integración referente a las coordenadas centro de masa se puede realizar y sólo nos queda la integración de la variable relativa. La integral I_2 es

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \left(\frac{m\beta}{4\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \int d\vec{r} e^{-\beta m \omega^2 r^2 / 4} (e^{-\beta U(r)} - 1) \\ &\rightarrow \frac{1}{2} \left(\frac{m\beta}{4\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \int d\vec{r} (e^{-\beta U(r)} - 1). \end{aligned} \quad (2.41)$$

Dada una temperatura fija, el límite termodinámico es $\beta m \omega^2 r^2 / 4 \ll 1$ en el caso de un potencial armónico [14]. A pesar que la integral va de $r = 0$ a $r \rightarrow \infty$, la distancia entre partículas $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ solo toma valores dentro de un intervalo, este está definido por el alcance del potencial σ . La integral puede ser redefinida hasta un valor fijo $l\sigma$, con l un entero positivo, dejando como única variable libre ω , que es el parámetro que define el tamaño de la trampa y al volumen generalizado $\mathcal{V} = 1/\omega$ (capítulo 1). Con estas precisiones tomamos el límite termodinámico en el sentido matemático $\omega \rightarrow 0$. En un sentido físico se pide que disminuya el valor de ω o $\mathcal{V} \rightarrow \infty$ manteniendo la trampa de confinamiento del gas *macroscópica* y conteniendo un número *macroscópico de partículas*.

Podemos generalizar y definir la integral I_2 como

$$I_2 = \frac{1}{\lambda^{3*2}} \mathcal{V} \zeta(2\beta) b_2(T), \quad (2.42)$$

donde la integral $b_2(T)$ es

$$b_2(T) = \int d\vec{r}' (e^{-\beta U(r)} - 1). \quad (2.43)$$

Para el caso de un gas en un potencial cuadrupolar la integral I_2 se comporta como

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \frac{1}{A^3} \left(\frac{\beta^3 A^3}{8\pi} \right)^2 \int d\vec{r}' e^{-\beta \sqrt{(A_x x')^2 + (A_y y')^2 + (A_z z')^2}} \\ & \int d\vec{r} e^{-\beta \sqrt{(A_x (x'-x))^2 + (A_y (y'-y))^2 + (A_z (z'-z))^2}} (e^{-\beta U(r)} - 1) \\ & \rightarrow \frac{1}{2} \frac{1}{A^3} \left(\frac{\beta^3 A^3}{8\pi} \right)^2 \int d\vec{r}' e^{-2\beta \sqrt{(A_x x')^2 + (A_y y')^2 + (A_z z')^2}} \int d\vec{r} (e^{-\beta U(r)} - 1) \\ & = \frac{1}{2} \left(\frac{\beta}{8\pi 2^3} \right) \int d\vec{r}' (e^{-\beta U(r)} - 1) \\ & = I_2. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Gracias a que el potencial es de corto alcance, la función $(e^{-\beta U(r)} - 1) \rightarrow 0$ para $r \gg \sigma$, en este límite podemos despreciar \vec{r} en el exponencial.

Ahora definiremos las integrales b_n para el caso de un gas confinado clásico que dependen de la temperatura T y del potencial de interacción

$$\begin{aligned} b_1 &= 1 \\ b_2 &= \int d\vec{r} f(T, \vec{r}) \\ b_3 &= \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 f(T, \vec{r}_1 + \vec{r}_2) f(T, -\vec{r}_1) f(T, -\vec{r}_2) \\ &\vdots \end{aligned} \tag{2.45}$$

donde la función $f(T, \vec{r})$ son las funciones de Mayer [38, 39] que se definen como

$$f(T, \vec{r}) \equiv e^{-\beta U(r)} - 1 \tag{2.46}$$

con

$$U(r) \equiv U(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \tag{2.47}$$

el potencial de interacción entre la partícula i -ésima y la j -ésima.

La función de Mayer $f(r) \approx 0$ para $r \gg \sigma$ (ver figura 2.2), por lo cual la magnitud de la coordenada relativa $|\vec{r}|$ está limitada por el valor de σ .

El límite termodinámico se cumple sí $(\mathcal{V}/N)^{1/3} \gg \sigma$, con σ el alcance del potencial de interacción, es decir, si las distancias interatómicas definidas por el potencial exterior son mucho mayores que las distancias de choques definidas por el potencial de interacción.

Llegamos a una expresión general para el gran potencial de un gas confinado e interactuante

$$\Omega = -kT\mathcal{V} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{\beta n\mu}}{n!} \frac{\zeta(n\beta)}{\lambda^{3n}} b_n. \tag{2.48}$$

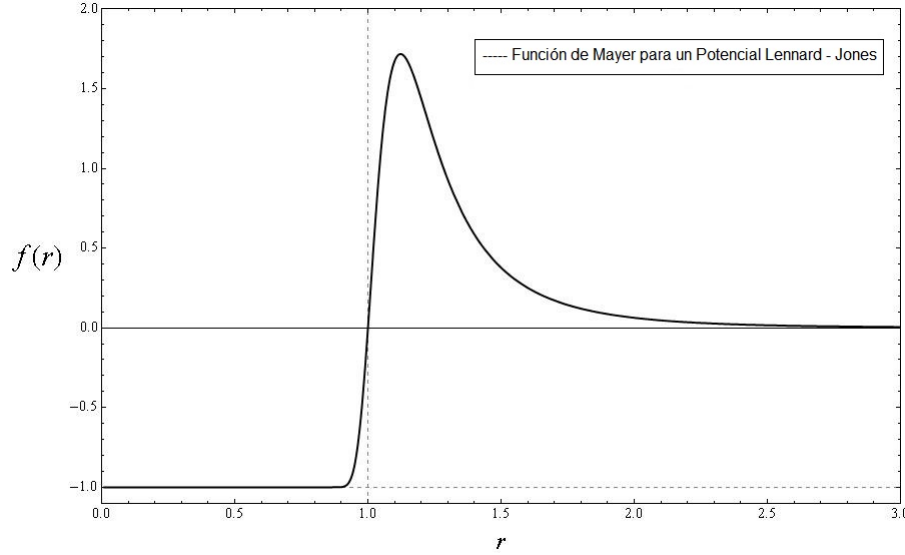


Figura 2.2: Se muestra la función de Mayer para un potencial Lennard-Jones, con $\sigma = 1$ y $\varepsilon = -1$.

Sabemos que $\Omega = -\mathcal{P}\mathcal{V}$ por lo cual tenemos de forma inmediata la expresión para la presión

$$\mathcal{P} = -kT \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{e^{\beta\mu}}{\lambda^3} \right)^n \frac{\zeta(n\beta)}{n!} b_n \quad (2.49)$$

y calculamos el número promedio de partículas

$$N(T, \mathcal{V}, \mu) = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, \mathcal{V}} \quad (2.50)$$

$$N = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{e^{\beta\mu}}{\lambda^3} \right)^n \frac{\zeta(n\beta)}{(n-1)!} b_n. \quad (2.51)$$

Definimos $x = \frac{e^{\beta\mu}}{\lambda^3}$ y escribimos explícita la suma de la densidad $\rho = N/\mathcal{V}$

$$\rho = \frac{N}{\mathcal{V}} = \sum_{n=1}^{\infty} x^n \frac{\zeta(n\beta)}{(n-1)!} b_n, \quad (2.52)$$

despejamos x de la expresión anterior

$$x = \frac{\rho}{\zeta(\beta)} - \frac{\zeta(2\beta)}{\zeta(\beta)} b_2 x^2 - \frac{\zeta(3\beta)}{\zeta(\beta) 2!} b_3 x^3 - \dots, \quad (2.53)$$

tomamos la serie hasta tercer orden y sustituyendo en la presión obtenemos

$$\mathcal{P}\beta = \frac{N}{\mathcal{V}} \left\{ 1 - \frac{\zeta(2\beta)}{\zeta^2(\beta)} b_2 \frac{N}{\mathcal{V}} + \left[\left(\frac{\zeta(2\beta)}{\zeta^2(\beta)} b_2 \right)^2 - \frac{1}{3} \frac{\zeta(3\beta)}{\zeta^3(\beta)} b_3 \right] \left(\frac{N}{\mathcal{V}} \right)^2 + \dots \right\}, \quad (2.54)$$

la anterior expresión es el desarrollo del Virial clásico para un gas confinado. Las interacciones están contenidas en las integrales b_n que dependen de la temperatura T . Los coeficientes del Virial son:

$$B_2(T) = -\frac{\zeta(2\beta)}{\zeta^2(\beta)} b_2, \quad (2.55)$$

$$B_3(T) = \left[\left(\frac{\zeta(2\beta)}{\zeta^2(\beta)} b_2 \right)^2 - \frac{1}{3} \frac{\zeta(3\beta)}{\zeta^3(\beta)} b_3 \right], \quad (2.56)$$

así sucesivamente.

Hemos encontrado los coeficientes del Virial clásico para un gas interactuante confinado. Los coeficientes del Virial dependen de los cúmulos reducidos b_n en los cuales se encuentra toda la información sobre la interacción entre las partículas.

La relación entre los cúmulos reducidos b_n y las integrales I_n , como ya se había constatado antes es (ecuación 2.1)

$$I_n = \frac{\mathcal{V}}{\lambda^{3n}} \zeta(n\beta) b_n. \quad (2.57)$$

2.2.1. Potencial Lennard-Jones

Ahora encontraremos el primer coeficiente del Virial para el caso de un potencial Lennard-Jones [44]

$$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2.58)$$

donde ε es el valor mínimo de energía en el potencial V_{int} y σ es un parámetro de colisión, ver figura (2.3). Definimos las siguientes cantidades adimensionales [44]

$$t = \frac{kT}{\varepsilon}, \quad (2.59)$$

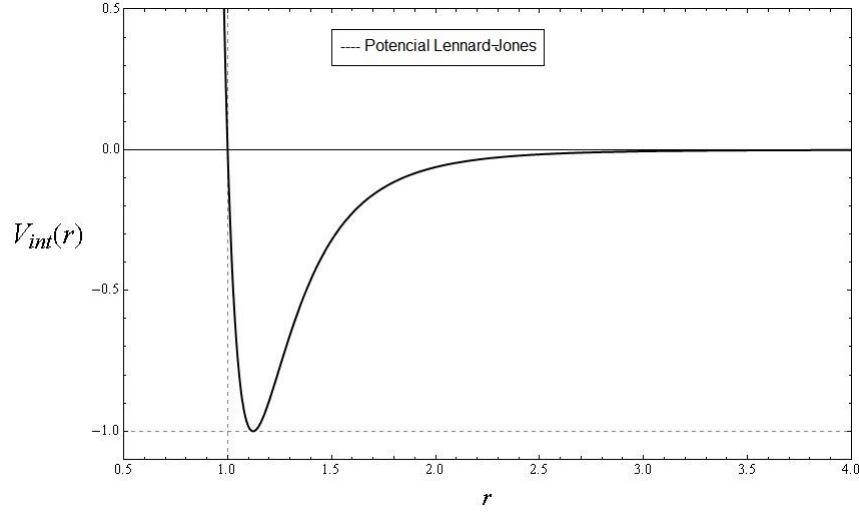


Figura 2.3: Potencial de Lennard-Jones con $\sigma = 1$ y $\epsilon = -1$.

$$s = \frac{r}{\sigma}. \quad (2.60)$$

Sustituyendo el cambio de variable adimensional en los cúmulos reducidos, encontramos

$$\begin{aligned} d_1(t) &= 1 \\ d_2(t) &= -3 \int_0^\infty f(t, s) s^2 ds \\ d_3(t) &= -6 \int_0^\infty \int_0^\infty f(t, s) f(t, s_1) \\ &\quad \int_0^\pi f\left(t, \sqrt{s_1^2 + s^2 + 2s_1s \cos \theta}\right) s^2 s_1^2 \sin \theta d\theta ds ds_1 \\ &\quad \vdots \end{aligned} \quad (2.61)$$

y reescribiendo la ecuación de estado como

$$\mathcal{P}' = \tilde{\rho} t \{1 + B_2(t) \tilde{\rho} + \dots\} \quad (2.62)$$

donde la presión y la densidad son

$$\begin{aligned}\mathcal{P}' &= \mathcal{P} \frac{b_o}{\varepsilon} \\ \tilde{\rho} &= \rho b_o\end{aligned}\tag{2.63}$$

y

$$b_o = \begin{cases} \frac{1}{3} \left(\frac{m\sigma}{2\pi\varepsilon} \right)^{\frac{3}{2}} & \text{Potencial armónico} \\ \frac{1}{3} \left(\frac{\sigma}{\varepsilon} \right)^3 & \text{Potencial cuadrupolar} \end{cases}.\tag{2.64}$$

Ahora podemos escribir el segundo coeficiente del Virial

$$B_2(t) = \begin{cases} \left(\frac{1}{2t} \right)^{\frac{3}{2}} d_2 & \text{Potencial armónico} \\ \left(\frac{1}{2t} \right)^3 d_2 & \text{Potencial cuadrupolar} \end{cases}\tag{2.65}$$

que es la primera corrección al gas ideal clásico confinado debido a interacciones entre pares de partículas.

Usando un programa computacional, *Mathematica*, se calculan numéricamente las integrales y se realizan las gráficas, las que se muestran en las figuras (2.4) y (2.5). Las integrales tienen una solución analítica que encontró Taro Kihara [45]

$$d_2(t) = \sum_{j=0}^{\infty} -\frac{2^{j+\frac{1}{2}}}{4j!} \Gamma \left[\frac{2j-1}{4} \right] t^{-\frac{2j-1}{4}}.\tag{2.66}$$

Este tipo de integrales han sido estudiadas desde hace muchos años y existe en la literatura soluciones para diferentes potenciales. Con la corrección encontrada en esta sección, se obtienen los primeros coeficientes del Virial para un gas confinado en un potencial de interacción Lennard-Jones y siguiendo el método anterior se pueden encontrar para diferentes potenciales de interacción.

2.3. Coeficientes del Virial cuánticos

Como una primera aproximación, encontraremos las correcciones al gas ideal cuántico debidas a interacciones entre partículas, usando el formalismo de Landau [21] que

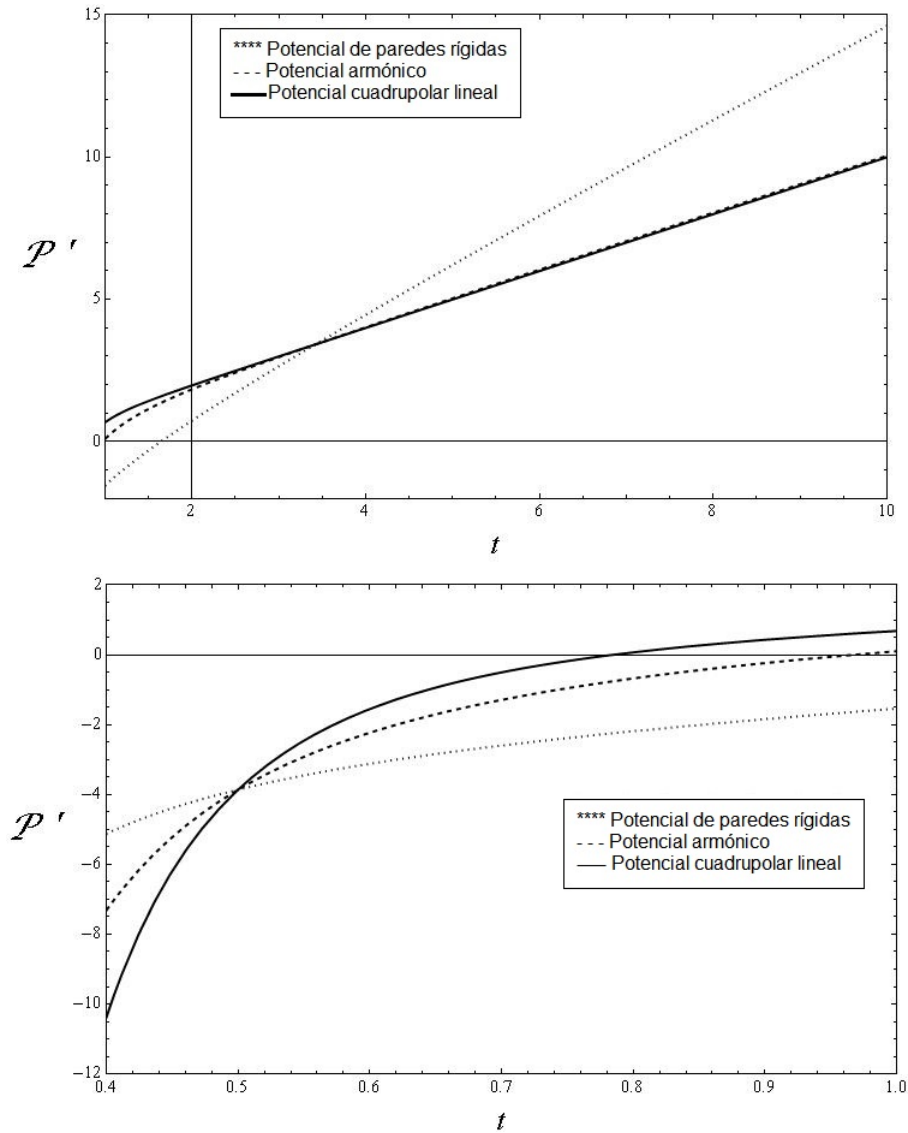


Figura 2.4: Gráficas de la presión usando la primera aproximación del desarrollo del Virial. La presión \mathcal{P}' y la temperatura t son adimensionales. La línea de puntos corresponde a un potencial de paredes rígidas, la línea punteada corresponde a un potencial armónico y la línea llena a un potencial cuadrupolar. La segunda gráfica es un acercamiento para $t = 0.4 - 1.0$

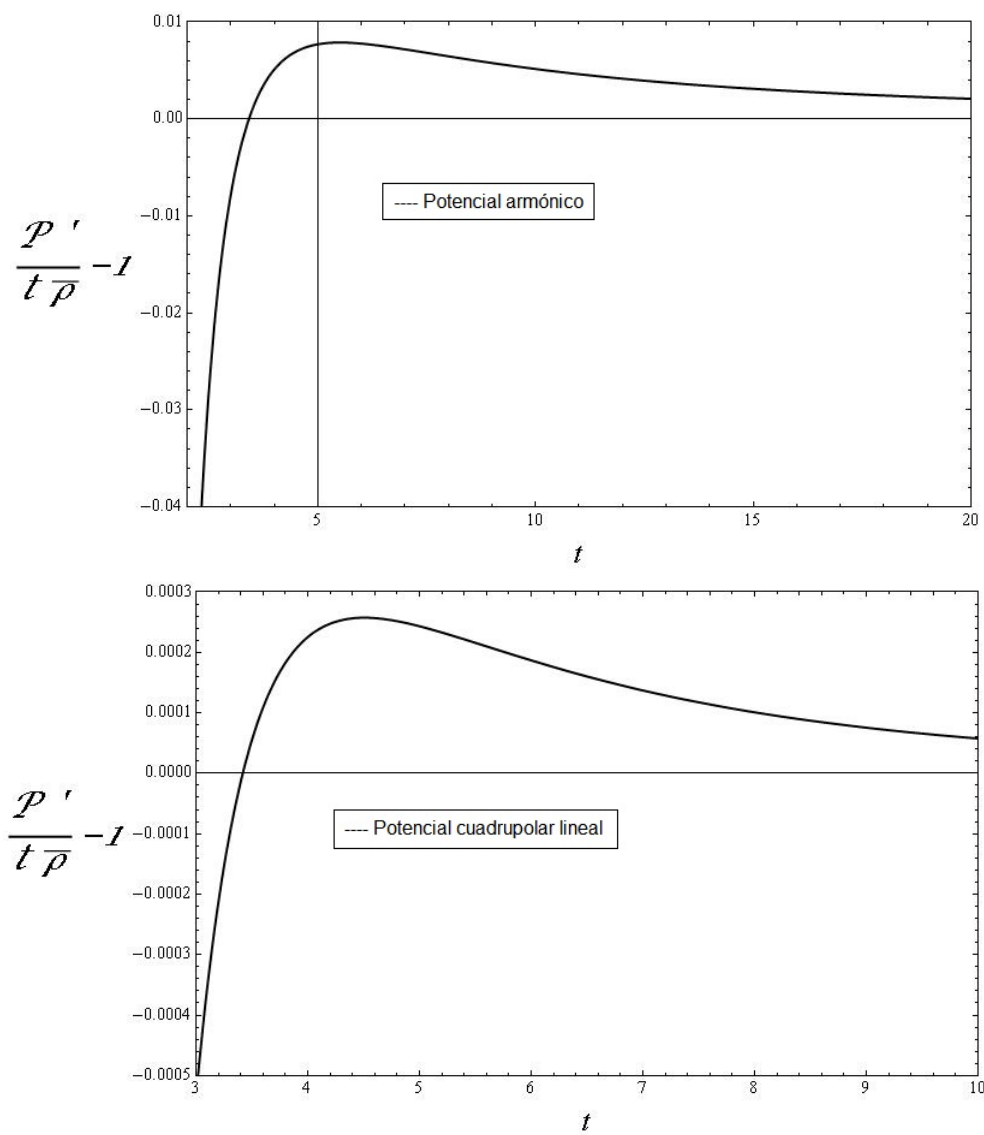


Figura 2.5: Las gráficas corresponden al segundo coeficiente del Virial clásico. La primera imagen corresponde a un potencial armónico y la segunda a un potencial cuadrupolar.

mostraremos a continuación.

En esta aproximación, es suficiente tomar los tres primeros términos de la suma sobre N del gran potencial

$$\Omega(T, \mathcal{V}, \alpha) = -kT \log \left[1 + e^\alpha \sum_n e^{-\beta E_n^1} + e^{2\alpha} \sum_j e^{-2\beta E_j^2} \right] \quad (2.67)$$

donde $\alpha = \mu/kT$; E_n^1 son las energías de un átomo en un potencial externo V_{ext} , E_j^2 son las energías de un sistema interactuante entre pares de átomos confinados.

El segundo término de la aproximación, la suma sobre los estados de una sola partícula, lo calcularemos de la ecuación para la presión de un gas ideal cuántico en un potencial armónico (1.78c). Escribimos la función de Bose en potencias de e^α usando la definición (B.4) y expresamos la presión como función del número de partículas

$$\mathcal{P} = \rho kT \left[1 - \frac{1}{16} \left(\frac{\hbar}{kT} \right)^3 \rho + \dots \right] \quad (2.68)$$

con $\rho = N/\mathcal{V}$. Tomando la primera corrección de la expresión anterior definimos

$$B_2^{exch}(T) = -\frac{1}{16} \left(\frac{\hbar}{kT} \right)^3 \quad (2.69)$$

que representa la corrección debida al intercambio entre partículas indistinguibles.

Para calcular el tercer término de la aproximación, la suma de las energías E_j^2 , escribimos la energía para dos átomos confinados que interactúan

$$H^{(2)} = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + V_{int}(r) \quad (2.70)$$

donde $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$.

