



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

CONDENSACIÓN DE BOSE-EINSTEIN EN
UN GAS INHOMOGÉNEO EN DOS
DIMENSIONES

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Física

PRESENTA:

MARÍA IZABEL MORALES AMADOR

Tutora:

DRA. ROSARIO PAREDES GUTIÉRREZ

Ciudad de México, 2023





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.

Hoja de datos del jurado

1. Datos del alumno:

Morales
Amador
María Izabel
55 45 67 39 21
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Física
314011118

2. Datos del tutor:

Dra.
Rosario
Paredes
Gutiérrez

3. Datos del Sinodal 1:

Dra.
Mirna
Villavicencio
Torres

4. Datos del Sinodal 2:

Dr.
Francisco Javier
Sevilla
Pérez

5. Datos del Sinodal 3:

Dra.
Adriana
Andraca
Gómez

6. Datos del Sinodal 4:

Dr.
Dario
Núñez
Zúñiga

7. Datos de la tesis:

Condensación de Bose-Einstein en un gas inhomogéneo en dos dimensiones
86 p.
2023

Agradecimientos

A mis padres, Alfredo y Virginia, quienes han sido mi apoyo incondicional, les agradezco por todo el amor que me han dado, por guiarme con su sabiduría y darme grandes valores; tenerlos como padres ha sido un regalo maravilloso y les estaré agradecida toda la vida por hacerme la persona que soy ahora. A mis hermanas, Sofia y Frida, que siempre han estado pendientes de mi, por su cariño y sus sabios consejos les doy las gracias. A Jared Minero, por ser mi gran amiga en la licenciatura, sin ti no lo hubiera logrado; gracias por vivir esta aventura conmigo. A Alejandro, por el conocimiento que me has brindado, por el tiempo y cariño que me has brindado estos años.

A la doctora Rosario Paredes, quien me brindó la maravillosa oportunidad de trabajar con ella en este proyecto, gracias por todo el conocimiento y la paciencia que me ha brindado y por siempre estar dispuesta ha enseñarme. Al doctor Víctor Romero por apoyarme incondicionalmente a concluir este trabajo abriendo la posibilidad de ir más allá de lo planeado. A mis sinodales, por el apoyo brindado para mejorar este trabajo.

El desarrollo de esta tesis ha sido financiado por los proyectos de investigación:
DGAPA-PAPIIT (UNAM) IN108620 y IN117623.

Resumen

En esta tesis se analizó la termodinámica de un gas ideal de bosones atrapado en una trampa armónica en dos dimensiones, y particularmente la transición a la condensación de Bose-Einstein. Haciendo uso del Ensamble Gran Canónico se obtuvo la ecuación de estado y se identificó la variable análoga al volumen estándar de un gas homogéneo. De la ecuación de estado, se determinaron las susceptibilidades termodinámicas, particularmente el calor específico a volumen y presión constantes, la compresibilidad isotérmica, y el coeficiente de expansión térmica. Habiendo encontrado discontinuidades y divergencias en algunas de estas cantidades, se analizó el comportamiento de la función de correlación densidad-densidad para caracterizar propiamente el tipo de transición que es la condensación de Bose. Constatamos, a través del comportamiento de las susceptibilidades y del incremento de la longitud de correlación en la temperatura crítica, que la transición analizada es una transición de fase de segundo orden.

Índice general

Resumen	3
1. Introducción	5
2. Función Gran Potencial y su relación con la termodinámica	8
2.1. Concepto de número de ocupación: funciones simétricas y antisimétricas	8
2.2. Ensemble Gran Canónico	12
3. Gran potencial y propiedades termodinámicas de un gas en dos dimensiones	16
3.1. Oscilador armónico cuántico 2D en coordenadas cartesianas	16
3.2. Construcción de la función Gran Potencial	22
4. Ecuación de estado y propiedades termodinámicas del gas bidimensional	28
4.1. Entropía, número de partículas y energía	28
4.2. Distribución semi-clásica de Bose	29
4.3. Ecuación de estado de un gas de Bose ideal en una Trampa Armónica en 2D	34
5. La Física Estadística de un gas de Bose ideal	37
5.1. Deducción de la BEC inhomogénea en 2D	37
5.1.1. Caso $\mu < 0$:	40
5.1.2. Caso $\mu = 0$:	40
6. Susceptibilidades termodinámicas	42
6.1. Capacidad calorífica a volumen armónico constante: C_V	43
6.2. Capacidad calorífica a presión armónica constante: C_P	45
6.3. Coeficiente de expansión térmica: α_T	49
6.4. Compresibilidad isotérmica: κ_T	51
7. Función de Correlación densidad-densidad	55
7.1. Transiciones de Fase y Fenómenos Críticos	55
7.2. Oscilador Armónico Cuántico 2D en Coordenadas polares	57
7.3. Deducción de la función de correlación	59
7.4. Cálculo de la correlación	65
8. Conclusiones	68

Capítulo 1

Introducción

En 1924, Satyendra Nath Bose [1] desarrolló una nueva forma de estadística para deducir la ley de Planck, que expresa a la densidad espectral de la radiación de un cuerpo negro como función de la temperatura. Esta nueva estadística proporcionaba más información para poder comprender el comportamiento de los fotones; proponía que si un fotón ocupa un estado cuántico entonces había una tendencia, aunque sea pequeña, de que el siguiente fotón ocupara ese mismo estado. Esta estadística la envió a Einstein, quien quedó impresionado y se preguntó qué sucedería si se aplicara a un gas ideal de átomos o moléculas. Para el año 1925, Einstein descubrió[2] que si bajáramos la temperatura de un gas, siendo muy próxima al cero absoluto, encontraríamos una temperatura donde todos los átomos alcanzarán exactamente el mismo estado cuántico, es decir, el estado base.[3][4] Actualmente conocemos a este fenómeno como Condensación de Bose-Einstein, o BEC (Bose-Einstein Condensation) por sus siglas en inglés, siendo uno de los fenómenos que marcó una revolución en el contexto de los sistemas cuánticos en el régimen de degeneración, donde la degeneración hace referencia a que, en el caso de bosones, estas partículas ocupan el mismo estado (puede ser cualquier estado pero la BEC hace referencia al estado de mínima energía), queriendo decir, que tienen la misma energía.

La BEC es una transición de fase estadística-cuántica que consiste en la ocupación macroscópica del estado base por debajo de una temperatura crítica, que hemos denotado como T_c . La transición sucede cuando tomamos el límite termodinámico o cuando los niveles de energía discretos se aproximan a una densidad continua de estados. Al estudiar la BEC estamos trabajando con un gas de bosones, donde la clave que nos permite identificar la condensación es el comportamiento del potencial químico a bajas temperaturas, pues este es responsable de la aparente estabilización de la mencionada ocupación macroscópica del estado base. Es importante aclarar que si bien la condensación de Bose-Einstein es imposible en 1D y 2D en un sistema homogéneo[5], sí podría ocurrir en trampas armónicas, como es el caso presentado en esta tesis, porque el potencial de confinamiento modifica la densidad de estados y, por lo dicho anteriormente, la condensación sí sucede. [6][7][8] Cabe destacar que a diferencia de otras transiciones de fase cuánticas, en el caso de la BEC la interacciones no son necesarias para su ocurrencia.

Experimentalmente la BEC se consiguió en vapores de gases alcalinos en 1995, logrando con ello llevar una cantidad macroscópica de átomos neutros de un gas inhomogéneo, una densidad de 2×10^{12} átomos, a ocupar el estado base del sistema, es decir el estado de mínima energía. Para dicho propósito se enfrió un conjunto macroscópico de dichos átomos en una trampa inhomogénea de tipo armónico [9]. Esto es resultado de la predicción original que se hizo para un gas ideal [2] y es relevante mencionar que, en el caso

experimental, las interacciones entre pares de partículas están intrínsecamente presentes en los gases atómicos cuánticos ultrafríos, lo que quiere decir que no desaparecen y aún así sucede la BEC. Es por ello que surge la relevancia de este trabajo, donde se trabaja con un gas ideal inhomogéneo de bosones. Es importante decir que a partir de ese logro experimental se abrió la posibilidad de estudiar la materia en dicho régimen de degeneración cuántica, esto significa que el control y manipulación de estos vapores de átomos neutros fuera posible a partir de 1995.[10][11][12] Ejemplos de esto es estudiar la dinámica de condensados de Bose y gases degenerados de Fermi (1999)[13][27][28][29][30][31] en diversos potenciales y también incluyendo la dimensionalidad como un factor de control. En este contexto surge el problema que se abordó en esta tesis, pues consiste en identificar la termodinámica de un gas ideal de Bose confinado en una trampa armónica bidimensional y además caracterizar la transición de fase a la BEC como una transición que no es de primer orden, más adelante en el capítulo 7 se explicará más a profundidad. Esto es, primero se encuentran las cantidades termodinámicas presión, entropía, energía y número de partículas, así como la ecuación de estado de este sistema; siguiendo este camino, se calcularon las susceptibilidades C_v , C_p , α_T y κ_T . Todo lo anterior a partir de las primeras y segundas derivadas de la función Gran Potencial respectivamente, en particular, se caracterizó la transición de fase al estado condensado a través del comportamiento de estas susceptibilidades y del comportamiento de la función de correlación de la densidad. En las tres últimas susceptibilidades se encontró una divergencia en el punto crítico que es característica de una transición de fase de 2do orden. Y, finalmente, se encontró que la longitud de correlación se va haciendo más grande a medida que se toma el límite termodinámico estando en el punto de transición de fase. Con estos resultados se asegura que existe una transición de fase de punto crítico.

Con más detalle se describe el contenido de los capítulos en los párrafos siguientes.

En el capítulo 2 abordamos el concepto de número de ocupación que surge como una necesidad para poder expresar de manera general las funciones de onda para bosones, con ello podemos calcular para cualquier sistema la función Gran Potencial haciendo uso del Ensemble Gran Canónico, concluimos que este Gran Potencial es una potencial termodinámico por lo que a partir de esa función podemos encontrar las propiedades termodinámicas tomando las primeras y segundas derivadas. En el capítulo 3, estudiamos en la subsección 3.1, el oscilador armónico cuántico 2D en coordenadas cartesianas, encontrando las energías y las funciones de onda que son soluciones a la ecuación de Schrödinger. Procedemos en la subsección 3.2, a construir la función Gran Potencial para este caso particular, sustituyendo la energía encontrada del oscilador armónico en la ecuación general del capítulo 2. Para calcular esa expresión tomamos el límite termodinámico haciendo que la suma sobre la densidad de estados se convierta en una distribución continua de estados.

El capítulo 4 se compone del cálculo de las cantidades termodinámicas a partir de las primeras derivadas parciales del Gran Potencial. En la primera subsección de este capítulo se encuentra el cálculo para hallar la entropía y el número de partículas usando la definición dada en el capítulo 2, mientras que para encontrar la energía del sistema usamos la definición en términos de la suma sobre todos los estados de la energía del oscilador armónico multiplicada por el número de partículas en cada estado. La subsección 4.2 consiste en identificar quien hace la función de Volumen y de Presión, a través de determinar el carácter extensivo e intensivo de cantidades que aparecen en la función Gran Potencial, y se encuentra que para este caso, el volumen armónico corresponde al inverso cuadrado de la frecuencia de la trampa armónica. Una vez identificadas estas dos cantidades podemos calcular la presión armónica a través de la definición en términos de

la derivada parcial del gran potencial. Lo anterior abre camino a la última sección de este capítulo, donde se deduce la ecuación de estado del sistema, simplemente dividiendo la ecuación para la presión P entre la ecuación para el número de partículas N .

Ya que se han identificado las propiedades termodinámicas del gas de bosones, en el capítulo 5 se da una explicación empírica y posteriormente una deducción formal de que efectivamente sucede la condensación de Bose-Einstein cuando el gas está confinado en una trampa armónica 2D.

En el capítulo 6, se calculan las susceptibilidades: capacidad calorífica a volumen constante C_V , capacidad calorífica a presión constante C_P , coeficiente de expansión térmica α_T y compresibilidad isotérmica κ_T , que son las segundas derivadas de la función Gran Potencial. Las expresiones matemáticas que se encuentran son para temperaturas menores a la temperatura crítica y temperaturas mayores a la temperatura crítica. Además se identifica la divergencia que existe en las últimas 3 susceptibilidades cuando $T = T_c$.

El capítulo 7 trata sobre el comportamiento de la función de correlación de la densidad en el sistema tratado en este trabajo, para dicho propósito se dividió en tres sub secciones: la primera consiste en resolver nuevamente el problema del oscilador armónico cuántico bidimensional, pero ahora en coordenadas polares, pues para los cálculos posteriores resulta más sencillo trabajar con la solución en estas coordenadas. Luego, la siguiente sección aborda la deducción matemática de una expresión general para la función de correlación en términos de las energías y las funciones de onda que son solución a la ecuación de Schrödinger. Una vez obtenido lo anterior, la última sección del capítulo corresponde a sustituir la energía y funciones de onda calculadas en la sección 7.2, en la ecuación general de función de correlación dando como resultado la expresión que nos dice que tan correlacionada está la densidad en un punto \bar{r} con la densidad en un punto \bar{r}' en términos de los números cuánticos M, n_r . Para este trabajo se considera $M = 0$ y uno de los puntos fijo en el origen, es decir, $\bar{r}' = 0$, consiguiendo con esto una ecuación más simple. Las gráficas que se presentan en este capítulo corresponden a las que se obtienen variando la frecuencia armónica de la trampa, lo que significa tomar el límite termodinámico en ambas gráficas, y por otro lado en una se considera la transición de fase y en la otra no. Finalmente se encuentra que cuando se considera el límite termodinámico y la transición de fase, la longitud de correlación diverge en medida que el volumen armónico se hace infinito, siendo esto otra afirmación de que estamos en presencia de una transición de fase de segundo orden.

Para finalizar se presentan las conclusiones del trabajo realizado. Además, se incluye en los apéndices los programas utilizados para obtener las gráficas presentadas en esta tesis. Se trabajó con Wolfram Mathematica 11.1.

Capítulo 2

Función Gran Potencial y su relación con la termodinámica

La física estadística provee de un método para conocer las propiedades que describen a un sistema macroscópico en equilibrio a partir de sus propiedades microscópicas. En particular, a través del cálculo de la función de partición en cada ensamble, se pueden determinar las propiedades termodinámicas del sistema. En esta sección abordaremos el concepto de número de ocupación [15] para con él, construir la Gran Función de Partición y posteriormente identificar un potencial termodinámico que denominamos como el Gran Potencial. Todo esto usando el Ensamble Gran canónico.[20]

2.1. Concepto de número de ocupación: funciones simétricas y antisimétricas

En mecánica cuántica se sabe que si no hacemos una medición sobre un sistema, no podemos afirmar absolutamente nada sobre su estado, en otras palabras, una medición equivale a preparar un estado cuántico. Por lo que, si realizamos una medición, entonces sabemos cual es su estado, pero solo en ese instante y no para tiempos posteriores, lo que sí sabremos es las probabilidades de los resultados de dicha medición. Una consecuencia del enunciado anterior es que no podemos conocer la trayectoria de una partícula, pues solamente podemos calcular la probabilidad de hallar la posición subsecuente, si en un instante previo habíamos medido su posición.[23][15] La ecuación de Schrödinger que describe lo anterior al tiempo $t = 0$ es:

$$\hat{x}\psi(\bar{x}, 0) = \bar{x}_0\psi(\bar{x}, 0), \quad (2.1)$$

donde $\psi(\bar{x}, 0)$ es una eigenfunción del operador de posición con eigenvalor x_0 . Suponemos entonces que el sistema es descrito por un Hamiltoniano \hat{H} que lo evoluciona en el tiempo; al tiempo t , la función de onda es

$$\psi(\bar{x}, t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi(\bar{x}, 0). \quad (2.2)$$

Y al tiempo $t \neq 0$ ya no podemos saber cuál es la posición \bar{x} de la partícula. Pero lo que podemos obtener de la función de onda es $|\psi(x, t)|^2$, que es la probabilidad de hallar a la partícula en la posición x al tiempo t . Ahora, cuando tenemos 2 o más partículas es necesario introducir el concepto de *indistinguibilidad*. Para ello, sabemos que las propiedades

que definen a una partícula son su masa, su carga eléctrica y su spin. Entonces, si dos o más partículas tienen las mismas masa, carga y spin, decimos que son *indistinguibles* pues no existe ningún experimento que nos permita identificar una de la otra.

Teniendo presente lo anterior, podemos escribir una función de onda arbitraria de dos partículas como $\psi(x_1, \bar{x}_2, t)$ y que se lee como la amplitud de probabilidad de hallar a una partícula en \bar{x}_1 y a otra en \bar{x}_2 al tiempo t sin saber cual está en \bar{x}_1 y cual en \bar{x}_2 , por lo que la indistinguibilidad presente en la función consiste en que, para predicciones de cantidades medibles, no debe importar el orden de las variables \bar{x}_1 y \bar{x}_2 en la funciones de onda. Cabe resaltar que $\psi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, t)$ no es medible; lo que sí se puede determinar a través de mediciones es $|\psi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, t)|^2$ que corresponde a la probabilidad de hallar a una partícula en \bar{x}_1 y a otra en \bar{x}_2 , nuevamente haciendo énfasis que esto es sin importar cuál partícula esté en \bar{x}_1 y cuál en \bar{x}_2 . Y para que $|\psi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, t)|^2$ realmente represente esa probabilidad se debe satisfacer que:

$$|\psi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, t)|^2 = |\psi(\bar{x}_2, \bar{x}_1, t)|^2, \quad (2.3)$$

y la solución a la relación (2.3) implica la siguiente condición sobre la función de onda:

$$\psi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, t) = \psi(\bar{x}_2, \bar{x}_1, t), \quad (2.4)$$

$$\psi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, t) = -\psi(\bar{x}_2, \bar{x}_1, t). \quad (2.5)$$

La expresión (2.4) corresponde al caso cuando la función de onda no cambia de signo ante el intercambio de sus variables y se dice que la función es simétrica y, en el segundo caso, la ecuación (2.5), que es cuando sí cambia de signo, la función de onda se llama antisimétrica. Lo anterior se generaliza para N partículas.

Sean $\psi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, t)$ y $\phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, t)$ dos funciones de onda del sistema de las dos partículas. La mecánica cuántica nos dice que la superposición de esas 2 funciones es también un estado válido del sistema:

$$\xi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, t) = a\psi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, t) + b\phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, t), \quad (2.6)$$

con a y b números complejos arbitrarios. $\xi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, t)$ debe ser simétrica o antisimétrica, como en (2.4) o en (2.5), pero esto sólo es posible si ambas $\psi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, t)$ y $\phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, t)$ son simétricas o antisimétricas. Esto significa que dado un conjunto de partículas idénticas, es decir, con la misma masa, misma carga y mismo spin; o todas sus funciones de onda son simétricas o todas son antisimétricas. El resultado, que usaremos sin demostrar, es que las partículas cuyo spin es entero, $s = 0, 1, 2, \dots$ tienen funciones de onda simétricas y se llaman *bosones*; mientras que para las partículas cuyo spin es semientero, $s = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$, sus funciones de onda son antisimétricas y se llaman *fermiones*. Los bosones y los fermiones obedecen diferentes estadísticas, que mencionaremos más abajo.

A continuación, describiremos un ejemplo con el que se pretende mostrar claramente la diferencia entre las funciones de onda simétricas y antisimétricas de dos partículas, construidas a partir de funciones de onda de una partícula. Posteriormente, lo generalizaremos a N partículas.

Sean $\psi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, t)$ y $\phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, t)$ dos funciones de onda diferentes que pertenecen al espacio de Hilbert de una partícula, podemos definir una función de onda de 2 partículas como el producto de las dos, es decir,

$$\psi(x_1, x_2) = \phi_1(x_1)\phi_2(x_2). \quad (2.7)$$

2.1. CONCEPTO DE NÚMERO DE OCUPACIÓN: FUNCIONES SIMÉTRICAS Y ANTISIMÉTRICAS

Esta función de onda ni es simétrica, ni es antisimétrica, sin embargo, si proponemos la siguiente combinación:

$$\psi_+(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1(x_1)\phi_2(x_2) + \phi_1(x_2)\phi_2(x_1)), \quad (2.8)$$

donde el factor $1/\sqrt{2}$ se introduce por normalización; vemos que se cumple que $\psi_+(x_1, x_2) = \psi_+(x_2, x_1)$:

$$\begin{aligned} \psi_+(x_1, x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1(x_1)\phi_2(x_2) + \phi_1(x_2)\phi_2(x_1)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1(x_2)\phi_2(x_1) + \phi_1(x_1)\phi_2(x_2)) \\ &= \psi_+(x_2, x_1), \end{aligned} \quad (2.9)$$

es decir, $\psi_+(x_1, x_2)$ es simétrica. Ahora consideramos la siguiente combinación:

$$\psi_-(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1(x_1)\phi_2(x_2) - \phi_1(x_2)\phi_2(x_1)), \quad (2.10)$$

esta es antisimétrica pues, como se muestra a continuación $\psi_-(x_1, x_2) = -\psi_-(x_2, x_1)$:

$$\begin{aligned} \psi_-(x_1, x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1(x_1)\phi_2(x_2) - \phi_1(x_2)\phi_2(x_1)) \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1(x_2)\phi_2(x_1) - \phi_1(x_1)\phi_2(x_2)) \\ &= -\psi_-(x_2, x_1), \end{aligned} \quad (2.11)$$

Por lo tanto $\psi_+(x_1, x_2)$ es la función de onda simétrica de dos partículas en la que *una* está en la función de onda $\phi_1(x)$ de una partícula y la *otra* está en la función de onda $\phi_2(x)$ de una partícula; una de ellas en x_1 y la otra en x_2 , sin saber cuál es cuál. Y $\psi_-(x_1, x_2)$ es la versión antisimétrica. Notamos que si $\phi_1(x) = \phi_2(x)$, entonces la función de onda antisimétrica sería cero, $\psi_-(x_1, x_2) = 0$, es decir, si las partículas son fermiones, sus funciones de onda son antisimétricas, se sigue que la probabilidad de que las dos partículas estén en el mismo estado de una partícula es cero, esto es el Principio de Exclusión de Pauli.

Si las partículas son bosones, sus funciones de onda son simétricas, y por tanto no existe ninguna restricción de que ocupen el mismo estado, lo que significa que $\phi_1(x)$ y $\phi_2(x)$ pueden ser iguales o diferentes y la función de onda $\psi_+(x_1, x_2)$ es diferente de cero en general. Con esto queremos decir que los bosones pueden estar todos en el mismo estado, siendo esta la gran diferencia entre bosones y fermiones.

Procedamos ahora a generalizar lo anterior a N partículas, para ello definimos $\phi_{m_1}(x)$, $\phi_{m_2}(x)$, \dots , $\phi_{m_N}(x)$, N funciones de onda de una partícula y decimos que dichas funciones de onda son parte de un conjunto completo y ortonormal de una partícula; por lo que existe un número finito o infinito de ellas. De nuevo, el producto de las N , es la función de onda

$$\psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N) = \phi_{m_1}(x_1)\phi_{m_2}(x_2)\cdots\phi_{m_N}(x_N), \quad (2.12)$$

pero, análogo al caso anterior, ésta no es una función ni simétrica ni antisimétrica y escribirla como simétrica o antisimétrica ya no es trivial.

2.1. CONCEPTO DE NÚMERO DE OCUPACIÓN: FUNCIONES SIMÉTRICAS Y ANTISIMÉTRICAS

Comenzaremos por hallar una forma general antisimétrica de la función de onda (2.12), tal que cada vez que cambiemos los argumentos de dos funciones $\phi_{m_\alpha}(x_i)$ y $\phi_{m_\beta}(x_j)$ la función completa cambie de signo. Sin entrar en muchos detalles, la solución a esto es el Determinante de Slater[20]:

$$\psi_-(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{m_1}(x_1) & \phi_{m_2}(x_1) & \cdots & \phi_{m_N}(x_1) \\ \phi_{m_1}(x_2) & \phi_{m_2}(x_2) & \cdots & \phi_{m_N}(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{m_1}(x_N) & \phi_{m_2}(x_N) & \cdots & \phi_{m_N}(x_N) \end{vmatrix}, \quad (2.13)$$

donde el argumento en cada renglón son el mismo y en cada columna los argumentos varía de acuerdo a x_1, x_2, \dots, x_N . Es fácil ver que si intercambiamos dos argumentos, digamos x_i por x_j , el procedimiento es equivalente a intercambiar dos renglones y, por una propiedad general de los determinantes, el determinante cambia de signo (i.e. el intercambio de dos renglones o dos columnas le cambia el signo al determinante). Por lo tanto, el arreglo (2.13) da la propiedad de antisimetría. Por otro lado, si dos funciones son iguales, por ejemplo $\phi_{m_i} = \phi_{m_j}$, entonces tendríamos que dos columnas son iguales y, por otra propiedad de los determinantes (si dos columnas o dos renglones son iguales, el determinante es cero), el determinante es cero, y con esto último recuperamos la esencia del Principio de Exclusión de Pauli, que quiere decir que en un sistema de N partículas fermiónicas, no puede ocurrir que dos ó mas partículas estén en el mismo estado de una partícula.

En el problema 3D, el índice m es el vector $\vec{m} = (m_x, m_y, m_z)$ y $m_\alpha = 1, 2, 3, \dots, \infty$ con $\alpha = x, y, z$, es decir, existe un número infinito de estados de una partícula, sin embargo, el estado $\psi_-(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N)$ dado en (2.13) es una suma con signos alternantes del producto de N funciones $\phi_{\vec{m}}(\vec{r})$ todas diferentes. En otras palabras, los índices m_1, m_2, \dots, m_N quiere decir, cada uno, un vector $\vec{m} = (m_x, m_y, m_z)$ diferente. Esto nos permite decir que un estado arbitrario de N partículas fermiónicas siempre se puede construir con N funciones diferentes tomadas del conjunto infinito de funciones $\phi_{\vec{m}}(\vec{r})$.