Podemos separar la expresión en movimiento del centro de masa y en movimiento relativo

$$e^{2\alpha} \sum_j e^{-2\beta E_j^2} = e^{2\alpha} \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^3 \sum_k e^{\varepsilon_k}, \quad (2.71)$$

donde ε_k son las energías del movimiento relativo. La suma la definimos como

$$\sum_k e^{\varepsilon_k} = Z_{int}. \quad (2.72)$$

El término debido a la interacción de dos partículas (2.71) como función del número de partículas es

$$B_2^{int}(T) = \left(\frac{\hbar}{kT} \right)^3 Z_{int}. \quad (2.73)$$

Tomando en cuenta la corrección cuántica de la indistinguibilidad y la interacción de las partículas, la modificación del gas ideal confinado en una primera aproximación es

$$B_2(T) = \begin{cases} -\frac{1}{16} \left(\frac{\hbar}{kT} \right)^3 \{1 + 16Z_{int}\} & \text{Potencial armónico} \\ -\left(\frac{\lambda}{kT} \right)^3 \frac{1}{8\pi} \left(\frac{1}{2^{\frac{9}{2}}} - \frac{1}{2^{\frac{11}{2}}} \right) \left\{ 1 + \left(\frac{1}{2^{\frac{9}{2}}} - \frac{1}{2^{\frac{11}{2}}} \right)^{-1} Z_{int} \right\} & \text{Potencial cuadrupolar} \end{cases} \quad (2.74)$$

Toda la información sobre la interacción de los átomos la contiene Z_{int} , la cual la podemos deducir.

Supongamos un espectro discreto de valores negativos $\sum_n \exp(-\beta\varepsilon_n)$ y un espectro continuo de valores positivos $\sum_p \exp(-\beta p^2/2\eta)$ para el movimiento relativo de los átomos, con η la masa reducida.

La función de onda de un estado estacionario con momento angular l y energía positiva, para valores grandes de r , tiene la forma analítica [21]

$$\Psi \simeq \frac{\sin\left(\frac{p}{\hbar}r - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l\right)}{r} \quad (2.75)$$

donde los corrimientos de fase $\delta_l = \delta_l(p)$ dependen del potencial de interacción V_{int} .

El intervalo de variación de r está limitado por un valor grande pero finito R , el rango del potencial. De este modo p puede tener valores discretos por la condición de

frontera $\Psi(r \rightarrow R) = 0$. Adicionalmente, como R es grande, podemos aproximar la suma como una integral

$$\sum_p e^{-\beta \frac{p^2}{2\eta}} \rightarrow \frac{1}{\pi} \sum_l (2l+1) \int_0^\infty \left(\frac{R}{\hbar} + \frac{d\delta_l}{dp} \right) e^{-\beta \frac{p^2}{2\mu}} dp. \quad (2.76)$$

Para bosones que tienen spin entero, la función de onda correspondiente a las coordenadas debe ser simétrica e imponiendo condiciones físicas, $\delta_l = 0$. Sin interacción la integral debe cancelarse y valer cero. Para cumplir esta condición el término R/\hbar se omite.

Tomando la primera onda parcial, la onda S , implica que $\delta \cong ap/\hbar$, el término de interacción

$$Z_{int} = \sum_k e^{-\beta \varepsilon_k} + \frac{a}{\hbar} \sqrt{\frac{\eta}{2\beta\pi}} \quad (2.77)$$

donde a es la longitud de dispersión.

2.4. Aproximación de densidad local

La finalidad de la presente tesis es encontrar las ecuaciones de estado de un gas confinado en diferentes aproximaciones y modelos. Un resultado interesante fue encontrar que la aproximación de densidad local (LDA, por sus siglas en inglés) es exacta en el límite termodinámico. A continuación demostraremos esta afirmación usando la ecuación del gran potencial, la cual es válida para un gas clásico o cuántico confinado.

Para el caso de un gas en una caja de paredes rígidas podemos calcular el número de partículas N y su entropía S , a partir del gran potencial.

Definimos al gran potencial por unidad de volumen como

$$\omega(\mu, T) = \frac{\Omega}{V}. \quad (2.78)$$

El número de partículas por unidad de volumen, es decir la densidad de partículas como

$$\rho(\mu, T) = \frac{N}{V} = kT \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\beta n}{n!} \frac{e^{\beta n \mu}}{\lambda^{3n}} b_n(T), \quad (2.79)$$

la cual obtenemos usando la identidad termodinámica $N = -(\partial\Omega/\partial\mu)_{T,V}$ y la entropía por unidad de volumen

$$s(\mu, T) = \frac{S}{V}. \quad (2.80)$$

El volumen es el volumen convencional $\mathcal{V} = V$, ya que se trata de un gas en una caja de paredes rígidas.

Ahora consideramos al mismo sistema bajo el efecto de un potencial externo confinante $V_{ext}(\vec{r})$. Usaremos la aproximación de densidad local, la cual consiste en tomar las variables ω , ρ y s del caso homogéneo y suponer que se cumplen para un elemento arbitrariamente pequeño, pero macroscópico del sistema. Estas funciones solo tendrán validez localmente y dependerán de la posición $\omega(\vec{r})$, $\rho(\vec{r})$ y $s(\vec{r})$.

Bajo esta aproximación la densidad depende de la posición y, por tanto, el potencial químico también lo sustituimos por un potencial químico local

$$\mu_{local}(\vec{r}) = \mu - V_{ext}(\vec{r}), \quad (2.81)$$

que sustituiremos directamente en la densidad de partículas,

$$\rho(\vec{r}) = kT \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\beta n}{n!} \left(\frac{e^{\beta(\mu - V_{ext}(\vec{r}))}}{\lambda^3} \right)^n b_n(T). \quad (2.82)$$

Integrando la expresión anterior sobre todo el espacio, obtendremos el número de partículas como función de la temperatura T , el potencial químico μ y el volumen

generalizado \mathcal{V}

$$N = \int \rho(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.83)$$

$$= kT\mathcal{V} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\beta n}{n!} \frac{e^{\beta n\mu}}{\lambda^{3n}} g(n,\beta) b_n(T). \quad (2.84)$$

Al calcular directamente el número de partículas $N = -(\partial\Omega/\partial\mu)_{T,\mathcal{V}}$ de la ecuación (2.32) obtendremos la ecuación anterior. Ambas expresiones son iguales.

Este cálculo se puede repetir para las diferentes cantidades termodinámicas y en todos los casos coinciden. Recordando que la ecuación (2.32) es exacta para un gas confinado con interacciones de corto alcance y por pares, concluimos que dentro de este régimen la aproximación de densidad local es exacta.

Capítulo 3

Gases de Bose débilmente interactuantes

En este capítulo, desarrollaremos a detalle la teoría necesaria para obtener las ecuaciones autoconsistentes de Hartree-Fock, las cuales son el fundamento de los cálculos numéricos realizados en la presente tesis. En este proceso revisaremos la aproximación de Thomas-Fermi, abordaremos las aproximaciones del potencial de contacto e introduciremos la longitud de dispersión, trabajos realizados en la primera fase del estudio teórico de los condensados de Bose-Einstein y recopilados en el libro *Bose-Einstein condensation in Dilute Gases* [46]. Y finalmente utilizamos estos resultados para el gas cuántico homogéneo y el caso de un gas de bosones interactuantes confinado en un potencial cuadrupolar lineal, el cual es el foco de la presente tesis doctoral

3.1. Ecuaciones autoconsistentes de Hartree-Fock

Para un gas de N partículas interactuantes por pares, en presencia de una fuerza externa, el Hamiltoniano del sistema es,

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \hat{V}_{ext}(\vec{r}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^N \hat{U}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \quad (3.1)$$

donde m es la masa de cada partícula, $\hat{V}_{ext}(\vec{r})$ es el potencial debido a la fuerza externa que actúa sobre cada partícula y $\hat{U}(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ es el potencial de interacción, considerado arbitrario en este momento.

La ecuación de Schrödinger para el gas de N partículas es,

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle, \quad (3.2)$$

esta ecuación no tiene una solución analítica para cualquier potencial externo y/o potencial de interacción. Para resolverla usaremos la teoría de Hartree-Fock [47, 48, 49].

Para el caso de partículas indistinguibles, supondremos que la función de onda que describe al gas es una combinación de funciones de onda de una sola partícula ortonormalizadas $\phi(\vec{r})$,

$$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = C \sum_P \epsilon^P \phi_{P1}(\vec{r}_1) \cdots \phi_{PN}(\vec{r}_N) \quad (3.3)$$

donde ϵ es un factor $+1$ para bosones y -1 para fermiones, C es la constante de normalización definida como $\sqrt{1/N!}$ para fermiones y $\sqrt{\frac{\prod_i N_i!}{N!}}$ para bosones. N_i es el número de partículas que se encuentran en el estado i -ésimo, para bosones puede tener valores de $[0, 1, 2, \dots, N]$ y para fermiones de $[0, 1]$. La suma \sum_P es sobre todas las permutaciones P entre estados de una sola partícula o las permutaciones entre partículas. Las funciones $\phi_{Pi}(\vec{r}_i)$ se determinarán autoconsistentemente.

Primero definiremos la función:

$$\mathbb{H} = \langle E \rangle - \sum_i^N \sum_j^N \lambda_{ij} \langle \phi_i | \phi_j \rangle, \quad (3.4)$$

que queremos maximizar, tal que $\{\lambda_{ij}\}$ son los multiplicadores de Lagrange.

El valor esperado de la energía $\langle E \rangle$ lo calculamos tomando el valor de expectación del Hamiltoniano (ecuación 3.1),

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \sum_{i=1}^N \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \hat{V}_{ext}(i) \right) | \Psi \rangle + \langle \Psi | \frac{1}{2} \sum_{i,j}^N \hat{U}(i,j) | \Psi \rangle \quad (3.5)$$

el primer término sólo involucra operadores de una sola partícula y lo calculamos a continuación,

$$\langle \Psi | \sum_{i=1}^N \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \hat{V}_{ext}(i) \right) | \Psi \rangle = \quad (3.6a)$$

$$C^2 \sum_P \epsilon^P \sum_Q \epsilon^Q \langle \phi_{P1} \cdots \phi_{PN} | \sum_{i=1}^N \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \hat{V}_{ext}(i) \right) | \phi_{Q1} \cdots \phi_{QN} \rangle = \quad (3.6b)$$

$$C^2 \sum_{i=1}^{N'} \sum_{P,Q} \epsilon^{P+Q} N_i \langle \phi_{Pi} | \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}_{ext} | \phi_{Qi} \rangle \langle \cdots \phi_{P(i-1)} \phi_{P(i+1)} \cdots | \cdots \phi_{Q(i-1)} \phi_{Q(i+1)} \cdots \rangle. \quad (3.6c)$$

Dado que las funciones de onda ϕ son ortonormales, el producto entre las funciones de estados diferentes al Pi -ésimo es igual a

$$\langle \cdots \phi_{P(i-1)} \phi_{P(i+1)} \cdots | \cdots \phi_{Q(i-1)} \phi_{Q(i+1)} \cdots \rangle = \cdots \delta_{P(i-1), Q(i-1)} \delta_{P(i+1), Q(i+1)} \cdots \quad (3.7)$$

es decir, es diferente de cero cuando la permutación P es igual a la permutación Q , por lo cual el factor $\epsilon^{P+Q} = \epsilon^{2P} = 1$.

Como ya mencionamos anteriormente N_i es el número de partículas en el estado i -ésimo de una sola partícula, también llamado el *número de ocupación*, el cual aparece

como factor del valor esperado de los potenciales

$$N_i \langle \phi_{Pi} | \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}_{ext} | \phi_{Pi} \rangle \quad (3.8)$$

esto es porque existen N_i partículas en este estado, por lo cual la suma $\sum_{i=1}^{N'}$ que corre sobre el numero de partículas se mantiene para el caso de fermiones, ya que en cada estado hay un único fermión. Para los bosones la suma se transforma en una *suma prima* donde se suma sobre partículas que están en diferentes estados. Por lo tanto, dicha suma se puede intercambiar por una suma sobre estados de una sólo partícula \sum_i^n donde n puede ser finito o infinito y los números de ocupación toman valores de, $0, 1, 2, \dots$ para bosones y $0, 1$ para fermiones. La expresión (3.6) se transforma en,

$$C^2 \sum_i^n \sum_P N_i \langle \phi_{Pi} | \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}_{ext} | \phi_{Pi} \rangle \quad (3.9)$$

que al tomar la suma sobre las permutaciones posibles entre los estados nos da el valor de C^{-2} que se cancela con el factor de normalización C^2 . El término correspondiente a los potenciales de una sólo partícula, del valor esperado de la energía es,

$$\sum_i^n N_i \langle \phi_i | \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}_{ext} | \phi_i \rangle. \quad (3.10)$$

El segundo término en el valor esperado de la energía es el potencial de interacción, que es un operador de dos partículas,

$$\langle \Psi | \frac{1}{2} \sum_{i,j}^N \hat{U}(i,j) | \Psi \rangle = \quad (3.11a)$$

$$C^2 \sum_P \epsilon^P \sum_Q \epsilon^Q \langle \phi_{P1} \cdots \phi_{PN} | \frac{1}{2} \sum_{i,j}^N \hat{U}(i,j) | \phi_{Q1} \cdots \phi_{QN} \rangle = \quad (3.11b)$$

$$\frac{C^2}{2} \sum_{i,j}^n \sum_{P,Q} \epsilon^{P+Q} f(N_i, N_j) \langle \phi_{Pi} \phi_{Pj} | \hat{U} | \phi_{Qi} \phi_{Qj} \rangle \cdot \prod_{k \neq i,j} \delta_{Pk, Qk} \quad (3.11c)$$

donde $f(N_i, N_j)$ es una función de los números de ocupación del i y j -ésimo estados. Igual que en el término anterior, las deltas nos dan una condición sobre las permutaciones P y Q , son iguales exceptuando para la i -ésima y la j -ésima, por lo que tendremos tres casos.

El primer caso es cuando consideramos que $i = j$ es decir cuando las dos partículas están en el mismo estado, es claro que este solo se cumple para el caso de los bosones. Las permutaciones son exactamente iguales $P = Q$ y la suma sobre éstas nos da un factor de C^{-2} . Este término se repite $N_i(N_i - 1)$ veces,

$$\frac{1}{2} \sum_i^n N_i(N_i - 1) \langle \phi_i \phi_i | \widehat{U} | \phi_i \phi_i \rangle. \quad (3.12)$$

El segundo caso es cuando $i \neq j$ y las permutaciones son $P_i = Q_i$ y $P_j = Q_j$, otra vez se cumple que $P = Q$, el tercer caso corresponde cuando tenemos $P_i = Q_j$ y $P_j = Q_i$ en este caso la permutación P difiere en uno de Q es decir $Q = P \pm 1$ y el factor $\epsilon^{2P \pm 1} = \epsilon$,

$$\frac{C^2}{2} \sum_{i \neq j}^n \sum_P N_i N_j \left(\langle \phi_{P_i} \phi_{P_j} | \widehat{U} | \phi_{P_i} \phi_{P_j} \rangle + \epsilon \langle \phi_{P_i} \phi_{P_j} | \widehat{U} | \phi_{P_j} \phi_{P_i} \rangle \right), \quad (3.13)$$

donde la suma sobre las permutaciones dan un factor de C^{-2} . Podemos escribir ahora el valor esperado de la energía [46],

$$\begin{aligned} \langle E \rangle = & \sum_i^n N_i \langle \phi_i | \frac{\widehat{p}^2}{2m} + \widehat{V}_{ext} | \phi_i \rangle + \\ & \frac{1}{2} \sum_i^n N_i(N_i - 1) \langle \phi_i \phi_i | \widehat{U} | \phi_i \phi_i \rangle + \\ & \frac{1}{2} \sum_i^n N_i \sum_{j \neq i}^n N_j \left(\langle \phi_i \phi_j | \widehat{U} | \phi_i \phi_j \rangle + \epsilon \langle \phi_i \phi_j | \widehat{U} | \phi_j \phi_i \rangle \right). \end{aligned} \quad (3.14)$$

El siguiente paso es tomar la variación de $\delta \mathbb{H} = 0$ para minimizar el valor de la

energía. Dada $\delta\phi$ arbitraria obtenemos que,

$$\begin{aligned} \delta\mathbb{H} = & \sum_i^n N_i \left[\langle \delta\phi_i | \frac{\widehat{p}^2}{2m} + \widehat{V}_{ext} | \phi_i \rangle + \langle \phi_i | \frac{\widehat{p}^2}{2m} + \widehat{V}_{ext} | \delta\phi_i \rangle \right] + \\ & \frac{1}{2} \sum_{i,j}^n N_i(N_j - \delta_{i,j}) \left[\langle \delta\phi_i \phi_j | \widehat{U} | \phi_i \phi_j \rangle + \langle \phi_i \delta\phi_j | \widehat{U} | \phi_i \phi_j \rangle + \langle \phi_i \phi_j | \widehat{U} | \delta\phi_i \phi_j \rangle + \langle \phi_i \phi_j | \widehat{U} | \phi_i \delta\phi_j \rangle \right] + \\ & \frac{1}{2} \epsilon \sum_{j \neq i}^n N_i N_j \left[\langle \delta\phi_i \phi_j | \widehat{U} | \phi_j \phi_i \rangle + \langle \phi_i \delta\phi_j | \widehat{U} | \phi_j \phi_i \rangle + \langle \phi_i \phi_j | \widehat{U} | \delta\phi_j \phi_i \rangle + \langle \phi_i \phi_j | \widehat{U} | \phi_j \delta\phi_i \rangle \right] - \\ & \sum_i N_i \sum_j^n \lambda_{ij} (\langle \delta\phi_i | \phi_j \rangle + \langle \phi_j | \delta\phi_i \rangle) = 0. \quad (3.15) \end{aligned}$$

Resolver esta ecuación para $\delta\phi$ o para $\delta\phi^*$ es equivalente. Sin embargo, para los términos de la suma $\sum_{i \neq j}$ no es obvio cuál término es conjugado de cuál. Tomemos el primer valor esperado

$$\langle \delta\phi_i \phi_j | \widehat{U} | \phi_j \phi_i \rangle = \int \int d\xi_1 d\xi_2 \delta\phi_i^*(\xi_1) \phi_j^*(\xi_2) U(\xi_1, \xi_2) \phi_j(\xi_1) \phi_i(\xi_2) \quad (3.16)$$

intercambiamos los índices $i \leftrightarrow j$ y tomamos el conjugado de este elemento

$$\int \int d\xi_1 d\xi_2 \phi_i^*(\xi_1) \phi_j^*(\xi_2) U(\xi_1, \xi_2) \delta\phi_j(\xi_1) \phi_i(\xi_2), \quad (3.17)$$

obtenemos el tercer término de la ecuación (3.15), lo mismo pasa para los otros dos términos restantes, uno es el conjugado del otro. Además si observamos la ecuación (3.16) intercambiando $i \leftrightarrow j$ y además intercambiando subíndices en las coordenadas $\xi_1 \leftrightarrow \xi_2$, ya que los operadores son simétricos al ser autoadjuntos, obtenemos

$$\int \int d\xi_1 d\xi_2 \delta\phi_j^*(\xi_2) \phi_i^*(\xi_1) U(\xi_1, \xi_2) \delta\phi_i(\xi_2) \phi_j(\xi_1) \quad (3.18)$$

que por definición es el valor esperado de

$$\langle \phi_i \delta\phi_j | \widehat{U} | \phi_j \phi_i \rangle \quad (3.19)$$

por lo que concluimos que el valor esperado en la ecuación (3.16) es igual a la ecuación (3.19). Con esta información podemos analizar la ecuación para $\delta\phi$,

$$\begin{aligned} \delta\mathbb{H} = \sum_i^n N_i \langle \delta\phi_i | \left[\frac{\widehat{p}^2}{2m} + \widehat{V}_{ext} | \phi_i \rangle \right] + \\ \sum_i^n N_i \langle \delta\phi_i | \left[\sum_j^n (N_j - \delta_{i,j}) \langle \phi_j | \widehat{U} | \phi_i \phi_j \rangle \right] + \\ \sum_i^n N_i \langle \delta\phi_i | \left[\epsilon \sum_{j \neq i}^n N_j \langle \phi_j | \widehat{U} | \phi_j \phi_i \rangle \right] - \\ \sum_i^n N_i \langle \delta\phi_i | \left[\sum_j^n \lambda_{ij} | \phi_j \rangle \right] = 0 \quad (3.20) \end{aligned}$$

dado que ésta es una variación arbitraria $\delta\phi$ y \sum_i^n es la suma sobre los estados, implica que para cada $N_i \neq 0$, se cumple

$$\begin{aligned} \left(\frac{\widehat{p}^2}{2m} + \widehat{V}_{ext} \right) | \phi_i \rangle + \sum_j^n (N_j - \delta_{i,j}) \langle \phi_j | \widehat{U} | \phi_i \phi_j \rangle + \\ \epsilon \sum_{j \neq i}^n N_j \langle \phi_j | \widehat{U} | \phi_j \phi_i \rangle - \sum_j^n \lambda_{ij} | \phi_j \rangle = 0. \quad (3.21) \end{aligned}$$

La interpretación de los multiplicadores de Lagrange $\{\lambda_{ij}\}$ no es obvia. Sin embargo, es posible hacer una transformación unitaria para las funciones de onda ϕ_i

$$\phi'_i = \sum_j a_{ij} \phi_j \quad (3.22)$$

para encontrar un nuevo conjunto de valores propios $\{\lambda\}$ tal que en esta base sean diagonales

$$\lambda_{ij} \longrightarrow \delta_{ij} \varepsilon_i \quad (3.23)$$

así que en términos de las funciones ϕ' la ecuación es,

$$\left(\frac{\widehat{p}^2}{2m} + \widehat{V}_{ext} \right) |\phi'_i\rangle + \sum_j^n (N_j - \delta_{i,j}) \langle \phi'_j | \widehat{U} | \phi'_i \phi'_j \rangle + \epsilon \sum_{j \neq i}^n N_j \langle \phi'_j | \widehat{U} | \phi'_j \phi'_i \rangle - \epsilon_i |\phi'_i\rangle = 0, \quad (3.24)$$

en las siguientes expresiones omitiremos la prima de las funciones de onda ϕ .

Tomemos la ecuación (3.24) y aplicamos $\langle \vec{r} |$ por el lado izquierdo:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}) \right) \phi_i(\vec{r}) + \left(\int d\xi \sum_j N_j |\phi_j(\xi)|^2 U(\vec{r} - \xi) \right) \phi_i(\vec{r}) + \epsilon \sum_{j \neq i} N_j \phi_j(\vec{r}) \left[\int d\xi \phi_j^*(\xi) U(\vec{r}, \xi) \phi_i(\xi) \right] = \epsilon_i \phi_i(\vec{r}), \quad (3.25)$$

obtenemos n ecuaciones acopladas que son el resultado del método de Hartree-Fock. Hemos pasado de tener una ecuación diferencial de N partículas a n ecuaciones de una sola partícula, tal que el primer término de la ecuación (3.25) representa la energía cinética y potencial de una partícula, el segundo término es el llamado de campo medio, pues es la interacción de la i -ésima partícula con el campo generado por la densidad de todo el gas, mientras el último término, el de intercambio depende fuertemente si las partículas son bosones o fermiones por el factor ϵ . Por último ϵ_i se interpreta como la energía de la partícula i -ésima, es la energía de una partícula en un campo efectivo.

3.2. Colisiones binarias en la aproximación de onda

S

Hasta este momento solamente hemos pedido que la interacción entre las partículas sea por pares. Trabajaremos en el régimen de bajas energías, es decir cuando la energía cinética de las partículas es pequeña, por lo cual las colisiones que examinaremos son de baja energía. El desarrollo aquí mostrado se puede encontrar en la literatura convencional [43, 50].

Consideremos la colisión de dos partículas idénticas de masa m a bajas energías interactuando, $U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$. Para facilitar los cálculos cambiaremos al sistema de coordenadas de centro de masa $\vec{R} = (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)/2$ y coordenadas relativas $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$. El movimiento del centro de masa dependerá del potencial de confinamiento en el cual se encuentren las partículas, sin embargo en esta sección no nos ocuparemos de esto. Las colisiones ocurren en el movimiento relativo y corresponden a la dispersión de una partícula de masa $m/2$ debido a una fuerza central $U(|\vec{r}|)$.

Nos concentraremos en resolver el movimiento de una partícula bajo el efecto de un potencial $U(|\vec{r}|)$, para ello encontraremos la función de onda resolviendo la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m/2}\nabla^2\psi(\vec{r}) + U(|\vec{r}|)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \quad (3.26)$$

Proponemos como solución una función de onda de la forma [50]

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \psi_{sc}(\vec{r}) \quad (3.27)$$

donde la función de onda plana $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ representa la solución de la ecuación de onda lejos del potencial central, en este límite se considera un partícula libre, donde $p = \hbar k$ es

el momento lineal de la partícula y la energía E de la partícula, es la energía cinética que depende de k como

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{m}. \quad (3.28)$$

La función $\psi_{sc}(\vec{r})$ es la parte de la función de onda dispersada, nuestra finalidad es encontrar esta función.

Primero analizaremos nuestra solución para la dispersión en el espacio de k [50],

$$\psi(r) = e^{ikr} + \psi_{sc}(r), \quad (3.29)$$

definimos la transformada de Fourier en una caja de volumen V de la función $f(r)$ como

$$\tilde{f}(k) = \int_V d\vec{r} e^{-ikr} f(r) \quad (3.30)$$

y

$$f(r) = \frac{1}{V} \sum_k e^{ikr} \tilde{f}(k) \quad (3.31)$$

con

$$\int_V d\vec{r} e^{-i(k-k')r} = V \delta_{k,k'} \quad (3.32)$$

y

$$\sum_k e^{ik(r-r')} = V \delta(r-r'). \quad (3.33)$$

Los valores que toma k son:

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z) \quad (3.34)$$

con $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ e $i = x, y, z$.

Tomando la transformada de Fourier en ambos lados de la ecuación de Schrödinger, obtenemos lo siguiente

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{m} \tilde{\psi}(k') + \frac{1}{V} \sum_{k''} \tilde{U}(k' - k'') \tilde{\psi}(k'') = E_k \tilde{\psi}(k') \quad (3.35)$$

donde E_k es la solución de la energía correspondiente al valor de k . Reescribimos la solución propuesta en el espacio de k

$$\tilde{\psi}(k') = V\delta_{k,k'} + \tilde{\psi}_{sc}(k') \quad (3.36)$$

la sustituimos en la ecuación de Schrödinger y obtenemos una ecuación para la función que representa la dispersión $\tilde{\psi}_{sc}(k')$. Recordando que buscamos soluciones para regiones lejos del potencial tal que la partícula se comporte como partícula libre con energía E_k , podemos encontrar que la función que representa la dispersión cumple con la ecuación

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{m} - \frac{\hbar^2 k'^2}{m}\right) \tilde{\psi}_{sc}(k') = \tilde{U}(k' - k) + \frac{1}{V} \sum k'' \tilde{U}(k' - k'') \tilde{\psi}_{sc}(k''). \quad (3.37)$$

Definimos la matriz de dispersión T como la solución de la ecuación anterior

$$\tilde{\psi}_{sc}(k') = \frac{1}{E_k - E_{k'} + i\delta} T(k', k; E_k) \quad (3.38)$$

donde $\delta \rightarrow 0^+$ es una cantidad necesaria para obtener las soluciones de la función de onda cuando se toma la transformada de Fourier. Si se sustituye la solución en la ecuación de Schrödinger recurrentemente se obtiene la ecuación de Lippman-Schwinger, la cual es una ecuación autoconsistente para T . La matriz T la usaremos más adelante para completar nuestra aproximación. Ahora regresaremos a la ecuación de Schrödinger en el espacio r y tomaremos la aproximación a bajas energías.

La ecuación de Schrödinger en el espacio de r tiene la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m/2} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + U(|\vec{r}|) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}), \quad (3.39)$$

dado que el potencial de interacción es un potencial central podemos realizar una transformación a coordenadas esféricas, $\vec{r} = (r, \theta, \phi)$ y $U(r)$, donde $r = |\vec{r}|$. Escogemos

la onda incidente a lo largo del eje z , tal que $\vec{k} = k\hat{z}$. Es fácil ver que la dispersión es independiente del ϕ , es decir, $\psi_{sc}(\vec{r}) = \psi_{sc}(r, \theta)$.

El problema para un potencial general en pocas ocasiones se puede resolver, sin embargo las interacciones interatómicas tienen un alcance de algunos radios atómicos, podemos suponer un potencial de interacción de corto alcance, es decir, $U(r) \rightarrow 0$ para $r \gg r_o$, donde r_o es el alcance del potencial.

Deseamos conocer la dispersión, por lo cual nos concentraremos en la región donde el potencial de interacción es cero, $r \gg r_o$ y suponemos que la solución son ondas esféricas de la forma

$$\psi_{sc}(r, \theta) \approx f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (3.40)$$

donde $kr = |\vec{k}||\vec{r}|$. El coeficiente $f(\theta)$ se denomina como la amplitud de dispersión y contiene toda la información de la colisión.

Por otro lado, la solución general de la ecuación de Schrödinger en coordenadas esféricas la podemos proponer como

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \theta) R_{lk}(r) \quad (3.41)$$

donde $l = 0, 1, 2, \dots$ es el momento angular, las funciones $P_l(\cos \theta)$ son los polinomios de Legendre.

Al sustituir esta solución en la ecuación de Schrödinger, la parte relativa a la coordenada radial queda

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) R_{lk}(r) + \left[k^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{m}{\hbar^2} u(r) \right] R_{lk}(r) = 0 \quad (3.42)$$

y la amplitud de dispersión queda en términos de los polinomios de Legendre

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos \theta). \quad (3.43)$$

Recordando que queremos la aproximación a bajas energías, el cual equivale a tomar sólo el término $l = 0$, lo que es llamado *aproximación de onda S*. Es fácil mostrar que para $r \gg r_o$ la amplitud de dispersión en la aproximación de onda S es

$$f(\theta) \approx \frac{1}{2ik}(e^{2i\delta_o}) - 1 \quad (3.44)$$

donde δ_o se denomina como *el corrimiento de fase de la onda S*. La fase contiene la información del potencial de interacción.

3.2.1. La longitud de dispersión

La *longitud de dispersión a* se define como

$$\tan \delta_o = -ka \quad (3.45)$$

En el límite de bajas energías, para $k \rightarrow 0$, el valor absoluto de $|ka| \ll 1$, y la tangente se aproxima

$$\tan \delta_o \approx \text{sen } \delta_o \approx \delta_o \approx -ka. \quad (3.46)$$

En la función de onda dispersada, la anterior aproximación es

$$\psi(r, \theta) = f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (3.47)$$

$$\approx \frac{1}{2ik}(e^{2i\delta_o} - 1) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (3.48)$$

$$\approx \frac{\text{sen } \delta_o}{kr} e^{i(kr + \delta_o)} \quad (3.49)$$

que al tomar la aproximación $|ka| \ll 1$, finalmente obtenemos

$$\psi(r) \approx -\frac{a}{r} e^{ik(r-a)}. \quad (3.50)$$

La longitud de dispersión se interpreta físicamente como un corrimiento en la función de onda debido al potencial central. Podemos imaginar que el potencial es

una esfera *dura* con radio a . Si la longitud de dispersión tiene signo positivo $a > 0$ nuestra intuición es correcta, tenemos una pared dura en $r = a$ y el potencial de interacción es *repulsivo*. Sin embargo para el caso contrario para una longitud de dispersión $a < 0$, la función de onda se corre hacia el centro del potencial, en este caso tenemos un potencial *atractivo*. Para nuestro estudio es fundamental analizar el signo de la longitud de dispersión a . Un potencial repulsivo $a > 0$ fomenta la aparición del BEC al impedir la formación de moléculas o la transición a líquido. Sin embargo una potencial atractivo $a < 0$ permitirá la formación de moléculas y la transición a líquido por lo que no se formará el BEC.

3.2.2. Potencial de interacción a bajas temperaturas

Ahora conectaremos las ideas anteriores con nuestro problema de muchos cuerpos. Primero tomaremos la transformada de Fourier a la función dispersada (3.38)

$$\psi(r) = \frac{1}{V} \sum_{k'} e^{ik'r} \frac{1}{Ek - E_{k'} + i\delta} T(k', k; E_k), \quad (3.51)$$

tomamos el limite termodinámico $V \rightarrow \infty$, es decir un sistema macroscópico, lo cual en nuestros cálculos es equivalente a tomar

$$\sum_k \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{k}' e^{ik'r} \frac{1}{Ek - E_{k'} + i\delta} T(k', k; E_k). \quad (3.52)$$

Nuestro sistema se encuentra a temperaturas bajas por lo cual la energía de la colisión $E_k \rightarrow 0$ y $k \rightarrow 0$, al sustituir estos valores en la matriz de transferencia podemos aproximar

$$T(k', k \rightarrow 0; E_k \rightarrow 0) \approx T(0, 0; 0), \quad (3.53)$$

tomando el límite en la función dispersada

$$\psi(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{k}' \frac{1}{Ek - E_{k'} + i\delta} T(k', k; E_k) \quad (3.54)$$

$$\approx -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{m}{\hbar^2} T(0, 0; 0) \int d\vec{k}' \frac{e^{ikr}}{k'^2} \quad (3.55)$$

$$\approx -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{m}{\hbar^2} T(0, 0; 0) \left(\frac{2\pi^2}{r} \right) \quad (3.56)$$

$$= -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{m}{\hbar^2} T(0, 0; 0) \frac{1}{r} \quad (3.57)$$

y comparando con la ecuación (3.50) con la obtenida para $\psi_{sc}(r)$ en el límite $k \rightarrow 0$ podemos concluir que

$$T(0, 0; 0) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}. \quad (3.58)$$

La matriz de dispersión satisface la ecuación de Lippman-Schwinger y en una primera aproximación podemos escribir

$$T(0, 0; 0) \approx \tilde{U}(0) \approx \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}, \quad (3.59)$$

cabe notar que

$$\tilde{U}(0) = \int d\vec{r} U(r) \approx \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}, \quad (3.60)$$

concluimos introduciendo la siguiente notación

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}. \quad (3.61)$$

La ecuación de Lippman-Schwinger es una ecuación autoconsistente y en nuestro caso sólo hemos tomado el primer término, esto bajo la aproximación que nuestro sistema está a una temperatura muy baja y por tanto las colisiones son de baja energía.

3.3. Ecuaciones de Hartree-Fock en la aproximación de onda S

Nosotros nos restringiremos al caso de bosones en un potencial de confinamiento, es decir, que el potencial externo tenga un mínimo y a interacciones por pares en la aproximación de onda S y de contacto como,

$$U(\vec{r}, \vec{r}') = U_0 \delta(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (3.62)$$

donde a es la longitud de dispersión (ver la ecuación 3.61). Un gas a bajas temperaturas y diluido es un ejemplo al cual se aplica esta aproximación.

Regresando a nuestro análisis en la aproximación de Hartree-Fock, primero analizamos el valor esperado de

$$\langle ri | \hat{U} | jk \rangle \quad (3.63)$$

sustituyendo el potencial de interacción explícitamente, la anterior expresión se reduce a

$$\begin{aligned} \int \int d\xi_1 d\xi_2 \delta(\vec{r} - \xi_1) \phi_i^*(\xi_2) U_0 \delta(\xi_1 - \xi_2) \phi_j(\xi_1) \phi_k(\xi_2) = \\ \int d\xi_2 \phi_i^*(\xi_2) U_0 \delta(\vec{r} - \xi_2) \phi_j(\vec{r}) \phi_k(\xi_2) = \\ U_0 \phi_i^*(\vec{r}) \phi_j(\vec{r}) \phi_k(\vec{r}) \end{aligned} \quad (3.64)$$

y la ecuación (3.24) queda como,

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}) \right) \phi_i(\vec{r}) + U_0 \sum_j^n N_j |\phi_j(\vec{r})|^2 \phi_i(\vec{r}) + \\ U_0 \sum_{j \neq i}^n N_j |\phi_j(\vec{r})|^2 \phi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\vec{r}), \end{aligned} \quad (3.65)$$

suponemos otra vez que $N_i \neq 0$ y además que tienen poblaciones macroscópicas por lo que despreciamos el término $\delta_{i,j}$.

Queremos conocer el comportamiento del Condensado de Bose-Einstein, por lo cual tomamos la ecuación para las partículas del estado base, $i = 0$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext}(\vec{r})\right)\phi_0(\vec{r}) + U_0 N_0 |\phi_0(\vec{r})|^2 \phi_0(\vec{r}) + U_0 \sum_{j \neq 0}^n N_j |\phi_j(\vec{r})|^2 \phi_0(\vec{r}) = \varepsilon_0 \phi_0(\vec{r}) \quad (3.66)$$

definimos el perfil de densidad de partículas en el condensado como

$$\rho_0(\vec{r}) = N_0 |\phi_0(\vec{r})|^2 \quad (3.67)$$

y el correspondiente a las partículas que no están en el estado base

$$\rho_{th}(\vec{r}) = \sum_{\alpha \neq 0} N_\alpha |\phi_\alpha(\vec{r})|^2, \quad (3.68)$$

la ecuación (3.66) se puede escribir ahora de la forma

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}) + U_0 \rho_0(\vec{r}) + 2U_0 \rho_{th}(\vec{r})\right)\phi_0(\vec{r}) = \varepsilon_0 \phi_0(\vec{r}). \quad (3.69)$$

Para el caso de $i \neq 0$ y recordando que $N_i \neq 0$ tenemos

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext}(\vec{r})\right)\phi_i(\vec{r}) + U_0 N_0 |\phi_0(\vec{r})|^2 \phi_i(\vec{r}) + U_0 \sum_{j \neq 0}^n N_j |\phi_j(\vec{r})|^2 \phi_i(\vec{r}) + U_0 N_0 |\phi_0(\vec{r})|^2 \phi_i(\vec{r}) + U_0 \sum_{j \neq 0, i}^n N_j |\phi_j(\vec{r})|^2 \phi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\vec{r}) \quad (3.70)$$

que en términos del perfil de densidad del gas, definido por

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\alpha} N_\alpha |\phi_\alpha(\vec{r})|^2 \quad (3.71)$$

que cumple con la relación

$$N = \int d\vec{r} \rho(\vec{r}), \quad (3.72)$$

podemos reescribir la ecuación (3.70) como

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}) + 2U_0 \rho(\vec{r}) \right) \phi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\vec{r}). \quad (3.73)$$

Las ecuaciones (3.69) y (3.73) encontradas por Goldman *et al.* [51] están acopladas y se pueden interpretar como las ecuaciones de dos diferentes tipos de gases, tomando en cuenta que para $T > T_c$ el perfil de densidad del condensado $\rho_0(\vec{r})$ es cero para todo punto del espacio y para $T < T_c$ es mayor que cero. Nos concentraremos en encontrar los perfiles de densidad de los dos gases, en lugar de encontrar la función de onda de cada estado al resolver las n ecuaciones acopladas.

Ahora tomaremos la aproximación de densidad local discutida en la sección (2.4), para ello definimos al potencial efectivo de la ecuación (3.73) como

$$V_{eff}(\vec{r}) = V_{ext}(\vec{r}) + 2U_0 \rho(\vec{r}). \quad (3.74)$$

La aproximación de densidad local, supone que las partículas se comportan localmente como una partícula libre, por lo que su función de onda es de una onda estacionaria y obedecen la estadística de Bose-Einstein tal que su densidad localmente es

$$\rho = \frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{1}{V} \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(\alpha'), \quad (3.75)$$

donde $\alpha' = \frac{\mu'}{kT}$, es decir el potencial químico μ más una corrección

$$\mu' \leftrightarrow \mu - V_{eff}(\vec{r}), \quad (3.76)$$

esto nos da una expresión para el perfil de densidad térmico que depende explícitamente de la posición

$$\rho_{th}(\vec{r}) = \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2} \left(\frac{1}{kT} [\mu - V_{eff}(\vec{r})] \right). \quad (3.77)$$

Para encontrar el perfil de densidad del condensado tomaremos una aproximación tipo Thomas-Fermi [46] al suponer que la energía cinética del estado base sea menor a la energía de interacción, despreciando el término cinético en la ecuación (3.69), obtenemos la siguiente expresión

$$V_{ext}(\vec{r}) + U_0\rho_0(\vec{r}) + 2U_0\rho_{th}(\vec{r}) - \varepsilon_0 = 0, \quad (3.78)$$

despejando de la anterior ecuación encontramos el perfil de densidad del condensado

$$\rho_0(\vec{r}) = \frac{1}{U_0} (\varepsilon_0 - V_{ext}(\vec{r}) - 2U_0\rho_{th}(\vec{r})) \quad (3.79)$$

y como ya hemos mencionado anteriormente, se debe cumplir que para toda \vec{r} este valor debe ser positivo, por lo que se define como cero en el caso contrario.

Las expresiones (3.74), (3.77) y (3.79) son las *ecuaciones autoconsistentes de Hartree-Fock* [46] para un gas de bosones débilmente interactuantes en un potencial externo, de las cuales podemos obtener los perfiles de densidad térmico y del estado base. Recordemos las aproximaciones hechas para llegar a estas, (i) teoría de Hartree-Fock o aproximación de campo medio, consiste en suponer que cada partícula se encuentra en un campo efectivo generado por la interacción entre partículas, (ii) aproximación de onda S , la interacción entre las partículas es de corto alcance y radial tal que está caracterizada por el parámetro a , la longitud de dispersión, (iii) identificación de los perfiles de densidad con las funciones de onda, como se muestra en (3.67) y (3.68), (iv) límite termodinámico, al suponer que tenemos una población macroscópica y aplicar la teoría estadística de los gases, es decir, al usar la estadística de Bose-Einstein junto con la *aproximación de densidad local* y obtener (3.77), (v)

aproximación de Thomas-Fermi, al despreciar el término cinético del perfil de densidad del gas condensado y así encontrar (3.79). En conclusión los perfiles de densidad engloban información microscópica del sistema por como fueron definidos y macroscópicos al ser funciones del potencial químico μ que es una variable termodinámica.

3.3.1. Aproximación de Thomas-Fermi

Si suponemos que el gas está completamente en su fase condensada, esto ocurre a temperatura $T = 0$ o muy bajas, esencialmente todo el gas esta en el estado base, de la ecuación (3.69) al sustituir $\rho_{th} = 0$; obtenemos la ecuación de Gross-Pitaevskii (1961) [25]

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi_0(\vec{r}) + V_{ext}(\vec{r})\phi_0 + U_0|\phi_0(\vec{r})|^2\phi_0 = \mu\phi_0. \quad (3.80)$$

Esta es la solución al problema de N partículas interactuantes por pares en la aproximación de onda S en el estado base y atrapadas en un potencial externo V_{ext} . Dado que la mayoría del gas está en el condensado, esto nos da pauta a suponer que su temperatura es baja en comparación con la temperatura crítica T_c . Haremos una suposición más, que la energía cinética por partícula es pequeña en comparación con la energía potencial y/o de interacción, así pues, podemos despreciarla y obtener la ecuación

$$[V_{ext}(\vec{r}) + U_0|\phi_0(\vec{r})|^2]\phi_0 = \mu\phi_0, \quad (3.81)$$

cuya solución es

$$\rho_0(\vec{r}) = |\phi_0(\vec{r})|^2 = \frac{1}{U_0}[\mu - V_{ext}(\vec{r})] \quad (3.82)$$

en la región donde es positiva y cero en el caso contrario. La condición de frontera para la nube del gas es cuando $V_{ext}(\vec{r}) = \mu$. Y el número de partículas en la nube, que

coincide con el número en el condensado $N \sim N_0$ es

$$N = \int d\vec{r} \rho_0(\vec{r}). \quad (3.83)$$

Tomando un potencial externo del tipo cuadrupolar lineal $|\vec{A} \cdot \vec{r}|$, la ecuación anterior (3.83) nos proporciona el valor del potencial químico

$$\mu_{tf} = \left(12 A^3 \frac{N \hbar^2 a}{m} \right)^{\frac{1}{4}}. \quad (3.84)$$

Esta aproximación será importante para nosotros, por ser de la cual tomaremos los valores iniciales para encontrar el perfil de densidad y el potencial químico en la aproximación autoconsistente de Hartree-Fock. En los cálculos numéricos se comienzan los programas en las temperaturas cercanas a cero, que corresponden a la aproximación de Thomas-Fermi.

3.4. El gas homogéneo débilmente interactuante

Analizaremos el caso homogéneo, cuando $V_{ext}(\vec{r}) = 0$ dentro de un volumen V e infinito fuera de este volumen, por lo que las partículas permanecen atrapadas sin sentir ningún potencial externo salvo en las fronteras. Las ecuaciones (3.73) y (3.69) se transforman en,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + 2U_0 \rho(\vec{r}) \right) \phi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\vec{r}) \quad (3.85a)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_0 \rho_0(\vec{r}) + 2U_0 \rho_{th}(\vec{r}) \right) \phi_0(\vec{r}) = \varepsilon_0 \phi_0(\vec{r}). \quad (3.85b)$$

Como primera observación, tenemos que los perfiles de densidad ya no dependen de la posición, $\rho_{th} \neq \rho_{th}(\vec{r})$ y $\rho_0 \neq \rho_0(\vec{r})$, es decir, son constantes; esto significa que el

gas es homogéneo y que las densidades son

$$\rho_{th} = \frac{N_{th}}{V}, \quad (3.86a)$$

$$\rho_0 = \frac{N_0}{V}, \quad (3.86b)$$

con $N_{th} = \sum_{\alpha \neq 0} N_\alpha$ y cumpliendo la relación

$$N = N_0 + \sum_{\alpha \neq 0} N_\alpha. \quad (3.87)$$

La condición de homogeneidad implica que podamos suponer las funciones de onda como ondas planas

$$\phi_k = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-ih(\vec{k} \cdot \vec{r})} \quad (3.88)$$

y la función de onda del estado base (para $k = 0$) como $\phi_0 = \frac{1}{\sqrt{V}}$. Sustituyendo las funciones de onda antes mencionadas en las ecuaciones (3.85), obtenemos las siguientes ecuaciones para las energías,

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U_0(2\rho) = \varepsilon_k \quad (3.89a)$$

$$U_0(2\rho_{th} + \rho_0) = \varepsilon_0. \quad (3.89b)$$

Suponemos que el gas de bosones está a una temperatura T y que tiene un potencial químico μ tal que N_k , el número de partículas en el estado k , se pueda escribir como

$$N_k \longrightarrow n_k = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1} \quad (3.90)$$

el número promedio de ocupación, que obedece la estadística de Bose-Einstein, que nos dice que existe una temperatura crítica T_c tal que abajo de ella, aparece una población del orden de N en el estado base. Sin embargo para $T > T_c$ la ocupación

de n_0 es del orden de uno, por lo que podemos suponer que $\rho_0 = 0$, implicando que $N_{th} = N$ y que $\rho_{th} = N/V$. Las ecuaciones para las energías (3.89) son ahora

$$\varepsilon_0 = 2\rho_{th}U_0 \quad (3.91a)$$

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2U_0\rho_{th} = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (3.91b)$$

y hay que notar que $\varepsilon_0 \neq 0$.