Vayamos ahora al caso para partículas que son bosones, donde, lamentablemente, dado el producto $\phi_{m_1}(x_1)\phi_{m_2}(x_2)\cdots\phi_{m_N}(x_N)$, no es posible obtener una forma cerrada que nos garantice que la combinación de productos es simétrico, es decir, que ante el cambio de dos argumentos cualquiera x_i por x_j la función sea la misma. El problema es que los bosones no obedecen un principio de exclusión, esto quiere decir que varios de los índices m_1, m_2, \dots, m_N pueden ser los mismos. Por ejemplo, si $m_i = m_j$, eso implica que las funciones correspondientes son iguales: $\phi_{m_i} = \phi_{m_j}$, o sea que tenemos dos partículas que están en el mismo estado de una partícula y no hay nada que lo prohíba. Por tanto, no tiene sentido cambiar los argumentos x_i y x_j de esas dos funciones pues no haríamos nada.

Pongamos nuevamente un ejemplo para hacer claro el problema: sean dos partículas, las dos en el mismo estado m_i :

$$\psi(x_1, x_2) = \phi_{m_i}(x_1)\phi_{m_i}(x_2). \quad (2.14)$$

Carece de significado cambiar x_1 por x_2 , sin embargo, esto no quiere decir que no podamos escribir un estado simétrico construido con las funciones $\phi_{m_1}(x_1)\phi_{m_2}(x_2)\cdots\phi_{m_N}(x_N)$. Para poder hacerlo, primero tenemos que ver cuantas partículas están en el mismo ϕ_m del conjunto de una partícula. Con eso, podría ocurrir que las N funciones fueran diferentes o que $N - M$ partículas estuvieran en diferentes estados y M partículas en el mismo pero diferentes a las anteriores, etc. Y nos damos cuenta que el número de posibilidades es enorme. Por lo que la solución al problema técnico se obtiene por medio del concepto del *número de ocupación*.

Sea \bar{m} la etiqueta que distingue los estados de una base de una partícula, definimos entonces a n_m como el número de ocupación del estado \bar{m} de una partícula, es decir, $n_{\bar{m}}$ es el número de veces que aparece el estado \bar{m} de una partícula en un estado dado de $\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ de N partículas. Este número adquiere ciertos valores dependiendo de si las funciones son simétricas o antisimétricas:

- Si el estado es *antisimétrico*, $n_m = 0$ ó 1 , para toda m , es decir, el estado m está ocupado o no lo está.
- Si el estado es *simétrico*, $n_m = 0$ ó 1 ó \dots ó N para toda m . De nuevo, m o no es parte del estado, o puede aparecer a lo sumo N veces.

Además, se debe tener presente que dado un estado $\psi_{m_1 \dots m_N}(x_1, x_2, \dots, x_N)$ de N partículas, se tiene que obedecer

$$\sum_m n_m = N,$$

donde la suma es sobre *todos* los estados de *una* partícula. Es claro que si una m no aparece en el estado $\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$, entonces su número de ocupación es cero, $n_m = 0$.

La ventaja de esta identificación es que los estados de N partículas pueden clasificarse solamente dando los números de ocupación y esto es lo que necesitaremos para hacer la física estadística de cualquier sistema, en particular el sistema que se trata en este trabajo.

Por tanto, de manera simbólica, los estados de N partículas pueden escribirse como,

$$|\psi\rangle_N = \{n_{m_0}, n_{m_1}, n_{m_2}, \dots, n_{m_\infty}\}_N,$$

con

$$\sum_m n_m = n_{m_0} + n_{m_1} + n_{m_2} + \dots + n_{m_\infty} = N,$$

donde las etiquetas m_i con $i = 0, 1, 2, \dots, \infty$ simbolizan los valores que toma m . En resumen, tenemos dos casos:

Bosones:

$$|\psi_+\rangle = \{n_{m_0}, n_{m_1}, n_{m_2}, \dots, n_{m_\infty}\}, \quad n_{m_i} = 0, 1, 2, \dots, N \quad \text{y} \quad \sum_m n_m = N$$

Fermiones:

$$|\psi_-\rangle = \{n_{m_0}, n_{m_1}, n_{m_2}, \dots, n_{m_\infty}\}, \quad n_{m_i} = 0, 1 \quad \text{y} \quad \sum_m n_m = N.$$

Más adelante se introducirán los operadores de creación y aniquilación con los cuales podemos expresar los estados $|\psi_+\rangle$ y $|\psi_-\rangle$

2.2. Ensemble Gran Canónico

Ahora vamos a considerar un sistema cerrado descrito por las variables termodinámicas volumen, temperatura y potencial químico (V, T, μ) ; podemos encontrar la probabilidad de hallar a dicho sistema con N partículas y en uno de sus estados $|n\rangle$, sin importar el estado en que se encuentre el baño térmico. El conocimiento de dicha probabilidad nos permite obtener todas las propiedades estadísticas del sistema en este estado[14]. La probabilidad de la que hablamos antes es:

$$W_{n_N} \approx \frac{e^{\frac{S_R(N_T, E_T, V_R)}{k}} e^{-\frac{E_{n_N}}{kT} + \frac{\mu}{kT} N}}{\Omega_T}, \quad (2.15)$$

podemos definir una función Ξ como:

$$\Xi^{-1} = \frac{e^{\frac{S_R(N_T, E_T, V_R)}{k}}}{\Omega_T} \quad (2.16)$$

que nos permite escribir más compacto W_{n_N} , luego recordamos que N nos indica el número de partículas que ocupan un estado, es decir, para esta N dada existe un conjunto completo de estados $\{|n_N\rangle_N\}$ con lo cual N toma cualquier valor desde cero hasta infinito, siendo cero el improbable caso donde ninguna partícula este en el volumen V , dicho volumen defino dentro del sistema de N partículas, hasta el improbable caso donde todas estén contenidas en el volumen. Por lo tanto la normalización es la siguiente:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n_N} W_{n_N} = \frac{1}{\Xi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n_N} e^{-\frac{E_{n_N}}{kT} + \frac{\mu}{kT} N} = 1, \quad (2.17)$$

y de lo anterior podemos despejar Ξ para reconocer la gran función de partición como:

$$\Xi = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n_N} e^{-E_{n_N} \beta + \alpha N},$$

siendo $\alpha = \frac{\mu}{kT}$ y $\beta = \frac{1}{kT}$. Lo anterior nos es útil para definir el Ensemble Gran canónico que es el conjunto de todos los estados $|n_N\rangle$ para toda N , con la probabilidad W_{n_N} asignada a cada estado [14].

A continuación, usaremos la fórmula fundamental de Boltzmann de la Física Estadística, que nos relaciona la entropía con la distribución Gran Canónica:

$$S = -kT_r \widehat{W} \ln \widehat{W} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n_N} W_{n_N} \ln W_{n_N}, \quad (2.18)$$

identificamos la W_{n_N} como en la ecuación (2.15), sustituimos:

$$\begin{aligned} S &= -k \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n_N} \frac{1}{\Xi} e^{-E_{n_N} \beta + \alpha N} \ln \left(\frac{1}{\Xi} e^{-E_{n_N} \beta + \alpha N} \right) \\ &= -k \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n_N} \frac{1}{\Xi} e^{-E_{n_N} \beta + \alpha N} (-E_{n_N} \beta + \alpha N - \ln \Xi) \\ &= k \ln \Xi \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n_N} \frac{1}{\Xi} e^{-E_{n_N} \beta + \alpha N} + k \beta \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n_N} \frac{1}{\Xi} E_{n_N} e^{-E_{n_N} \beta + \alpha N} \\ &\quad - k \alpha \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n_N} \frac{1}{\Xi} N e^{-E_{n_N} \beta + \alpha N}, \end{aligned} \quad (2.19)$$

donde podemos identificar lo siguiente, el primer termino por normalización es igual a 1;

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n_N} \frac{1}{\Xi} e^{-E_{n_N} \beta + \alpha N} = 1;$$

los siguientes dos términos son los valores promedio de la energía y del número de partículas respectivamente:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n_N} \frac{1}{\Xi} E_{n_N} e^{-E_{n_N} \beta + \alpha N} = \bar{E},$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n_N} \frac{1}{\Xi} N e^{-E_{n_N} \beta + \alpha N} = \bar{N},$$

con lo que finalmente podemos escribir:

$$S = k \ln \Xi + k \beta \bar{E} - k \alpha \bar{N} = k \ln \Xi + \frac{1}{T} \bar{E} - \frac{\mu}{T} \bar{N},$$

multiplicando por T toda la ecuación, tenemos:

$$TS = kT \ln \Xi + \bar{E} - \mu \bar{N}; \quad (2.20)$$

podemos definir una función que llamaremos el Gran Potencial:

$$\Omega = -kT \ln(\Xi), \quad (2.21)$$

la sustituimos en la ecuación (2.20) y posteriormente despejamos dando lugar a una expresión para la función Gran Potencial en términos de las variables termodinámicas V, T, μ :

$$\Omega = \bar{E} - \mu \bar{N} - TS, \quad (2.22)$$

esta ecuación es la doble transformada de Legendre de la energía E , que nos cambia S por T y N por μ , de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} dE &= TdS - pdV + \mu dN, \\ \implies d\Omega &= dE - TdS - SdT - \mu dN - Nd\mu \\ &= -SdT - pdV - Nd\mu, \end{aligned} \quad (2.23)$$

entonces $\Omega = \Omega(V, T, \mu)$ es un potencial que contiene toda la termodinámica del sistema. De esta manera, podemos proceder a calcular sus primeras derivadas parciales, encontrando con ello S, P y N :

$$S = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{\mu, V}, \quad (2.24)$$

$$P = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial V} \right)_{\mu, T}, \quad (2.25)$$

$$N = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{V, T}. \quad (2.26)$$

También podemos calcular las segundas derivadas de la función Gran Potencial, estas son descripciones de las funciones de respuesta del material y por ello son de mayor interés físico que las primeras. Comenzamos con el coeficiente de expansión térmico definido como:

$$\alpha_T \equiv \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{P, N}, \quad (2.27)$$

que es el incremento en el volumen a medida que cambia la temperatura de un sistema manteniendo la presión y el número de partículas constante. La compresión isotérmica se define como:

$$\kappa_T \equiv - \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_{T, N}, \quad (2.28)$$

que corresponde a la disminución de volumen a medida que la cambia presión a temperatura y número de partículas constante. Luego podemos calcular la capacidad calorífica a presión constante como:

$$C_P \equiv T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{P,N}, \quad (2.29)$$

siendo esto el flujo de calor cuasi-estático por unidad de partículas requerido para producir un incremento de una unidad en la temperatura del sistema, manteniendo la presión y el número de partículas constante. Finalmente, la capacidad calorífica a volumen constante está dada por:

$$C_v \equiv T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{V,N} \quad (2.30)$$

y esto nuevamente es el flujo de calor cuasi-estático por unidad de partículas requerido para producir un incremento de una unidad en la temperatura del sistema, manteniendo ahora el volumen y el número de partículas constante.[7]

Capítulo 3

Gran potencial y propiedades termodinámicas de un gas en dos dimensiones

En este capítulo nos enfocaremos en encontrar la función Gran Potencial, para ello necesitaremos conocer la energías del sistema que se obtiene a través de resolver el oscilador armónico cuántico en coordenadas cartesianas en 2 dimensiones en la primera sección de este capítulo. Después, usando el ensamble gran canónico, calcularemos la densidad de estados del sistema encontrando que en el límite termodinámico la distribución se vuelve continua. Finalmente, encontramos una expresión para la función Gran Potencial.

3.1. Oscilador armónico cuántico 2D en coordenadas cartesianas

Para poder adentrarnos en el estudio de nuestro sistema, es primordial definirlo: consideramos un gas ideal confinado en una trampa armónica bidimensional de N átomos de masa m y espín s (arbitrarios), sin carga eléctrica y en equilibrio termodinámico. Al ser ideal, no consideramos la interacción entre las partículas. Con esto, proseguimos a decir que experimentalmente las nubes de átomos neutros se confinan por potenciales que matemáticamente se representan por osciladores armónicos, por lo cual estudiaremos el oscilador armónico cuántico 2D en coordenadas cartesianas. Comenzamos estudiando el Hamiltoniano de un átomo:

$$\hat{h} = \hbar\omega(\hat{n}_x + \hat{n}_y + 1), \quad (3.1)$$

donde el subíndice x y el subíndice y indican, cada uno, una dirección diferente en plano. Entonces el Hamiltoniano para N átomos de un gas ideal corresponde a la suma de N Hamiltonianos \hat{h} :

$$\hat{H} = \sum_{i=0}^N \hbar\omega(\hat{n}_i^x + \hat{n}_i^y), \quad (3.2)$$

nuevamente las etiquetas x y y identifican la direcciones ortogonales, en tanto el subíndice i es un entero que va de 0 a N e indica el átomo considerado. Consideremos la energía de un oscilador armónico clásico:

$$E = T + V = \frac{|\vec{p}|^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2),$$

donde

$$|\bar{p}|^2 = \bar{p} \cdot \bar{p} = (\bar{p}_x \hat{i} + \bar{p}_y \hat{j}) \cdot (\bar{p}_x \hat{i} + \bar{p}_y \hat{j}) = \bar{p}_x^2 + \bar{p}_y^2,$$

sustituyendo obtenemos:

$$E = \frac{1}{2m}(\bar{p}_x^2 + \bar{p}_y^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2). \quad (3.3)$$

Ahora, el Hamiltoniano cuántico corresponde a la energía de la ecuación (3.3), pero en vez de vectores, consideramos operadores y se ve de la siguiente forma:

$$\hat{h} = \frac{\hat{P}_x^2}{2m} + \frac{\hat{P}_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(\hat{X}^2 + \hat{Y}^2). \quad (3.4)$$

Se sabe que los eigenestados de \hat{h} se obtienen a través del uso de variables dimensionales que, posteriormente, nos conducirán a la introducción de operadores de número. Partiremos de la expresión:

$$\hat{h}|\phi\rangle = E|\phi\rangle, \quad (3.5)$$

sustituyendo E , \hat{h} , $|\phi\rangle = |\phi_x\rangle|\phi_y\rangle$ y multiplicando por $\langle\bar{r}| = \langle x|\langle y|$ toda la ecuación, obtenemos:

$$\begin{aligned} \langle\bar{r}|\left[\frac{\hat{P}_x^2}{2m} + \frac{\hat{P}_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(\hat{X}^2 + \hat{Y}^2)\right]|\phi\rangle &= \left[\frac{1}{2m}\bar{p}_x^2 + \bar{p}_y^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2)\right]\langle\bar{r}|\phi\rangle \\ \langle x|\langle y|\left[\frac{\hat{P}_x^2}{2m} + \frac{\hat{P}_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(\hat{X}^2 + \hat{Y}^2)\right]|\phi_x\rangle|\phi_y\rangle &= \left[\frac{1}{2m}\bar{p}_x^2 + \bar{p}_y^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2)\right]\langle x|\phi_x\rangle\langle y|\phi_y\rangle, \end{aligned} \quad (3.6)$$

repasemos los valores que tienen los conmutadores de los operadores con los que estamos trabajando:

$$\begin{aligned} [\hat{X}, \hat{P}_x] &= [\hat{Y}, \hat{P}_y] = i\hbar \\ [\hat{X}, \hat{Y}] &= [\hat{P}_x, \hat{P}_y] = [\hat{X}, \hat{P}_y] = [\hat{Y}, \hat{P}_x] = 0, \end{aligned}$$

entonces, al desarrollar la ecuación (3.6) e identificar los valores de los conmutadores podemos simplificar como:

$$\begin{aligned} \langle x|\langle y|\left[\frac{\hat{P}_x^2}{2m}|\phi_x\rangle|\phi_y\rangle + \langle x|\langle y|\left[\frac{\hat{P}_y^2}{2m}|\phi_x\rangle|\phi_y\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2\langle x|\langle y|\hat{X}^2|\phi_x\rangle|\phi_y\rangle + \right. \\ \left. + \frac{1}{2}m\omega^2\langle x|\langle y|\hat{Y}^2|\phi_x\rangle|\phi_y\rangle = \frac{1}{2}m\omega^2\langle x|\phi_x\rangle\langle y|\phi_y\rangle, \end{aligned} \quad (3.7)$$

y en la expresión anterior tenemos operadores y funciones de onda que podemos sustituir por sus expresiones explícitas, las cuales son:

$$\begin{aligned} \phi_x(x) &= \langle x|\phi_x\rangle \\ \phi_y(y) &= \langle y|\phi_y\rangle \\ \hat{P}_x^2 &= -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \\ \hat{P}_y^2 &= -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \\ \hat{X}^2 &= x^2 \\ \hat{Y}^2 &= y^2, \end{aligned}$$

3.1. OSCILADOR ARMÓNICO CUÁNTICO 2D EN COORDENADAS CARTESIANAS

y posteriormente sustituimos en (3.7), dando lugar a:

$$\begin{aligned}
 E\phi_x(x)\phi_y(y) &= \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x|\phi_x\rangle \langle y|\phi_y\rangle - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \langle x|\phi_x\rangle \langle y|\phi_y\rangle + \\
 &+ \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \langle x|\phi_x\rangle \langle y|\phi_y\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 \langle x|\phi_x\rangle \langle y|\phi_y\rangle,
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

por lo tanto, en la representación de coordenadas $\hat{h}|\phi\rangle = E|\phi\rangle$, tenemos:

$$E\phi_x(x)\phi_y(y) = \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \phi_x(x)\phi_y(y) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2)\phi_x(x)\phi_y(y). \tag{3.9}$$

Procedemos ahora a resolver la ecuación (3.9), esto es calcular los eigenvalores del Hamiltoniano \hat{h} y lo haremos a partir de definir operadores de creación y aniquilación. Primero hacemos un cambio de variable adimensional:

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathcal{X}} &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{X}, & \hat{\mathcal{Y}} &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{Y}, \\
 \hat{\mathcal{P}}_x &= \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{P}_x, & \hat{\mathcal{P}}_y &= \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{P}_y,
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

y obtenemos el valor de los conmutadores de las nuevas variables, empezando por las asociadas a la coordenada x :

$$[\hat{\mathcal{X}}, \hat{\mathcal{P}}_x] = \hat{\mathcal{X}}\hat{\mathcal{P}}_x - \hat{\mathcal{P}}_x\hat{\mathcal{X}} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} (\hat{X}\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{X}) = \frac{1}{\sqrt{\hbar^2}} [\hat{X}, \hat{P}_x] = \frac{1}{\hbar} i\hbar = i, \tag{3.11}$$

y de forma análoga para las asociadas a la coordenada y , $[\hat{\mathcal{Y}}, \hat{\mathcal{P}}_y] = i$. Por lo que:

$$\begin{aligned}
 \hat{h} &= \frac{\hat{P}_x}{2m} + \frac{\hat{P}_y}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 (\hat{X}^2 + \hat{Y}^2) \\
 &= \frac{m\hbar\omega}{2m} \hat{\mathcal{P}}_x^2 + \frac{m\hbar\omega}{2m} \hat{\mathcal{P}}_y^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right) (\hat{\mathcal{X}}^2 + \hat{\mathcal{Y}}^2) \\
 &= \frac{\hbar\omega}{2} [(\hat{\mathcal{P}}_x + \hat{\mathcal{P}}_y) + (\hat{\mathcal{X}}^2 + \hat{\mathcal{Y}}^2)].
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

Aquí podemos definir:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} [(\hat{\mathcal{P}}_x + \hat{\mathcal{P}}_y) + (\hat{\mathcal{X}}^2 + \hat{\mathcal{Y}}^2)], \tag{3.13}$$

y sustituyendo lo anterior en (3.12) encontramos que:

$$\hat{h} = \hbar\omega \hat{\mathcal{H}}. \tag{3.14}$$

La ecuación (3.13) se puede reescribir si identificamos las proyecciones del hamiltoniano en las direcciones x, y :

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_x + \hat{\mathcal{H}}_y. \tag{3.15}$$

Vamos a trabajar primero con $\hat{\mathcal{H}}_x$, para esto definimos los siguientes operadores:

$$\begin{aligned}
 \hat{a}_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\mathcal{X}} + i\hat{\mathcal{P}}_x) \\
 \hat{a}_x^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\mathcal{X}} - i\hat{\mathcal{P}}_x),
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

3.1. OSCILADOR ARMÓNICO CUÁNTICO 2D EN COORDENADAS CARTESIANAS

estos operadores son de creación y aniquilación, al calcular el conmutador de estos operadores se encuentra que $[\hat{a}_x, \hat{a}_x^\dagger] = 1$. Calculamos el siguiente producto:

$$\begin{aligned}
 \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x &= \frac{1}{2} (\hat{\mathcal{X}} - i\hat{\mathcal{P}}_x) (\hat{\mathcal{X}} + i\hat{\mathcal{P}}_x) \\
 &= \frac{1}{2} (\hat{\mathcal{X}}^2 + i\hat{\mathcal{X}}\hat{\mathcal{P}}_x - i\hat{\mathcal{P}}_x\hat{\mathcal{X}} + \hat{\mathcal{P}}_x^2) \\
 &= \frac{1}{2} (\hat{\mathcal{X}}^2 + \hat{\mathcal{P}}_x^2 + i[\hat{\mathcal{X}}, \hat{\mathcal{P}}_x]) \\
 &= \frac{1}{2} (\hat{\mathcal{X}}^2 + \hat{\mathcal{P}}_x^2 - 1),
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

y con este resultado, $\hat{\mathcal{H}}_x$ puede ser reescrito como:

$$\hat{\mathcal{H}}_x = \frac{1}{2} (\hat{\mathcal{X}}^2 + \hat{\mathcal{P}}_x^2) = \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \frac{1}{2}. \tag{3.18}$$

En este punto introducimos el operador \hat{n}_x que está definido como:

$$\hat{n}_x = \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x, \tag{3.19}$$

por lo tanto

$$\hat{\mathcal{H}}_x = \hat{n}_x + \frac{1}{2}. \tag{3.20}$$

Análogamente para la coordenada y , definimos los operadores de creación y aniquilación:

$$\begin{aligned}
 \hat{a}_y &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\mathcal{Y}} + i\hat{\mathcal{P}}_y), \\
 \hat{a}_y^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\mathcal{Y}} - i\hat{\mathcal{P}}_y).
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

Siguiendo el mismo procedimiento que en (3.17) y definiendo otro operador como $\hat{n}_y = \hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y$, encontramos que $\hat{\mathcal{H}}_y = \hat{n}_y + \frac{1}{2}$, entonces la ecuación (3.15) se reescribe en términos de los nuevos operadores de creación y aniquilación:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_x + \hat{\mathcal{H}}_y = \hat{n}_x + \frac{1}{2} + \hat{n}_y + \frac{1}{2} = \hat{n}_x + \hat{n}_y + 1, \tag{3.22}$$

por lo tanto, el hamiltoniano de la ecuación (3.14) para un átomo se convierte en:

$$\hat{h} = \hbar\omega(\hat{n}_x + \hat{n}_y + 1). \tag{3.23}$$

Haciendo la suma de N Hamiltonianos correspondientes a cada partícula idéntica del gas obtenemos:

$$\hat{H} = \sum_{i=0}^N \hbar\omega(\hat{n}_i^x + \hat{n}_i^y + 1). \tag{3.24}$$

Veremos que al tomar el límite termodinámico cuando se estudian propiedades del sistema macroscópico, el corrimiento de la energía $\hbar\omega$ puede ser despreciado, vale la pena recordar que un corrimiento de la energía no modificará las propiedades a estudiar, entonces se puede reescribir la suma comenzando ahora en 1:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{\infty} \hbar\omega(\hat{n}_i^x + \hat{n}_i^y).$$

3.1. OSCILADOR ARMÓNICO CUÁNTICO 2D EN COORDENADAS CARTESIANAS

De esta forma, logramos expresar el Hamiltoniano en términos de los operadores de número. A continuación vamos a encontrar las energías y las funciones que son soluciones a nuestra ecuación de eigen valores (3.9), donde ya hemos supuesto que nuestra solución $\phi(x, y) = \phi(x)\phi(y)$, y nos permite resolver el problema por el método de separación de variables. Reescribimos:

$$E\phi_x(x)\phi_y(y) = \frac{-\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \phi_x(x)\phi_y(y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_x(x)\phi_y(y)}{\partial y^2} \right] + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \phi_x(x)\phi_y(y) + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 \phi_x(x)\phi_y(y), \quad (3.25)$$

con esta separación de variables, las derivadas parciales se convierten en derivadas totales, entonces función con variable independiente a la derivada total sale como una constante. Ahora multiplicamos por $\frac{1}{\phi_x(x)\phi_y(y)}$:

$$E = \frac{1}{\phi_x(x)} \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi_x(x)}{\partial x^2} + \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{\phi_y(y)} \frac{\partial^2 \phi_y(y)}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2, \quad (3.26)$$

luego, al trabajar en 2 dimensiones, la energía también está en términos de estas componentes, entonces podemos escribirla como $E = E_x + E_y$ lo cual nos permite separar la ecuación en dos ecuaciones que solo dependen de una variable:

$$E_x = \frac{1}{\phi_x(x)} \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi_x(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2,$$

$$E_y = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{\phi_y(y)} \frac{\partial^2 \phi_y(y)}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2,$$

podemos reescribirlas:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi_x(x)}{\partial x^2} - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \phi_x(x) + E_x \phi_x(x) = 0, \quad (3.27)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi_y(y)}{\partial y^2} - \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 \phi_y(y) + E_y \phi_y(y) = 0. \quad (3.28)$$

Lo primero que nos damos cuenta es que son las mismas ecuaciones diferenciales pero para direcciones diferentes, entonces sus soluciones serán análogas. Por esta razón nos concentraremos en resolver solo una de ellas, la primera. Para resolverla necesitamos hacer algunos cambios de variable:

$$\alpha^4 = \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2},$$

$$f_x = \alpha x,$$

$$\frac{df_x}{dx} = \alpha,$$

$$\frac{d}{dx} = \alpha \frac{d}{df_x},$$

$$\lambda = \frac{2mE_x}{\alpha^2 \hbar^2} = \frac{2E_x m}{\hbar \omega};$$

Sustituyendo lo anterior en (3.27), se tiene:

$$\begin{aligned}\alpha^2 \frac{d^2 \phi(f_x)}{df_x^2} - \alpha^2 f_x^2 \phi(f_x) + \alpha^2 \lambda \phi(f_x) &= 0 \\ \frac{d^2 \phi(f_x)}{df_x^2} - f_x^2 \phi(f_x) + \lambda \phi(f_x) &= 0 \\ \frac{d^2 \phi(f_x)}{df_x^2} + (\lambda - f_x^2) \phi(f_x) &= 0,\end{aligned}\tag{3.29}$$

la ecuación diferencial anterior es la ecuación de Hermite pero no esta en su forma auto adjunta, por lo cuál su solución son los *polinomios de Hermite* multiplicados por una Gaussiana, como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned}\phi_x(f_x) &= e^{-\frac{f_x^2}{2}} H_m(f_x), \\ \phi'_x(f_x) &= e^{-\frac{f_x^2}{2}} [H'_m(f_x) - f_x H_m(f_x)], \\ \phi''_x(f_x) &= e^{-\frac{f_x^2}{2}} [H''_m(f_x) - 2f_x H'_m(f_x) + (f_x^2 - 1)H_m(f_x)],\end{aligned}$$

sustituimos en (3.29):

$$\begin{aligned}e^{-\frac{f_x^2}{2}} [H''_m(f_x) - 2f_x H'_m(f_x) + (f_x^2 - 1)H_m(f_x) + (\lambda - f_x^2)H_m(f_x)] &= 0 \\ \Rightarrow H''_m - 2f_x H'_m(f_x) + (\lambda - 1)H_m(f_x) &= 0,\end{aligned}\tag{3.30}$$

podemos comparar esto con la ecuación de Hermite, que es:

$$H''_m - 2xH'_m + 2nH_m = 0,\tag{3.31}$$

donde $n = 0, 1, \dots$, y podemos identificar $n = m_x$:

$$2m_x = \lambda - 1 = \frac{2E_x}{\hbar\omega} - 1,\tag{3.32}$$

de donde podemos despejar la energía E_x :

$$\begin{aligned}2m_x + 1 &= \frac{2E_x}{\hbar\omega} \\ E_x &= \hbar\omega(m_x + \frac{1}{2}),\end{aligned}$$

y nos damos cuenta que E_x depende del número m_x que es un número natural y está relacionado con la coordenada x , entonces:

$$E_{m_x} = \hbar\omega(m_x + \frac{1}{2}).\tag{3.33}$$

Y las soluciones $\phi(x)$ son lo que ya habíamos propuesto, solo que agregaremos un término de normalización y sustituiremos el valor de $f_x = \alpha x$:

$$\phi_x(x) = A_{m_x} e^{-\frac{x^2 m \omega}{2\hbar}} H_m(x), \quad \text{con} \quad A_{m_x} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^2 \left(\frac{1}{\sqrt{2^{m_x} m_x!}}\right).\tag{3.34}$$

De forma completamente análoga se encuentran las soluciones para la ecuación diferencial de $\phi_y(y)$:

$$E_{m_y} = \hbar\omega(m_y + \frac{1}{2}), \quad (3.35)$$

$$\phi_y(y) = A_{m_y} e^{-\frac{y^2 m \omega}{2\hbar}} H_{m_y}(y), \quad \text{con} \quad A_{m_y} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^2 \left(\frac{1}{\sqrt{2^{m_y} m_y!}}\right). \quad (3.36)$$

Por lo tanto, la solución del sistema completo $\phi(x, y)$ y su energía $E = E_x + E_y$, son las siguientes:

$$\phi(x, y) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^4 \left(\frac{1}{\sqrt{2^{m_x+m_y} m_x! m_y!}}\right) e^{-\frac{(x^2+y^2)}{2}} H_{m_x}(x) H_{m_y}(y) \quad (3.37)$$

$$E = \varepsilon_{\bar{m}} = E_{m_x} + E_{m_y} = \hbar\omega(m_x + m_y + 1), \quad (3.38)$$

Y por el mismo argumento que hicimos para el Hamiltoniano, se tiene:

$$\varepsilon_{\bar{m}} = \hbar\omega(m_x + m_y). \quad (3.39)$$

Ya que conocemos las energías posibles del gas que estamos estudiando, procedemos ahora a construir la función Gran Potencial que nos permitirá encontrar la termodinámica del sistema.

3.2. Construcción de la función Gran Potencial

En esta sección mostraremos cómo obtener la función Gran Potencial en el Ensemble Gran Canónico. La ecuación (3.39) nos proporciona la energía para el caso bidimensional:

$$\varepsilon_{\bar{m}} = \hbar\omega(m_x + m_y), \quad m_i \in \mathbb{N}^+ \cup \{0\}. \quad (3.40)$$

Estamos suponiendo que el sistema estudiado en este trabajo está en un potencial armónico isotrópico, en el cual se satisface que $\omega_x = \omega_y = \omega$, que es la frecuencia de la trampa. Dentro del formalismo del Ensemble Gran Canónico tenemos que la función Gran Potencial Ω , en términos de la Gran función de Partición, es:

$$\Omega(V, T, \mu) = -kT \ln(\Xi), \quad (3.41)$$

calculamos el logaritmo natural de Ξ :

$$\ln(\Xi) = \ln\left(\prod_{\bar{m}=1}^{\infty} \sum_{n_{\bar{m}}=0}^{n_{max}} e^{-(\beta\varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)n_{\bar{m}}}\right) = \sum_{\bar{m}=1}^{\infty} \ln\left(\sum_{n_{\bar{m}}=0}^{n_{max}} e^{-(\beta\varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)n_{\bar{m}}}\right), \quad (3.42)$$

donde la etiqueta \bar{m} representa el estado de una partícula, la etiqueta $n_{\bar{m}}$ corresponde a los números de ocupación del estado \bar{m} , mientras que n_{max} es el número de ocupación máximo que puede tener un estado \bar{m} , es decir el mayor número de partículas que puede tener dicho estado que depende de la estadística de Bose-Einstein. Sustituyendo en la función Gran Potencial se tiene:

$$\Omega(V, T, \mu) = -kT \sum_{\bar{m}=1}^{\infty} \ln\left(\sum_{n_{\bar{m}}=0}^{n_{max}} e^{-(\beta\varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)n_{\bar{m}}}\right). \quad (3.43)$$

Ahora vamos a calcular cada una de las sumas presentes en la ecuación anterior. Comencemos con la suma del logaritmo, que corresponde a la suma sobre todos los estados de una partícula, pues, como se dijo, la etiqueta m denota dichos estados y su significado es:

$$\bar{m} = (\vec{m}, m_s),$$

donde el vector $\vec{m} = (m_x, m_y)$ denota el estado del sistema, es decir, es una etiqueta para identificar los estados cuánticos en el sistema cartesiano. Y m_s es la proyección de espín s . Entonces la suma del logaritmo realmente corresponde a tres sumas:

$$\sum_{\bar{m}=1}^{\infty} = \sum_{m_x=1}^{\infty} \sum_{m_y=1}^{\infty} \sum_{m_s=-s}^s. \quad (3.44)$$

La suma sobre espín se calcula fácilmente, pues los valores de espín son $m_s = -s, -s + 1, \dots, 0, \dots, s - 1, s$, dando un total de $2s + 1$ valores, es decir:

$$\sum_{m_s=-s}^s = (2s + 1). \quad (3.45)$$

Para hacer la suma (3.43) se debe tomar en cuenta que en sistemas macroscópicos, como el considerado aquí, las cantidades extensivas, como es el Gran Potencial, requieren capturar la esencia de que la separación entre niveles de energía se vuelve continua, en otras palabras, pierde el carácter discreto. Es por eso que la suma se transforma en integrales, pero debido a que existe degeneración, para estados mayores que el estado base se requiere introducir una densidad de estados, y este es el trabajo que realizaremos a continuación. Para obtener dicha densidad vamos a calcular la suma sobre todos los estados. Para ello, tomaremos el límite termodinámico haciendo que el área $A \rightarrow \infty$ y al mismo tiempo el número de partículas $N \rightarrow \infty$, tal que $\frac{N}{A} = cte$. Comenzaremos definiendo una energía adimensional de la siguiente forma:

$$\epsilon_{i,j} = \frac{\epsilon}{\hbar\omega} = i + j = L, \quad (3.46)$$

con

$$i = 0, 1, \dots$$

$$j = 0, 1, \dots$$

A continuación consideramos un plano bidimensional en un sistema coordenado cuyos ejes corresponden a los números i, j identificados como estados. Dicho plano se forma, sin pérdida de generalidad, al ubicarnos en la coordenada (L, L) , esto se representa en una gráfica en la Figura (3.1). Para saber cuantos estados existen, debemos sumarlos, esto se logra calculando el área del plano:

$$A = \int_0^L dx \int_0^{-x+L} dy = \int_0^L (-x + L) dx = -\frac{L^2}{2} + L^2 = \frac{L^2}{2}, \quad (3.47)$$

el resultado anterior nos va a servir para calcular la densidad de estados con energía ϵ en este intervalo retomando que está definida como $\rho(\epsilon) = \frac{dA}{dL}$, entonces sustituyendo el área tenemos:

$$\rho(\epsilon) = \frac{dA}{dL} = \frac{d}{dL} \frac{L^2}{2} = L, \quad (3.48)$$

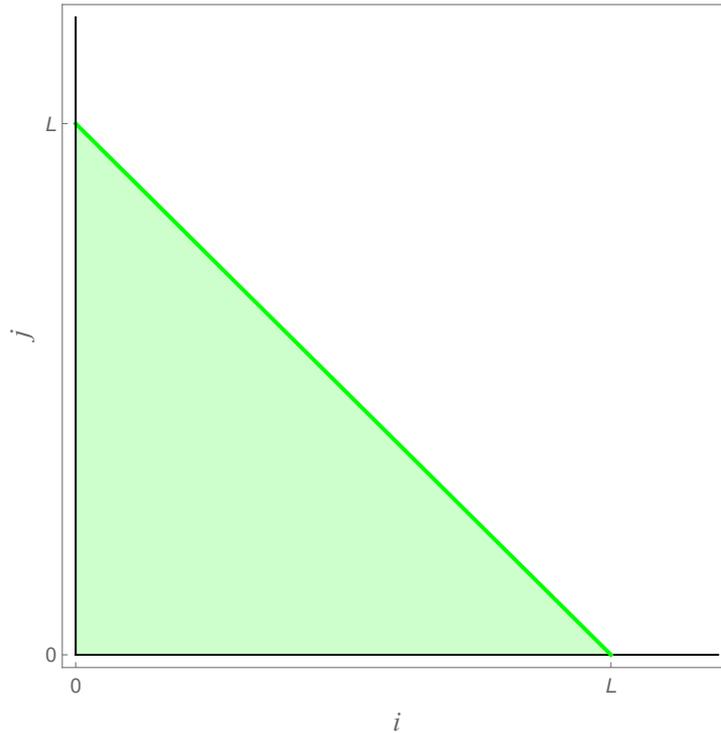


Figura 3.1: Representación de los estados en un plano cartesiano 2D

ahora, de (3.46) podemos derivar y despejar para reescribir la densidad de estados como función de L :

$$\begin{aligned}\epsilon &= \frac{\varepsilon}{\hbar\omega} = L \\ \Rightarrow d\epsilon &= \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = dL,\end{aligned}$$

por lo que, al sustituir lo anterior en (3.48) obtenemos:

$$\begin{aligned}\rho(\epsilon_{i,j})d\epsilon &= Ld\epsilon \\ \Rightarrow \rho(L)dL &= \frac{\varepsilon}{(\hbar\omega)^2}d\varepsilon.\end{aligned}\tag{3.49}$$

Esto es la densidad de estados de una partícula con energía ϵ en este intervalo. De esta ecuación es fácil para nosotros darnos cuenta que la degeneración se va haciendo muy grande conforme la energía crece, implicando que el espaciamiento entre niveles de energía, en el límite termodinámico, se aproxime a un continuo. Por lo tanto, como se describe antes, una suma que originalmente era discreta se convierte en una integral sobre el continuo:

$$\sum_{i,j} \rightarrow \int \rho(L)dL,$$

y sustituyendo la densidad $\rho(L)$:

$$\sum_{i,j} \rightarrow \int \frac{\varepsilon}{(\hbar\omega)^2}d\varepsilon.\tag{3.50}$$

Los resultados anteriores los retomaremos más adelante, ahora vamos a enfocarnos en la suma dentro del logaritmo, $\sum_{n_{\bar{m}}=0}^{n_{\bar{m}}^{max}} e^{-(\beta\varepsilon_{\bar{m}}-\alpha)n_{\bar{m}}}$, que es la suma sobre los números de

ocupación del estado \bar{m} de la partícula. Como estamos trabajando con bosones, sabemos que un estado puede ser ocupado por más de una partícula, entonces la mayor cantidad de partículas que pueden ocupar un estado \bar{m} en un sistema macroscópico dentro del límite termodinámico es $n_{max} = N$, siendo esto la restricción que obliga a la suma sobre todos los estados de una partícula ser igual al número de partículas, es decir:

$$\sum_{\bar{m}}^{\infty} n_{\bar{m}} = N, \quad (3.51)$$

que sólo quiere decir que no vamos a exceder el número de partículas totales del sistema. Para poder trabajar la suma, vamos a reescribirla para que nos quede en términos de algo ya conocido, comenzamos primero renombrando el sumando,

$$X = e^{-(\beta\varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)}, \quad (3.52)$$

luego sustituyendo en la suma que estamos buscando:

$$\sum_{n_{\bar{m}}=0}^{n_{max}} e^{-(\beta\varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)n_{\bar{m}}} = \sum_{n_{\bar{m}}=0}^{\infty} X^{n_{\bar{m}}}, \quad (3.53)$$

encontramos una expresión que se parece mucho a la siguiente propiedad:

$$\sum_{p=0}^{\infty} x^p = \frac{1}{1-x} \quad \text{si } |x| < 1, \quad (3.54)$$

sin embargo, para poder usar la expresión (3.54) debemos asegurar que $e^{-(\beta\varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)} < 1$. Nos permitiremos suponer, por ahora, que se cumple esta condición y posteriormente veremos sí tiene sentido el resultado, por lo que:

$$\sum_{n_{\bar{m}}=0}^{\infty} X^{n_{\bar{m}}} = \frac{1}{1-X} = \frac{1}{1 - e^{-(\beta\varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)}}. \quad (3.55)$$

Recordemos que el número de partículas N satisface dos ecuaciones, por un lado, del formalismo del Ensemble Gran Canónico:

$$N = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T,V}, \quad (3.56)$$

y por otro, se debe satisfacer la restricción (3.51). Entonces, suponiendo que (3.55) se cumple, la función Gran Potencial se convierte en:

$$\Omega = \sum_{\bar{m}} \ln \left(\frac{1}{1 - e^{-(\beta\varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)}} \right), \quad (3.57)$$

a esta ecuación le podemos calcular la derivada parcial respecto de μ como sigue:

$$\begin{aligned}
 N &= - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right) \\
 &= - \frac{1}{kT} \frac{\partial}{\partial \mu} \left(\sum_{\bar{m}} \ln \left(\frac{1}{1 - e^{-(\beta \varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)}} \right) \right) \\
 &= - \frac{1}{kT} \sum_{\bar{m}} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \left(\frac{1}{1 - e^{-(\beta \varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)}} \right) \\
 &= - \frac{1}{kT} \sum_{\bar{m}} (1 - e^{-(\beta \varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)}) \left((-1) (1 - e^{-(\beta \varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)})^{-2} \right) \\
 &\times \left(-e^{-(\beta \varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)} \left(-\frac{1}{kT} \right) \right) \\
 &= \sum_{\bar{m}} \frac{e^{-(\beta \varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)}}{1 - e^{-(\beta \varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)}} \\
 &= \sum_{\bar{m}} \frac{1}{e^{(\beta \varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)} - 1}, \tag{3.58}
 \end{aligned}$$

y como N también satisface la restricción de la ecuación (3.51), se cumple:

$$N = \sum_{\bar{m}} n_{\bar{m}} = \sum_{\bar{m}} \frac{1}{e^{(\beta \varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)} - 1}, \tag{3.59}$$

por lo tanto:

$$n_{\bar{m}} = \frac{1}{e^{(\beta \varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)} - 1}. \tag{3.60}$$

Ahora, sabemos que el valor de $n_{\bar{m}}$ es siempre positivo pues corresponde a número de partículas y físicamente no existen valores negativos. Entonces bajo este hecho se satisface:

$$\begin{aligned}
 n_{\bar{m}} &\geq 0 \\
 \Rightarrow \frac{1}{e^{(\beta \varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)} - 1} &\geq 0 \\
 \Leftrightarrow e^{(\beta \varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)} &> 1 \\
 \Leftrightarrow \frac{1}{e^{(\beta \varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)}} &< 1 \\
 \Leftrightarrow X &< 1, \tag{3.61}
 \end{aligned}$$

en el último renglón se usa que $X = e^{-(\beta \varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)}$ y es fácil ver que $0 < X$ pues es una exponencial, entonces la condición $|X| < 1$ se satisface y por lo tanto fue correcto usar la propiedad (3.54).

Retomando los resultados que obtuvimos en (3.45), (3.50) y (3.55), vamos a sustituirlos en (3.43) y considerando $s = 0$, obtenemos:

$$\Omega(\mu, T, \omega) = kT \int \frac{\varepsilon_{\bar{m}}}{(\hbar \omega)^2} \ln \left(1 - e^{-\beta(\varepsilon_{\bar{m}} + \alpha)} \right) d\varepsilon_{\bar{m}}. \tag{3.62}$$

Resolveremos esta integral por partes, identificando lo siguiente

$$\begin{aligned}
 u = \ln \left(1 - e^{-\beta(\varepsilon_{\bar{m}} + \alpha)} \right) &\Rightarrow du = \frac{\beta e^{-\beta \varepsilon_{\bar{m}} + \alpha}}{1 - e^{-\beta \varepsilon_{\bar{m}} + \alpha}}, \\
 dv = \varepsilon_{\bar{m}} d\varepsilon_{\bar{m}} &\Rightarrow v = \frac{\varepsilon_{\bar{m}}^2}{2},
 \end{aligned}$$

entonces la integral se separa de la siguiente manera

$$\int_0^{\infty} \varepsilon_{\bar{m}} \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_{\bar{m}} + \alpha)}) d\varepsilon_{\bar{m}} = \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_{\bar{m}} + \alpha)}) \frac{\varepsilon_{\bar{m}}^2}{2} \Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty} \frac{\beta \varepsilon_{\bar{m}}^2}{2(e^{-\beta\varepsilon_{\bar{m}} + \alpha} - 1)} d\varepsilon_{\bar{m}},$$

el primer término de la integral es cero pues al evaluar en ∞ dentro del logaritmo sucede que $\varepsilon_{\bar{m}} + \alpha \rightarrow \infty$, al multiplicarse por una cantidad finita positiva, el resultado sigue tendiendo a infinito, por lo que la exponencial evaluada en un número muy grande negativo, da como resultado cero, entonces $\ln(1-0) = 0$. Ahora cuando evaluamos en cero, el segundo término de este producto, es cero directamente. Entonces el Gran Potencial es solamente la integral:

$$\Omega(\mu, T, \omega) = -\frac{1}{2(\hbar\omega)^2} \int_0^{\infty} \frac{\beta \varepsilon_{\bar{m}}^2}{(e^{-\beta\varepsilon_{\bar{m}} + \alpha} - 1)} d\varepsilon_{\bar{m}}.$$

Hacemos un cambio de variable para poder resolver la integral:

$$\begin{aligned} x &= \beta \varepsilon_{\bar{m}} \\ \Rightarrow dx &= \beta d\varepsilon_{\bar{m}} \\ \Rightarrow d\varepsilon_{\bar{m}} &= \frac{dx}{\beta} \\ \Rightarrow \varepsilon_{\bar{m}}^2 &= \frac{x^2}{\beta^2}, \end{aligned} \tag{3.63}$$

con lo cual:

$$\Omega(\mu, T, \omega) = -\frac{1}{\beta^3(\hbar\omega)^2} \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \frac{x^2}{(e^{x-\alpha} - 1)} dx.$$

En esta última igualdad podemos identificar a la función gamma:

$$\Gamma(3) = \Gamma(1 + 2) = 2\Gamma(2) = 2\Gamma(1 + 1) = 2\Gamma(1) = 2,$$

por lo que podemos reescribir lo anterior:

$$\Omega(\mu, T, \omega) = -\frac{1}{\beta^3(\hbar\omega)^2} \frac{1}{\Gamma(3)} \int_0^{\infty} \frac{x^2}{(e^{x-\alpha} - 1)} dx,$$

y escrita de esta manera, la integral se ve como una función de Bose:

$$g_3(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(3)} \int_0^{\infty} \frac{x^{3-1}}{(e^{x-\alpha} - 1)} dx, \tag{3.64}$$

y sustituyendo $\beta = \frac{1}{kT}$, encontramos que el Gran Potencial es:

$$\Omega(\mu, T, \omega) = -kT \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^2 g_3(\alpha). \tag{3.65}$$

Resumiendo, en este capítulo se resolvió el oscilador armónico cuántico 2D en coordenadas cartesianas para encontrar la energía de la trampa $\varepsilon_{\bar{m}} = \hbar\omega(m_x + m_y)$, que posteriormente fue sustituida en la forma general de la función Gran potencial para encontrar la expresión para este caso particular, que es la ecuación (3.65). Una vez obtenida la Función Gran Potencial de un gas de Bose de N partículas ideales, procedemos a investigar la termodinámica en la siguiente sección.

Capítulo 4

Ecuación de estado y propiedades termodinámicas del gas bidimensional

En este capítulo calcularemos las propiedades termodinámicas de acuerdo con la teoría del ensemble Gran Canónico, después identificaremos la ecuación de estado que nos dirá toda la termodinámica del gas. Dichas propiedades se encuentran tras calcular las primeras derivadas parciales de la función Gran Potencial que dedujimos en la sección anterior y que corresponde a la ecuación (3.65); estas propiedades son la entropía y el número de partículas, además encontraremos el valor de la energía. Para encontrar la ecuación de estado, es necesario identificar dos cantidades: la presión armónica y el volumen armónico, que será a través de su carácter intensivo y extensivo respectivamente y veremos que son los análogos a presión y volumen convencionales.[14][15][16][17]

4.1. Entropía, número de partículas y energía

Las primeras dos propiedades termodinámicas que calcularemos se definen como:

$$S = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{\mu, V}, \quad (4.1)$$

$$N = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{V, T}. \quad (4.2)$$

Calcularemos estas cantidades explícitamente. Para la entropía tenemos el siguiente cálculo:

$$\begin{aligned} S &= - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{\mu, V} \\ &= \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{k^3 T^3}{(\hbar \omega)^2} g_3(\alpha) \right) \\ &= \frac{3k^3 T^2}{(\hbar \omega)} g_3(\alpha) + \frac{k^3 T^3}{(\hbar \omega) g_2(\alpha) (-1) \frac{\mu}{kT^2}} \\ &= k \left(\frac{kT}{\hbar \omega} \right)^2 [3g_3(\alpha) - \alpha g_2(\alpha)], \end{aligned}$$

$$\therefore S = k \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^2 [3g_3(\alpha) - \alpha g_2(\alpha)], \quad (4.3)$$

y para el número de partículas:

$$\begin{aligned} N &= - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{V,T} \\ &= \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^2 g_2(\alpha), \\ \therefore N &= \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^2 g_2(\alpha). \end{aligned} \quad (4.4)$$

A continuación vamos a encontrar la energía. Primero consideramos que está definida como:

$$E = \sum_{\bar{m}} \varepsilon_{\bar{m}} n_{\bar{m}},$$

donde la suma $\sum_{\bar{m}}$ corresponde a (3.50) y $n_{\bar{m}}$ es la ecuación (3.55), con lo cual

$$\begin{aligned} E &= \int_0^\infty \frac{\varepsilon_{\bar{m}} \rho(\varepsilon_{\bar{m}})}{e^{(\beta\varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)} - 1} d\varepsilon_{\bar{m}} \\ &= \int_0^\infty \frac{\varepsilon_{\bar{m}}^2}{(\hbar\omega)^2} \frac{1}{e^{(\beta\varepsilon_{\bar{m}} - \alpha)} - 1} d\varepsilon_{\bar{m}}. \end{aligned}$$

Utilizando el cambio de variable (3.63), se tiene:

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{(\hbar\omega)^4} \frac{2}{2} \frac{1}{\beta^3} \int_0^\infty \frac{x^2}{e^{x-\alpha} - 1} dx \\ &= 2kT \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^2 g_3(\alpha) \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$\therefore E = 2kT \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^2 g_3(\alpha). \quad (4.6)$$

4.2. Distribución semi-clásica de Bose

Recordemos que la ecuación (3.65) es el producto negativo de una variable termodinámica intensiva por una variable termodinámica extensiva, en esta sección identificaremos estas variables y encontraremos que son, como suele ser, la presión y el volumen. Para esto hagamos el siguiente ejercicio pensado: Supongamos una compresión adiabática, con N constante, es decir, la frecuencia de la trampa cambiará manteniendo el número de partículas constante y esto provocaría, de acuerdo con la ecuación (4.4), que al aumentar ω , T aumente, por lo cual el sistema se calienta; y viceversa, si tenemos una expansión adiabática, la frecuencia ω disminuye, obligando a T a disminuir también, provocando un enfriamiento del sistema. Si consideramos la cantidad definida como $\frac{1}{\omega^2}$, como lo que hemos obtenido en la entropía, número de partícula y energía, entonces diríamos en nuestro experimento anterior que durante una compresión adiabática a número de partículas constante, dicha cantidad disminuye y la temperatura aumenta, y en una expansión adiabática la cantidad $\frac{1}{\omega^2}$ aumenta y la temperatura disminuye.