La física estadística da la siguiente relación,

$$N = \sum_{k \neq 0} n_k = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d^3k}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1} \quad (3.92)$$

y usando la definición $\rho_{th} = \sum_{k \neq 0} n_k$, sustituimos el valor de la energía ε_k , encontramos que la relación para la densidad de partículas es

$$\rho = \rho_{th} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d^3k}{e^{\beta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2U_0\rho_{th} - \mu\right)} - 1}, \quad (3.93)$$

es decir el número de partículas del gas es

$$N = \frac{V}{\lambda^3} g_{\frac{3}{2}}(\mu - 2\rho_{th}U_0) \quad (3.94)$$

donde la temperatura crítica T_c , dada N con un valor fijo, está definida cuando se cumple la relación $\mu = 2\rho_{th}U_0$, es decir cuando $g_{\frac{3}{2}}(0) = 2.61238$, que es la misma que en el caso de un gas ideal de Bose en un potencial de paredes rígidas. En general, las cantidades termodinámicas del sistema serán iguales al del gas ideal arriba de la temperatura crítica. Como veremos más adelante la definición de la T_c es cuestionable en este caso; sin embargo, continuaremos con el análisis de las ecuaciones resultantes de Hartree-Fock para el caso de un gas homogéneo.

Para temperaturas por debajo de la temperatura crítica $T < T_c$, el número de ocupación promedio para el estado base es,

$$n_0 = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_0 - \mu)} - 1} \quad (3.95)$$

esta cantidad es siempre positiva por definición, lo que implica que el potencial químico μ es igual a la energía del estado base ε_0 . Sustituimos $\varepsilon_0 = \mu$ en las ecuaciones de las energías y obtenemos las siguientes relaciones para las densidades,

$$\rho_0 = \frac{\mu}{U_0} - 2\rho_{th} \quad (3.96a)$$

$$\rho_{th} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{k} \frac{1}{e^{\beta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2U_0(\rho_{th} + \rho_0) - \mu\right)} - 1} \quad (3.96b)$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{k} \frac{1}{e^{\beta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U_0\rho_0 - \mu\right)} - 1} \quad (3.96c)$$

y cumpliendo con la relación de

$$\rho = \rho_0 + \rho_{th}. \quad (3.97)$$

Las relaciones entre las energías ε_k y el número cuántico k son,

$$\mu = \varepsilon_0 = U_0(\rho_0 + 2\rho_{th}) \quad (3.98a)$$

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \varepsilon_0 + \rho_0 U_0 \quad (3.98b)$$

$$= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2U_0\rho. \quad (3.98c)$$

llamado el espectro de energías, que en este caso tiene un *gap* $\Delta = U_0\rho_0$. Podemos identificar este *gap*, con la teoría de Landau [52, 53] para superfluidez. Por tanto, podemos manejar al condensado de Bose-Einstein como un gas en estado superfluido.

Capítulo 4

Gas en un potencial cuadrupolar lineal

En el capítulo anterior desarrollamos la teoría autoconsistente de Hartree-Fock, encontramos la aproximación de Thomas-Fermi, así como el caso particular de un gas homogéneo. En el presente capítulo usaremos dicha teoría para el caso de un gas confinado en un potencial cuadrupolar lineal, resolvimos numéricamente las ecuaciones autoconsistentes y en el presente capítulo discutimos el comportamiento del gas.

4.1. Gas en un potencial cuadrupolar lineal en la aproximación de Hartree-Fock, solución computacional

En la presente sección esbozaremos el programa computacional en lenguaje Fortran que fue usado en la presente tesis doctoral para encontrar las variables termodinámicas de un gas de Bose en una trampa cuadrupolar lineal en la aproximación de Hartree-Fock. A partir de la teoría desarrollada en el Capítulo 3, en particular los

perfiles de densidad, bosquejaremos los cálculos computacionales realizados y mostraremos los resultados en formato de gráficas.

Para un gas de bosones en una trampa cuadrupolar lineal tal que su potencial de confinamiento tiene la forma de la ecuación (1.29),

$$V_{ext}(\vec{r}) = \sqrt{(A_x x)^2 + (A_y y)^2 + (A_z z)^2}, \quad (4.1)$$

las ecuaciones autoconsistentes de Hartree-Fock en la aproximación de onda S y de Thomas-Fermi a resolver son (3.74), (3.77) y (3.79).

Además, se exige la restricción que el número de partículas cumpla que

$$N = \int [\rho_0(\vec{r}) + \rho_{th}(\vec{r})] d\vec{r}, \quad (4.2)$$

y que el potencial químico μ sea igual a la energía del estado base, por el mismo argumento dado anteriormente en la sección (3.4).

Reescribiendo los perfiles de densidad obtenemos las siguientes ecuaciones,

$$\rho_{th}(\vec{r}) = \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2} [\beta (-\mu + V_{ext}(\vec{r}) + 2U_0 \rho_{th})] \quad (4.3a)$$

$$\rho_0(\vec{r}) = \frac{1}{U_0} (\mu - V_{ext}(\vec{r}) - 2U_0 \rho_{th}), \quad (4.3b)$$

que aunada con la ecuación anterior del número de partículas N , tenemos tres ecuaciones autoconsistentes. Sin embargo, no hay una solución analítica para estas ecuaciones, por lo cual en la tesis doctoral optamos por desarrollar un programa en lenguaje Fortran para determinar los perfiles de densidad, y con éstos, la presión generalizada \mathcal{P} .

El camino que optamos para calcular la presión generalizada \mathcal{P} fue fijar un valor de la densidad N/\mathcal{V} y tomar un intervalo de temperaturas T . Con esto encontramos las isócoras del sistema. El programa requiere una densidad fija y una temperatura inicial, una vez que se proporcionan estos datos, lo primero que determina el programa es el valor de $\alpha = \mu/kT$ que le corresponde a la densidad y temperatura seleccionadas, con la restricción de que se cumpla la ecuación del número de partículas (4.2). Y para cumplir con la restricción del número de partículas se procede a encontrar los perfiles de densidad térmico y del condensado, ecuaciones (4.3), para cada punto en el espacio. Una vez que se encuentra el valor de α , consistente con los valores seleccionados de la densidad y de la temperatura, se calculó la presión definida por la ecuación (1.53),

$$\mathcal{P} = \frac{1}{3}A^3 \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) \sqrt{(A_x x)^2 + (A_y y)^2 + (A_z z)^2}. \quad (4.4)$$

Con lo anterior, el programa nos proporciona el estado termodinámico del sistema $[T, N/\mathcal{V}, \mathcal{P}]$ y su correspondiente valor del potencial químico μ . Este proceso se repite para el intervalo de temperaturas, con una densidad fija, calculando la isócora correspondiente a dicha densidad del sistema. Se repite la metodología para diferentes densidades, lo que nos permitió construir gráficamente la ecuación de estado de un gas de Bose confinado en una trampa cuadrupolar lineal en la aproximación de Hartree-Fock, onda S y Thomas-Fermi (fig. 4.1). Una vez que obtuvimos la ecuación de estado en forma numérica, el siguiente paso fue calcular la energía libre de Helmholtz de acuerdo a la expresión $F = -\mathcal{P}\mathcal{V} + \mu N$ y, a partir de ésta, la entropía S , la energía E , la capacidad calorífica C_V y la susceptibilidad isotérmica κ_T . A continuación esbozaremos como está constituido el programa *isocoras.f* que es el que realiza el cálculo.

ECUACION DE ESTADO, GAS DE BOSONES EN UNA TRAMPA CUADROPOLAR

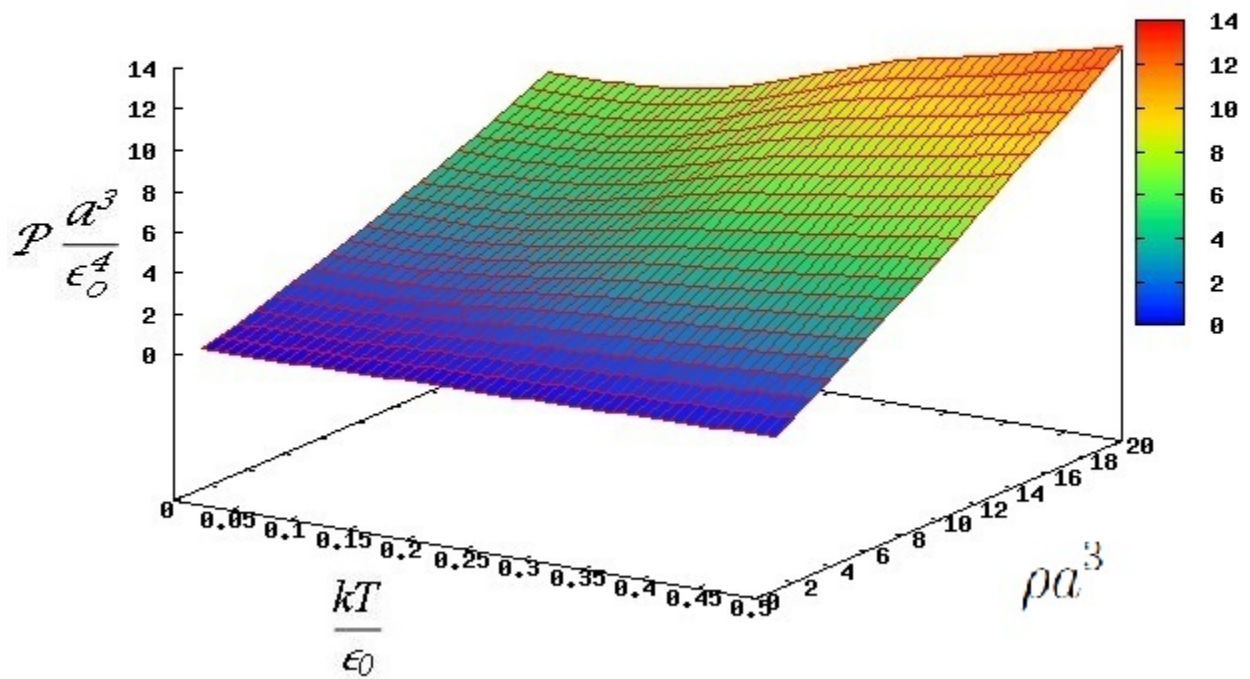


Figura 4.1: Se muestra la gráfica de la ecuación de estado, el eje vertical representa la presión generalizada adimensional $\mathcal{P}(a^3/\epsilon_0^4)$. El intervalo de la temperatura adimensional kT/ϵ_0 es $(0, 0.5]$, de la densidad adimensional ρa^3 es $(0, 20]$ y la presión generalizada adimensional $(0, 14)$.

El programa *isocoras.f* está compuesto por varios subprogramas que a continuación describiremos. Todas las variables, la presión generalizada \mathcal{P} , temperatura T , densidad N/\mathcal{V} , α y sus respectivas ecuaciones dentro del programa y en las gráficas, son adimensionales; siguiendo el cambio de variable expuesto en el Apéndice C. La energía libre de Helmholtz, la entropía, la energía, la capacidad calorífica y la susceptibilidad isotérmica, se toman por partícula *i.e.* molares. Decidimos calcular isócoras, las cuales tienen un dominio de $kT/\epsilon_0 = (0, 0.5]$ en unidades adimensionales, la densidad la tomamos en el intervalo $\rho a^3 = (0, 20]$ y la presión generalizada adimensional tomó valores de $\mathcal{P}(a^3/\epsilon_0^4) = (0, 15)$.

En la presente tesis se realizó el computo para un intervalo de la densidad adimensional de $(0, 20]$, como se muestra en la figura (4.1); sin embargo, por la gran cantidad de datos obtenidos, en la presente tesis se muestran en general las gráficas correspondientes a una densidad $\rho a^3 = 10$, que corresponde a la mitad del intervalo estudiado y dónde los cálculos numéricos permitieron tomar un mayor número de datos en el intervalo $(0, 0.5]$ de la temperatura kT/ϵ_0 , para realizar el cómputo de la primera y segunda derivada de la energía libre de Helmholtz. Se calculó las propiedades termodinámicas en todo el intervalo de las densidades y se observó que tenían el mismo comportamiento.

El error en el cómputo de la densidad de este programa se muestra en la figura (4.2). El programa calcula el perfil de densidad y una vez que se tiene esta función se realiza la integración numérica para verificar que la densidad de partículas concuerde con la proporcionada al programa inicialmente. El error en el cómputo es la diferencia entre el resultado de la integración numérica del perfil de densidad y el valor de la densidad proporcionada al inicio del cómputo; se establece que el error sea menor a

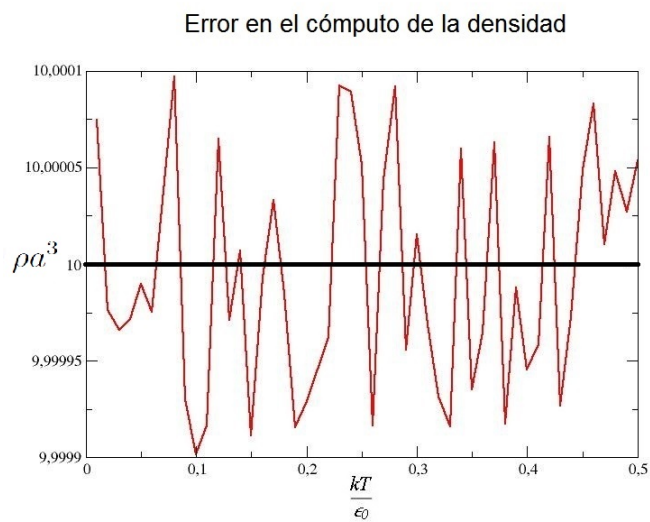


Figura 4.2: Para obtener las variables termodinámicas de nuestro sistema primero se calcula el perfil de densidad dada una densidad y una temperatura. El error es la diferencia entre el valor de la integración numérica del perfil de densidad y el valor dado inicialmente de la densidad.

0.0001. Se tomó de esta forma, ya que con estos datos, posteriormente, se calcularon la primera y segunda derivada.

Perfiles de densidad. Una parte importante de nuestro programa son los cálculos de los perfiles de densidad térmico y del condensado. Para obtenerlos fijamos dos parámetros: el potencial químico μ/ε_0 y la temperatura kT/ε_0 , y procedemos a resolver las ecuaciones autoconsistentes (4.3) para cada punto del espacio. Dada la simetría del problema podemos pasar a coordenadas elípticas y las ecuaciones autoconsistentes del perfil de densidad dependen únicamente de la componente $|r'|$ (Apéndice C). El programa *denhf.f* encuentra el valor del perfil de densidad térmico $\rho'_{th}(r')$ para cada r en la ecuación (4.3.a) usando un método estándar para encontrar raíces de una ecuación de una variable, y utilizando como adivinanza inicial el perfil de densidad encontrado en la aproximación de Thomas-Fermi (ecuación 3.82). Una vez que se obtiene el perfil de densidad térmico $\rho'_{th}(r')$ se calcula el perfil de densidad del condensado $\rho'_0(r')$ (ecuación 4.3b) y el perfil de densidad dado por $\rho'(r') = \rho'_{th}(r') + \rho'_0(r')$. Repitiendo el procedimiento para diferentes r' obtenemos los perfiles de densidad del gas, como se muestra en la fig. (4.3).

Sin embargo, al estudiar el comportamiento de la ecuación del perfil de densidad (ecuación 4.3) con ayuda del programa *Mathematica* observamos que tenemos raíces múltiples para temperaturas por debajo de la crítica. Las soluciones de las ecuaciones del perfil de densidad (ecuación 4.3) son como se muestran en la figura (4.4). La primera solución marcada de color negro se obtiene al encontrar las raíces de la ecuación del perfil de densidad térmico (ecuación 4.3.a), es decir, sin tener en cuenta la parte del condensado. En la segunda solución marcada de color rojo, se pide la autoconsistencia de las ecuaciones del perfil de densidad térmico y del condensado

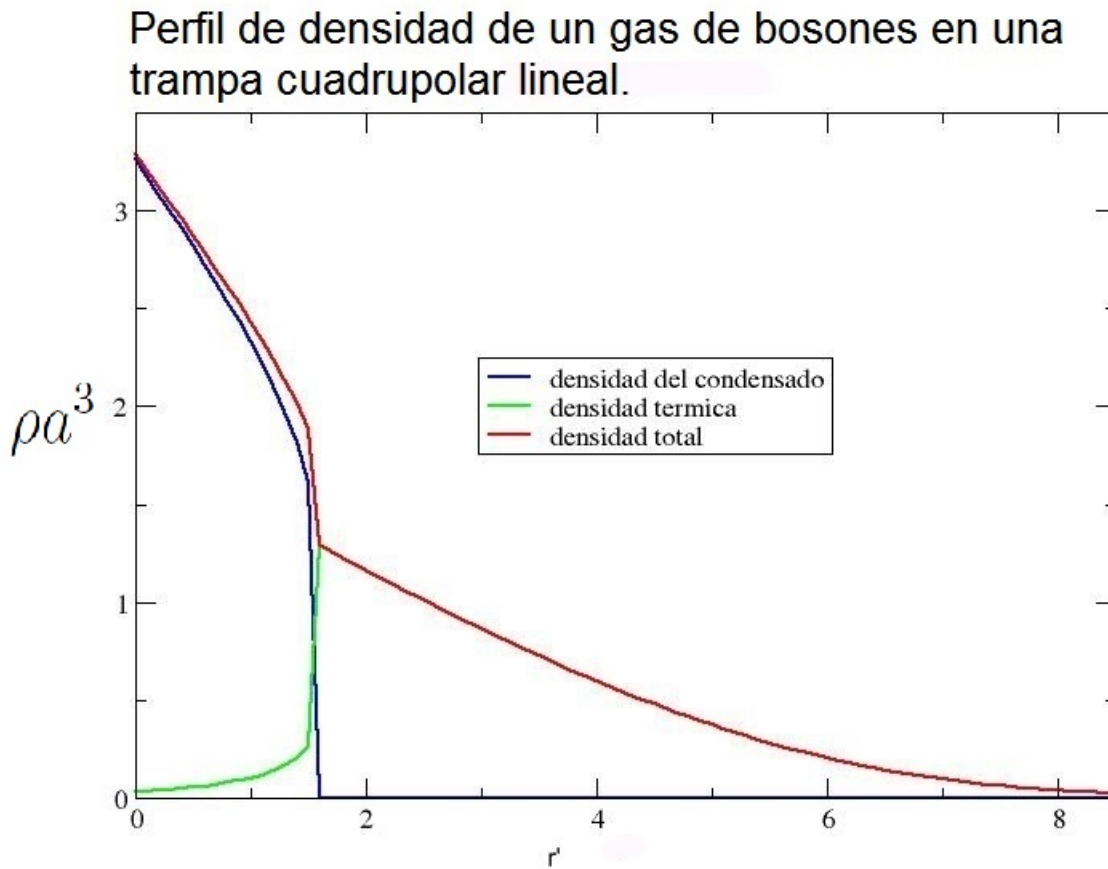


Figura 4.3: En la gráfica se muestra el perfil de densidad de un gas de bosones en una trampa cuadrupolar lineal en la teoría autoconsistente de Hartree-Fock, la aproximación de onda S y de Thomas-Fermi, obtenido con el programa *denhf.f*. La densidad es $\frac{N}{V} \frac{a^3}{\epsilon_0^3} = 10$ y la temperatura es $\frac{kT}{\epsilon_0} = 0.25$, le corresponde $\alpha = 4.2274$. El perfil de densidad ρ' y la coordenada r' están adimensionadas como se muestra en el Apéndice C.

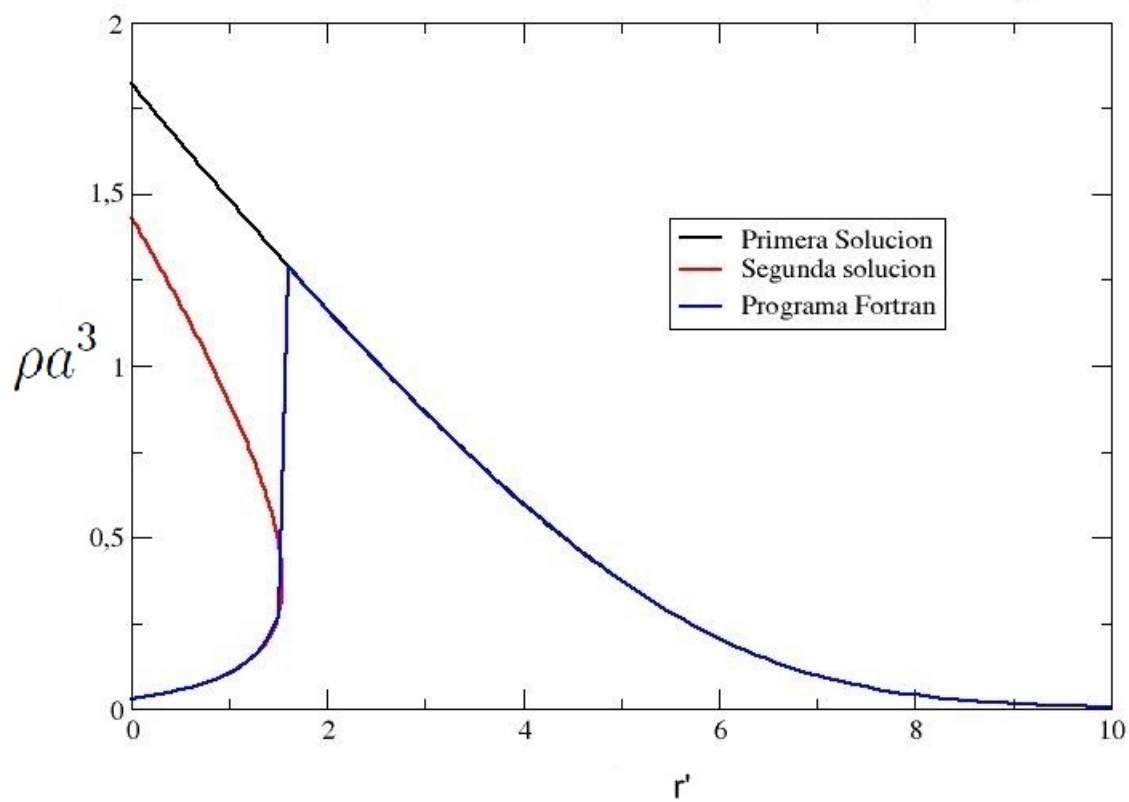


Figura 4.4: En la gráfica se muestra el perfil de densidad térmico de un gas de bosones en una trampa cuadrupolar en la teoría autoconsistente de Hartree-Fock, obtenido con el programa *denhf.f* y las raíces adicionales obtenidas con ayuda del programa *Mathematica*.