Ahora antes de darle un nombre a la cantidad $\frac{1}{\omega^2}$, sabemos que, por definición, el número de partículas es una cantidad extensiva, por lo que para T y μ fijas, si multiplicamos la ecuación (4.4) por un $\lambda > 0$, necesariamente $\left(\frac{1}{\omega}\right)^2 \rightarrow \lambda \left(\frac{1}{\omega}\right)^2$ para que suceda lo siguiente:

$$\begin{aligned}\lambda N &= \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^2 (\lambda) \left(\frac{1}{\omega}\right)^2 g_2(\alpha) \\ &= (\lambda) \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^2 g_2(\alpha) \\ &= \lambda N,\end{aligned}\tag{4.7}$$

lo mismo sucede con E y S , por lo que la cantidad $\left(\frac{1}{\omega}\right)^2$ es extensiva. Vale la pena recalcar que utilizamos como exponente el número 2, pues esto es consecuencia directa de la expresión para la densidad de estados, en el caso 3D se utiliza como exponente el 3.[16] Habiendo identificado lo anterior, nombramos esta cantidad como *volumen armónico bidimensional* y lo denotaremos como:

$$\mathcal{V} = \frac{1}{\omega^2}.\tag{4.8}$$

La función Gran Potencial, al ser una cantidad extensiva, nos permite calcular la cantidad conjugada a \mathcal{V} bajo la siguiente definición:

$$\mathcal{P} = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mathcal{V}} \right)_{\mu, T},\tag{4.9}$$

y podemos calcularla explícitamente usando la ecuación (3.65), se ve como:

$$\begin{aligned}\mathcal{P} &= - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mathcal{V}} \right)_{\mu, T} \\ &= kT \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^2 g_3(\alpha),\end{aligned}\tag{4.10}$$

$$\therefore \mathcal{P} = kT \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^2 g_3(\alpha).\tag{4.11}$$

En analogía con \mathcal{V} , esta cantidad que acabamos de calcular será llamada *presión armónica*. Ahora vamos a analizar el significado de las dos cantidades. Comenzaremos calculando la densidad de partículas de la trampa, para esto vamos a demostrar un resultado general que va a ser de utilidad en nuestro caso particular donde nuestro potencial es un potencial tipo armónico. La densidad de partículas de un gas de Bose se calcula con la siguiente ecuación:

$$n(r) = \sum_{\varepsilon_{\bar{m}}} n_{\varepsilon_{\bar{m}}} |\phi_{\varepsilon_{\bar{m}}}(\varepsilon_{\bar{m}})|^2,\tag{4.12}$$

siendo $\phi_{\varepsilon_{\bar{m}}}(\varepsilon_{\bar{m}})$ la función de onda, y es válido para cualquier potencial externo del gas, a energía $\varepsilon_{\bar{m}}$, sin embargo es complicada de calcular para algunos potenciales, por lo que haremos una aproximación. Una aproximación semi clásica es:

$$dN = \frac{1}{h^2} n_{\varepsilon_{\bar{m}}} d^2 p d^2 r,\tag{4.13}$$

donde N es el número de partículas, y dN es el número de partículas con momento entre p y $p + dp$ y posición entre r y $r + dr$, además identificamos $n_{\varepsilon_{\bar{m}}}$ como la distribución de Bose:

$$n_{\varepsilon_{\bar{m}}} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\bar{m}} - \mu)} - 1}, \quad (4.14)$$

donde $\varepsilon_{\bar{m}}$ es la energía y vale la pena, para este caso, escribirla explícitamente:

$$n(p, r) = \frac{1}{e^{\beta(\frac{p^2}{2m} + U(r) - \mu)} - 1}, \quad (4.15)$$

donde $U(r)$ es cualquier potencial. Como estamos trabajando en un gas bidimensional, $d^2r = dA$, siendo esto una diferencial de área. De la ecuación (4.13) podemos despejar y cambiar $n_{\varepsilon_{\bar{m}}}$ por $n(p, r)$:

$$\left[\frac{dN}{dA} \right] = \frac{1}{h^2} n(p, r) d^2p. \quad (4.16)$$

Encontremos la integral de la ecuación anterior para obtener la densidad total;

$$\begin{aligned} \int \left[\frac{dN}{dA} \right]_{p,r} &= \frac{1}{h^2} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} n(p, r) p dp d\theta \\ \left[\frac{dN}{dA} \right]_r &= \frac{2\pi}{h^2} \int_0^\infty n(p, r) p dp, \end{aligned} \quad (4.17)$$

donde se ha utilizado de un renglón a otro que, de lado izquierdo, se puede integrar directamente sobre todos los momentos p (se quita el subíndice), y de lado derecho, la integral se hace explícita por la dependencia en p que tiene la función $n(p, r)$. Sustituimos el valor de $n(p, r)$:

$$\left[\frac{dN}{dA} \right]_r = \frac{2\pi}{h^2} \int_0^\infty \frac{p dp}{e^{\beta(\frac{p^2}{2m} + U(r) - \mu)} - 1}, \quad (4.18)$$

hacemos un cambio de variable:

$$\begin{aligned} x &= \frac{p^2}{2m} \frac{1}{kT} \\ dx &= \frac{2p dp}{2mkT} = \frac{p}{mkT} dp \\ p dp &= mkT dx, \end{aligned} \quad (4.19)$$

sustituyendo tenemos:

$$\begin{aligned} \left[\frac{dN}{dA} \right]_r &= \frac{\pi}{h^2} \int_0^\infty \frac{2mkT dx}{e^{(x+U(r)\beta-\mu\beta)} - 1} \\ &= \frac{2\pi}{h^2} mkT \int_0^\infty \frac{dx}{e^x e^{U(r)\beta-\mu\beta} - 1}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

dentro de la integral, en el denominador, podemos factorizar $e^x e^{(U(r)\beta-\mu\beta)}$:

$$\begin{aligned} \left[\frac{dN}{dA} \right]_r &= \frac{2\pi mkT}{h^2} \int_0^\infty \frac{e^{-x} e^{(-U(r)\beta+\mu\beta)}}{1 - e^{-x} e^{(-U(r)\beta+\mu\beta)}} dx \\ &= \frac{2\pi mkT}{h^2} \int_0^\infty \frac{e^{-x} e^{(-U(r)\beta+\mu\beta)} x^0}{1 - e^{-x} e^{(-U(r)\beta+\mu\beta)}} dx, \end{aligned}$$

de donde podemos identificar la longitud de onda térmica de Broglie:

$$\begin{aligned}\lambda_T &= \frac{h}{(2\pi mkT)^{1/2}} \\ \lambda_T^{-2} &= \frac{2\pi mkT}{h^2}\end{aligned}$$

además podemos extraer el factor $e^{-U(r)\beta+\mu\beta}$ de la integral, pues no depende de x , seguido de sustituir (4.21) obtenemos:

$$\left[\frac{dN}{dA}\right]_r = \frac{1}{\lambda_T^2} e^{(-U(r)\beta+\mu\beta)} \int_0^\infty \frac{e^{-x} x^0}{1 - e^{-x} e^{(-U(r)\beta+\mu\beta)}} dx. \quad (4.21)$$

Vamos a definir una nueva variable:

$$y = e^{-x} e^{(-U(r)\beta+\mu\beta)}, \quad (4.22)$$

reescribiendo:

$$\left[\frac{dN}{dA}\right]_r = \frac{1}{\lambda_T^2} e^{(-U(r)\beta+\mu\beta)} \int_0^\infty e^{-x} x^0 \frac{1}{1-y} dx$$

y usando la serie:

$$\frac{1}{1-y} = \sum_{t=0}^{\infty} y^t,$$

tenemos la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}\left[\frac{dN}{dA}\right]_r &= \frac{1}{\lambda_T^2} e^{(-U(r)\beta+\mu\beta)} \int_0^\infty \sum_{t=0}^{\infty} (e^{-x} e^{(-U(r)\beta+\mu\beta)})^t e^{-x} x^0 dx \\ &= \frac{1}{\lambda_T^2} e^{(-U(r)\beta+\mu\beta)} \int_0^\infty \sum_{t=0}^{\infty} (e^{-xt-U(r)\beta t+\mu\beta t}) e^{-x} x^0 dx.\end{aligned} \quad (4.23)$$

Luego, podemos intercambiar la integral y la suma, y como $e^{(-U(r)\beta+\mu\beta)}$ no depende de t puede entrar a la suma:

$$\left[\frac{dN}{dA}\right]_r = \frac{1}{\lambda_T^2} \sum_{t=0}^{\infty} e^{(-U(r)\beta+\mu\beta)} \int_0^\infty e^{(-U(r)\beta t+\mu\beta t)} e^{-xt-x} x^0 dx.$$

Para poder seguir, hacemos otro cambio de variable. Sea:

$$\begin{aligned}s &= x(t+1) \\ \Rightarrow x &= \frac{s}{t+1} \\ \Rightarrow dx &= \frac{ds}{t+1},\end{aligned}$$

por lo que

$$e^{-xt-x} dx = \frac{e^{-s}}{t+1} ds,$$

sustituyendo y sacando de la integral lo que no está en función de x obtenemos:

$$\begin{aligned}\left[\frac{dN}{dA}\right]_r &= \frac{1}{\lambda_T^2} \sum_{t=0}^{\infty} e^{(-U(r)\beta+\mu\beta)} \frac{e^{t(-U(r)\beta+\mu\beta)}}{t+1} \int_0^\infty e^{-s} s^{1-1} ds \\ &= \frac{1}{\lambda_T^2} \sum_{t=0}^{\infty} \frac{e^{(t+1)(-U(r)\beta+\mu\beta)}}{t+1} \int_0^\infty e^{-s} s^{1-1} ds.\end{aligned}$$

La definición de la función $\Gamma(1)$ corresponde a:

$$\Gamma(1) = \int_0^{\infty} e^{-s} s^{1-1} ds = 1,$$

que es justamente lo que aparece en la integral que tenemos; antes de sustituirlo, realizaremos un cambio de variable para los índices de la suma con la finalidad de recorrerla un lugar:

$$\begin{aligned} \tilde{t} &= t + 1, \\ \text{si } t = 0 &\Rightarrow \tilde{t} = 1 \end{aligned}$$

por lo tanto:

$$\begin{aligned} n(r) &= \left[\frac{dN}{dA} \right]_r \\ &= \frac{1}{\lambda_T^2} \sum_{\tilde{t}=1}^{\infty} \frac{e^{\tilde{t}(-U(r)\beta + \mu\beta)}}{\tilde{t}}, \end{aligned}$$

y como los índices son mudos, podemos reemplazar $\tilde{t} = t$, y tenemos:

$$n(r) = \frac{1}{\lambda_T^2} \sum_{t=1}^{\infty} \frac{e^{t(-U(r)\beta + \mu\beta)}}{t}. \quad (4.24)$$

Recordamos que a temperaturas muy bajas, cercanas al cero absoluto, los bosones comienzan a ocupar el estado base del sistema que se caracteriza por ser el de energía $\varepsilon_m \approx 0$, lo que significa que el coste energético de meter partículas a ese estado es aproximadamente cero también y esto es la definición de potencial químico cercano a cero, por lo que consideramos $\mu \approx 0$, entonces la ecuación anterior se convierte en:

$$n(r) = \frac{1}{\lambda_T^2} \sum_{t=1}^{\infty} \frac{e^{-U(r)t\beta}}{t},$$

donde nos damos cuenta que el término con mayor aportación en la suma, es con $t = 1$, por lo que, en una primera aproximación:

$$n(r) = \frac{1}{\lambda_T^2} e^{-U(r)\beta}. \quad (4.25)$$

Por lo tanto, hemos demostrado como es la densidad de partículas para cualquier potencial $U(r)$. Ahora podemos calcular la densidad de partículas para nuestro caso: el gas confinado en una trampa armónica bidimensional. Retomando el procedimiento de la demostración anterior hasta la ecuación (4.20), sustituimos el inverso al cuadrado de la longitud de onda de Broglie:

$$n(r) = \left[\frac{dN}{dA} \right]_r = \frac{1}{\lambda_T^2} \int_0^{\infty} \frac{dx}{e^{x - (-U(r)\beta + \mu\beta)} - 1},$$

la definición de la función de Bose es la siguiente:

$$g_n(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} \frac{x^{n-1}}{e^{x-\alpha} - 1}, \quad (4.26)$$

podemos identificar en la densidad la función de bose $g_1(\alpha')$, con $\alpha' = -U(r)\beta + \alpha$, siendo $\alpha = \mu/kT$ usual, entonces:

$$n(r) = \frac{1}{\lambda_T^2} g_1(-U(r)\beta + \alpha). \quad (4.27)$$

Recordando que el potencial de una trampa armónica es:

$$U(x, y) = \frac{1}{2} m \omega^2 (x + y), \quad (4.28)$$

notamos de lo anterior, sin demostrarlo, que la densidad de partículas está contenida en una nube con un volumen que resulta proporcional a ω^2 [16][17], por lo tanto esto es otra prueba de que el inverso al cuadrado de la frecuencia hace la función de volumen y además lo anterior hace claro que no sólo es en el sentido matemático, sino que físicamente esta cantidad contiene las partículas.

Estas dos cantidades satisfacen, como es el caso usual de la presión y el volumen, que $\Omega = -\mathcal{P}\mathcal{V}$, incluso las unidades de su producto tiene las unidades correctas de energía, aunque de forma individual no tengan las unidades de presión y volumen usuales. Finalmente, podemos concluir que \mathcal{P} es la presión armónica del sistema.

4.3. Ecuación de estado de un gas de Bose ideal en una Trampa Armónica en 2D

Ya definidas las cantidades análogas a la presión y volumen usual, \mathcal{V} , volumen armónico y \mathcal{P} , presión armónica, podemos emprender el camino para encontrar la ecuación de estado y con ella la termodinámica de nuestro sistema. Vamos a necesitar las ecuaciones (4.4) y (4.11). Procedemos a dividir la presión entre el número de partículas:

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{P}}{N} &= \frac{kT \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^2 g_3(\alpha)}{\left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^2 g_2(\alpha)} \\ &= kT \omega^2 \frac{g_3(\alpha)}{g_2(\alpha)}, \end{aligned}$$

despejamos la presión \mathcal{P} de esta ecuación y sustituimos el volumen armónico:

$$\mathcal{P} = \frac{NkT g_3(\alpha)}{\mathcal{V} g_2(\alpha)}. \quad (4.29)$$

La ecuación anterior es la ecuación de estado. Podemos graficar esta ecuación de dos formas: la primera, manteniendo la densidad N/\mathcal{V} constante y esta gráfica corresponde a Figura (4.1) y la otra manteniendo la temperatura constante, que es lo que se muestra en la Figura (4.2).

Para poder realizar estas gráficas, y todas las subsecuentes, establecemos una relación entre μ y T de acuerdo a lo esperado físicamente. Para ello, utilizaremos la temperatura normalizada $\tilde{T} = \frac{T}{T_c}$, por lo tanto se debe cumplir que cuando $T = T_c$, esto sería $\tilde{T} = 1$, el potencial químico debe ser $\mu = 0$.

Con esto en mente sabemos que si definimos una densidad constante $N/\mathcal{V} = 1$, entonces la ecuación (4.4) satisface lo siguiente:

$$\frac{N}{\mathcal{V}} = 1 = \left(\frac{k\tilde{T}}{\hbar}\right) g_2(\alpha), \quad (4.30)$$

4.3. ECUACIÓN DE ESTADO DE UN GAS DE BOSE IDEAL EN UNA TRAMPA ARMÓNICA EN 2D

esto evaluado en $\mu = 0$ cumple que:

$$\frac{N}{\mathcal{V}} = 1 = \left(\frac{k\tilde{T}_c}{\hbar} \right) g_2(0), \quad (4.31)$$

donde $\tilde{T}_c = 1$ pues corresponde al caso en que $T = T_c$, además como la dos ecuaciones son iguales las podemos igualar sustituyendo $\tilde{T} = \frac{T}{T_c}$ y haciendo $k = \hbar = 1$:

$$\left(\frac{T}{T_c} \right)^2 g(\alpha) = g_2(0),$$

y está es la relación funcional que necesitamos para poder encontrar valores tales que satisfagan $\alpha = 0$ cuando la temperatura es igual a la temperatura crítica.

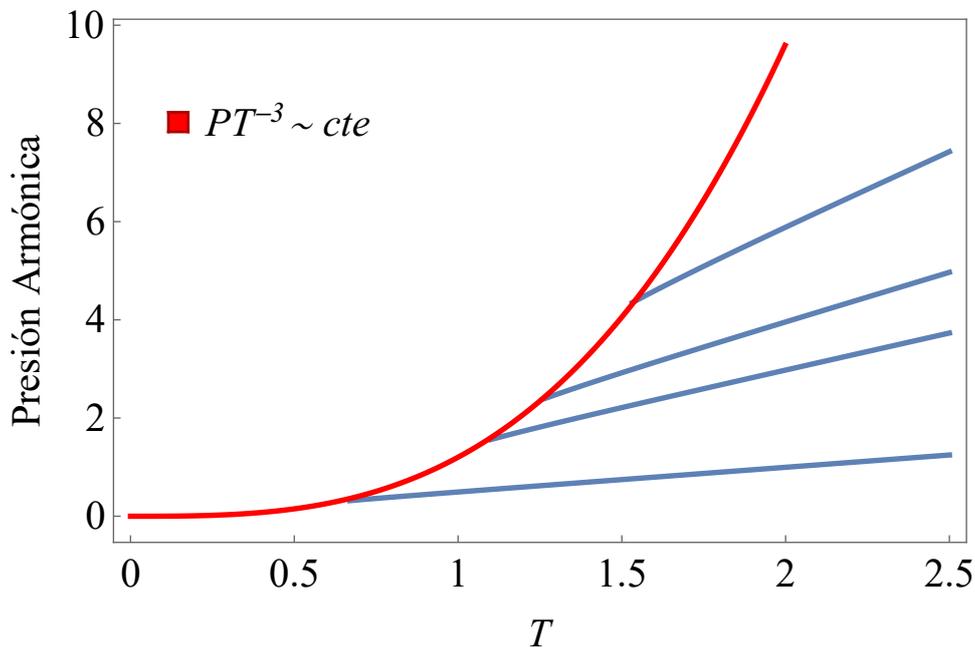


Figura 4.1: Ecuación de estado: Presión armónica vs Temperatura a Densidad N/\mathcal{V} constante cuyos valores fueron 2.0, 1.5, 1.0, 0.5.

Lo primero que notamos es que para grandes volúmenes, las isotermas se parecen a las de un gas clásico ideal, es decir, a medida que se reduce el volumen, la condensación de Bose-Einstein se establece en un valor crítico dado por la curva $\mathcal{P}V^{-3/2} = cte$, que es la curva roja de la figura (4.2). Por debajo del punto crítico, sólo la fracción de átomos que no está en el estado base ejerce presión, pero esto permanece constante hasta el volumen armónico cero a temperatura constante. En cambio, para densidad fija, que es la gráfica (4.2), la presión armónica se reduce a medida que baja la temperatura hasta llegar a la línea de transición $\mathcal{P}T^{-3} = cte$, donde se fusionan todas las isócoras, y la presión se desvanece a medida que las temperaturas tienden a cero. La explicación es la misma que en el BEC libre habitual: debajo de la transición, a medida que se reduce el volumen armónico (aumenta la densidad), la presión armónica solo depende de la temperatura y el exceso de partículas se condensa en el estado fundamental. [16]

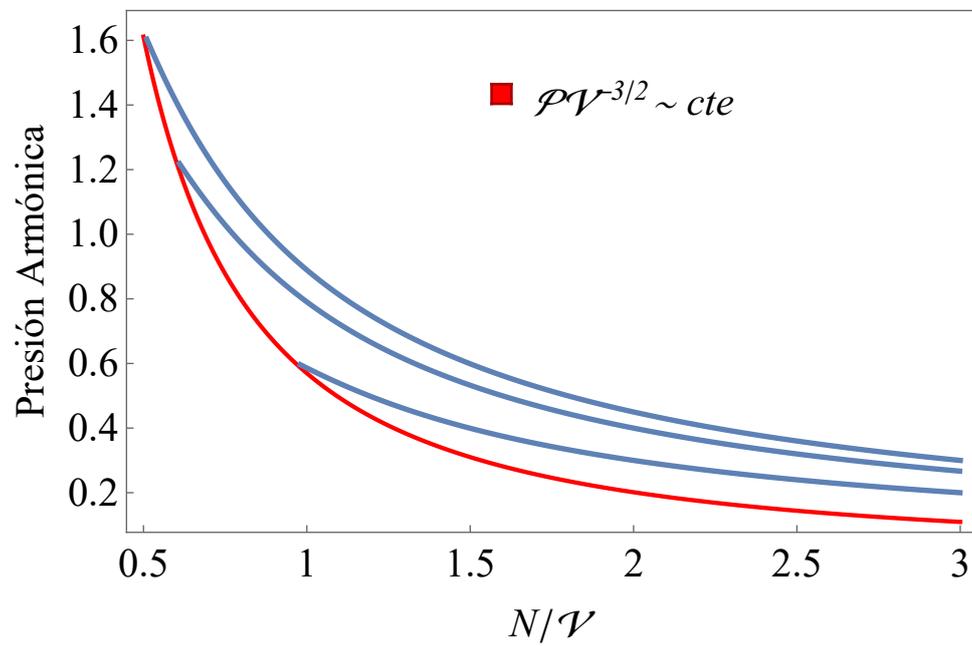


Figura 4.2: Ecuación de estado: Presión armónica vs Densidad N/V a Temperatura constante, cuyos valores fueron 1.3, 1.1, 0.8, 0.5

Capítulo 5

La Física Estadística de un gas de Bose ideal

En este capítulo vamos a hacer un paréntesis antes de pasar al cálculo de las susceptibilidades termodinámicas para dar una explicación empírica y formal de la condensación de Bose-Einstein de un gas de bosones en una trampa armónica bidimensional. Es necesario hacer esta deducción, pues, además de proporcionarnos una forma de entender lo que está sucediendo con el gas, es importante asegurarnos que la condensación sucede para este caso bidimensional, a diferencia del caso bidimensional de un gas confinado en una caja. [14][20] Para finalizar el capítulo, encontraremos las susceptibilidades del sistema.

5.1. Deducción de la BEC inhomogénea en 2D

Comenzaremos con la explicación empírica de que la condensación de Bose-Einstein existe para un gas de Bose confinado en una trampa armónica 2D.

Para nuestro caso encontramos que el número de partículas está dado por la ecuación (4.4), este valor está relacionado con los número de ocupación promedio $\bar{n}_{\bar{m}}$ (con $s = 0$, entonces $m_s = 0$), mediante la siguiente ecuación:

$$N = \sum_{\bar{m}} \frac{1}{e^{-\beta\varepsilon_{\bar{m}} + \alpha} - 1}, \quad (5.1)$$

con $\varepsilon_{\bar{m}} = \frac{p^2}{2m} + U(r)$. Analicemos el comportamiento de la función de Bose $g_2(\alpha)$ cuando $\alpha \rightarrow 0^-$; la definición de la función es:

$$g_z(\alpha) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\alpha}}{n^z}, \quad (5.2)$$

si $\alpha = 0$ se tiene:

$$g_z(0) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^0}{n^z} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^z} = \zeta(z) \quad (5.3)$$

que es justo la definición de la función Zeta de Riemman, y para nuestro caso sucede:

$$g_2(0) = \zeta(2) = \frac{\pi^2}{6} \approx 1,6449. \quad (5.4)$$

Entonces, matemáticamente, en $\alpha = 0$ la función $g_2(\alpha)$ es finita, pues adquiere un valor en ese punto, sin embargo, ya no está definida para valores positivos, pues como demostramos en (3.61), el potencial químico siempre es negativo y su máximo valor es cero, esto

se puede ver en la figura (5.1), por lo que podemos decir que las variables termodinámicas no son analíticas, significando esto que sucede una transición de fase, que más adelante caracterizaremos. Analizaremos ahora el significado de que $g_2(0)$ sea finita con un ex-

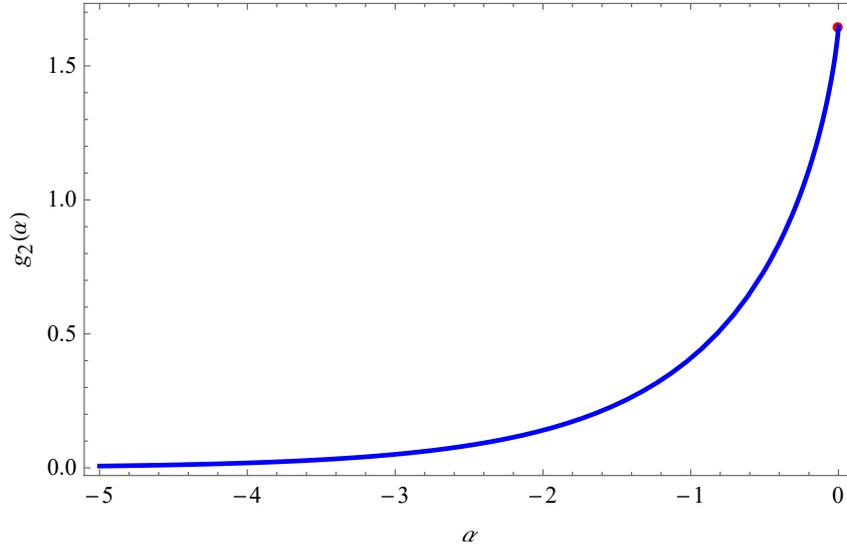


Figura 5.1: Función $g_2(\alpha)$, con el potencial químico $\alpha \leq 0$

perimento pensado. Vamos a suponer que $\frac{N}{\mathcal{V}} = N\omega^2 = \text{constante}$, definimos $c = \left(\frac{k}{\hbar}\right)^2$, entonces a una temperatura T tal que $\mu < 0$, se cumple:

$$\frac{N}{\mathcal{V}} = cT^2 g_2(\alpha) = \text{constante}, \quad (5.5)$$

si cambiáramos el valor de T por un T' menor, el valor de α cambiaría, para mantener constante (5.5), por un $\alpha' > \alpha$ (recordando que α es negativo), entonces se satisface:

$$cT^2 g_2(\alpha) = cT'^2 g_2(\alpha') = \text{constante}, \quad (5.6)$$

es fácil ver que si bajamos la temperatura T , entonces α disminuye en valor absoluto. Por lo que si seguimos bajando la temperatura, llegaremos hasta una temperatura T_c a la cual le corresponda $\alpha = 0$:

$$\frac{N}{\mathcal{V}} = cT_c^2 g_2(0), \quad (5.7)$$

estando en esta temperatura, nada nos impide bajar más la temperatura a una $\bar{T} < T_c$, lo que si sucede es que no podemos aumentar el potencial químico para que (5.5) permanezca constante, entonces:

$$\frac{N}{\mathcal{V}} = cT_c^2 g_2(0) > c\bar{T}^2 g_2(0). \quad (5.8)$$

Para que esta última desigualdad se convierta en una igualdad, podemos sumar el número de partículas faltantes para completar la densidad de la siguiente manera:

$$\frac{N}{\mathcal{V}} = c\bar{T}^2 g_2(0) + \frac{N_0}{\mathcal{V}}, \quad (5.9)$$

nos damos cuenta que N_0 son las partículas que están ocupando estados de mínima energía, dicho valor antes de T_c es igual a cero, pero por debajo de esta temperatura adquiere un

valor significativo. A este fenómeno, de tener una cantidad de átomos insignificante, en particular, en el estado base, y después de cierta temperatura, tener un número significativo, le llamamos la **condensación de Bose-Einstein**.

Ahora vamos a hacer una deducción formal del condensado. Retomamos la ecuación de la energía (3.40) y nos colocamos en el estado $\bar{m}_0 = (1, 1)$, tenemos que:

$$\varepsilon_{(1,1)} = 2\hbar\omega, \quad (5.10)$$

donde ya sabemos que $\omega = \omega_0$, pues suponemos que la frecuencia es constante. Si tomamos el límite termodinámico en el Ensemble Gran Canónico, esto quiere decir que, a una densidad constante $\frac{N}{\mathcal{V}}$, hacemos $\mathcal{V} \rightarrow \infty$ y por definición tenemos que $\mathcal{V} = \frac{1}{\omega^2}$, entonces $\omega^2 \rightarrow 0$, implicando que $\omega \rightarrow 0$, por lo que $\varepsilon_{(1,1)} \rightarrow 0$. Usando este resultado podemos extraer este término de la suma (5.1) y aún así dicha suma seguiría convergiendo como (3.50), pues la contribución de $\varepsilon_{(1,1)}$ es muy pequeña, casi cero; entonces, definiendo $N_0 = \bar{n}_{(1,1)}$, donde \bar{n} está dada por la ecuación (3.60), se tiene:

$$\begin{aligned} N &= \sum_{\bar{m}} \frac{1}{e^{-\beta(\varepsilon_{\bar{m}} - \mu)} - 1} \\ &= \bar{n}_{(1,1)} + \sum_{\bar{m} \neq (1,1)} \frac{1}{e^{-\beta(\varepsilon_{\bar{m}} - \mu)} - 1} \\ &= N_0 + \left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^2 g_2(\alpha) \\ &= N_0 + \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^2 \mathcal{V} g_2(\alpha). \end{aligned} \quad (5.11)$$

Del último renglón nos damos cuenta que el primer término considera sólo los átomos en el estado base, mientras que el segundo término considera a los que ocupan estados excitados. Nos damos cuenta que (5.11) es diferente a lo que habíamos encontrado en la ecuación (4.4), sólo por el término N_0 y a continuación veremos por qué.

Si aplicamos el límite termodinámico, i.e. $\mathcal{V} \rightarrow \infty$, nos damos cuenta que el último término diverge, haciendo que $N \rightarrow \infty$, entonces la forma correcta de expresar la ecuación es dividiendo entre el volumen, entonces:

$$\frac{N}{\mathcal{V}} = \frac{N_0}{\mathcal{V}} + \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^2 g_2(\alpha), \quad (5.12)$$

y esta ecuación se lee como: la densidad total de átomos es igual a la densidad de átomos que se encuentran estado base, más la densidad de átomos que ocupan estado excitados. Si nos concentramos en el segundo término, $\left(\frac{kT}{\hbar}\right)^2 g_2\left(\frac{\mu}{kT}\right)$, encontramos que depende solamente de cantidades intensivas, tales son μ y T , por lo que el límite termodinámico no lo modifica, además, es una cantidad convergente, pues sabemos que el valor máximo que puede tomar el potencial químico es 0 y la función de Bose es finita en este valor. Esto nos abre camino para hacer un análisis de la ecuación (5.12) por casos:

5.1.1. Caso $\mu < 0$:

Partiendo del hecho de que $\frac{N}{\mathcal{V}} = \text{constante}$, los sumandos de (5.12) deben adaptarse para mantener esa constante, el primer término, N_0 , está definido como:

$$\begin{aligned} N_0 &= \lim_{\mathcal{V} \rightarrow \infty} \bar{n}_{(1,1)} \\ &= \lim_{\mathcal{V} \rightarrow \infty} \frac{1}{e^{-\beta(\epsilon_{(1,1)} - \mu)} - 1}, \end{aligned}$$

y de acuerdo con (3.60), en este límite $\epsilon_{(1,1)} \rightarrow 0$, según lo que analizamos al principio, entonces:

$$N_0 = \frac{1}{e^{\beta\mu} - 1}. \quad (5.13)$$

Notamos que esta expresión sólo tiene sentido para $\mu < 0$, pues el caso en $\mu = 0$, $N_0 \rightarrow \infty$, lo cual no puede suceder pues no puede haber más átomos en el estado base que en el total, además $\frac{N}{\mathcal{V}}$ dejaría de ser constante. Ahora dividimos N_0 entre el volumen, y calculamos el límite termodinámico:

$$\lim_{\mathcal{V} \rightarrow \infty} \frac{N_0}{\mathcal{V}} = \lim_{\mathcal{V} \rightarrow \infty} \frac{1}{e^{\beta\mu} - 1} \frac{1}{\mathcal{V}} = 0. \quad (5.14)$$

Esto quiere decir que en el límite termodinámico y con $\mu < 0$ la densidad del estado base $\frac{N_0}{\mathcal{V}}$ es tan insignificante que la consideramos cero. Entonces la densidad total con $\mu < 0$ es:

$$\frac{N}{\mathcal{V}} = \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^2 g_2(\alpha) \quad (5.15)$$

cabe destacar que esto no quiere decir que el estado base se encuentra sin átomos, solo que su contribución en dicho límite es despreciable.

5.1.2. Caso $\mu = 0$:

Comenzaremos reescribiendo la expresión a potencial químico cero:

$$\frac{N}{\mathcal{V}} = \frac{N_0}{\mathcal{V}} \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^2 g_2(0). \quad (5.16)$$

De esta ecuación identificamos la temperatura crítica T_c , que es aquella en la cual llegamos a $\mu = 0$ y donde se cumple que:

$$\frac{N}{\mathcal{V}} = \left(\frac{kT_c}{\hbar} \right)^2 g_2(0) \quad (5.17)$$

por lo que T_c queda definida una vez que hayamos fijado $\frac{N}{\mathcal{V}}$. En este punto podemos tomar una temperatura menor que T_c , donde sabemos que el potencial químico no puede aumentar más, entonces sucede que:

$$\begin{aligned} \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^2 g_2(0) &< \left(\frac{kT_c}{\hbar} \right)^2 g_2(0) = \frac{N}{\mathcal{V}} \\ \Rightarrow \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^2 g_2(0) &< \frac{N}{\mathcal{V}}. \end{aligned}$$

Esto quiere decir que la densidad de átomos que no están en el estado base, no son suficientes para igualar la densidad total, por lo que los átomos faltantes deben estar en el estado base, es decir, **el condensado**, y se calcula como la densidad total menos la densidad de átomos en estados excitados a una temperatura $T < T_c$:

$$\frac{N_0}{\mathcal{V}} = \frac{N}{\mathcal{V}} - \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^2 g_2(0), \quad (5.18)$$

por lo que podemos concluir de ambos casos que $\forall \mu \leq 0$ se cumple:

$$\frac{N}{\mathcal{V}} = \frac{N_0}{\mathcal{V}} + \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^2 g_2(\alpha), \quad \alpha = \frac{\mu}{kT}. \quad (5.19)$$

Capítulo 6

Susceptibilidades termodinámicas

En este capítulo nos enfocaremos en calcular las susceptibilidades del sistema, C_V , C_P , α_T , κ_T , en principio, sería a partir de las segundas derivadas de la función Gran Potencial, pero como ya hemos calculado previamente las primeras derivadas parciales entonces se hará a partir de las derivadas parciales de la entropía o volumen armónico como se muestra a continuación. Para ello, dividiremos por casos dichos cálculos: a temperatura mayor que la temperatura crítica, $T_c < T$, y luego para temperaturas menores que la temperatura crítica, $T < T_c$, posteriormente analizaremos sus comportamientos.

Comenzaremos calculando la temperatura crítica, para esto consideramos la ecuación para el número de partículas (4.4):

$$N = \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^2 g_2(\alpha). \quad (6.1)$$

evaluamos $\mu = 0$ y sabemos que a este valor de la temperatura le llamamos *temperatura crítica*:

$$\begin{aligned} N &= \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^2 g_2(0) \\ &= \left(\frac{kT_c}{\hbar} \right)^2 \mathcal{V} g_2(0), \end{aligned} \quad (6.2)$$

así, despejando T_c tenemos:

$$T_c = \frac{\hbar}{k} \left(\frac{N}{\mathcal{V} g_2(0)} \right)^{1/2}. \quad (6.3)$$

Prosigamos ahora con las susceptibilidades, que se pueden encontrar a partir de las ecuaciones (4.3), (4.4), (4.11) y (4.29), que son las siguientes definiciones:

$$\begin{aligned} C_V &= T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{\mathcal{V}, N}, \\ C_P &= T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{\mathcal{P}, N}, \\ \alpha_T &= \frac{1}{\mathcal{V}} \left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial T} \right)_{\mathcal{P}, N}, \\ \kappa_T &= - \left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial \mathcal{P}} \right)_{T, N}, \end{aligned}$$

y como vamos a tener casos de acuerdo a si $T > T_c$ o si $T < T_c$, la entropía y la presión dadas por las ecuaciones (4.3) y (4.11) respectivamente, son ecuaciones adecuadas en la región $T_c < T$. Sin embargo, cuando $T < T_c$, que es lo mismo que $\mu = 0$, tenemos que se satisfacen otras expresiones las cuales son:

$$S = 3k \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^2 g_3(0), \quad T < T_c, \quad (6.4)$$

$$\mathcal{P} = kT \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^2 g_3(0), \quad T < T_c. \quad (6.5)$$

Además de estas dos ecuaciones, vamos a necesitar saber cómo es la derivada de la función de Bose:

$$\frac{d}{d\alpha} g_z(\alpha) = g_{z-1}(\alpha).$$

De esta manera tenemos las herramientas para poder calcular las susceptibilidades.

6.1. Capacidad calorífica a volumen armónico constante: C_V

Por definición tenemos que la capacidad calorífica es:

$$C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{V,N}, \quad (6.6)$$

donde la derivada la podemos descomponer como:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{V,N} = \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{\mu,V} + \left(\frac{\partial S}{\partial \mu} \right)_{T,V} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{N,V}, \quad (6.7)$$

esta descomposición es válida $\forall T$. Comenzaremos trabajando en la región donde $T > T_c$, consideraremos S dada por la ecuación (4.3) y haremos las derivadas por separado, comenzando con la primera:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{\mu,V} &= k \left(\frac{k}{\hbar\omega} \right)^2 \left[\frac{2T^2}{T} (3g_3(\alpha) - \alpha g_2(\alpha)) \right] + \\ &+ k \left(\frac{k}{\hbar\omega} \right)^2 \left[3T^2 g_2(\alpha) \left(\frac{-\mu}{kT^2} \right) - T^2 g_2(\alpha) \left(\frac{-\mu}{kT^2} \right) - \alpha^2 g_1(\alpha) \frac{\alpha}{T} \right] \\ &= \frac{k}{T} \left(\frac{k}{\hbar\omega} \right)^2 \left[6g_3(\alpha) - 2\alpha g_2(\alpha) - 3\alpha g_2(\alpha) + \alpha g_2(\alpha) + \alpha^2 g_1(\alpha) \right] \\ &= \frac{Nk}{T} \left[6 \frac{g_3(\alpha)}{g_2(\alpha)} - 4\alpha + \alpha^2 g_1(\alpha) \right]. \end{aligned} \quad (6.8)$$

La segunda:

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\partial S}{\partial \mu}\right)_{T,\nu} &= k \left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^2 \left[3g_2(\alpha)\frac{1}{kT} - g_2(\alpha)\frac{1}{kT} - \alpha g_2(\alpha)\frac{1}{kT}\right] \\
 &= \frac{1}{T} \left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^2 [3g_2(\alpha) - g_2(\alpha) - \alpha g_2(\alpha)] \\
 &= \frac{N}{T} \left[3 - 1 - \alpha \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)}\right] \\
 &= \frac{N}{T} \left[2 - \alpha \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)}\right].
 \end{aligned} \tag{6.9}$$

Ahora, para calcular la tercer derivada parcial, consideramos la identidad de Jaccobi:

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{N,\nu} \left(\frac{\partial T}{\partial N}\right)_{\mu,\nu} \left(\frac{\partial N}{\partial \mu}\right)_{T,\nu} = -1, \tag{6.10}$$

despejando $\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{N,\nu}$:

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{N,\nu} = -\frac{\left(\frac{\partial N}{\partial T}\right)_{\mu,\nu}}{\left(\frac{\partial N}{\partial \mu}\right)_{T,\nu}}. \tag{6.11}$$

calculemos las derivadas del cociente anterior por separado:

$$\begin{aligned}
 -\left(\frac{\partial N}{\partial T}\right)_{\mu,\nu} &= -\left[2\left(\frac{k}{\hbar\omega}\right)^2 \frac{T^2}{T} g_2(\alpha) + \left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^2 g_1(\alpha) \left(\frac{-\mu}{kT^2}\right)\right] \\
 &= -\left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^2 \frac{1}{T} [2g_2(\alpha) - \alpha g_1(\alpha)] \\
 &= \frac{N}{T} \left[\frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)} \alpha - 2\right],
 \end{aligned} \tag{6.12}$$

y por otro lado tenemos:

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\partial N}{\partial \mu}\right)_{T,\nu} &= \left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^2 g_1(\alpha) \frac{1}{kT} \\
 &= \frac{N}{kT} \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)}.
 \end{aligned} \tag{6.13}$$

Haciendo el cociente de (6.12) y (6.13) obtenemos:

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{N,\nu} &= \frac{\frac{N}{T} \left[\frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)} \alpha - 2\right]}{\frac{N}{kT} \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)}} \\
 &= k \left[\alpha - 2 \frac{g_2(\alpha)}{g_1(\alpha)}\right].
 \end{aligned} \tag{6.14}$$

Ahora podemos multiplicar (6.9) por (6.14) dando como resultado el segundo término de la derivada (6.7):

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial S}{\partial \mu}\right)_{T,\nu} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{N,\nu} &= \frac{Nk}{T} \left[\left(2 - \alpha \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)}\right) \left(\alpha - 2 \frac{g_2(\alpha)}{g_1(\alpha)}\right) \right] \\ &= \frac{Nk}{T} \left[-4 \frac{g_2(\alpha)}{g_1(\alpha)} + 2\alpha + 2\alpha - \alpha^2 \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)} \right] \\ &= \frac{Nk}{T} \left[-4 \frac{g_2(\alpha)}{g_1(\alpha)} + 4\alpha \right], \end{aligned} \quad (6.15)$$

Por lo tanto, sumando (6.8) y (6.15), obtenemos la capacidad calorífica $C_{\mathcal{V}}$:

$$\begin{aligned} C_{\mathcal{V}} &= Nk \left[6 \frac{g_3(\alpha)}{g_2(\alpha)} - 4\alpha + \alpha^2 \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)} - 4 \frac{g_2(\alpha)}{g_1(\alpha)} + 4\alpha - \alpha^2 \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)} \right] \\ &= 2Nk \left[3 \frac{g_3(\alpha)}{g_2(\alpha)} - 2 \frac{g_2(\alpha)}{g_1(\alpha)} \right], \end{aligned} \quad (6.16)$$

$$\therefore C_{\mathcal{V}} = 2Nk \left[3 \frac{g_3(\alpha)}{g_2(\alpha)} - 2 \frac{g_2(\alpha)}{g_1(\alpha)} \right] \quad \text{para } T > T_c \quad (6.17)$$

Para la región en la que $T \leq T_c^-$ utilizaremos la ecuación (6.4) para la entropía:

$$S = 3k \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^2 g_3(0),$$

entonces la ecuación (6.7) para este caso sólo va a tener el primer término, pues $\mu = 0$:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{\nu,N} = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{\mu,\nu} = 3k \left(\frac{k}{\hbar\omega} \right)^2 2T g_3(0), \quad (6.18)$$

por lo que sustituyendo en (6.38):

$$C_{\mathcal{V}} = 6k \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^2 g_3(0) \quad \text{para } T < T_c. \quad (6.19)$$

El caso $T = T_c$ es un caso particular del anterior, pues cuando sucede esto, $\mu = 0$, entonces solamente cambiamos T por T_c y con esto aseguramos que sea válida para $T \leq T_c$. El comportamiento descrito para $C_{\mathcal{V}}$ se muestra en la Figura (6.1) como función de la temperatura.

6.2. Capacidad calorífica a presión armónica constante: $C_{\mathcal{P}}$

En esta sección se calculará $C_{\mathcal{P}}$, que es la capacidad calorífica a presión constante y se define como:

$$C_{\mathcal{P}} = T \left(\frac{\delta S}{\delta T} \right)_{\mathcal{P},N}, \quad (6.20)$$

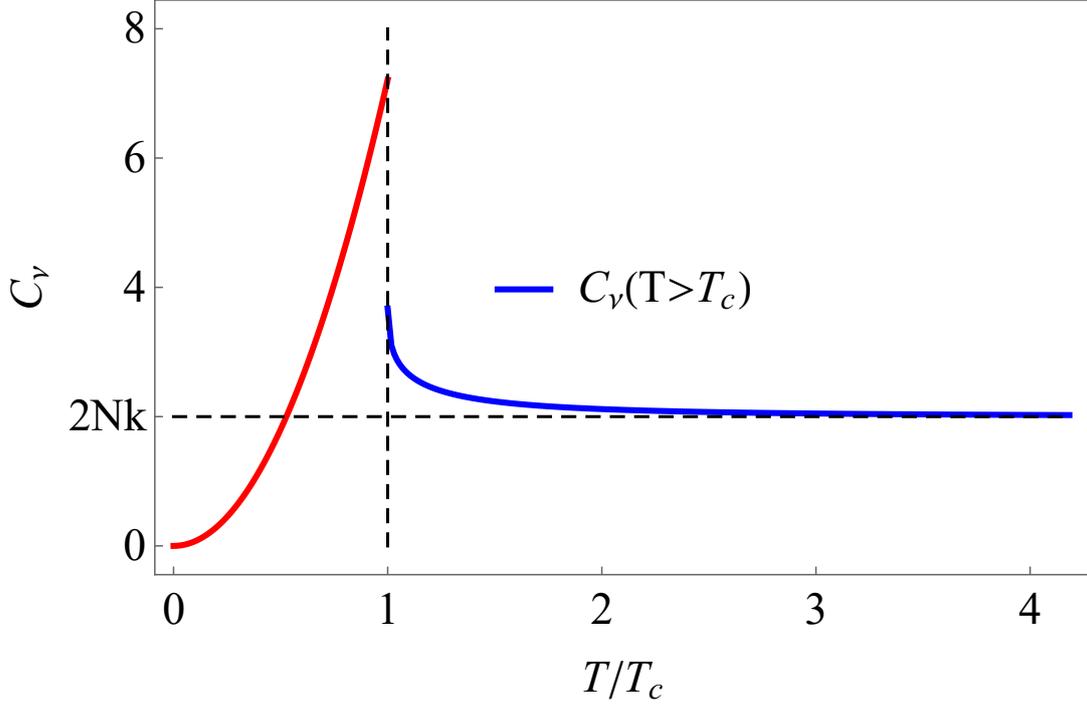


Figura 6.1: Comportamiento de Capacidad calorífica a Volumen Armónico Constante para un gas ideal de Bosones confinado en una trampa armónica 2D como función de la temperatura, considerando $k = \hbar = 1$

y que podemos descomponer en una suma de productos de derivadas parciales:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta S}{\delta T}\right)_{\mathcal{P},N} &= \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{\mu,\nu} + \left(\frac{\partial S}{\partial \mu}\right)_{\nu,T} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{\mathcal{P}} + \\ &+ \left(\frac{\partial S}{\partial \nu}\right)_{T,\mu} \left(\frac{\partial \nu}{\partial T}\right)_{N,\mu} + \\ &+ \left(\frac{\partial S}{\partial \nu}\right)_{T,\mu} \left(\frac{\partial \nu}{\partial \mu}\right)_{N,T} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{\mathcal{P}}, \end{aligned} \quad (6.21)$$

nuevamente haremos cada una de las derivadas anteriores por separado, la primera $\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{\mu,\nu}$:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{\mu,\nu} = \frac{Nk}{T} \left[6 \frac{g_3(\alpha)}{g_2(\alpha)} - 4\alpha + \alpha^2 \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)} \right]. \quad (6.22)$$

La segunda $\left(\frac{\partial S}{\partial \mu}\right)_{\nu,T}$:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial S}{\partial \mu}\right)_{\nu,T} &= k \left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^2 \left[3g_2(\alpha) \frac{1}{kT} - g_2(\alpha) \frac{1}{kT} - \alpha g_1(\alpha) \frac{1}{kT} \right] \\ &= \frac{1}{T} \left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^2 [2g_2(\alpha) - \alpha g_1(\alpha)] \\ &= \frac{N}{T} \left[2 - \alpha \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)} \right]. \end{aligned} \quad (6.23)$$

Para hacer la siguiente, utilizamos otra identidad de Jaccobi:

$$\left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial T}\right)_\mu \left(\frac{\partial T}{\partial \mu}\right)_\mathcal{P} \left(\frac{\partial \mu}{\partial \mathcal{P}}\right)_T = -1, \quad (6.24)$$

por lo que la tercera derivada se puede despejar de la identidad anterior:

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_\mathcal{P} = -\frac{\left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial T}\right)_\mu}{\left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \mu}\right)_T}. \quad (6.25)$$

Primero calculamos cada una de las derivadas y luego realizamos el cociente:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial T}\right)_\mu &= k \left(\frac{k}{\hbar}\right)^2 \left[3Tg_3(\alpha) + T^3g_2(\alpha)\frac{-\mu}{kT^2}\right] \\ &= k \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^2 [3g_3(\alpha) - \alpha g_2(\alpha)], \end{aligned} \quad (6.26)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \mu}\right)_T &= kT \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^2 g_2(\alpha) \frac{1}{kT} \\ &= \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^2 g_2(\alpha), \end{aligned} \quad (6.27)$$

haciendo el cociente entre (6.26) y (6.27) tenemos:

$$\begin{aligned} -\frac{\left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial T}\right)_\mu}{\left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \mu}\right)_T} &= \frac{-k \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^2 [3g_3(\alpha) - \alpha g_2(\alpha)]}{\left(\frac{kT}{\hbar}\right)^2 g_2(\alpha)} \\ &= k \left[\alpha - 3\frac{g_3(\alpha)}{g_2(\alpha)}\right]. \end{aligned} \quad (6.28)$$

Procedemos a multiplicar las ecuaciones (6.23) y (6.28), dando lugar a lo siguiente:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial S}{\partial \mu}\right)_{\nu, T} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_\mathcal{P} &= \frac{Nk}{T} \left(\alpha - 3\frac{g_3(\alpha)}{g_2(\alpha)}\right) \left(2 - \alpha\frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)}\right) \\ &= \frac{Nk}{T} \left[2\alpha - \alpha^2\frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)} - 6\frac{g_3(\alpha)}{g_2(\alpha)} + 3\alpha\frac{g_1(\alpha)g_3(\alpha)}{g_2^2(\alpha)}\right]. \end{aligned} \quad (6.29)$$