(ecuaciones 4.3) y se encuentran dos valores del perfil de densidad térmico ρ'_{th} para cada r' menor a una r'_{max} , definida como aquella r donde la ecuación del perfil de densidad del condensado (4.3.b) se hace menor a cero. No obstante, el programa en fortran *denhf.f* sólo toma una rama de estas soluciones, la más cercana a la aproximación de Thomas-Fermi (sección 3.3.1) esto es, porque se da como adivinanza para encontrar las raíces. Para temperaturas bajas en comparación de la temperatura crítica kT_c/ε_0 se espera que el modelo autoconsistente de Hartree-Fock coincida con su análogo en este régimen de temperatura cercana a cero. Por ello se toma la rama baja de las raíces hasta el punto en que su derivada se hace infinita, que coincide con el valor de r'_{max} , y se descartan las otras soluciones.

La temperatura crítica que depende de la densidad del gas $N/\mathcal{V} = NA^3$ se define cuando al ir disminuyendo la temperatura, llegamos a una kT_c/ε_0 , tal que la r'_{max} es diferente a cero, es decir, cuando la ecuación del perfil de densidad del condensado (ecuación 4.3b) se convierte en positiva para algún o algunos valores de r' . También se puede hacer el proceso sobre una isoterma, es decir a una temperatura fija kT_0/ε_0 , se aumenta la densidad hasta llegar a una densidad crítica tal que en el perfil de densidad correspondiente, la ecuación (4.3b) sea positiva.

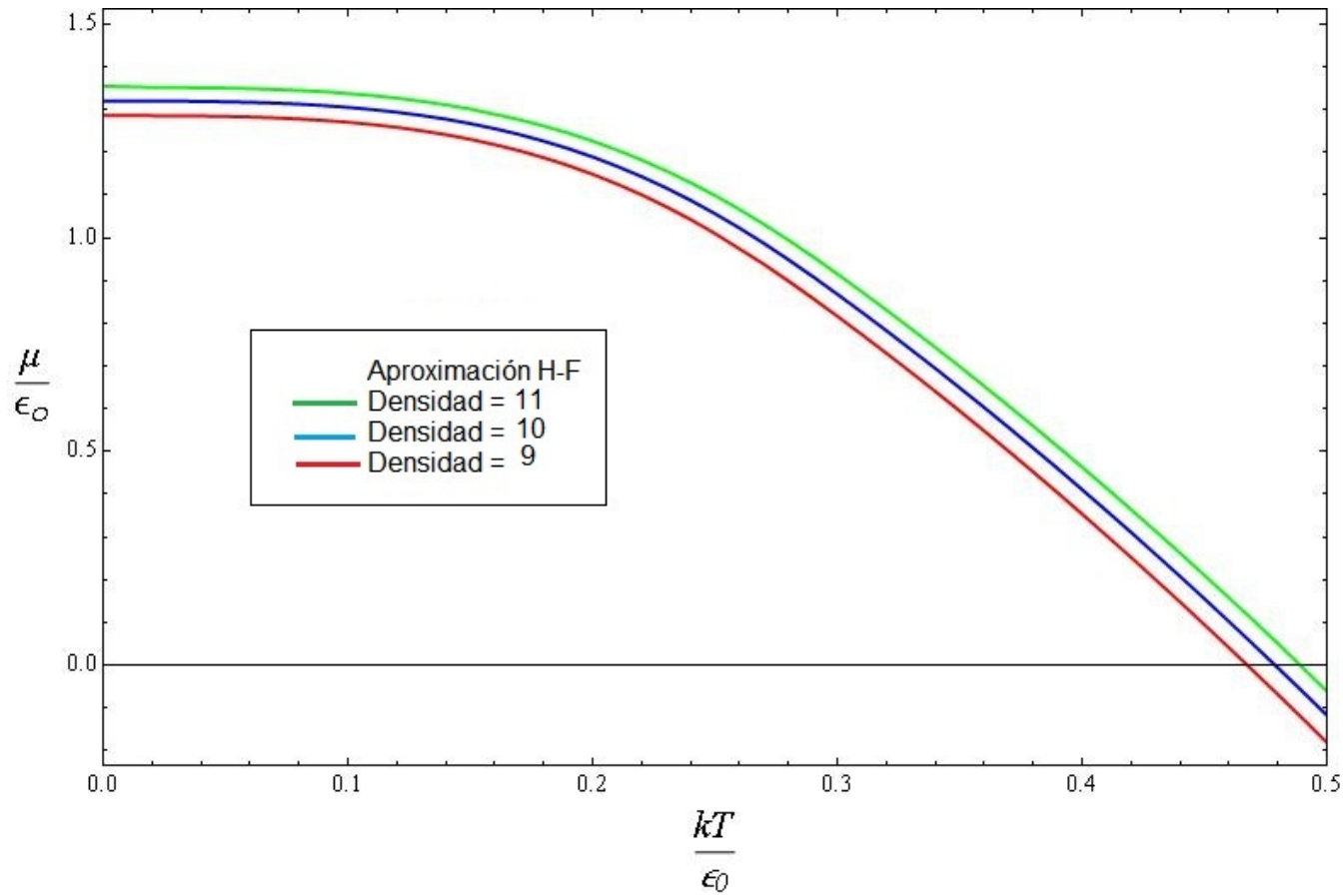


Figura 4.5: El potencial químico de un gas de bosones en una trampa cuadrupolar en la teoría autoconsistente de Hartree-Fock. La línea verde corresponde a un densidad de $\frac{N a^3}{V \epsilon_0^3} = 11$, la línea azul a $\frac{N a^3}{V \epsilon_0^3} = 10$ y la roja a $\frac{N a^3}{V \epsilon_0^3} = 9$.

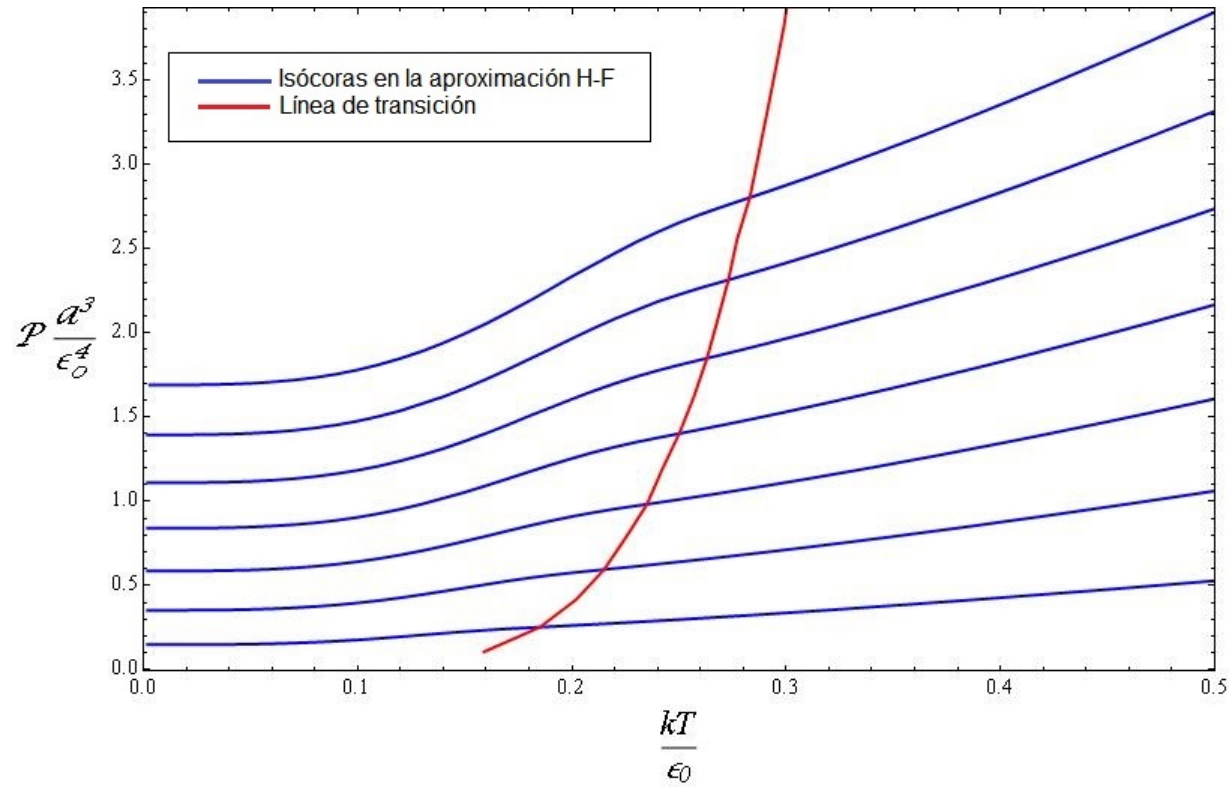


Figura 4.6: Se muestran la gráfica de isócoras para una densidad desde $\frac{N}{V} \frac{a^3}{\epsilon_0^3} = 1$ hasta $\frac{N}{V} \frac{a^3}{\epsilon_0^3} = 7$, se exhibe la línea de transición.

Para encontrar el valor del **potencial químico** μ/ε_0 , dados la temperatura kT/ε_0 y la densidad del gas NA^3a^3 , se utiliza el programa *alpha.f* exigiendo que se cumpla la ecuación (4.2), dando como adivinanza el potencial químico en la aproximación de Thomas-Fermi μ_{tf}/ε_0 (ecuación 3.84). La densidad la calculamos utilizando la *Regla de Simpson* [54]. Variamos el valor del potencial químico μ/ε_0 hasta que se cumpla la identidad (4.2). Una vez que se tiene el valor del potencial químico μ (figura 4.5), se calcula el perfil de densidad con el programa *denhf.f* y se calcula la presión, integrando numéricamente.

Al encontrar los estados termodinámicos del sistema podemos graficar las isócoras del sistema como se muestra en la fig. (4.6). Destaca en la gráfica de las isócoras que el valor de la presión no se va a cero para temperatura $kT/\varepsilon_0 = 0$, como sucede para un gas ideal sin interacciones. Esta presión remanente es consecuencia de la interacción de los átomos a estas temperaturas. La parte izquierda de la gráfica corresponde a la parte que contiene el condensado de Bose-Einstein. Estas gráficas se comparan cualitativamente con las obtenidas por Romero-Rochín [14], las ahí estudiadas tienen un potencial de confinamiento de tipo armónico, sin embargo, se puede apreciar que la transición es más suave en nuestro caso.

Asimismo podemos calcular la **energía libre de Helmholtz** como $F = -\mathcal{P}\mathcal{V} + \mu N$ y a partir de ésta calcular numéricamente la primera derivada de F , la entropía $S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{N,\mathcal{V}}$, y la segunda derivada de F , la capacidad calorífica $C_{\mathcal{V}} = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{N,\mathcal{V}}$ obteniendo las gráficas que se muestran en la fig. (4.7). En el artículo de Minguzzi *et al.* [55] comparan una solución perturbativa y no perturbativa del modelo de dos fluidos en la aproximación de campo medio, que es análoga al modelo autoconsistente de Hartree-Fock para el caso de un potencial armónico. Dado que los sistemas son

diferentes, no podemos hacer una comparación cuantitativa de las gráficas, sin embargo, cualitativamente tienen el mismo comportamiento, por lo que podemos concluir que nuestros resultados son consistentes con lo obtenido en 1997 [55].

En la literatura se pueden encontrar funciones termodinámicas calculadas a partir de diferentes modelos, como lo menciona Dalfovo *et al.* [25]. Sin embargo, estos regularmente están restringidos a encontrar la energía, densidades y capacidades caloríficas. Al definir correctamente las variables termodinámicas que caracterizan a cada sistema, según el potencial al cual están expuestos, hemos encontrado los estados termodinámicos $[T, \mathcal{V}, \mathcal{P}]$ de nuestro sistema y podemos calcular la energía libre de Helmholtz F , que es un potencial termodinámico, por lo cual, a partir de definiciones e identidades termodinámicas, tenemos accesibles **TODAS** las cantidades termodinámicas, como la energía y la capacidad calorífica ya mostradas anteriormente y que concuerdan con los resultados previos en la literatura. A continuación mostraremos la entropía $S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{N, \mathcal{V}}$ en la fig. (4.8). Aunque esta cantidad no es medible directamente, existen otra a las cuales tenemos acceso dado que tenemos la energía libre de Helmholtz, como la compresibilidad isotérmica (fig. 4.9).

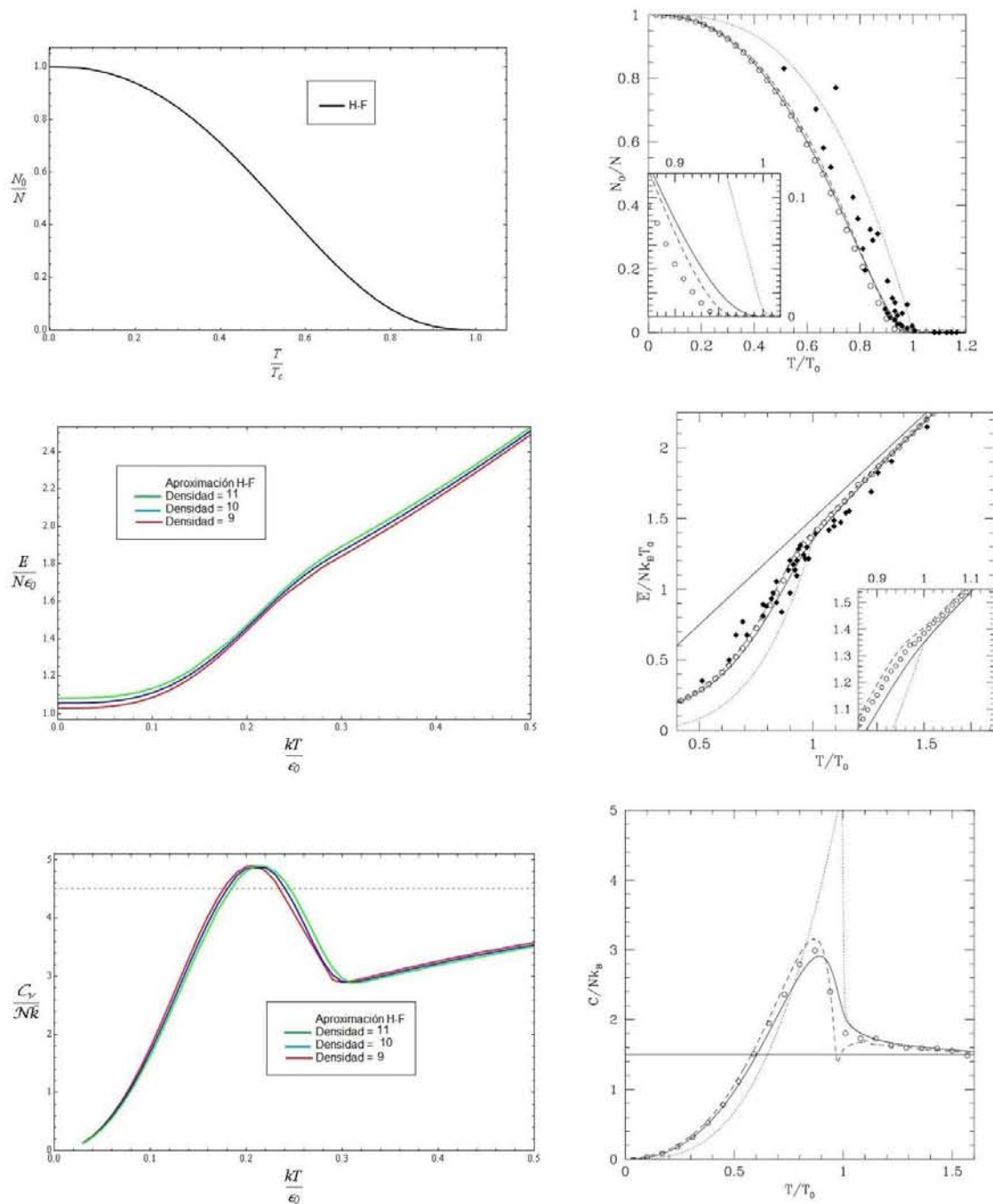


Figura 4.7: Se muestran del lado izquierdo las graficas correspondientes a la densidad térmica, la energía y la capacidad calorífica, obtenidas a partir de las ecuaciones autoconsistentes de Hartree-Fock. Del lado derecho las correspondientes a las expuestas por Minguzzi *et al.*, donde la línea corresponde a una solución perturbativa de orden cero, los guiones al primer orden y los círculos a la solución numérica completa.

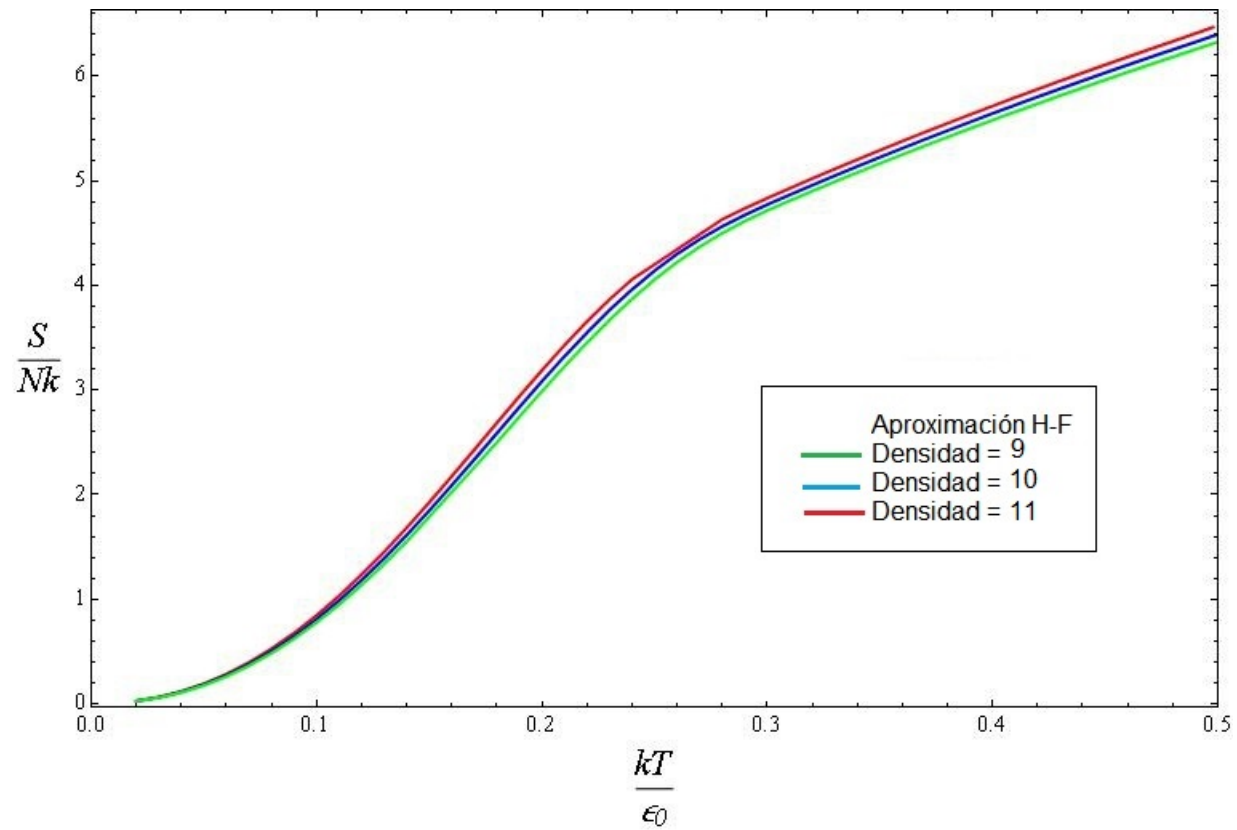


Figura 4.8: Se muestra la gráfica correspondiente a la entropía S .

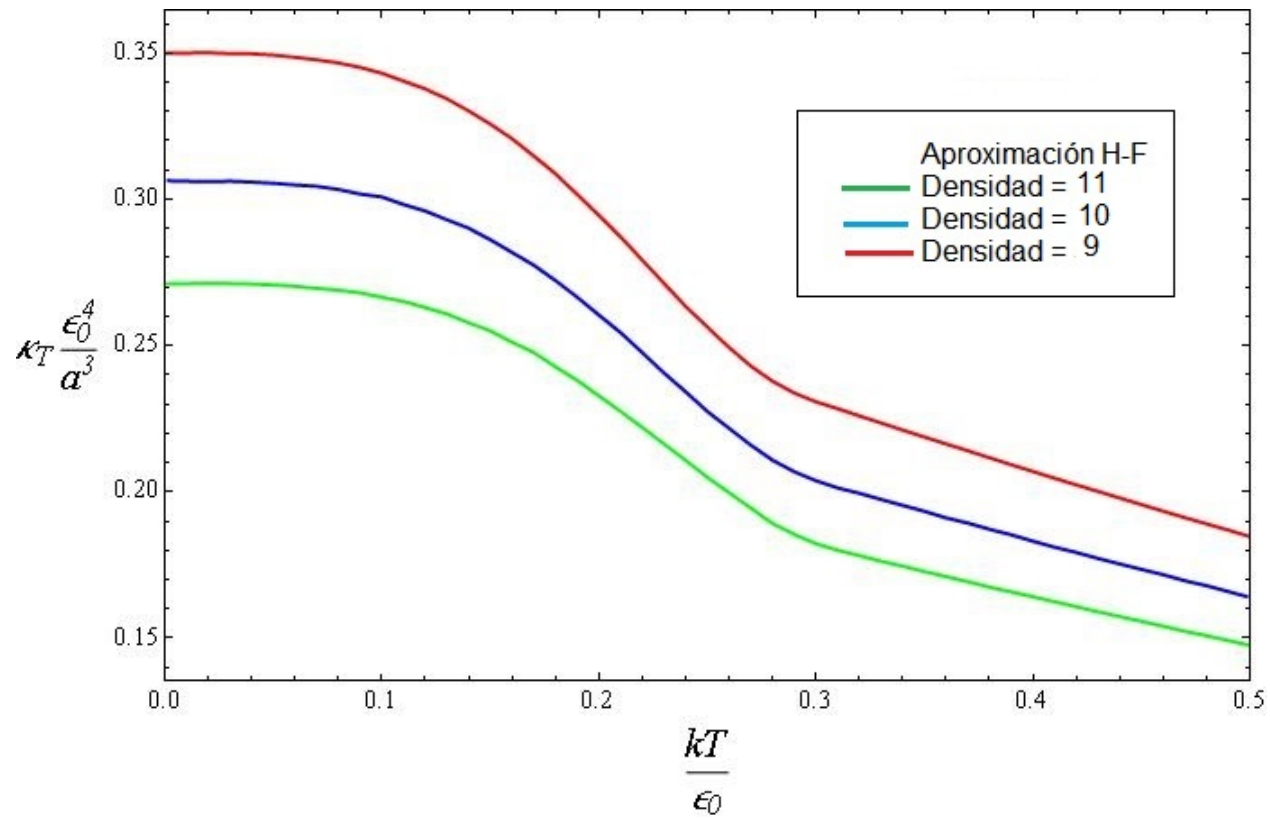


Figura 4.9: Se muestra la gráfica de la compresibilidad isotérmica para un gas de bosones atrapados en un potencial cuadrupolar lineal en la teoría autoconsistente de Hartree-Fock.