Siguiendo con el otro par de derivadas, la cuarta derivada se obtiene de la siguiente manera:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \mathcal{V}}\right)_{T, \mu} = k \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^2 [3g_3(\alpha) - \alpha g_2(\alpha)]. \quad (6.30)$$

Y para poder calcular la quinta derivada, $\left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial T}\right)_{N, \mu}$, vamos a despejar el volumen armónico de las ecuaciones (4.4) y (4.29):

$$\mathcal{V} = \frac{NkT}{\mathcal{P}} \frac{g_3(\alpha)}{g_2(\alpha)} = \frac{N}{g_2(\alpha)} \left(\frac{\hbar}{kT}\right)^2, \quad (6.31)$$

y con esta ecuación ya es posible calcular la quinta derivada:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial T}\right)_{N,\mu} &= N \left(\frac{\hbar}{kT}\right)^2 \left[\frac{(-1)g_1(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} \left(\frac{-\mu}{kT^2}\right) \left(\frac{1}{T^2}\right) + \frac{-2}{T^3} \frac{1}{g_2(\alpha)} \right] \\ &= \frac{N}{T} \left(\frac{\hbar}{kT}\right)^2 \left[\alpha \frac{g_1(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} - \frac{2}{g_2(\alpha)} \right]. \end{aligned} \quad (6.32)$$

Después multiplicamos (6.30) por (6.32):

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial S}{\partial \nu}\right)_{T,\mu} \left(\frac{\partial \nu}{\partial T}\right)_{N,\mu} &= \frac{Nk}{T} \left[(3g_3(\alpha) - \alpha g_2(\alpha)) \left(\alpha \frac{g_1(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} - \frac{2}{g_2(\alpha)} \right) \right] \\ &= \frac{Nk}{T} \left[3\alpha \frac{g_3(\alpha)g_1(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} - 6\frac{g_3(\alpha)}{g_2(\alpha)} + 2\alpha \right]. \end{aligned} \quad (6.33)$$

Finalmente calculamos las tres derivadas del último sumando, donde identificamos la primera de estas tres, como la ecuación (6.30) y la última como (6.28). Por lo que solo calculamos a continuación la segunda de estas últimas tres:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial \mu}\right)_{N,T} &= N \left(\frac{\hbar}{kT}\right)^2 \frac{(-1)g_1(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} \left(\frac{1}{kT}\right) \\ &= -\frac{N}{kT} \left(\frac{\hbar}{kT}\right)^2 \frac{g_1(\alpha)}{g_2^2(\alpha)}. \end{aligned} \quad (6.34)$$

Ahora, realizamos las multiplicaciones, primero (6.30) por (6.34):

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial S}{\partial \nu}\right)_{T,\mu} \left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial \mu}\right)_{N,T} &= -\frac{kN}{kT} \left[\frac{g_1(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} (3g_3(\alpha) - \alpha g_2(\alpha)) \right] \\ &= -\frac{N}{T} \left[3\frac{g_1(\alpha)g_3(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} - \alpha \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)} \right]. \end{aligned} \quad (6.35)$$

Finalmente, multiplicamos (6.35) por (6.28):

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial S}{\partial \nu}\right)_{T,\mu} \left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial \mu}\right)_{N,T} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_p &= \frac{Nk}{T} \left[\left(3\frac{g_1(\alpha)g_3(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} - \alpha \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)} \right) \left(\alpha - 3\frac{g_3(\alpha)}{g_2(\alpha)} \right) \right] \\ &= \frac{Nk}{T} \left[3\alpha \frac{g_1(\alpha)g_3(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} - 9\frac{g_1(\alpha)g_3^2(\alpha)}{g_2^3(\alpha)} \right] + \\ &+ \frac{Nk}{T} \left[-\alpha^2 \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)} + 3\alpha \frac{g_1(\alpha)g_3(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} \right] \\ &= \frac{Nk}{T} \left[-6\alpha \frac{g_1(\alpha)g_3(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} + 9\frac{g_1(\alpha)g_3^2(\alpha)}{g_2^3(\alpha)} + \alpha^2 \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)} \right] \end{aligned} \quad (6.36)$$

Por último, para encontrar la expresión final de C_P sustituimos (6.22), (6.29), (6.33) y (6.36) en (6.20):

$$\begin{aligned}
 C_P &= Nk \left[6 \frac{g_3(\alpha)}{g_2(\alpha)} - 4\alpha + \alpha^2 \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)} + 2\alpha - \alpha^2 \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)} \right] + \\
 &+ Nk \left[-6 \frac{g_3(\alpha)}{g_2(\alpha)} + 3\alpha \frac{g_1(\alpha)g_3(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} + 3\alpha \frac{g_1(\alpha)g_3(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} \right] + \\
 &+ Nk \left[-6 \frac{g_3(\alpha)}{g_2(\alpha)} - \alpha^2 \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)} + 2\alpha \right] + \\
 &+ Nk \left[9 \frac{g_1(\alpha)g_3^2(\alpha)}{g_2^3(\alpha)} - 6\alpha \frac{g_1(\alpha)g_3(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} + \alpha^2 \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)} \right] \\
 &= Nk \left[9 \frac{g_1(\alpha)g_3^2(\alpha)}{g_2^3(\alpha)} - 6 \frac{g_3(\alpha)}{g_2(\alpha)} \right] \\
 &= 3Nk \left[3 \frac{g_1(\alpha)g_3^2(\alpha)}{g_2^3(\alpha)} - 2 \frac{g_3(\alpha)}{g_2(\alpha)} \right] \\
 &= 3Nk \frac{g_1(\alpha)g_3(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} \left[3 \frac{g_3(\alpha)}{g_2(\alpha)} - 2 \frac{g_2(\alpha)}{g_1(\alpha)} \right], \tag{6.37}
 \end{aligned}$$

$$\therefore C_P = 3Nk \frac{g_1(\alpha)g_3(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} \left[3 \frac{g_3(\alpha)}{g_2(\alpha)} - 2 \frac{g_2(\alpha)}{g_1(\alpha)} \right], \quad T > T_c. \tag{6.38}$$

Ahora en la región $T < T_c$. Consideramos nuevamente la entropía en dicho límite como la ecuación (6.4), por lo que la ecuación (6.21) se transforma en:

$$\left(\frac{\delta S}{\delta T} \right)_{P,N} = \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{\mu,\nu} + \left(\frac{\partial S}{\partial \nu} \right)_{T,\mu} \left(\frac{\partial \nu}{\partial T} \right)_{N,\mu}, \tag{6.39}$$

por lo que la primera derivada de la ecuación anterior es (6.18), la siguiente derivada se calcularía considerando (6.4), pero no la calcularemos pues la tercer derivada, $\left(\frac{\partial \nu}{\partial T} \right)_{N,\mu}$, corresponde a (6.34) no se puede evaluar en $\alpha = 0$, (es decir en $\mu = 0$), pues $g_1(\alpha)$ diverge tomando como valor infinito, por lo que (6.39) no está definida en este intervalo.

El comportamiento a temperatura constante para C_P se muestra en la Figura (6.2) como función de la temperatura, notamos que existe una discontinuidad que surge al evaluar $g_1(\alpha)$ en cero, o lo que es lo mismo, considerar $T = T_c$.

6.3. Coeficiente de expansión térmica: α_T

Comencemos, como en los casos anteriores, calculando α_T en $T_c < T$, cuya definición es la siguiente:

$$\alpha_T = \frac{1}{\nu} \left(\frac{\partial \nu}{\partial T} \right)_{P,N}, \tag{6.40}$$

y nuevamente descomponemos:

$$\left(\frac{\partial \nu}{\partial T} \right)_{P,N} = \left(\frac{\partial \nu}{\partial T} \right)_{P,\mu} + \left(\frac{\partial \nu}{\partial \mu} \right)_{P,T} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_P. \tag{6.41}$$

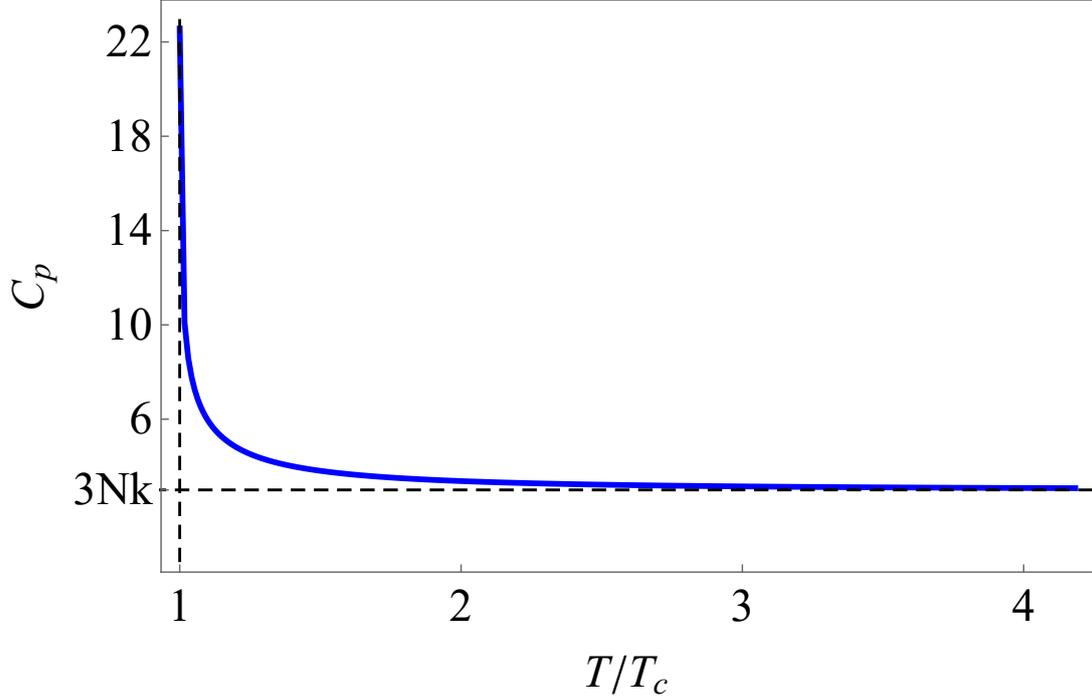


Figura 6.2: Comportamiento de capacidad calorífica a presión armónica constante como función de la temperatura para un gas ideal de bosones confinado en una trampa armónica 2D, considerando $k = \hbar = 1$.

Utilizando la ecuación (6.31) podemos calcular las derivadas que se necesitan, la primera:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial T}\right)_{\mathcal{P},\mu} &= N \left(\frac{\hbar}{k}\right)^2 \left[\frac{(-1)g_1(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} \left(\frac{-\mu}{kT^2}\right) \left(\frac{1}{T^2}\right) + \frac{1}{g_2(\alpha)} \frac{(-2)}{T^3} \right] \\ &= \frac{N}{T} \left(\frac{\hbar}{k}\right)^2 \left[\alpha \frac{g_1(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} - \frac{2}{g_2(\alpha)} \right] \end{aligned} \quad (6.42)$$

la primera del último par de ecuaciones es:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial \mu}\right)_{\mathcal{P},T} &= N \left(\frac{\hbar}{kT}\right)^2 (-1) \frac{g_1(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} \left(\frac{1}{kT}\right) \\ &= - \left(\frac{\hbar}{kT}\right)^2 \frac{g_1(\alpha)}{g_2^2(\alpha)}, \end{aligned} \quad (6.43)$$

y la última corresponde a (6.14). Por lo tanto el producto de las últimas dos corresponde a:

$$\left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial \mu}\right)_{\mathcal{P},T} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{\mathcal{P}} = - \frac{N}{T} \left(\frac{\hbar}{kT}\right)^2 \left[\alpha \frac{g_1(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} - 3 \frac{g_3(\alpha)g_1(\alpha)}{g_2^3(\alpha)} \right] \quad (6.44)$$

$$= \frac{N}{T} \left(\frac{\hbar}{kT}\right)^2 \left[3 \frac{g_3(\alpha)g_1(\alpha)}{g_2^3(\alpha)} - \alpha \frac{g_1(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} \right], \quad (6.45)$$

Finalmente, sumamos las ecuaciones (6.42) y (6.44), y sustituimos en (6.40):

$$\begin{aligned}
 \alpha_T &= \frac{1}{\mathcal{V}} \frac{N}{T} \left(\frac{\hbar}{kT} \right)^2 \left[\alpha \frac{g_1(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} - \frac{2}{g_2(\alpha)} + 3 \frac{g_3(\alpha)g_1(\alpha)}{g_2^3(\alpha)} - \alpha \frac{g_1(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} \right] \\
 &= \frac{1}{\mathcal{V}} \frac{N}{T} \frac{\mathcal{V}}{N} g_2(\alpha) \left[-\frac{2}{g_2(\alpha)} + 3 \frac{g_3(\alpha)g_1(\alpha)}{g_2^3(\alpha)} \right] \\
 &= \frac{1}{T} \left[-2 + 3 \frac{g_3(\alpha)g_1(\alpha)}{g_2^2(\alpha)} \right] \\
 &= \frac{1}{T} \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)} \left[3 \frac{g_3(\alpha)}{g_2(\alpha)} - 2 \frac{g_2(\alpha)}{g_1(\alpha)} \right]. \\
 \therefore \alpha_T &= \frac{1}{T} \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)} \left[3 \frac{g_3(\alpha)}{g_2(\alpha)} - 2 \frac{g_2(\alpha)}{g_1(\alpha)} \right], \quad T > T_c. \tag{6.46}
 \end{aligned}$$

En la región $T \leq T_0$ tenemos el mismo problema que para C_P , pues al considerar la derivada del volumen armónico en este límite, es decir, con $\mu = 0$, la ecuación queda en términos de $g_1(\alpha)$ que se indetermina en ese valor del potencial químico, por lo tanto α_T se indetermina también. En la figura (6.3) se muestra el comportamiento de α_T como función de la temperatura, donde se ve claramente que existe una discontinuidad en $T = T_c$.

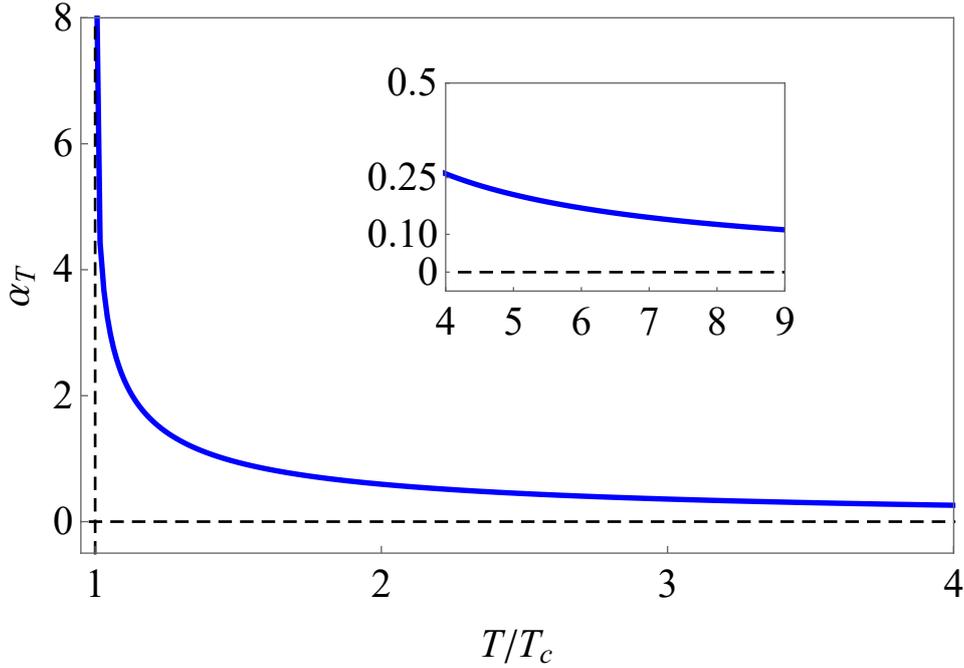


Figura 6.3: Comportamiento de coeficiente de expansión térmica para un gas ideal de bosones confinado en una trampa armónica 2D como función de la temperatura, considerando $k = \hbar = 1$

6.4. Compresibilidad isotérmica: κ_T

Por último, vamos a calcular la compresibilidad isotérmica κ_T , que está dada por la siguiente ecuación:

$$\kappa_T = - \left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial \mathcal{P}} \right)_{T,N} = \frac{1}{\eta^2} \left(\frac{\partial \eta}{\partial \mu} \right)_T, \tag{6.47}$$

Nuestra primer tarea será demostrar la segunda igualdad. Recordamos que la 1ª Ley de la Termodinámica nos dice que:

$$dE = TdS - \mathcal{P}d\mathcal{V} + \mu dN, \quad (6.48)$$

y la relación de extensividad de Euler es:

$$E = TS - \mathcal{P}\mathcal{V} + \mu N, \quad (6.49)$$

resaltamos que estamos utilizando la presión y el volumen armónico, que como vimos en una sección anterior, son análogos a la presión y volumen convencionales. Derivando la ecuación anterior obtenemos:

$$dE - TdS - SdT + \mathcal{P}d\mathcal{V} + \mathcal{V}d\mathcal{P} - \mu dN - Nd\mu = 0, \quad (6.50)$$

si sustituimos (6.48) en lo anterior damos lugar a:

$$TdS - \mathcal{P}d\mathcal{V} + \mu dN - TdS - SdT + \mathcal{P}d\mathcal{V} + \mathcal{V}d\mathcal{P} - \mu dN - Nd\mu = 0 \quad (6.51)$$

$$\Rightarrow -SdT + \mathcal{V}d\mathcal{P} - Nd\mu = 0, \quad (6.52)$$

despejamos $d\mathcal{P}$:

$$d\mathcal{P} = \frac{N}{\mathcal{V}}d\mu + \frac{S}{\mathcal{V}}dT, \quad (6.53)$$

es fácil ver que la presión es función de la densidad y de la temperatura, ambas cantidades intensivas:

$$\mathcal{P} = \mathcal{P}\left(\frac{N}{\mathcal{V}}, T\right),$$

la derivamos:

$$d\mathcal{P} = \left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \frac{N}{\mathcal{V}}}\right)_T d\frac{N}{\mathcal{V}} + \left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial T}\right)_{\frac{N}{\mathcal{V}}} dT, \quad (6.54)$$

y posteriormente la sustituimos en (6.53):

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \frac{N}{\mathcal{V}}}\right)_T d\frac{N}{\mathcal{V}} + \left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial T}\right)_{\frac{N}{\mathcal{V}}} dT &= \frac{N}{\mathcal{V}}d\mu + \frac{S}{\mathcal{V}}dT \\ -SdT + \mathcal{V} \left[\left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \frac{N}{\mathcal{V}}}\right)_T d\frac{N}{\mathcal{V}} + \left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial T}\right)_{\frac{N}{\mathcal{V}}} dT \right] - Nd\mu &= 0, \end{aligned}$$

despejando $d\mu$ obtenemos:

$$d\mu = \frac{1}{N} \left[-S + \mathcal{V} \left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial T}\right)_{\frac{N}{\mathcal{V}}} \right] dT + \frac{\mathcal{V}}{N} \left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \frac{N}{\mathcal{V}}}\right)_T d\frac{N}{\mathcal{V}},$$

seguido a esto, derivamos respecto la densidad N/\mathcal{V} a $T = cte$:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \mu}{\partial \frac{N}{\mathcal{V}}}\right)_T &= \frac{\mathcal{V}}{N} \left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \frac{N}{\mathcal{V}}}\right)_T \\ \Rightarrow \left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \frac{N}{\mathcal{V}}}\right)_T &= \frac{N}{\mathcal{V}} \left(\frac{\partial \mu}{\partial \frac{N}{\mathcal{V}}}\right)_T, \end{aligned}$$

Ahora vamos a trabajar la primer igualdad de la ecuación (6.47), donde identificaremos lo anterior:

$$\begin{aligned}
 \kappa_T &= -\frac{1}{\mathcal{V}} \frac{1}{\left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial N/\mathcal{V}}\right)_{T,\mathcal{V}}} \\
 &= -\frac{1}{\mathcal{V}} \left(\frac{1}{\left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial N/\mathcal{V}}\right)_{T,\mathcal{V}} \left(\frac{\partial N/\mathcal{V}}{\partial \mathcal{V}}\right)_T} \right) \\
 &= -\frac{1}{\mathcal{V}} \left(-\frac{\mathcal{V}^2}{N} \right) \left(\frac{1}{\left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial N/\mathcal{V}}\right)_T} \right) \\
 &= \frac{1}{N} \left(\frac{1}{\left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial N/\mathcal{V}}\right)_T} \right) \\
 &= \frac{1}{\frac{N}{\mathcal{V}} \frac{N}{\mathcal{V}}} \left(\frac{1}{\left(\frac{\partial \mu}{\partial N/\mathcal{V}_T}\right)} \right),
 \end{aligned}$$

denotando la densidad como $N/\mathcal{V} = \eta$, la segunda igualdad de la ecuación (6.47) queda demostrada.

Procedamos ahora a calcular la derivada correspondiente en la región $T > T_c$. Para ello primero identificamos la densidad η de la ecuación (4.4):

$$\eta = \frac{N}{\mathcal{V}} = \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^2 g_2\left(\frac{\mu}{kT}\right), \quad (6.55)$$

haciendo la derivada parcial respecto del potencial químico μ tenemos:

$$\left(\frac{\partial N/\mathcal{V}}{\partial \mu}\right) = \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^2 g_1(\alpha) \frac{1}{kT}, \quad (6.56)$$

y el inverso de la densidad al cuadrado corresponde a:

$$\frac{1}{\eta^2} = \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^{-4} \frac{1}{g_2^2(\alpha)}, \quad (6.57)$$

finalmente sustituimos (6.56) y (6.57) en la ecuación para κ_T :

$$\begin{aligned}
 \kappa_T &= \frac{1}{\left(\frac{kT}{\hbar}\right)^4 g_2^2(\alpha)} \frac{1}{\left(\frac{kT}{\hbar}\right)^2} g_1(\alpha) \frac{1}{kT} \\
 &= \frac{1}{kT} \left(\frac{\hbar}{kT}\right)^2 \frac{1}{g_2(\alpha)} \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)} \\
 &= \frac{\mathcal{V}}{NkT} \frac{g_1(\alpha)}{g_2(\alpha)}.
 \end{aligned} \quad (6.58)$$

Siguiendo con esta susceptibilidad, ahora consideremos la región donde $T \leq T_0$. Tomando en cuenta la ecuación (6.56), encontramos problemas al evaluar $g_1(\alpha)$ en $\mu = 0$, ya que para este valor del potencial químico la función de Bose es infinita, entonces κ_T se indefine.

El comportamiento de κ_T se muestra en la Figura (6.4) como función de la temperatura donde se puede apreciar la discontinuidad que producida al evaluar $g_1(\alpha)$ en cero.

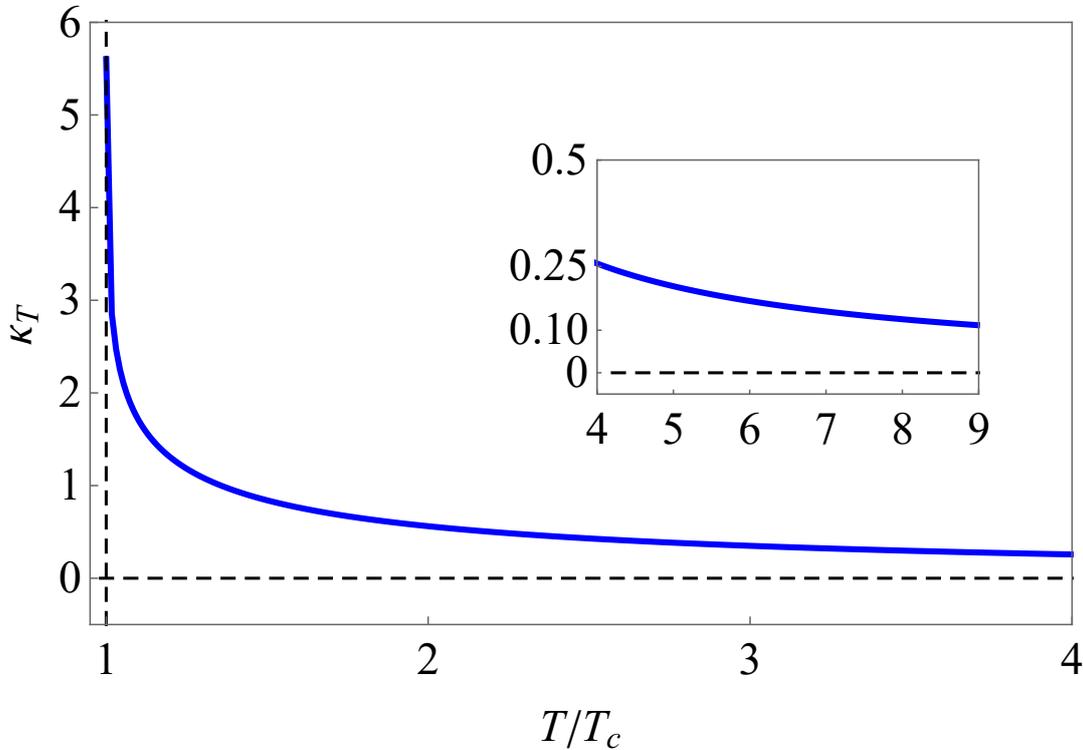


Figura 6.4: Comportamiento de Compresibilidad Isotérmica como función de la temperatura para un gas ideal de Bosones confinado en una trampa armónica 2D, considerando $k = \hbar = 1$.