Podemos concluir de las soluciones numéricas de las ecuaciones autoconsistentes de Hartree-Fock obtenemos los perfiles de densidad del gas, y gracias a la definición de las nuevas variables termodinámicas, hemos encontrado la energía libre de Helmholtz para un gas de bosones interactuantes en un potencial cuadrupolar lineal y, con lo anterior podemos obtener la termodinámica del sistema.

4.2. Discusión sobre la transición BEC dentro de la aproximación de Hartree-Fock

En esta parte nos concentraremos en el análisis y comparación del gas ideal cuántico y la aproximación de Hartree-Fock para entender la naturaleza de la transición BEC predicha por esta teoría. Dentro de estas aproximaciones la teoría nos muestra la transición de un gas normal a un gas condensado BEC. Por las características de esta transición la abordaremos como una transición de un gas a un superfluido.

Para temperaturas altas, mayores que la temperatura de transición, los modelos de Hartree-Fock, ideal y clásico concuerdan como esperábamos; esto se podrá observar en las figuras mostradas más adelante. Sin embargo, nos concentraremos en el comportamiento del gas en la transición y en los modelos de Hartree-Fock e ideal cuántico.

Mientras que los modelos para el gas ideal cuántico son analíticos, para la aproximación de Hartree-Fock se usaron los resultados obtenidos en la sección anterior con los cálculos computacionales.

4.2.1. Temperatura de Transición

Cualitativamente la predicción del comportamiento del gas es igual en los modelos de campo medio y el ideal cuántico. La diferencia fundamental aparece en la región de transición, siendo ésta diferente en ambos casos. Para un gas ideal la temperatura crítica es más alta que para un gas en un campo medio, $T_c^{id} > T_c^{HF}$, figura (4.10).

Hemos definido la temperatura crítica como la temperatura en la cual el perfil de densidad de las partículas en el estado base se vuelve no nula. Para el caso del gas ideal el aumento de partículas en el estado base es abrupto, mientras que para el caso Hartree-Fock es suave, dando lugar a un corrimiento *extra* para la aparición del BEC. La diferencia entre las temperaturas críticas se debe a las interacciones: mientras que en el gas ideal no existen, en el modelo de Hartree-Fock la energía por partícula es mayor por la contribución del potencial de interacción.

El poco aumento de la densidad de las partículas en el estado base en Hartree-Fock es debido también a las interacciones. Se necesita bajar aún más la temperatura de las partículas, es decir, su energía cinética, para que permanezcan en el estado base.

En conclusión, la formación del BEC en ambos modelos es totalmente diferente, la figura (4.11) nos muestra sus comportamientos al disminuir la temperatura por debajo de la temperatura T_c . Mientras que el gas ideal comienza discontinuamente con una derivada grande, en el gas interactuante su derivada es prácticamente cero muy cerca de T_c .

4.2.2. Presión, ecuación de estado

Cuando se estudia el gas ideal en los cursos estándares de física estadística, una de las preguntas que suelen hacer los estudiantes es, por qué la presión no depende

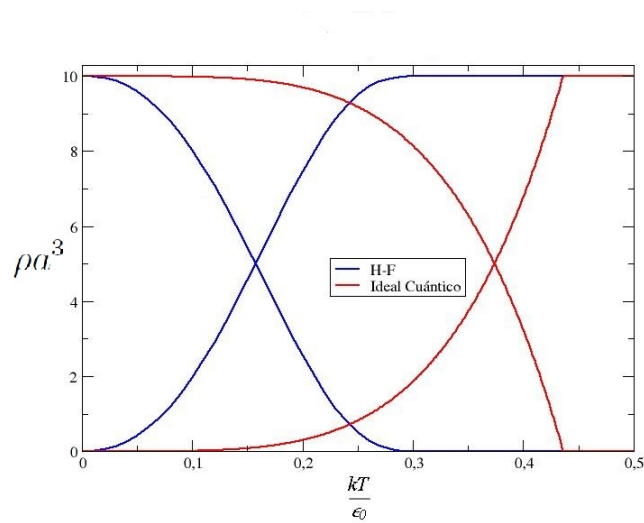


Figura 4.10: Se muestra la densidad térmica y la densidad del estado base como función de la temperatura, en el modelo de gas ideal y la aproximación de Hartree-Fock.

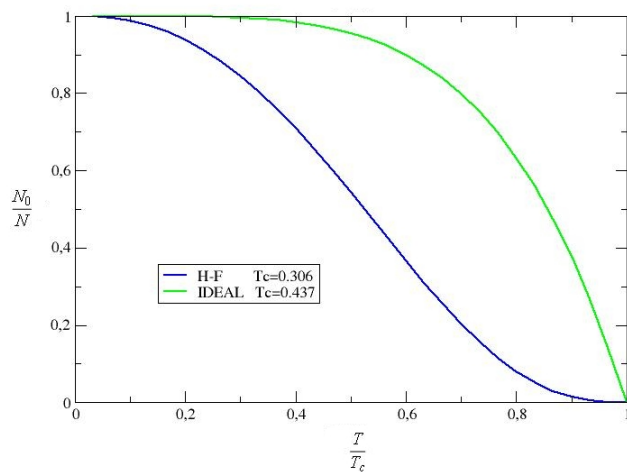


Figura 4.11: Se muestra el cociente entre la densidad del estado base y la densidad total para el modelo de gas ideal y Hartree-Fock, las temperaturas críticas para ambos casos son diferentes.

del volumen para $T < T_c$. Efectivamente, aún en una trampa de confinamiento rígida, la presión por debajo de la temperatura crítica no depende del volumen, y esto trae como consecuencia que la ecuación de estado solo tenga dos variables independientes, en vez de tres. Uno lo podría interpretar como si el sistema no tuviera tamaño o no le importará el tamaño que tiene. Pareciese que esto contradice los principios de la termodinámica y el límite termodinámico; sin embargo, hay que tomar en cuenta que la densidad sí toma parte de esta descripción, así, si aumenta el tamaño también debe aumentar el número de partículas. Salvado este problema, el siguiente es cuando la temperatura tiende a cero $T \rightarrow 0$, la presión también tiende a cero $p \rightarrow 0$. Esto da como interpretación que las partículas dentro del BEC ideal no ejercen ninguna presión entre ellas o no interactúan en ninguna forma.

Para el caso de un gas en la aproximación de Hartree-Fock, la presión cerca de la temperatura crítica, cualitativamente tiene un valor mayor que el que se obtiene en el gas ideal. Esto no nos sorprende ya que estamos considerando las interacciones entre las partículas. La temperatura crítica en la aproximación de Hartree-Fock es menor que en el gas cuántico ideal; pero es aquí donde el corrimiento *extra* en la temperatura crítica T_c es más evidente. En la figura (4.12) se muestra la presión en función de la temperatura para una densidad $\rho a^3 = 10$ en unidades adimensionales. Se tiene que la temperatura crítica $kT_c/\varepsilon_0 = 0.036$. Sin embargo, el quiebre de la gráfica ocurre aproximadamente en $kT/\varepsilon_0 = 0.25$, y vemos que es muy suave por lo cual es difícil establecer un criterio para definirlo. Por último hacemos notar que la presión a muy bajas temperaturas tiende a un valor constante y diferente de cero.

Para entender mejor que es lo que ocurre en la transición revisemos las otras variables termodinámicas. Veremos primero el potencial químico y la energía por

partícula. Para valores de temperatura $T \rightarrow 0$ ambas tienden a un valor finito y constante, al igual que la presión. Cada partícula en el estado base tiene una energía mínima que proviene de la interacción con las otras partículas, es decir una energía de campo medio. Recordamos que para el gas ideal, la energía de interacción es cero y el valor mínimo de la energía por partícula también es cero, al definirse así desde un principio

Al aumentar la temperatura y acercarnos a la zona de transición, la transición en el potencial químico es imperceptible, (figura 4.13), en la energía se nota un leve quiebre en la gráfica (figura 4.14). Podemos interpretar que si existe una transición de fase debe ser de ordenes superiores, ya que la derivada de la energía es continua y suave.

En el gas ideal el comportamiento es totalmente diferente al presentar una discontinuidad en la derivada de la energía que se reflejará en la capacidad calorífica. El potencial químico no tiene sentido como una variable termodinámica a estas temperaturas, ya que su valor se mantiene en cero, $\mu = 0$ para $T \leq T_c$.

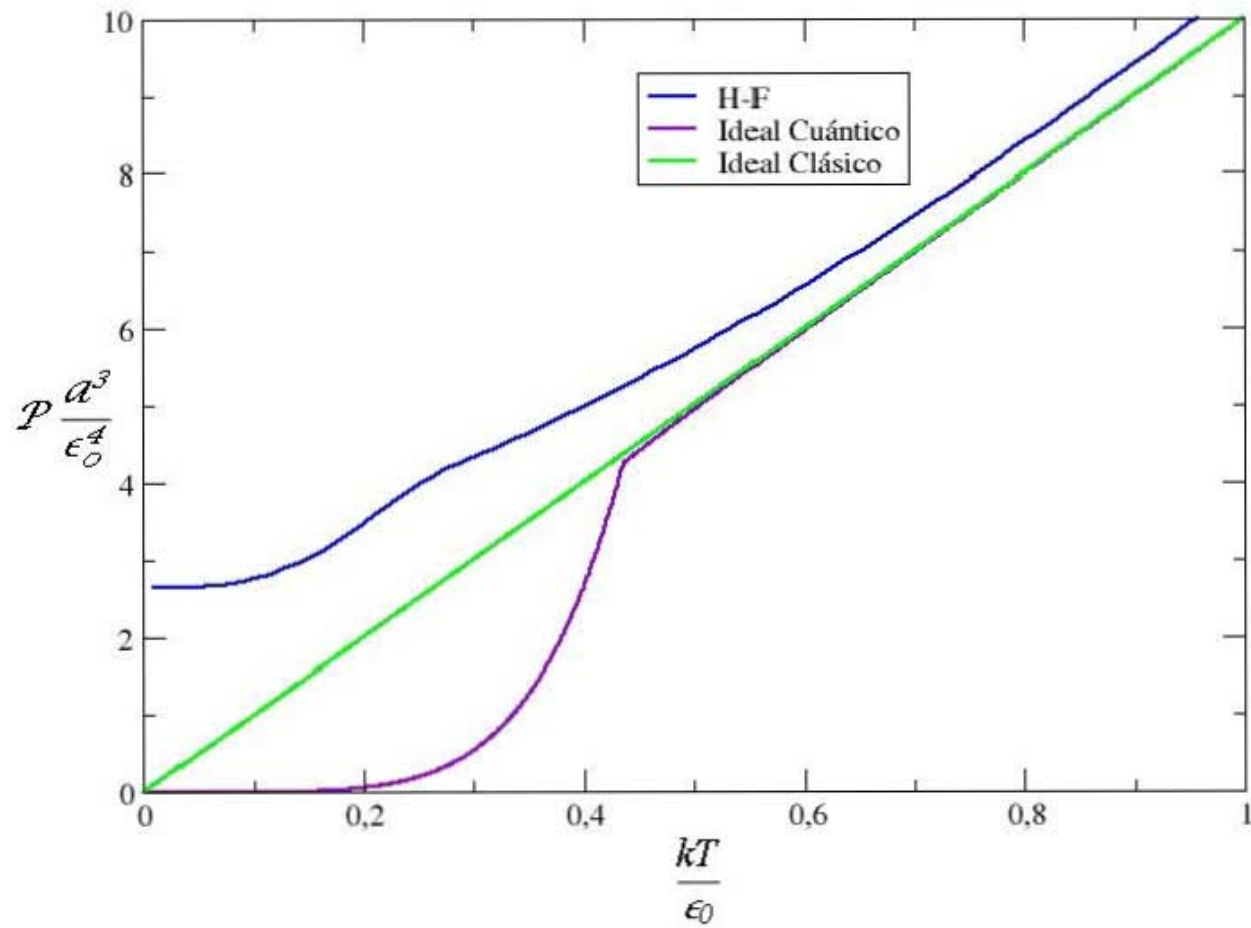


Figura 4.12: En la figura podemos ver la gráfica de la presión generalizada para diferentes regímenes, para una densidad $\rho = 10$ en unidades adimensionales.

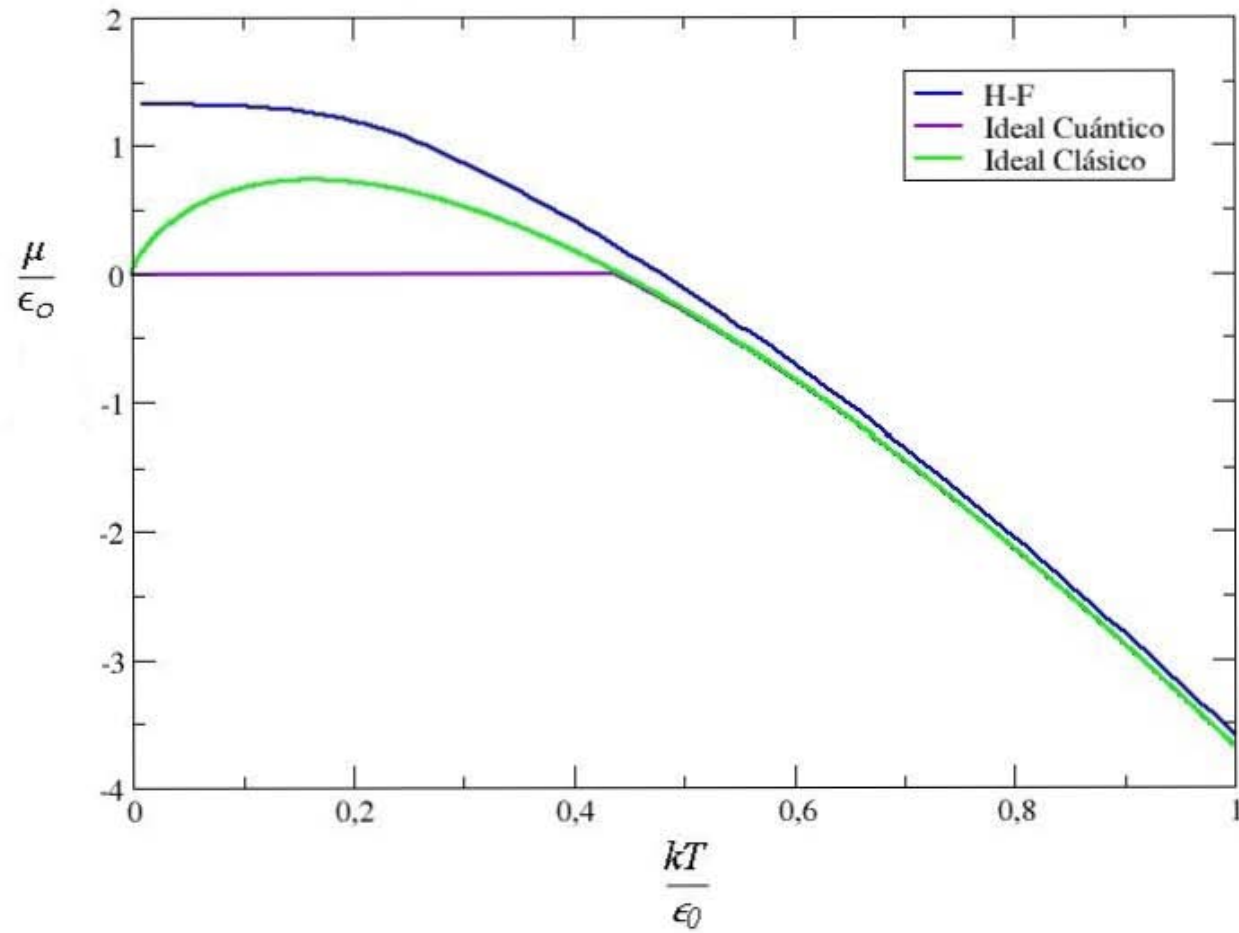


Figura 4.13: Se muestra el potencial químico para diferentes regímenes, las unidades son adimensionales

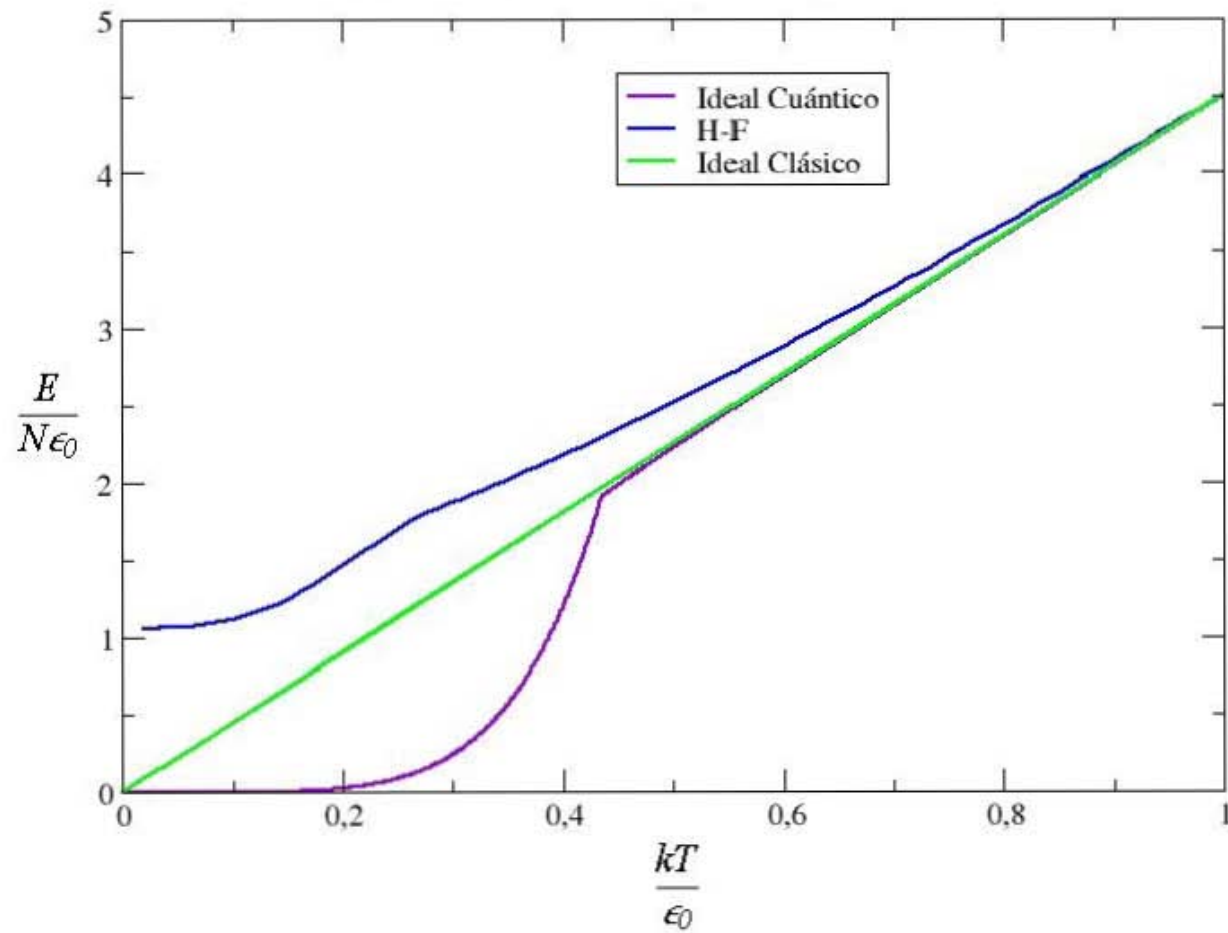


Figura 4.14: En la figura podemos ver la gráfica de energía para diferentes regímenes. Las unidades son adimensionales.

La entropía y la capacidad calorífica se obtienen al obtener la primera y segunda derivada de la energía libre de Helmholtz, respectivamente (figuras 4.15 y 4.16). Para el caso del gas ideal, la entropía presenta un quiebre en la temperatura de transición, mientras la capacidad calorífica tiene una discontinuidad. La transición entre el gas y el BEC se estudia como una transición de fase debido a esta discontinuidad. Ambas cantidades tienden a cero cuando la temperatura tiende a cero en ambos modelos, como se espera. Para el modelo de Hartree-Fock la entropía presenta un quiebre suave en la temperatura de transición, mientras que la capacidad calorífica ocurre en un mínimo local. Del análisis de ambas cantidades, que corresponden a la primera y segunda derivada del potencial termodinámico, podemos concluir que la transición del gas al BEC es continua sin singularidades, por lo cual no corresponde a una transición de fase crítica.

Continuando el análisis de la transición observemos la compresibilidad isotérmica (figura 4.17), la cual corresponde a una segunda derivada de la energía libre de Helmholtz. Para el gas ideal, la compresibilidad isotérmica no está definida para temperaturas menores que la temperatura crítica. Esto es una consecuencia de la naturaleza de la transición, habíamos visto que en el gas BEC solo tenemos dos variables termodinámicas independientes, si tomamos el volumen como una variable dependiente, la compresibilidad isotérmica no está definida.

Para temperaturas menores que la crítica T_c al no estar definida la compresibilidad isotérmica para el gas ideal, no podemos comparar los modelos ideal y Hartree-Fock. Para el análisis de esta parte nos auxiliaremos en la relación que existe entre la compresibilidad isotérmica y las fluctuaciones del gas [6]

$$\frac{\Delta N^2}{N^2} = \frac{kT}{V} \kappa_T. \quad (4.5)$$

Un punto crítico se puede identificar con la anterior relación: cuando la compresibilidad $\kappa_T \rightarrow \infty$, las fluctuaciones $\Delta N^2 \rightarrow \infty$. En nuestro caso no observamos este comportamiento (figura 4.17). La compresibilidad isotérmica presenta un quiebre en la temperatura crítica para posteriormente formar una curva cóncava que tiende a ser constante cuando $T \rightarrow 0$. Podemos inferir que en nuestro caso no tenemos un comportamiento de transición crítica al no existir una divergencia en la compresibilidad isotérmica. Sin embargo, al analizar el caso homogéneo ideal estudiado en la sección (3.4) y calcular la compresibilidad isotérmica para los casos de un potencial armónico [20] y extenderlo para el potencial cuadrupolar, la compresibilidad no está definida para temperaturas menores que la crítica, empero al acercarse a la transición desde temperaturas altas T^+ , la compresibilidad isotérmica diverge en el caso homogéneo. Podemos identificar esta transición para el caso homogéneo como una transición de un vapor a un superfluido.

La validez de las interpretaciones que se pueden realizar sobre el resultado de estos cálculos están restringidas por el modelo de campo medio que usamos para calcular el perfil de densidad. Este trabajo da la conexión entre la teoría y el experimento al dar una expresión algebraica para calcular la presión a partir del perfil de densidad y a partir de allí calcular la compresibilidad isotérmica.

En conclusión, la transición de un gas a un BEC estudiada en este trabajo se puede interpretar como una transición suave y continua y por lo tanto no crítica. Es una transición que no corresponde a primer o segundo orden. Para el caso homogéneo podemos interpretarla como una transición de gas a superfluido, por tener un gap en el espectro de energías.

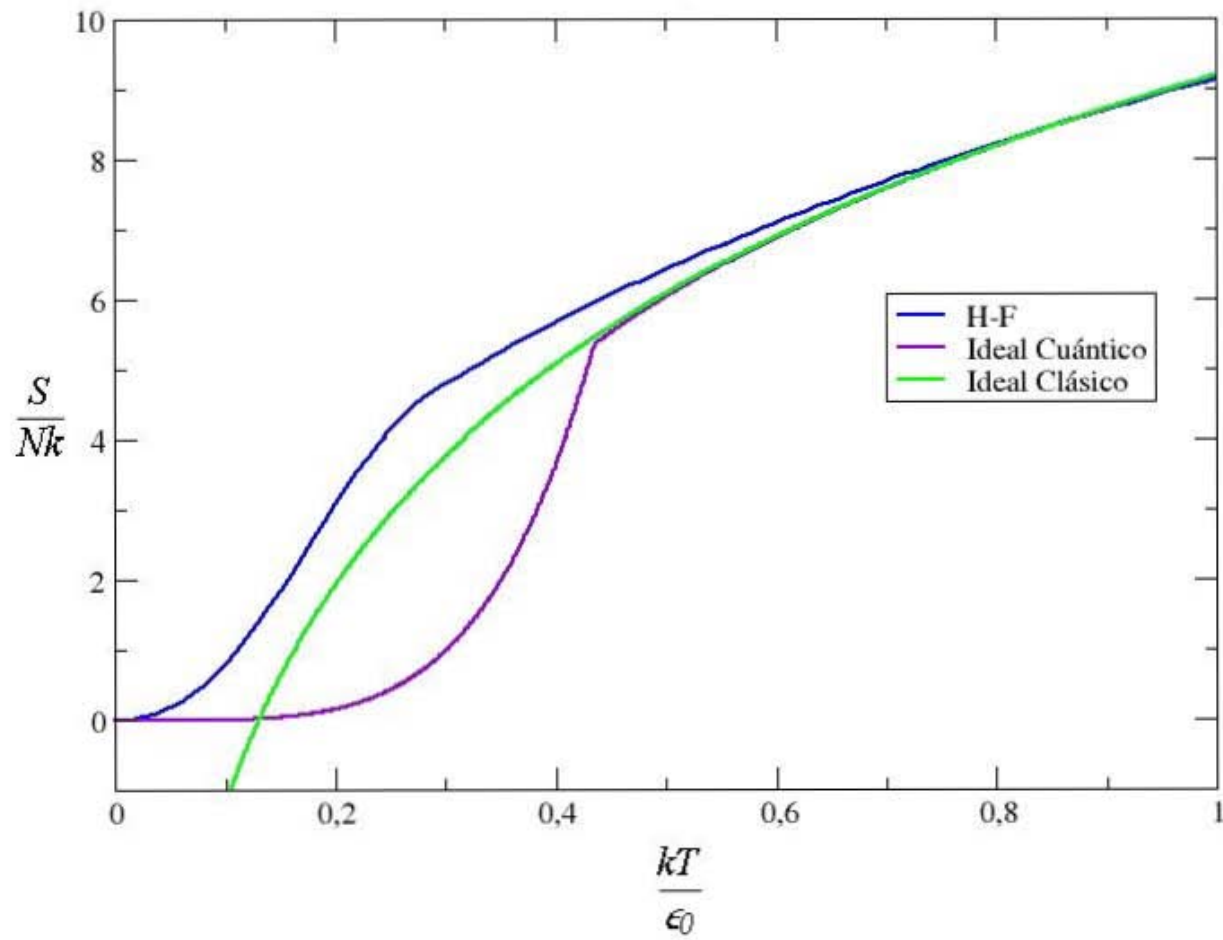


Figura 4.15: En la figura podemos ver la gráfica de la entropía para diferentes regímenes. Las unidades son adimensionales.

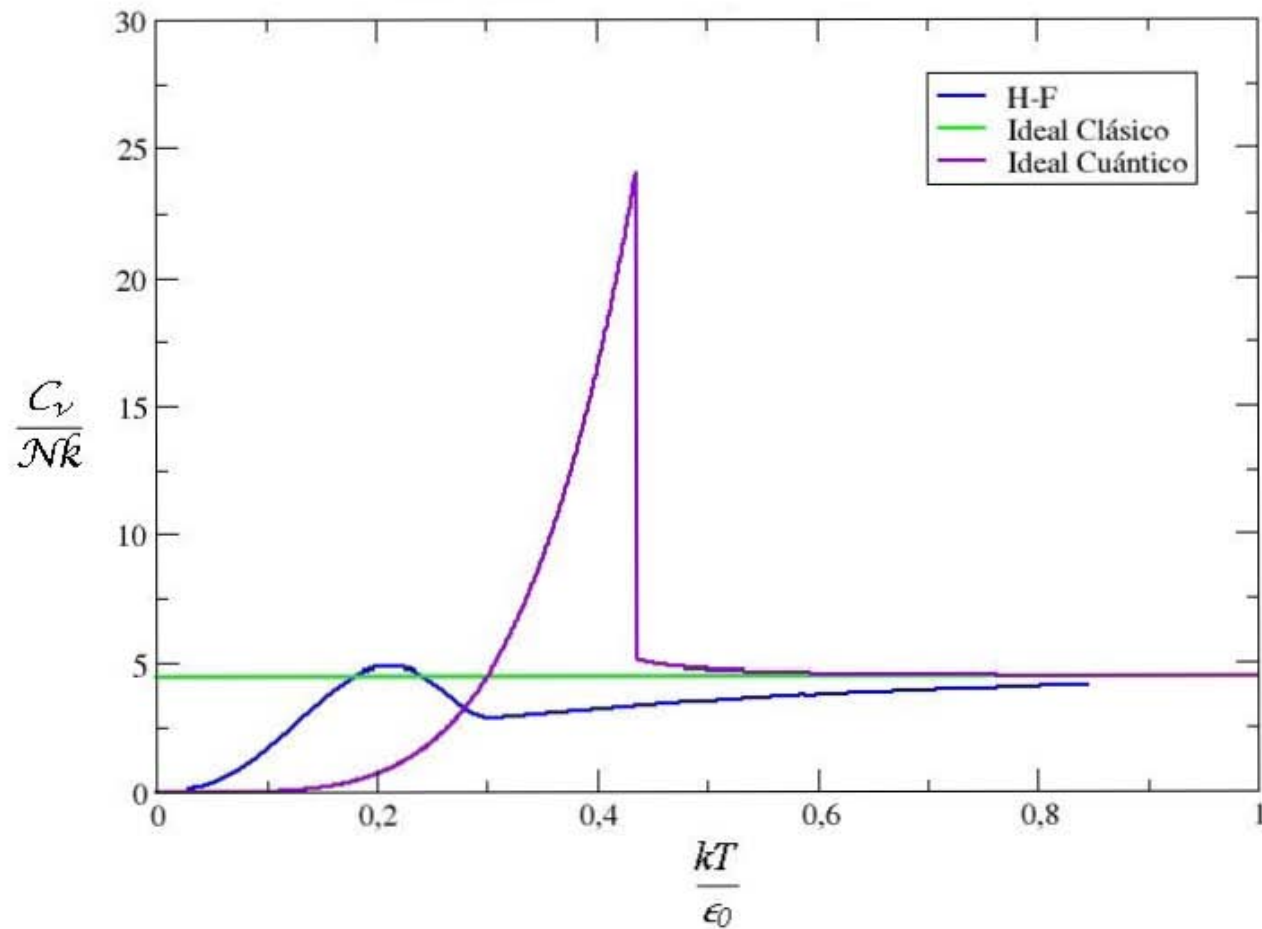


Figura 4.16: En la figura podemos ver la gráfica de la capacidad calorífica para diferentes regímenes. Las unidades son adimensionales.

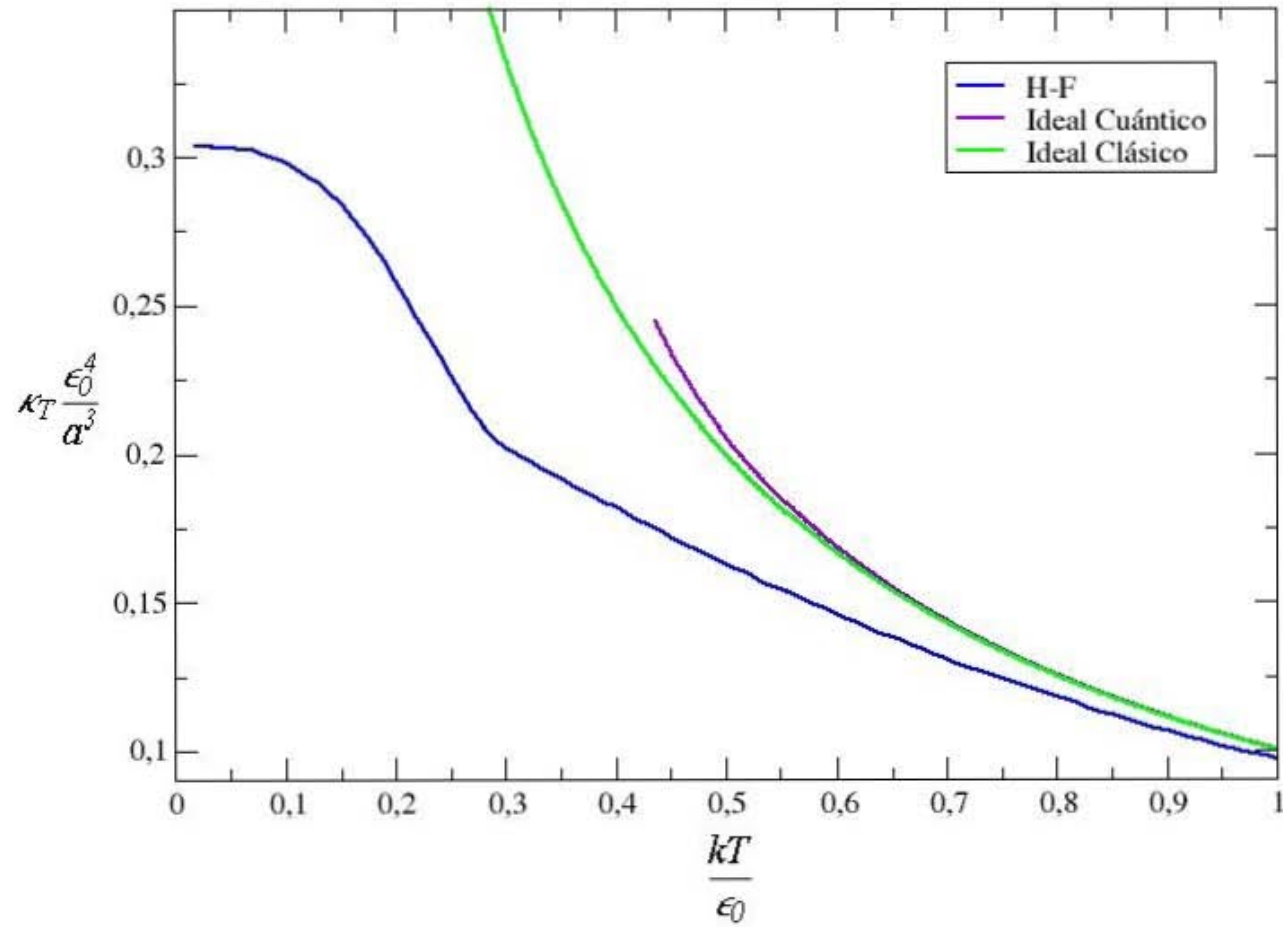


Figura 4.17: En la figura podemos ver la gráfica de la compresibilidad isotérmica para diferentes regímenes. Las unidades son adimensionales.

Capítulo 5

Conclusiones

En la presente tesis doctoral discutimos la transición de gas normal a el BEC de un gas de bosones ultrafrío confinado en una trampa cuadrupolar lineal, considerando interacciones atómicas de contacto dentro de la aproximación de Hartree-Fock. Revisamos el marco teórico de la termodinámica de un gas confinado por un potencial no uniforme para mostrar cómo debe formularse el equilibrio mecánico en términos de variables generalizadas del volumen \mathcal{V} y la presión \mathcal{P} , que remplazan al volumen usual y la presión hidrostática de un gas homogéneo. Se demostró la exactitud de la LDA, con el desarrollo del Virial del gran potencial. Calculamos el perfil de densidad dentro de la aproximación de Hartree-Fock como función de la temperatura T y el volumen molar generalizado $v = \mathcal{V}/N$. Con esta información calculamos todas las propiedades termodinámicas del sistemas y analizamos el comportamiento del gas a través de la transición BEC. Hallamos que la transición es completamente suave y que no muestra signos de comportamiento crítico.

La teoría desarrollada durante la presente tesis junto con los trabajos de Romero-Rochín se puede extender para cualquier gas confinado; dado el potencial de confinamiento, la temperatura y el perfil de densidad, somos capaces de encontrar la

ecuación de estado. La validez de la ecuación de estado dependerá principalmente de las aproximaciones hechas para encontrar el perfil de densidad. Para mejorar nuestras predicciones sobre el comportamiento del gas, debemos conocer mejor al gas estudiado, vía un perfil de densidad más acorde al experimento. Esto se hará posible al tener datos experimentales de perfiles de densidad *in situ* o mejorando nuestros modelos sobre el perfil de densidad.

Los principales resultados de esta investigación se exponen a continuación.

5.1. Presión generalizada \mathcal{P} y Volumen generalizado

\mathcal{V}

Dado un sistema confinado, sus variables termodinámicas canónicas asociadas al equilibrio mecánico estarán definidas en términos de parámetros del potencial de confinamiento.

El volumen generalizado \mathcal{V} lo podremos definir como (ecuación 1.37)

$$\zeta(\beta)\mathcal{V} = \int e^{-\beta V_{ext}(\vec{r})} d\vec{r} \quad (5.1)$$

donde la función $\zeta(\beta)$ es una función que depende de la temperatura $\beta = 1/kT$ y del potencial de confinamiento. Mientras, la presión generalizada \mathcal{P} está definida como (ecuación 1.53)

$$\mathcal{P} = \frac{1}{3\mathcal{V}} \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) \vec{r} \cdot \nabla V_{ext}(\vec{r}), \quad (5.2)$$

donde $\rho(\vec{r})$ es el perfil de densidad del gas, el cual no es homogéneo, excepto en el caso de un potencial de paredes rígidas.

Usando el límite termodinámico y la segunda ley de la termodinámica mostramos que estas variables son las variables termodinámicas de los sistemas confinados. Una

vez que nosotros conocemos las variables termodinámicas de un sistema, podemos calcular su ecuación de estado.

Para un gas clásico, la forma de la ecuación de estado de un gas ideal se conserva $\mathcal{P}\mathcal{V} = NkT$. Sin embargo, para un gas ideal cuántico, la mayor diferencia debido al potencial de confinamiento estará en el comportamiento en la transición del gas al BEC. Esto se puede ver en la discontinuidad en la capacidad calorífica (ver figura 1.5) al acercarse a la temperatura crítica T_c . Nosotros obtuvimos la energía, capacidad calorífica, entropía y potencial químico para un gas ideal clásico (ecuación 1.36) y para un gas ideal cuántico (ecuación 1.78) en una trampa cuadrupolar.

5.2. El desarrollo del Virial de la ecuación de estado

Para un gas confinado débilmente interactuante, obtuvimos el gran potencial (ecuación 2.32)

$$\Omega(\mathcal{V}, T, \mu) = -kT\mathcal{V} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{\beta n\mu}}{n!} \frac{\zeta(n\beta)}{\lambda_T^{3n}} b_n, \quad (5.3)$$

donde las integrales b_n dependen de las funciones de Mayer y éstas a su vez del potencial de interacción $U(|\vec{r} - \vec{r}'|)$, el cual es débilmente interactuante y por pares. Las funciones de Mayer $f(T, \vec{r}) \equiv e^{-\beta U(r)} - 1$ representan cúmulos reducidos para el caso de un gas clásico, mientras que para un gas cuántico son integrales de los valores esperados del operador estadístico $e^{-\beta H_n}$. La expresión del gran potencial es exacta, tomando la suma completa y realizando todas las integrales b_n , dentro de la aproximación del potencial interactuante $U(r)$. Sin embargo en la práctica no se pueden realizar todas las integrales y solo se toman los primeros términos, bajo la aproximación que el potencial de interacción es de corto alcance y el gas diluido.

Para el caso de un gas clásico obtuvimos la expresión general del desarrollo del Virial de un gas confinado (ecuación 2.54), y calculamos los dos primeros coeficientes del Virial para un potencial de Lennard-Jones. Para el caso cuántico repetimos el procedimiento expuesto por Landau para un gas confinado y encontramos el segundo coeficiente del Virial.

Un resultado importante de la presente tesis fue comprobar que la *aproximación de densidad local* es exacta en el límite termodinámico, esto se demuestra usando la expresión del gran potencial deducida en este trabajo.

5.3. Gases de Bose débilmente interactuantes

Para estudiar un gas de Bose débilmente interactuante se reviso y reprodujo la aproximación de Hartree-Fock con la suposición de colisiones en la aproximación de la onda S, definida por la longitud de dispersión en el límite de bajas energías. Se revisó la aproximación de Thomas-Fermi, la cual consiste en suponer que la mayoría del gas se encuentra en la fase condensada, por lo cual se desprecia la energía cinética de las partículas. Dentro de esta aproximación se analiza el caso de un gas homogéneo en el cual se encuentra un "gap" de energía correspondiente a $\Delta = U_0\rho_0$, el cual es característico de la transición a superfluididad. El condensado de Bose-Einstein se puede interpretar como un superfluido.

5.4. La ecuación de estado en los diferentes modelos

Usando la teoría sobre gases de Bose débilmente interactuantes, se desarrolló un programa computacional en lenguaje Fortran para calcular los perfiles de densidad

de un gas confinado en una trampa cuadrupolar. Con este se obtienen la presión, el número de partículas, la energía, capacidad calorífica, entropía, compresibilidad isotérmica. Con un error en el cálculo del perfil de densidad de 0.001 %.

Se compararon nuestros resultados obtenidos en la aproximación autoconsistente de Hartree-Fock con los reportados por Minguzzi *et al* y se encontraron coincidencias en la forma de la fracción del condensado, la energía y la capacidad calorífica.

Sin embargo, definir la temperatura de transición para el modelo de campo medio conllevó algunas complicaciones, las partículas en el condensado aparecen lentamente y los quiebres en las funciones de las variables termodinámicas están recorridas. Al resolver las ecuaciones autoconsistentes de Hartree-Fock cerca de la transición se observa que tienen doble solución. Nosotros tomamos la solución que coincide a bajas temperaturas con la aproximación de Thomas-Fermi.

Una vez que se define la temperatura de transición, como aquella donde el perfil de densidad del condensado es no cero, se estudia la transición del gas a BEC o superfluido. La transición es suave y continua en el modelo de Hartree-Fock. Para el gas ideal cuántico existe una discontinuidad en la capacidad calorífica. La temperatura de transición es mayor para el gas ideal que para el gas en un campo medio.

Hemos presentado una forma sistemática para estudiar los gases confinados, tanto clásicos como cuánticos. Tomamos el caso de un gas confinado en una trampa cuadrupolar y obtuvimos su ecuación de estado para el caso ideal, clásico y cuántico. Usando la aproximación autoconsistente de Hartree-Fock, encontramos la termodinámica de un gas de bose en este potencial y comparamos los diferentes modelos.

Apéndice A

Conceptos básicos de termodinámica

A.1. Conceptos de termodinámica

La termodinámica es una teoría fenomenológica de la materia, toma sus preceptos y conceptos de la experimentación. A continuación definiremos algunos de los conceptos que usaremos.

- Un *Sistema termodinámico* es cualquier sistema macroscópico.
- Una *variable termodinámica* es una cantidad macroscópica medible mediante la cual se describe el sistema, como la presión P , el volumen V , la temperatura T . Son definidas experimentalmente.
- Un *estado termodinámico* esta definido por un conjunto de valores de todas las variables termodinámicas necesarias para la descripción del sistema.
- La *ecuación de estado* es un función entre las variables termodinámicas para un sistema en equilibrio. Si P , V y T son las variables termodinámicas de un sistema, la ecuación de estado toma la forma de

$$f(P, V, T) = 0 \tag{A.1}$$

la cual reduce el número de variables independientes del sistema de tres a dos. La función f define al sistema. Cada estado del sistema esta representado como un punto en un espacio tridimensional $P-V-T$ que es un estado de equilibrio, un estado termodinámico. El conjunto de estados (P, V, T) , que cumplen con $f(P, V, T) = 0$ define una superficie en el espacio.

- Una variable termodinámica se dice que es *extensiva* si es proporcional a el número de partículas en el sistema y es *intensiva* si es independiente del número de partículas del sistema.
- Definimos las siguientes variables termodinámicas, las cuales se pueden comprobar experimentalmente:

$$\alpha \equiv \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \quad (\text{Coeficiente de expansión térmica}) \quad (\text{A.2a})$$

$$\kappa_T \equiv -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T \quad (\text{Compresibilidad isotérmica}) \quad (\text{A.2b})$$

$$\kappa_S \equiv -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_S \quad (\text{Compresibilidad adiabática}) \quad (\text{A.2c})$$

NOTA: Las definiciones aquí expuestas han sido tomadas del libro de Huang [6].

A.2. Identidades termodinámicas

Dada la energía libre de Helmholtz $F(T, V, N)$ podemos calcular la entropía, presión y potencial químico, usando las siguientes identidades termodinámicas:

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V,N} \quad P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T,N} \quad \mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{V,T}; \quad (\text{A.3})$$

la energía interna se puede calcular a partir de la función de partición

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z(T, V, N), \quad (\text{A.4})$$

la capacidad calorífica a partir de la energía

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{V,N} \quad (\text{A.5})$$

la energía libre de Helmholtz a partir de la función de partición

$$F(T, V, N) = -kT \log Z(T, V, N). \quad (\text{A.6})$$

Apéndice B

Funciones especiales

B.1. Función Gamma

La función Gamma denotada como $\Gamma(z)$ tiene su dominio sobre los números complejos y se define como

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} t^{z-1} \exp^{-t} dt = 2 \int_0^{\infty} \exp^{-t^2} t^{2z-1} dt \quad (\text{B.1})$$

si la parte real del número complejo z es positiva $\text{Re}(z) > 0$.

Si n es un entero positivo, entonces

$$\Gamma(n+1) = n! \quad (\text{B.2})$$

B.2. Función de Bose

La función de Bose es,

$$g_n(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} \frac{x^{n-1}}{e^{-\alpha+x} - 1} dx \quad (\text{B.3})$$

definida para $\alpha \leq 0$.

Otra definición es

$$g_n = Li_n(z) \equiv \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^n}, \quad (\text{B.4})$$

donde $z = \exp(\alpha)$ es la fugacidad.

Las funciones de Bose aparecerán en algunas de nuestras cantidades termodinámicas, por lo que veremos algunas de sus propiedades.

- Tienen una regla de recurrencia,

$$\frac{\partial g_n(\alpha)}{\partial \alpha} = g_{n-1}(\alpha). \quad (\text{B.5})$$

- Para $|\alpha| \gg 1$, es decir en el límite clásico, todas las funciones de Bose tienen el mismo límite,

$$g_n(\alpha) \cong e^\alpha. \quad (\text{B.6})$$

- Y en el límite contrario, el cuántico, cuando $\alpha = 0$,

$$g_n(\alpha) \rightarrow \begin{cases} n > 1 & \text{Converge.} \\ n \leq 1 & \text{Diverge.} \end{cases} \quad (\text{B.7})$$

- La función de Bose es una función monótonamente creciente. La propiedad matemática (B.7) de las funciones de Bose, nos dará de manifiesto la condensación de Bose-Einstein.

Apéndice C

VARIABLES ADIMENSIONALES

Las variables que a continuación se definen son adimensionales, donde el parámetro principal es la longitud de dispersión a , que es el que caracteriza la interacción entre los átomos. En sistemas como un gas ideal clásico o cuántico donde no hay interacciones se utilizará este cambio de variable, para poder comparar con los otros modelos donde si se contemplan interacciones. Los otros dos parámetros importantes son, la masa m que definirá el sistemas del cual estemos hablando, es decir que tipo de átomos se caracterizan y una constante física, la constante de Planck h

Definimos una energía $\varepsilon_0 = h^2/ma^2$ tal que las nuevas variables adimensionales son,

$$t = \frac{kT}{\varepsilon_0} \tag{C.1}$$

$$p = \mathcal{P} \frac{a^3}{\varepsilon_0^4} \tag{C.2}$$

$$v = \mathcal{V} \frac{\varepsilon_0^3}{a^3} \tag{C.3}$$

$$\mu' = \frac{\mu}{\varepsilon_0} \tag{C.4}$$

$$\alpha = \frac{\mu}{kT} \tag{C.5}$$

$$\vec{r}' = (x', y', z') = \left(\frac{A_x x}{kT}, \frac{A_y y}{kT}, \frac{A_z z}{kT} \right) \tag{C.6}$$

$$\rho'(\vec{r}') = \rho(\vec{r})a^3 \quad (\text{C.7})$$

Para un gas de átomos de Sodio en una trampa cuadrupolar lineal que se aproxima en el centro, de la forma

$$V_{ext} = A\sqrt{x^2 + y^2 + 4z^2}, \quad (\text{C.8})$$

como el mostrado en el artículo de Silva *et al.* [26], contiene $N \sim 10^7$ átomos a una temperatura de $T \sim 180\mu K$, donde el volumen generalizado esta dado por,

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2A^3} \quad (\text{C.9})$$

con $A = \mu_B B'/2$ donde $\mu_B = 9.2 * 10^{-24} JK^{-1}$ es el magnetn de Bohr y B' es el gradiente del campo a lo largo de una dirección transversal al eje del solenoide. El gradiente del campo B' se encuentra dentro del intervalo $105 - 245 G/cm$. Tomando un valor de $150 G/cm$, el valor adimensional de la densidad es $N/v \sim 1$, suponiendo una longitud de dispersion de $a = 5 nm$.

Para un gas de bosones en una trampa cuadrupolar en la aproximación de campo medio, las ecuaciones autoconsistentes adimensionales que se resuelven son:

$$\rho'_{th}(r') = (2\pi t)^{2/3} g_{3/2} \left(-\alpha + r' + \frac{2}{\pi t} \rho'_{th}(r') \right) \quad (\text{C.10a})$$

$$\rho'_0(r') = \pi t \left(\alpha - r' - \frac{2}{\pi t} \rho'_{th}(r') \right) \quad \text{si es positivo.} \quad (\text{C.10b})$$

$$\rho'_0(r') = 0 \quad \text{si es negativo.} \quad (\text{C.10c})$$

$$\frac{N}{v} = 4\pi t^3 \int dr' r'^2 \rho'(r') \quad (\text{C.10d})$$

$$p = \frac{4\pi}{3} t^4 \int dr' r'^3 \rho'(r') \quad (\text{C.10e})$$

Apéndice D

Programas

A continuación se anexan los códigos de los principales programas computacionales usados para la elaboración de la tesis doctoral. Dichos programas están escritos en lenguaje Fortran.

```
* Este programa obtiene,  
* las isocoras del sistema, es decir dada una rho dada,  
* encontramos la alpha correspondiente, y variamos la temperatura  
* con esto calculamos la presion=p(presión volumétrica)  
* de un gas de bosones atrapados en una caja lineal cuadrupolar  
* que interactuan, usando la aproximación autoconsistente Hartree-Fock  
*  
* las cantidades están en unidades reducidas, la longitud L en términos de  
* la a longitud de dispersion  $x=l/a$ , la densidad  $n$ ,  $alf=alf$ , y defino  
* epsilon tal que  $t= kT/epsilon$  y  $mu=mu/epsilon$   
* opera con alpha reales, es decir para temperaturas arriba y por debajo  
* de la temperatura critica
```

```
*  
  
program isocoras  
implicit integer (i-n)  
implicit double precision (a-h, o-z)  
  
rho=2.d0  
t0=0.16d0  
dt=0.001d0  
  
*  
*   doy la adivinanza para alpha (atf) usando Thomas-Fermi  
*  
  
pi=dacos(-1.0d0)  
rhopi=(3.d0*rho/pi**2.d0)  
rho4=rhopi**(1.d0/4.d0)  
atf=rho4/t0  
write(1,*)"la primera adivinanza de alf=", atf  
t=t0  
  
do l=1,100  
    call estado(atf,t,rho,alf)  
    if(alf .eq. 0.d0)then  
        write(1,*)"para t=",t," no se encontró alf"  
        rhopi=(3.d0*rho/pi**2.d0)  
        rho4=rhopi**(1.d0/4.d0)
```

```

        atf=rho4/t
        go to 51
    else
        call presion(t,alf,p)
        write(1,*)"la presion es, p=",p
        write(1,*)"para t=",t," alf=",alf
        f = -p*(1/rho) + alf
        write(11,*)t,rho,p,alf,f
        atf=alf
    end if
51      t=t0 + dble(1)*dt
end do
stop
end

```

```

*****

```

```

subroutine presion(t,alf,p)
implicit integer (i-n)
implicit double precision (a-h, o-z)

sum=0.d0
rmax=1000.d0
N=1000*int(rmax)
h=rmax/dbble(N)

```

```
r=0.d0
uno=1.d0/3.d0
dos=4.d0/3.d0
tres= 2.d0/3.d0
pi=dacos(-1.0d0)
tp4=4.d0*pi*(t**4.d0)/3.d0
*
*   empiezo a hacer la integral con la regla de Simpson,
*   tf, es la primera adivinanza de rntot
*
tf=0.d0
r=h
call den(t,alf,r,tf,rntot,rn0)
write(8,*)rn0,t
sum=sum + uno*rntot*r**3.d0
rntot=tf
*
r=2.d0*h
call den(t,alf,r,tf,rntot,rn0)
write(8,*)rn0,t
sum=sum + dos*rntot*r**3.d0
rntot=tf
*
r=3.d0*h
```



```

call den(t,alf,r,tf,rntot,rn0)
write(8,*)rn0,t
sum=sum + tres*rntot*r**3.d0
rntot=tf
*
r=4.d0*h
call den(t,alf,r,tf,rntot,rn0)
write(8,*)rn0,t
sum=sum + dos*rntot*r**3.d0
rntot=tf

do l=5,N-3
  r= dble(l)*h
  call den(t,alf,r,tf,rntot,rn0)
  if(rntot .eq. 0.d0)go to 42
  if(rntot .le. 1.d-4 )then
    write(1,*)"la integral de p paro en l=",l," r",r
    write(1,*)"para alf=",alf
    N=l+3
    rntot=tf
    go to 41
  end if
42 sum = sum + rntot*r**3.d0
rntot=tf

```

```

end do

41  r=dbl(N-2)*h
    call den(t,alf,r,tf,rntot,rn0)
    sum=sum + tres*rntot*r**3.d0
    rntot=tf
*
    r=dbl(N-1)*h
    call den(t,alf,r,tf,rntot,rn0)
    sum=sum + dos*rntot*r**3.d0
    rntot=tf
*
    r=dbl(N)*h
    call den(t,alf,r,tf,rntot,rn0)
    sum=sum + uno*rntot*r**3.d0
*
    sum=tp4*h*sum
    p=sum
    return
end

*****
subroutine estado(atf,t,rho,alf)
implicit integer (i-n)
implicit double precision (a-h, o-z)

```

```

*
*   la adivinanza para la alf, es atf
*
*   alf=atf
*
*   encuentro la alf que le corresponde a t y NA dados
*
*
e=1.d-4
da=dabs(alf)*0.1d0
j=0
call integral(t,alf,sum)
write(1,*)"para t=",t," rho=",rho," la primera adivinanza es"
write(1,*)"la integral N=", sum, " para alfa=",alf

31  j= j+1
    if(j .le. 100)then
        write(1,*)"vamos en la j=",j
        delta = 1.d0 - sum/rho
        write(21,*)j, sum, alf, delta
        if(dabs(delta) .le. e )then
            write(1,*)"encontramos la alfa=",alf
            write(1,*)"para t=",t," y NA=",rho," y sum=",sum
            write(21,*)"encontramos alf=",alf," t=",t," y rho=",rho

```

```
        goto 99
else
    If(delta .ge. 0.d0)then
        alf = alf + da
    else
        alf = alf - da
    end if
    call integral(t,alf,sum)
    write(1,*)"la integral es sum=",sum, " y alf=",alf
    algo = 1.d0 - sum/rho
    esto=delta*algo
    if(est0 .le. 0.d0)then
        da = da*0.5d0
    else
        da = da
    end if
    go to 31
end if
else
    write(1,*)"son 100 interacción y alf=",alf
    write(1,*)"con delta=", delta
    write(21,*)"llegamos j=100 y alf=",alf," delta=",delta
    alf=0.d0
    go to 99
```

```

        end if

99    return
    end

*****
subroutine integral(t,alf,sum)
implicit integer (i-n)
implicit double precision (a-h, o-z)

sum=0.d0
rmax=1000.d0
N=1000*int(rmax)
h=rmax/dbl(N)
r=0.d0
uno=1.d0/3.d0
dos=4.d0/3.d0
tres= 2.d0/3.d0
pi=dacos(-1.0d0)
tp4=4.d0*pi*(t**3.d0)

*
*   empiezo a hacer la integral con la regla de Simpson,
*   tf, es la primera adivinanza de rntot
*

tf=0.d0

```

```
r=h
call den(t,alf,r,tf,rntot,rn0)
sum=sum + uno*rntot*r**2.d0
rntot=tf
*
r=2.d0*h
call den(t,alf,r,tf,rntot,rn0)
sum=sum + dos*rntot*r**2.d0
rntot=tf
*
r=3.d0*h
call den(t,alf,r,tf,rntot,rn0)
sum=sum + tres*rntot*r**2.d0
rntot=tf
*
r=4.d0*h
call den(t,alf,r,tf,rntot,rn0)
sum=sum + dos*rntot*r**2.d0
rntot=tf

do l=5,N-3
  r= dble(l)*h
  call den(t,alf,r,tf,rntot,rn0)
  if(rntot .eq. 0.d0)go to 22
```

```

        if(rntot .le. 1.d-3 )then
            write(1,*)"la integral paro en l=",l," r",r
            write(1,*)"para alf=",alf
            N=l+3
            rntot=tf
            go to 21
        end if
22      sum = sum + rntot*r**2.d0
        rntot=tf
    end do

21  r=dbl(N-2)*h
    call den(t,alf,r,tf,rntot,rn0)
    sum=sum + tres*rntot*r**2.d0
    rntot=tf
*
    r=dbl(N-1)*h
    call den(t,alf,r,tf,rntot,rn0)
    sum=sum + dos*rntot*r**2.d0
    rntot=tf
*
    r=dbl(N)*h
    call den(t,alf,r,tf,rntot,rn0)
    sum=sum + uno*rntot*r**2.d0

```

```

*
  sum=tp4*h*sum
  return
end

*****

  subroutine den(t,alf,r,tf,rntot,rn0)
  implicit integer (i-n)
  implicit double precision (a-h, o-z)

*
*   defino mis constantes
*
  pi=dacos(-1.0d0)
  t32=(2.d0*pi*t)**(3.d0/2.d0)
  t1=2.d0/(pi*t)
  tp=pi*t

*
*   tf, es la variable para encontrar la nth dado r y x es el argumento
*   de la función de bose
*
  x= alf - r - t1*tf
  if(x .ge. 0.d0)then
    call bose(-x, 3.d0/2.d0,g)
    rnt = t32*g

```



```

else
    call bose(x, 3.d0/2.d0,g)
    rnt = t32*g
end if
dn=rnt*0.1d0
e=1.d-5
m=0
11  m=m+1
    if(m .le.50)then
        delta = 1.d0 - rnt/tf
        if(dabs(delta) .le. e) then
            z=alf - r - t1*rnt
            rn0=tp*z
            if(rn0 .le. 0.d0)rn0=0.d0
            rntot=rnt+rn0
*           write(3,*)'t',t,'alf',alf,'r',r, 'm es',m
*
*       escribo en el archivo fort.41 los resultados, los perfiles
*       de densidad para cada r
*
*           write(41,*)r,rn0, rnt,rntot
        else
            if(delta .ge. 0.d0)then
                tf = tf - dn

```

```
    else
        tf = tf + dn
    end if
    x = alf - r - t1*tf
    if(x .ge. 0.d0)then
        call bose(-x, 3.d0/2.d0,g)
        rnt = t32*g
    else
        call bose(x, 3.d0/2.d0,g)
        rnt = t32*g
    end if
    alfa= 1.d0 - rnt/tf
    algo=alfa*delta
    if(algo .ge. 0.d0)then
        dn=dn
    else
        dn=dn*0.5d0
    end if
    go to 11
end if
else
    rntot=0.d0
    rn0=0.d0
    write(1,*)"no se encontró ntot, para r=", r," alf=",alf
```

```
end if
return
end
```

```
*****
```

```
subroutine bose(a,rn,g)
implicit integer (i-n)
implicit double precision (a-h,o-z)
z = dexp(a)
g = z
if(dabs(a) .le. 0.025)then
    N=10000
else
    N=1000
end if
do l = 2,N
    g = g + z**(l)/dble(l)**rn
end do
return
end
```

Bibliografía

- [1] A. Einstein. Quantentheorie des einatomigen ideal en gases. *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften*, 1:3, 1925.
- [2] S. N. Bose. Plancks gesetz und lichtquantenhypothese. *Zeitschrift für Physik a Hadrons and nuclei*, 26(1):178, 1924.
- [3] B. L. Tolra, K. M. O'Hara, J. H. Huckans, W. D. Phillips, S. L. Rolston, and J. V. Porto. Observation of reduced three-body recombination in a correlated 1D degenerate Bose gas. *Physical Review Letters*, 92:190401, 2004.
- [4] Y. Colombe, T. Steinmetz, G. Dubois, F. Linke, D. Hunger, and J. Reichel. Strong atom field coupling for Bose-Einstein condensates in an optical cavity on a chip. *Nature*, 450(7167):272, 2007.
- [5] T. van Zoest, N. Gaaloul, Y. Singh, H. Ahlers, W. Herr, S.T. Seidel, W. Ertmer, E. Rasel, M. Eckart, E. Kajari, et al. Bose-Einstein condensation in microgravity. *Science*, 328(5985):1540, 2010.
- [6] K. Huang. *Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons, 1987.
- [7] F. London. On the Bose-Einstein condensation. *Physical Review*, 54:947, 1938.
- [8] V. S. Bagnato, G. P. Lafyatis, A. G. Martin, E. L. Raab, R. N. Ahmad-Bitar, and D. E. Pritchard. Continuous stopping and trapping of neutral atoms. *Physical Review Letters*, 58:2194, 1987.

- [9] V. S. Bagnato, D. E. Pritchard, and D. Kleppner. Bose-Einstein condensation in an external potential. *Physical Review A*, 35(10):4354, 1987.
- [10] T. Frängsmyr, editor. *The Nobel Prizes 1997*. Les Prix Nobel, 1998.
- [11] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, 269(5221):198, 1995.
- [12] A. Cornell and C. E. Wieman. The Bose-Einstein condensate. *Scientific American*, 278(3):40, 1998.
- [13] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Physical Review Letters*, 75:3969, 1995.
- [14] V. Romero-Rochín. Equation of state of an interacting Bose gas confined by a harmonic trap: The role of the "harmonic" pressure. *Physical Review Letters*, 94:130601, 2005.
- [15] R. Chang. *Química*. McGraw-Hill, 2010.
- [16] G. K. Woodgate. *Elementary atomic structure*. Oxford Science Publications, 1980.
- [17] A. J. Leggett. Bose-Einstein condensation in the alkali gases: Some fundamental concepts. *Reviews of Moderns Physics*, 73:307, 2001.
- [18] K. M. F. Magalhaes, S. R. Muniz, E. A. L. Henn, R. R. Silva, L. G. Marcassa, and V. S. Bagnato. Achievement of quantum degeneracy in a Na-QUIC trap in Brazil: an in situ observation. *Laser physics*, 2:214, 2005.
- [19] V. Romero-Rochín. Thermodynamics and phase transitions in a fluid confined by a harmonic trap. *Journal of Physical Chemistry B*, 109(45):21364, 2005.

- [20] V. Romero-Rochín and V. S. Bagnato. Thermodynamics of an ideal gas bosons harmonically trapped: Equation of state and susceptibilities. *Brazilian Journal of Physics*, 35(3A):607, 2005.
- [21] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Course of Theoretical Physics, Volume 5, Statistical Physics Part 1*. Pergamon, 1980.
- [22] E. Fermi. *Thermodynamics*. Dover Publications, Inc., 1936.
- [23] D. ter Haar. *Elements of Statistical Mechanics*. Rinehart, 1954.
- [24] R. K. Pathria. *Statistical Mechanics*. Elsevier, 1996.
- [25] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Sringari. Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases. *Reviews of Modern Physics*, 71(3):463, 1999.
- [26] R. R. Silva, E. A. L. Henn, K. M. F. Magalhaes, L. G. Marcassa, V. Romero-Rochín, and V. S. Bagnato. Definition and measurement of global thermodynamic variables for laser-cooled trapped gas. *Laser physics*, 16(4):687, 2006.
- [27] J. D. Weinstein and K. G. Libbrecht. Microscopic magnetic traps for neutral atoms. *Physical Review A*, 52(5):4004, 1995.
- [28] T. Esslinger, I. Bloch, and T. W. Hänsch. Bose-Einstein condensation in a quadrupole-Ioffe-configuration trap. *Physical Review A*, 58(4):2664, 1998.
- [29] F. Schwabl. *Statistical Mechanics*. Springer, 2006.
- [30] A. Griesmaier, J. Werner, S. Hensler, J. Stuhler, and T. Pfau. Bose-Einstein condensation of chromium. *Physical Review Letters*, 94:160401, 2005.
- [31] M. W. Zwierlein, A. Schirotzek, C. H. Schunck, and W. Ketterle. Superfluidity with imbalanced spin populations. *Science*, 311:492, 2006.
- [32] L. Landau and L. Lifshitz. *Fluid Mechanics*. Pergamon, 1987.

- [33] J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, and R. B. Bird. *Molecular Theory of Gases and Liquids*. John Wiley & Sons, Inc., 1964.
- [34] L. E. Reichl. *A Modern Course in Statistical Physics*. John Wiley & Sons, Inc., 2nd edition, 1998.
- [35] R. M. Eisberg. *Física Moderna*. Editorial Limusa-Willey, 1973.
- [36] M. W. Zemansky and R. H. Dittman. *Calor y Termodinámica*. McGraw-Hill, 1985.
- [37] W. Greiner, L. Neise, and H. Stöcker. *Thermodynamics and Statistical Mechanics*. Classical Theoretical Physics. Springer-Verlag, 1995.
- [38] J. E. Mayer and M. G. Mayer. *Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons, 1940.
- [39] R.P. Feynman. *Statistical Mechanics: A Set Of Lectures*. Advanced Books Classics. Westview Press, 1998.
- [40] J. M. Blatt. *Theory of Superconductivity*. Academic Press, 1964.
- [41] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga. Feshbach resonances in ultracold gases. *Reviews of Modern Physics*, 82:1225, 2010.
- [42] T. L. Ho. Universal thermodynamics of degenerate quantum gases in the unitarity limit. *Physical Review Letters*, 92:090402, 2004.
- [43] L. Landau and L. Lifshitz. *Quantum Mechanics*. Pergamon Press, 1980.
- [44] L. H. Nosanow and J. E. Mayer. On the virial coefficients for a Lennard-Jones gas. *The Journal of Chemical Physics*, 28(5):874, 1958.
- [45] T. Kihara. Virial coefficients and models of molecules in gases. *Reviews of Moderns Physics*, 25(4):831, 1953.

- [46] C. J. Pethick and H. Smith. *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge University Press, 2002.
- [47] D. Campos. *Fundamentos de Física Atómica y Molecular*. EUN Editorial Universidad Nacional, Universidad Nacional de Colombia, 1997.
- [48] A. L. Fetter and J. D. Walecka. *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. Dover Publications, Inc., 2003.
- [49] G. D. Mahan. *Many-Particle Physics*. Springer, 1990.
- [50] R. H. Landau. *Quantum Mechanics II*. Wiley-Interscience Publication, 1990.
- [51] V. V. Goldman, I. F. Silvera, and A. J. Leggett. Atomic hydrogen in an inhomogeneous magnetic field: Density profile and Bose-Einstein condensation. *Physical Review B*, 24(5):2870, 1981.
- [52] L. D. Landau. The theory of superfluidity of helium II. *Journal of Physics- USSR*, 5:71, 1941.
- [53] L. Landau. Theory of the superfluidity of helium II. *Physical Review*, 60:356, 1941.
- [54] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes in Fortran 77. The Art of Scientific Computing. Volume 1 of Fortran Numerical Recipes*. Press Syndicate of the University of Cambridge, 1992.
- [55] A. Minguzzi, S. Conti, and M. P. Tosi. The internal energy and condensate fraction of a trapped interacting Bose gas. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 9(5):L33, 1997.