Resumiendo, en este capítulo se demostró que la condensación de Bose-Einstein si sucede para un gas inhomogéneo 2D. Después se calcularon las susceptibilidades a partir de las segundas derivadas del Gran Potencial. Se encontró divergencias y discontinuidades que son, por definición, características de las transiciones de fase de 2do orden. Esto último motiva el estudio de la función de correlación que se explicará en el siguiente capítulo.

Capítulo 7

Función de Correlación densidad-densidad

En este capítulo estudiaremos a grandes rasgos qué es una transición de fase de punto crítico y cómo caracterizar de una transición de fase como una transición de este tipo a partir del comportamiento de la función de correlación. Después, con la finalidad de encontrar las funciones de onda en un sistema coordinado más apropiada, resolvemos el oscilador armónico cuántico bidimensional en coordenadas polares. La siguiente sección consiste en encontrar una expresión general de la función de correlación en términos de las funciones de onda de cualquier sistema. Finalmente, se juntan los dos resultados de las secciones anteriores para encontrar la función de correlación particular de este sistema. Para poder describir su comportamiento, asumimos que uno de los puntos en la función de correlación está ubicado en el origen y que el número cuántico $M = 0$ asociado al momento angular.

7.1. Transiciones de Fase y Fenómenos Críticos

Existe un punto en un sistema descrito por una presión y una temperatura críticas después del cual ya no hay transición de fase, a ese punto lo llamamos *punto crítico*. Además, se sabe que por debajo de dicho punto, es decir a presión y temperatura menores que la presión y temperatura crítica, existen transiciones de fase de primer orden, estas transiciones son aquellas cuyas primeras derivadas de un potencial termodinámico son discontinuas. Y si estamos en el punto crítico encontramos una transición de fase continua caracterizada por la continuidad de las primeras derivadas del potencial, pero una divergencia en las segundas derivadas, como el calor específico, a la susceptibilidad magnética y la compresibilidad isotérmica, llamando a esta una transición de segundo orden. Dicha divergencia sigue una ley de potencias alrededor de la fase de transición, por ejemplo:

$$\begin{aligned} C &\sim |\epsilon|^{-\alpha} \quad (\text{calor específico}), \\ \xi &\sim |\epsilon|^{-\gamma} \quad (\text{susceptibilidad}), \\ \kappa_T &\sim |\epsilon|^{-\gamma} \quad (\text{compresibilidad}), \end{aligned}$$

donde $\epsilon = \frac{T_c - T}{T_c}$, con T_c la temperatura crítica, y los exponentes α y γ son llamados *exponentes críticos*. Ahora separaremos el comportamiento en dos partes, el primero será lo que llamaremos "por arriba" de la transición, conocido como *fase de alta temperatura* que

corresponde a temperaturas mayores a la T_c , y "por debajo" de la transición lo llamaremos *fase de baja temperatura* que corresponden a temperaturas por de bajo de la temperatura T_c . Un concepto clave es el *parámetro de orden*, típicamente en la fase de alta temperatura tiene una simetría que se rompe en la fase de baja temperatura, dicha simetría desaparece en T_c como una ley de potencias descrita por:

$$\begin{aligned} m &\sim \epsilon^\beta \quad (\text{magnetización}), \\ \rho_L - \rho_V &\sim \epsilon^\beta \quad (\text{diferencia densidad gas-líquido}), \end{aligned}$$

donde h es un (pequeño) campo magnético externo.

Para entender el comportamiento de un sistema alrededor de una transición de fase debemos mirar su comportamiento microscópico. Una de las más importantes cantidades es la función de correlación estática $C(r)$, la cual expresa cómo el orden de parámetro local en una posición esta correlacionado con otro a una distancia r . En la fase desordenada de alta temperatura, esta correlación decae típicamente como una exponencial:

$$C(r) \sim e^{-\frac{r}{\xi}} \quad (T > T_c) \quad (7.1)$$

Donde ξ es la longitud de correlación, la cual depende de la temperatura. En la fase de baja temperatura, efectos cooperativos causan que una región en el espacio este correlacionada con una región vecina, lo que a su vez hace que se correlacione con una región más lejana. Estos efectos cooperativos causan que la función de correlación busque un valor constante para r muy grandes. Dicho orden es llamado orden de largo alcance. La desviación desde el valor asintótico puede describirse como:

$$C(r) - C(\infty) \sim e^{-\frac{r}{\xi}} \quad (T > T_c) \quad (7.2)$$

Así como la transición se aproxima de la región de altas, $T > T_c$ o bajas temperaturas $T < T_c$, la longitud de correlación diverge como:

$$\xi \sim |\epsilon|^\nu \quad (7.3)$$

donde ν es otro exponente crítico. En la transición, la densidad se correlaciona consigo en todas las escalas. Matemáticamente se expresa como:

$$C(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \quad (T = T_c) \quad (7.4)$$

donde η es un exponente crítico y d es la dimensión del espacio. La dimensión del espacio es muy importante en fenómenos críticos. La ley de decaimiento de potencias de la correlación en el punto crítico implica que no hay escala de longitud en el sistema. El decaimiento exponencial, ξ nos proporciona la longitud de escala, tal que $C(r)/C(2r)$ depende de r . Sin embargo, con el la ley de decaimiento de potencias, donde $C(r) \sim (r_0/r)^n$, la razón $C(r)/C(2r)$, es independiente de r_0/r . En otras palabras emerge un orden de largo alcance involucrando el tamaño molecular y el tamaño del sistema. Esta propiedad es responsable del fenómeno de opalescencia. Cuando un fluido alcanza el punto crítico, hay fluctuaciones de densidad de todos los tamaños y esas fluctuaciones dispersan la luz de todas las longitudes de onda, sintonizando el fluido transparente en uno color lechoso. [19]

Con el fin de identificar un fenómeno crítico de segundo orden, hemos identificado la divergencia de las susceptibilidades cuando la temperatura se acerca a la temperatura crítica; para reafirmar más esta idea vamos a calcular la función de correlación y vamos a darnos cuenta que efectivamente estamos en presencia de una transición de fase de 2do orden.

7.2. Oscilador Armónico Cuántico 2D en Coordenadas polares

En esta sección calcularemos la solución al Oscilador armónico 2D ahora en coordenadas polares, cuya ecuación independiente del tiempo es la siguiente:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r, \theta) \right] \phi(r, \theta) = E\phi(r, \theta), \quad (7.5)$$

donde el potencial está dado por $V(r, \theta) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$, y el laplaciano en coordenadas polares es:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. \quad (7.6)$$

Podemos encontrar la solución al problema utilizando el método de separación de variables, para ello suponemos que la función solución, que depende de dos variables, puede escribirse como el producto de dos funciones de una variable, y como estamos trabajando en coordenadas polares, esto sería:

$$\phi(r, \theta) = R(r)\Theta(\theta) = R\Theta, \quad (7.7)$$

sustituyendo (7.6) y (7.7) en (7.5) tenemos lo siguiente:

$$\begin{aligned} ER\Theta &= \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) R\Theta + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 R\Theta \\ &= \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 R\Theta}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial R\Theta}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 R\Theta}{\partial \theta^2} \right) + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 R\Theta \\ &= \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\Theta \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{\Theta}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{R}{r^2} \frac{d^2 \Theta}{d\theta^2} \right) + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 R\Theta, \end{aligned} \quad (7.8)$$

siguiendo el procedimiento para resolver por separación de variables tenemos que multiplicar lo anterior por $-\frac{2m}{\hbar^2 R\Theta}$:

$$-\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{R'}{rR} + \frac{R''}{R} + \frac{\Theta''}{r^2\Theta} - \frac{m^2\omega^2 r^2}{\hbar^2}. \quad (7.9)$$

Ahora multiplicamos por r^2 toda la ecuación anterior y reescribimos dejando de un lado la dependencia en r y del otro en θ :

$$-\frac{2mEr^2}{\hbar^2} - \frac{R'r}{R} - \frac{R''r^2}{R} + \frac{m^2\omega^2 r^4}{\hbar^2} = \frac{\Theta''}{\Theta}. \quad (7.10)$$

Para que la ecuación anterior sea válida, cada lado de la igualdad debe de ser igual a una constante pues las expresiones en el lado derecho de igualdad son dependientes de θ y de lado izquierdo de r . Por conveniencia denotamos dicha constante como $-M^2$, entonces para la función $\Theta(\theta)$ la solución es:

$$\begin{aligned} \frac{\Theta''}{\Theta} &= -M^2 \\ \Rightarrow \Theta(\theta) &= e^{iM\theta}. \end{aligned} \quad (7.11)$$

Análogamente, para la función R tenemos:

$$-\frac{2mEr^2}{\hbar^2} - \frac{R'r}{R} - \frac{R''r^2}{R} + \frac{m^2\omega^2r^4}{\hbar^2} = -M^2,$$

multiplicamos por $\frac{R}{r^2}$ y reagrupamos términos:

$$\begin{aligned} \frac{2mRE}{\hbar^2} + \frac{R'}{r} + R'' - \frac{m^2\omega^2r^2}{\hbar^2}R - \frac{M^2}{r^2}R &= 0 \\ \left(R'' + \frac{1}{r}R' - \frac{M^2}{r^2}R\right) + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2r^2}{\hbar^2}\right)R &= 0, \end{aligned} \quad (7.12)$$

para hacer más compacta la ecuación anterior, definimos las siguientes constantes:

$$\begin{aligned} k^2 &= \frac{2mE}{\hbar^2} \\ \lambda^2 &= \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}, \end{aligned} \quad (7.13)$$

entonces reescribimos:

$$\left(R'' + \frac{1}{r}R' - \frac{M^2}{r^2}R\right) + (k^2 - \lambda^2r^2)R = 0. \quad (7.14)$$

Proponemos la siguiente solución[18]:

$$R = r^{|M|}e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}F(r). \quad (7.15)$$

Calculamos la primera derivada:

$$\begin{aligned} R' &= |M|r^{|M|-1}e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}F(r) - r^{|M|+1}\lambda e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}F(r) + r^{|M|}e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}F'(r) \\ \frac{1}{r}R' &= |M|r^{|M|-2}e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}F(r) - r^{|M|}\lambda e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}F(r) + r^{|M|-1}e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}F'(r), \end{aligned} \quad (7.16)$$

y la segunda derivada:

$$\begin{aligned} R'' &= |M|(|M|-1)r^{|M|-2}e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}F(r) - |M|r^{|M|}\lambda e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}F(r) + \\ &+ |M|r^{|M|-1}e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}F'(r) - (|M|+1)r^{|M|}\lambda e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}F(r) + \\ &+ \lambda r^{|M|+2}e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}F(r) - r^{|M|+1}\lambda e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}F'(r) + \\ &+ |M|r^{|M|-1}e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}F'(r) - r^{|M|+1}\lambda e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}F'(r) + \\ &+ r^{|M|}e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}F''(r), \end{aligned} \quad (7.17)$$

Por otro lado, multiplicando (7.15) por $\frac{M^2}{r^2}$:

$$\frac{M^2}{r^2}R = M^2r^{|M|-2}e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}F(r). \quad (7.18)$$

Las ecuaciones (7.16), (7.17) y (7.18) tienen en común el factor $e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}$, entonces podemos factorizarlo al sustituir en (7.14); reagrupamos términos y obtenemos la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} 0 &= F(r) \left[M^2r^{|M|}r^2 - |M|r^{|M|}r^{-2} - |M|r^{|M|}\lambda - |M|r^{|M|}\lambda - r^{|M|}\lambda \right] + \\ &+ F(r) \left[r^{|M|}r^2\lambda + |M|r^{|M|}\lambda r^{-2} - r^{|M|}\lambda - M^2r^{|M|}r^{-2} + k^2 - \lambda^2r^2 \right] + \\ &+ F'(r) \left[|M|r^{|M|}r^{-1} + r^{|M|}r^2\lambda - r^{|M|}r\lambda + |M|r^{|M|}r^{-1} - r^{|M|}r\lambda + r^{|M|}r^{-1} \right] + \\ &+ r^{|M|}F''(r), \end{aligned} \quad (7.19)$$

podemos factorizar $r^{|M|}$:

$$0 = F''(r) + F(r) \left[-2|M|\lambda - \lambda + \lambda r^2 - \lambda + k^2 - \lambda^2 r^2 \right] - \left[|M|r^{-1} - \lambda r + |M|r^{-1} - \lambda r + r^{-1} \right] F'(r). \quad (7.20)$$

Cancelamos términos y encontramos la siguiente ecuación:

$$F'' - F \left[2\lambda(|M| + 1) - k^2 \right] + F' \left[\frac{2(|M| + 1)}{r} - 2\lambda r \right] = 0. \quad (7.21)$$

Ahora tomamos el cambio de variable $t = \lambda r^2$ e identificamos la ecuación de Krummer[18]:

$$t \frac{d^2 F}{dt^2} + \frac{dF}{dt} \left[(|M| + 1) - t \right] - \frac{1}{2} F \left[(|M| + 1) - \frac{k^2}{2\lambda} \right] = 0, \quad (7.22)$$

cuya solución regular es la serie confluyente:

$$F(t) = {}_1F_1(-a, |M| + 1; t), \quad (7.23)$$

$$\text{con } a = \frac{1}{2}(|M| + 1) - \frac{k^2}{2\lambda} = -n_r, \quad (7.24)$$

donde $n_r = 0, 1, 2, \dots$, y las dos condiciones anteriores se deben satisfacer para que a grandes valores de t , la función no se vuelva divergente. Con esto, la serie confluyente se convierte en polinomial y se puede normalizar:

$$\phi(r, \theta) = \left(\frac{\lambda}{\pi} \right)^{1/2} c_{n_r, M} r^{|M|} e^{-\frac{\lambda}{2} r^2} {}_1F_1(-n_r, |M| + 1; \lambda r^2) e^{iM\theta}, \quad (7.25)$$

donde el coeficiente de normalización es:

$$c_{n_r, M} = \left[\frac{2(n_r + |M|)!}{n_r! (|M|!)^2} \right]^{1/2}, \quad (7.26)$$

y la energía corresponde a:

$$E = \hbar\omega(|M| + 1 + 2n_r). \quad (7.27)$$

7.3. Dedución de la función de correlación

El propósito de esta sección es obtener una expresión general para la función de correlación densidad-densidad en un fluido cuántico de Bose,

$$C(\bar{r}, \bar{r}') = \langle \hat{\rho}(\bar{r}) \hat{\rho}(\bar{r}') \rangle - \langle \hat{\rho}(\bar{r}) \rangle \langle \hat{\rho}(\bar{r}') \rangle \quad (7.28)$$

donde $\hat{\rho}(\bar{r})$ es la matriz densidad, que se escribe en términos de los operadores de campo como sigue,

$$\hat{\rho}(\bar{r}) = \hat{\Psi}^\dagger(\bar{r}) \hat{\Psi}(\bar{r}), \quad (7.29)$$

siendo $\hat{\Psi}^\dagger(\bar{r}) = \sum_{\bar{m}} \phi_{\bar{m}}^*(\bar{r}) \hat{a}_{\bar{m}}^\dagger$ y $\hat{\Psi}(\bar{r}) = \sum_{\bar{m}} \phi_{\bar{m}}(\bar{r}) \hat{a}_{\bar{m}}$ los operadores que crean y aniquilan una partícula en la posición \bar{r} . Y como hemos usado antes, la etiqueta del estado \bar{m}

representa los números cuánticos asociados a los estados de una partícula. Al sustituir $\hat{\rho} = \sum_{\bar{m}_1} \phi_{\bar{m}_1}^*(\bar{r}) \hat{a}_{\bar{m}_1}^\dagger \sum_{\bar{m}_2} \phi_{\bar{m}_2}(\bar{r}) \hat{a}_{\bar{m}_2}$ en (7.28), [21] se encuentra que

$$C(\bar{r}, \bar{r}') = \sum_{\bar{m}_1} \sum_{\bar{m}_2} \sum_{\bar{m}_3} \sum_{\bar{m}_4} \phi_{\bar{m}_1}^*(\bar{r}) \phi_{\bar{m}_2}(\bar{r}) \phi_{\bar{m}_3}^*(\bar{r}') \phi_{\bar{m}_4}(\bar{r}') \times \left[\langle \hat{a}_{\bar{m}_1}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}_2} \hat{a}_{\bar{m}_3}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}_4} \rangle - \langle \hat{a}_{\bar{m}_1}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}_2} \rangle \langle \hat{a}_{\bar{m}_3}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}_4} \rangle \right]. \quad (7.30)$$

Los valores de expectación para obtener la correlación se toman, como es usual en la mecánica cuántica, usando $\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr} \hat{W} \hat{A}$, con \hat{W} la matriz de densidad estadística. Pero antes de tomar los promedios vía la traza, descomponemos el producto de operadores, $\hat{a}_{\bar{m}_1}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}_2} \hat{a}_{\bar{m}_3}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}_4}$ poniendo atención a lo siguiente

- Debido a que el valor de expectación del producto de los cuatro operadores, como veremos más adelante, es proporcional al producto del valor de expectación de dos operadores de número, es necesario exigir que dichos valores actúen sobre el mismo estado para evitar que el valor de expectación se anule.
- Consideraremos todas las posibilidades existentes por parejas que dan lugar al valor de expectación de un operador de número.
- Tener en cuenta las reglas de conmutación para bosones.

Teniendo en mente lo anterior, resulta que el producto de los cuatro operadores se separa en los siguientes términos:

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_{\bar{m}_1}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}_2} \hat{a}_{\bar{m}_3}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}_4} \rangle &= \delta_{\bar{m}_1 \bar{m}_2} \delta_{\bar{m}_3 \bar{m}_4} (1 - \delta_{\bar{m}_1 \bar{m}_3}) \langle \hat{a}_{\bar{m}_1}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}_2} \rangle \langle \hat{a}_{\bar{m}_3}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}_4} \rangle \\ &+ \delta_{\bar{m}_1 \bar{m}_4} \delta_{\bar{m}_2 \bar{m}_3} (1 - \delta_{\bar{m}_1 \bar{m}_2}) \langle \hat{a}_{\bar{m}_1}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}_4} \rangle \langle \hat{a}_{\bar{m}_2} \hat{a}_{\bar{m}_3}^\dagger \rangle \\ &+ \delta_{\bar{m}_1 \bar{m}_2} \delta_{\bar{m}_1 \bar{m}_3} \delta_{\bar{m}_1 \bar{m}_4} \langle \hat{a}_{\bar{m}_1}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}_2} \hat{a}_{\bar{m}_3}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}_4} \rangle, \end{aligned} \quad (7.31)$$

de esta forma el primer factor toma en cuenta el caso en que $\bar{m}_1 = \bar{m}_2$ y $\bar{m}_3 = \bar{m}_4$, y además que $\bar{m}_1 \neq \bar{m}_3$. En forma análoga, el segundo término ahora considera $\bar{m}_1 = \bar{m}_4$ y $\bar{m}_2 = \bar{m}_3$, y que $\bar{m}_1 \neq \bar{m}_2$. En este mismo término se usa la relación de conmutación entre bosones $[\hat{a}_{\bar{m}_i}, \hat{a}_{\bar{m}_j}^\dagger] = \delta_{\bar{m}_i, \bar{m}_j}$, por lo que $\langle \hat{a}_{\bar{m}_2} \hat{a}_{\bar{m}_2}^\dagger \rangle = 1 + \langle \hat{a}_{\bar{m}_2}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}_2} \rangle$ es usada para invertir el orden. Finalmente en el último renglón se tiene que el caso en el que $\bar{m}_1 = \bar{m}_2$, $\bar{m}_1 = \bar{m}_3$ y $\bar{m}_1 = \bar{m}_4$, por lo que el operador cuyo valor de expectación debe obtenerse tiene las cuatro etiquetas iguales.

A continuación se presenta la forma en la se obtienen los valores de expectación mediante el uso de la matriz estadística \hat{W} . Se demostrará lo siguiente,

- $\langle \hat{a}_{\bar{m}_j}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}_j} \rangle = \bar{n}_{\bar{m}_j}$
- $\langle \hat{a}_{\bar{m}_j}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}_j} \hat{a}_{\bar{m}_j}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}_j} \rangle = \bar{n}_{\bar{m}_j} + 2\bar{n}_{\bar{m}_j} \bar{n}_{\bar{m}_j}$.

Para efectuar esas demostraciones es necesario previamente probar que $\hat{W} = \prod_{\bar{m}} \hat{W}_{\bar{m}}$, siendo este último operador la matriz de densidad estadística en el estado \bar{m} . Iniciamos entonces recordando que

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{\Xi} \sum_N \sum_{\{m\}_N} e^{-\beta E_{\{m\}_N} + \alpha N} A_{\{m\}_N}, \quad (7.32)$$

dato que el Hamiltoniano se puede expresar en términos de los operadores de creación y aniquilación como

$$\hat{H} = \sum_{\bar{m}} \epsilon_{\bar{m}} \hat{a}_{\bar{m}}^{\dagger} \hat{a}_{\bar{m}}, \quad (7.33)$$

y que el operador de número de partículas se define como

$$\hat{N} = \sum_{\bar{m}} \hat{a}_{\bar{m}}^{\dagger} \hat{a}_{\bar{m}}, \quad (7.34)$$

entonces se satisface

$$\hat{W} = \frac{e^{-\beta \sum_{\bar{m}} (\epsilon_{\bar{m}} - \mu) \hat{a}_{\bar{m}}^{\dagger} \hat{a}_{\bar{m}}}}{\prod_{\bar{m}} \left(\sum_{n_{\bar{m}}'=0}^{\infty} e^{-\beta (\epsilon_{\bar{m}}' - \mu) n_{\bar{m}}'} \right)},$$

y podemos utilizar que $e^{A+B} = e^A e^B$, sin separar el producto de operadores pues en este caso sabemos que $[\hat{a}_{\bar{m}_i}, \hat{a}_{\bar{m}_j}^{\dagger}] = \delta_{m_i, m_j}$ donde $i = j$ y por lo tanto no conmutan, con esto podemos sacar la suma del exponente y convertirla en un producto teniendo presente lo anterior:

$$\begin{aligned} \hat{W} &= \frac{\prod_{\bar{m}} e^{-\beta (\epsilon_{\bar{m}} - \mu) \hat{a}_{\bar{m}}^{\dagger} \hat{a}_{\bar{m}}}}{\prod_{\bar{m}} \left(\sum_{n_{\bar{m}}'=0}^{\infty} e^{-\beta (\epsilon_{\bar{m}}' - \mu) n_{\bar{m}}'} \right)} \\ &= \prod_{\bar{m}} \left(\frac{e^{-\beta (\epsilon_{\bar{m}} - \mu) \hat{a}_{\bar{m}}^{\dagger} \hat{a}_{\bar{m}}}}{\sum_{n_{\bar{m}}'=0}^{\infty} e^{-\beta (\epsilon_{\bar{m}}' - \mu) n_{\bar{m}}'}} \right) \\ &= \prod_{\bar{m}} \hat{W}_{\bar{m}}. \end{aligned} \quad (7.35)$$

Esto quiere decir que el resultado de la conmutación entre dos operadores nos lleva a que la matriz de densidad estadística \hat{W} se puede escribir como el producto de matrices $\hat{W}_{\bar{m}}$, donde estas últimas matrices están dadas por:

$$\hat{W}_{\bar{m}} = \left(\frac{e^{-\beta (\epsilon_{\bar{m}} - \mu) \hat{a}_{\bar{m}}^{\dagger} \hat{a}_{\bar{m}}}}{\sum_{n_{\bar{m}}'=0}^{\infty} e^{-\beta (\epsilon_{\bar{m}}' - \mu) n_{\bar{m}}'}} \right). \quad (7.36)$$

Volviendo a la expresión para la función de correlación, nos interesa evaluar el valor de expectación de operadores como los siguientes $\hat{a}_{\bar{m}}^{\dagger} \hat{a}_{\bar{m}}$, $\hat{a}_{\bar{m}}^{\dagger} \hat{a}_{\bar{m}} \hat{a}_{\bar{m}}^{\dagger} \hat{a}_{\bar{m}}$. Es decir, el valor de expectación de operadores que van como productos de un número par de operadores de creación y aniquilación. Para conocer estos valores de expectación es importante darnos cuenta de dos hechos, por un lado que tomar la traza significa que los estados bra y ket del espacio de Fock tienen los mismos índices, y que la única forma de conseguir que el valor de expectación sea diferente de cero, es que la acción del operador conduzca a que el bra y el ket sean iguales. Iniciamos calculando el valor de expectación de un solo operador. Queremos demostrar el siguiente resultado,

$$\langle \hat{a}_{\bar{m}'} \rangle = \sum_{\{n_{\bar{m}}\}} \left\langle \{n_{\bar{m}}\} \left| \left(\prod_{\bar{m}''} \hat{W}_{\bar{m}''} \right) \hat{a}_{\bar{m}'} \right| \{n_{\bar{m}}\} \right\rangle = 0. \quad (7.37)$$

Partiendo de la definición del valor de expectación se tiene lo siguiente:

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_{\bar{m}'} \rangle &= Tr \{ \hat{W} \hat{a}_{\bar{m}'} \} \\ &= \sum_{\{n_{\bar{m}}\}} \left\langle \{n_{\bar{m}}\} \left| \hat{W} \hat{a}_{\bar{m}'} \right| \{n_{\bar{m}}\} \right\rangle = \sum_{\{n_{\bar{m}}\}} \left\langle \{n_{\bar{m}}\} \left| \left(\prod_{\bar{m}''} \hat{W}_{\bar{m}''} \right) \hat{a}_{\bar{m}'} \right| \{n_{\bar{m}}\} \right\rangle, \end{aligned}$$

como todos conmutan excepto cuando $\bar{m}'' = \bar{m}'$ y $\text{Tr}\hat{W} = 1$, se tiene:

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{a}_{\bar{m}'} \rangle &= \sum_{\{n_{\bar{m}}\}} \left\langle \{n_m\} \left| \left(\prod_{\bar{m}''} \hat{W}_{\bar{m}''} \right) \hat{a}_{\bar{m}'} \{n_m\} \right. \right\rangle \\
 &= \sum_{n_1} \sum_{n_2} \cdots \sum_{n'_m} \cdots \sum_{n_\infty} \langle n_1 n_2 \cdots n_{m'} \cdots n_\infty | W_1 W_2 \cdots (W'_m \hat{a}'_m) \cdots W_\infty | n_1 n_2 \cdots n_{m'} \cdots n_\infty \rangle \\
 &= \sum_{n_1} \langle n_1 | W_1 | n_1 \rangle \sum_{n_2} \langle n_2 | W_2 | n_2 \rangle \cdots \sum_{n'_m} \langle n'_m | W'_m \hat{a}'_m | n'_m \rangle \cdots \sum_{n_\infty} \langle n_\infty | W_\infty | n_\infty \rangle,
 \end{aligned} \tag{7.38}$$

Dado que $\text{Tr}\hat{W}_i = 1$, i.e. que para toda i se tiene que cada suma satisface $\sum_{n_i} \langle n_i | W_i | n_i \rangle = 1$. Se comprueba que en principio únicamente el término $\sum_{n'_m} \langle n'_m | W'_m \hat{a}'_m | n'_m \rangle$ es diferente de 1. En otras palabras, la igualdad previa es resultado de la acción del operador de aniquilación sobre un ket del espacio de Fock, y también de observar que la suma sobre todos los conjuntos $\{n_{\bar{m}}\}$, considerando el producto sobre los estados $\Pi_{\bar{m}}$ que se encuentran dentro del braket, se reemplaza simplemente por el valor de expectación,

$$\langle \hat{a}_{\bar{m}'} \rangle = \sum_{n'_{\bar{m}}=0}^{\infty} \langle n_{\bar{m}'} | \hat{W}_{\bar{m}'} \hat{a}_{\bar{m}'} | n_{\bar{m}'} \rangle. \tag{7.39}$$

Para llegar a esta conclusión primero identificamos de manera general los estados del espacio de Fock:

$$|n_0, n_1, n_2, \cdots, n_\infty\rangle = |\{n_{\bar{m}} \forall \bar{m}\}\rangle \equiv |\{n_{\bar{m}}\}\rangle. \tag{7.40}$$

Es importante mencionar que la notación $\{n_{\bar{m}}\}$ se refiere a todos los conjuntos de números de ocupación $|n_1, n_2, \cdots, n_\infty\rangle$ en los que las “ n ” toman todos los números consistentes con la restricción $N = \sum_{\bar{m}} n_{\bar{m}}$, es decir, cada ket $|n_1, n_2, \cdots, n_\infty\rangle$, satisface dicha restricción. Una forma más compacta de las igualdades anteriores para el valor de expectación $\langle \hat{a}_{\bar{m}'} \rangle$ es la siguiente,

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{a}_{\bar{m}'} \rangle &= \text{Tr} \left[\hat{W} \hat{a}_{\bar{m}'} \right] \\
 &= \text{Tr} \left[\prod_{\bar{m}} \hat{W}_{\bar{m}} \hat{a}_{\bar{m}'} \right] \\
 &= \text{Tr} \left[\hat{W}_{\bar{m}'} \hat{a}_{\bar{m}'} \prod_{\bar{m} \neq \bar{m}'} \hat{W}_{\bar{m}} \right] \\
 &= \text{Tr}_{\bar{m}'} \hat{W}_{\bar{m}'} \hat{a}_{\bar{m}'} \prod_{\bar{m} \neq \bar{m}'} \text{Tr}_{\bar{m}} \hat{W}_{\bar{m}} \hat{a}_{\bar{m}} \\
 &= \text{Tr}_{\bar{m}'} \left[\hat{W}_{\bar{m}'} \hat{a}_{\bar{m}'} \right] \\
 &= \sum_{n_{\bar{m}'}=0}^{\infty} \langle n_{\bar{m}'} | \hat{W}_{\bar{m}'} \hat{a}_{\bar{m}'} | n_{\bar{m}'} \rangle.
 \end{aligned} \tag{7.41}$$

Nos concentramos ahora en el término $\langle n_{\bar{m}'} | \hat{W}_{\bar{m}'} \hat{a}_{\bar{m}'} | n_{\bar{m}'} \rangle$. Notamos que

$$\langle n_0, n_1, \cdots, n_{m'}, \cdots, n_\infty | \hat{a}_{m'} | n_0, n_1, \cdots, n_{m'}, \cdots, n_\infty \rangle = 0,$$

Este resultado proviene del hecho que $\hat{a}_{\bar{m}'}$ actuando sobre el ket anterior es,

$$\hat{a}_{\bar{m}'} | n_0, n_1, \cdots, n'_{m'}, \cdots, n_\infty \rangle = \sqrt{n'_{m'}} | n_0, n_1, \cdots, n_{m'} - 1, \cdots, n_\infty \rangle, \tag{7.42}$$

por lo que el resultado con el bra $\langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_m, \dots, n_\infty |$ es igual a cero. Pero ya sabíamos que la única manera de que el valor de expectación de $\hat{W}_{\bar{m}'}$ conduzca a un resultado diferente de cero es que se encuentre entre el mismo bra y ket. Notamos que al desarrollar la exponencial que se encuentra en $\hat{W}_{\bar{m}'}$ se tendrán operadores de número actuando sobre un ket dado $|n_{\bar{m}'}\rangle$. Por lo tanto concluimos que el valor de expectación $\langle n_{\bar{m}'} | \hat{W}_{\bar{m}'} | n_{\bar{m}'} - 1 \rangle = 0$.

De forma análoga el valor de expectación del operador \hat{a}_m es igual a cero. Continuamos ahora con la determinación del siguiente valor esperado $\langle \hat{a}_{\bar{m}}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}} \rangle$, haciendo uso de lo demostrado al calcular $\langle \hat{a}_{\bar{m}'} \rangle$, se tiene que:

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{a}_{\bar{m}'}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}'} \rangle &= \sum_{n_{\bar{m}'}}^{\infty} \langle n_{\bar{m}'} | \hat{W}_{\bar{m}'} \hat{a}_{\bar{m}'}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}'} | n_{\bar{m}'} \rangle \\
 &= \sum_{n_{\bar{m}'}}^{\infty} \langle n_{\bar{m}'} | \hat{W}_{\bar{m}'} | n_{\bar{m}'} \rangle n_{\bar{m}'} \\
 &= \frac{1}{\sum_{n_{\bar{m}'}=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_{\bar{m}'} - \mu)n_{\bar{m}'}}} \sum_{n_{\bar{m}'}}^{\infty} n_{\bar{m}'} e^{-\beta(\epsilon_{\bar{m}'} - \mu)n_{\bar{m}'}} \\
 &= \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\bar{m}} - \mu)n_{\bar{m}}} - 1} = \bar{n}_{\bar{m}'}.
 \end{aligned} \tag{7.43}$$

Para llegar a las últimas dos igualdades es necesario, primero hacer el cambio de variable $x = \beta(\epsilon_{\bar{m}} - \mu)$ y posteriormente sustituirlo en la tercer igualdad para luego identificar la expresión dentro de la suma como la derivada de la función exponencial:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\sum_{n'=0}^{\infty} e^{-xn'}} \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-xn} &= \frac{1}{\sum_{n'=0}^{\infty} e^{-xn'}} \left(-\frac{d}{dx} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-xn} \right) \\
 &= \frac{e^x - 1}{e^x} \left(\frac{-d}{dx} \frac{1}{1 - e^{-x}} \right) \\
 &= \frac{e^x - 1}{e^x} \left(\frac{e^{-x}}{(1 - e^{-x})^2} \right) \\
 &= \frac{1}{e^x - 1},
 \end{aligned} \tag{7.44}$$

donde en la igualdad del segundo renglón hemos usado el resultado para la serie geométrica,

$$\sum_{k=0}^n r^k = \frac{1 - r^{n+1}}{1 - r},$$

con $n \rightarrow \infty$ y $e^{-x} < 1$. De esta manera quedan demostradas las dos últimas igualdades. Con este resultado podemos concluir entonces que:

$$\langle \hat{a}_{\bar{m}'}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}'} \rangle = \bar{n}_{\bar{m}'}, \tag{7.45}$$

$$\langle \hat{a}_{\bar{m}}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}} \rangle = \bar{n}_{\bar{m}}. \tag{7.46}$$

A continuación calcularemos el valor esperado faltante, que corresponde al producto de cuatro operadores. Para ello, primero vamos a separar los valores de \bar{m} cuando $\bar{m} \neq \bar{m}'$ y

cuando $\bar{m} = \bar{m}'$:

$$\begin{aligned} \sum_{\bar{m}} \sum_{\bar{m}'} \phi_{\bar{m}}^*(\bar{r}) \phi_{\bar{m}}(\bar{r}) \phi_{\bar{m}'}^*(\bar{r}') \phi_{\bar{m}'}(\bar{r}') \left[\langle \hat{a}_{\bar{m}}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}'} \hat{a}_{\bar{m}}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}} \rangle \right] &= \sum_{\bar{m} \neq \bar{m}'} \sum_{\bar{m}' \neq \bar{m}} \phi_{\bar{m}}^* \phi_{\bar{m}} \phi_{\bar{m}'}^* \phi_{\bar{m}'} \\ &\times \left[\langle \hat{a}_{\bar{m}}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}'} \hat{a}_{\bar{m}}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}} \rangle - \bar{n}_{\bar{m}'} \bar{n}_{\bar{m}} \right] \\ &+ \sum_{\bar{m}} \phi_{\bar{m}}^* \phi_{\bar{m}} \phi_{\bar{m}}^* \phi_{\bar{m}} \\ &\times \left[\langle \hat{a}_{\bar{m}}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}} \hat{a}_{\bar{m}}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}} \rangle - n_{\bar{m}} n_{\bar{m}} \right], \end{aligned}$$

Empezaremos por el primer valor esperado, que se encuentra dentro de las primeras sumas:

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_{\bar{m}}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}'} \hat{a}_{\bar{m}}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}} \rangle &= \text{Tr}(\hat{W}_{\bar{m}'} \hat{W}_{\bar{m}}) \hat{a}_{\bar{m}'}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}'} \hat{a}_{\bar{m}}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}} \\ &= \left(\text{Tr} \hat{W}_{\bar{m}'} \hat{a}_{\bar{m}'}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}'} \right) \left(\text{Tr} \hat{W}_{\bar{m}} \hat{a}_{\bar{m}}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}} \right) \\ &= \bar{n}_{\bar{m}'} \bar{n}_{\bar{m}}, \end{aligned} \quad (7.47)$$

y dado que $m \neq m'$, este término es cero, por lo tanto solo resta el término asociado a la suma sobre \bar{m} , obtengamos entonces el valor esperado de esa suma:

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_{\bar{m}}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}} \hat{a}_{\bar{m}}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}} \rangle &= \text{Tr} \left(\hat{W}_{\bar{m}} \hat{a}_{\bar{m}}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}} \hat{a}_{\bar{m}}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}} \right) \\ &= \frac{1}{\sum_{n'=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon-\mu)n'}} \left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon-\mu)n} n^2 \right). \end{aligned} \quad (7.48)$$

Nuevamente hacemos el cambio de variable $x = \beta(\epsilon_{\bar{m}} - \mu)$ para reproducir dos veces el truco de la ecuación (7.44), es decir identificar como segunda derivada el término dentro de la suma:

$$\frac{1}{\sum_{n'=0}^{\infty} e^{-xn'}} \left(\frac{d^2}{dx^2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-xn} n^2 \right) = \frac{e^x - 1}{e^x} \frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{1}{1 - e^{-1}} \right) = \bar{n}_{\bar{m}} + 2\bar{n}_{\bar{m}} \bar{n}_{\bar{m}}. \quad (7.49)$$

Finalmente, tenemos que:

$$\langle \hat{a}_{\bar{m}}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}} \hat{a}_{\bar{m}}^\dagger \hat{a}_{\bar{m}} \rangle = \bar{n}_{\bar{m}} + 2\bar{n}_{\bar{m}} \bar{n}_{\bar{m}}. \quad (7.50)$$

juntando los resultados anteriores, y tomando en cuenta las funciones delta de Kronecker en la ecuación (7.31) encontramos que la función de correlación se escribe como sigue:

$$\begin{aligned} C(\bar{r}, \bar{r}') &= \sum_{m_1 \neq m_3} \sum_{m_3 \neq m_1} \phi_{\bar{m}_1}^*(\bar{r}) \phi_{\bar{m}_1}(\bar{r}) \phi_{\bar{m}_3}^*(\bar{r}') \phi_{\bar{m}_3}(\bar{r}') \bar{n}_{\bar{m}_1} \bar{n}_{\bar{m}_3} \\ &+ \sum_{m_1 \neq m_2} \sum_{m_2 \neq m_1} \phi_{\bar{m}_1}^*(\bar{r}) \phi_{\bar{m}_2}(\bar{r}) \phi_{\bar{m}_2}^*(\bar{r}') \phi_{\bar{m}_1}(\bar{r}') \bar{n}_{\bar{m}_1} (1 + \bar{n}_{\bar{m}_2}) \\ &+ \sum_{\bar{m}_1} \phi_{\bar{m}_1}^*(\bar{r}) \phi_{\bar{m}_1}(\bar{r}) \phi_{\bar{m}_1}^*(\bar{r}') \phi_{\bar{m}_1}(\bar{r}') (\bar{n}_{\bar{m}_1} + 2\bar{n}_{\bar{m}_1} \bar{n}_{\bar{m}_1}) \\ &- \sum_{m_1} \sum_{m_3} \phi_{\bar{m}_1}^*(\bar{r}) \phi_{\bar{m}_1}(\bar{r}) \phi_{\bar{m}_3}^*(\bar{r}') \phi_{\bar{m}_3}(\bar{r}') \bar{n}_{\bar{m}_1} \bar{n}_{\bar{m}_3}, \end{aligned} \quad (7.51)$$

por lo que al cancelar los términos repetidos y juntar las sumas complementarias, la función de correlación adopta la siguiente forma:

$$\hat{C}(\bar{r}, \bar{r}') = \sum_{\bar{m}_1} \sum_{\bar{m}_2} \phi_{\bar{m}_1}^*(\bar{r}) \phi_{\bar{m}_2}(\bar{r}) \phi_{\bar{m}_2}^*(\bar{r}') \phi_{\bar{m}_1}(\bar{r}') [\bar{n}_{\bar{m}_1} + \bar{n}_{\bar{m}_1} \bar{n}_{\bar{m}_2}]. \quad (7.52)$$

Usando que,

$$\sum_{\bar{m}_2} \phi_{\bar{m}_2}^*(\bar{r}) \phi_{\bar{m}_2}(\bar{r}') = \delta(\bar{r} - \bar{r}'), \quad (7.53)$$

finalmente obtenemos:

$$C(\bar{r}, \bar{r}') = \rho(\bar{r}) \delta(\bar{r} - \bar{r}') + \left| \sum_{\bar{m}} \phi_{\bar{m}}^*(\bar{r}) \phi_{\bar{m}}(\bar{r}') \bar{n}_{\bar{m}} \right|^2, \quad (7.54)$$

que será el resultado a utilizar en la determinación de la función de correlación.

7.4. Cálculo de la correlación

En esta sección retomaremos los resultados de las dos secciones anteriores para encontrar la función de correlación de este caso particular. Primero encontramos la expresión para entre dos puntos \bar{r} y \bar{r}' :

$$C(\bar{r}, \bar{r}') = \rho(\bar{r}) \delta(\bar{r} - \bar{r}') + \left| \sum_{\bar{m}} \phi_{\bar{m}}^*(\bar{r}) \phi_{\bar{m}}(\bar{r}') \bar{n}_{\bar{m}} \right|^2, \quad (7.55)$$

donde $\phi_{\bar{m}}(\bar{r})$ es la solución al oscilador armónico en coordenadas polares hallada en la sección 7.2:

$$\phi(r, \theta) = \left(\frac{\lambda}{\pi} \right)^{1/2} C_{n_r, M} r^{|M|} e^{-\frac{\lambda}{2} r^2} {}_1F_1(-n_r, |M| + 1; \lambda r^2) e^{iM\theta}, \quad (7.56)$$

cuyo coeficiente de normalización es:

$$C_{n_r, M} = \left[\frac{2(n_r + |M|)!}{n_r! (|M|!)^2} \right]^{1/2}, \quad (7.57)$$

y también se encontró la energía $E = \hbar\omega(|M| + 1 + 2n_r)$. Encontramos en la expresión (7.56) dos números cuánticos, $M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, que es el asociado al momento angular y $n_r = 0, 1, 2, \dots$. Consideramos $M = 0$ y sustituimos en el coeficiente de normalización obteniendo:

$$C_{n_r, 0} = \left[\frac{2(n_r)!}{n_r!} \right]^{1/2} = \sqrt{2}, \quad (7.58)$$

además el valor de n_r también se modifica al tomar $M = 0$ y sustituir k^2 y λ :

$$-n_r = \frac{1}{2} - \frac{k^2}{4\lambda} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{E}{\omega\hbar} \right), \quad (7.59)$$

de esta forma, la función de onda dependerá solamente de la parte radial:

$$\phi(\bar{r}, \theta) = \sqrt{2} e^{-\frac{\lambda}{2} r^2} {}_1F_1(-n_r, 1; \lambda r^2) = \phi(\bar{r}). \quad (7.60)$$

Para la función de correlación necesitamos una función de onda que depende de \bar{r} , que es la anterior, y otra de \bar{r}' . Para este es caso particular consideraremos $\bar{r}' = 0$, de tal forma que la función de onda correspondiente es:

$$\phi(\bar{r}' = 0) = \sqrt{2} {}_1F_1(-n_{r'}, 1; 0), \quad (7.61)$$

A continuación reescribiremos las dos ecuaciones anteriores usando la relación que hay entre los polinomios de Laguerre y la función confluyente[24][25]:

$$L_n^m(x) = \frac{(m+n)!}{n!m!} {}_1F_1(-n, m+1; x), \quad (7.62)$$

despejando $F_1(-n, m+1; x)$ $n = n_r$ y cambiando $m = M = 0$ y $x = \lambda r^2$, se llega a:

$${}_1F_1(-n_r, 1; \lambda r^2) = L_{n_r}(\lambda r^2) \quad (7.63)$$

sustituyendo en (7.60) y (7.61), obtenemos las siguientes ecuaciones en términos de polinomios de Laguerre:

$$\phi(\bar{r}) = \sqrt{2}e^{-\frac{\lambda}{2}\bar{r}^2} L_{n_r}(\lambda r^2) \quad (7.64)$$

$$\phi(\bar{r}' = 0) = \sqrt{2}L_{n_r}(0) = \sqrt{2}, \quad (7.65)$$

por consiguiente la suma que aparece en la función de correlación corre ahora sobre el número cuántico n_r :

$$C(\bar{r}, 0) = \rho(\bar{r})\delta(\bar{r}) + \left| \sum_{n_r} 2e^{-\frac{\lambda}{2}\bar{r}^2} L_{n_r}(\lambda r^2) \bar{n}_{n_r} \right|^2, \quad (7.66)$$

donde n_{n_r} es la distribución de Bose- Einstein:

$$\bar{n}_{n_r} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{n_r} - \mu)} - 1} = \frac{1}{e^{\frac{1}{kT}(\hbar\omega(2n_r+1) - \mu)} - 1}, \quad (7.67)$$

donde ya se ha considerado $M = 0$ y por tanto $E = \hbar\omega(1 + 2n_r)$, con $n_r = 0, 1, 2, \dots$. Finalmente la función de correlación con los elementos anteriores ya incorporados es:

$$C(\bar{r}) = 4e^{-\lambda r^2} \left| \sum_{n_r} L_{n_r}(\lambda r^2) \frac{1}{e^{\frac{1}{kT}(\hbar\omega(2n_r+1) - \mu)} - 1} \right|^2. \quad (7.68)$$

La pregunta que surge ahora, a fin de encontrar el comportamiento que presenta la función de correlación y con ello identificar si existe una transición de fase, es como tomar el límite termodinámico en la ecuación anterior. A primera vista podríamos pensar en aproximar la suma a una integral, como se ha trabajado en las secciones previas, sin embargo, es imposible puesto que los polinomios de Laguerre lo impiden. Entonces, lo correcto es recordar que el límite termodinámico es hacer tender el número de partículas a infinito a medida que el volumen que estas van ocupando crece, esto último matemáticamente significa tomar $\omega \rightarrow 0$, pues habíamos encontrado que el volumen armónico es $\mathcal{V} = \frac{1}{\omega^2}$. Además, lo estudiado hasta ahora nos permite predecir que la transición estará presente al considerar el potencial químico $\mu = 0$, junto con el límite termodinámico.

A continuación, la gráfica (7.1) muestra el comportamiento de la función de correlación de la ecuación (7.68), donde se ha considerado diferentes valores de los potenciales químicos y a su vez una frecuencia asociada a cada uno.

El procedimiento para encontrar la frecuencia asociada al potencial químico fue considerar un potencia químico $\tilde{\mu}$ y graficar, para diferentes valores de la frecuencia cada vez más pequeños, la función de correlación contra la distancia r , de tal forma que a partir de cierto valor de $\tilde{\omega}$ la gráfica mencionada fuera la misma para ese valor de μ y $\omega < \tilde{\omega}$ fuera la misma, queriendo decir que para un potencial químico dado hay una frecuencia que podemos fijar.

Los valores que se encontraron son los siguientes: para $\mu = -10$, $\omega = 0,1$. Para $\mu = -1$, $\omega = 0,01$. Para $\mu = -0,01$, $\omega = 0,001$. Estos valores como se mencionó antes, fueron encontrados y hacen evidente el hecho de que a medida que se toma un valor de potencial químico más cercano a cero, que es el punto de la transición, el límite termodinámico también debe ser considerado.

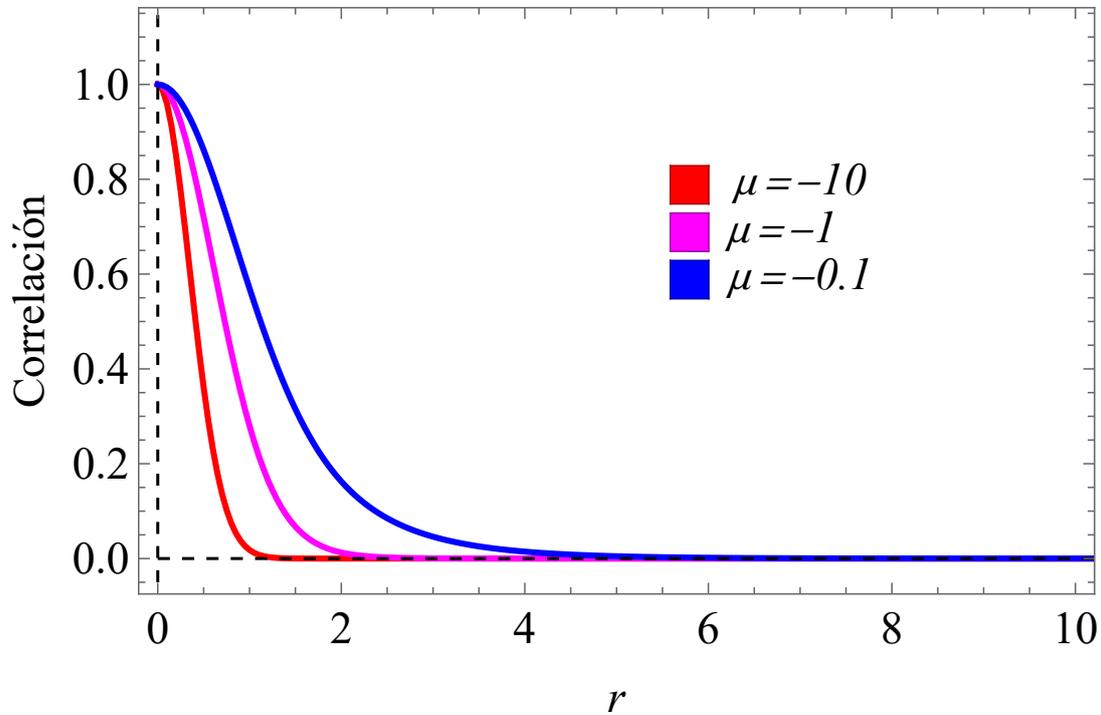


Figura 7.1: Función de correlación vs distancia r , estando en la transición $\mu = 0$ y tomando el límite termodinámico

Por último se nota que a medida que nos acercamos a la transición, es decir, $\mu \rightarrow 0^-$, y se considera el límite termodinámico, $\omega \rightarrow 0$, la longitud de correlación, que es la cintura de las curvas, se va haciendo cada vez más grande, lo cual indica una transición de fase de punto crítico.

Capítulo 8

Conclusiones

En este trabajo se estudió la termodinámica de un gas de Bose ideal confinado en una trampa armónica bidimensional y se caracterizó la condensación de Bose (BEC) como una transición de fase de punto crítico. Para cumplir con los objetivos anteriores, primero se encontraron las eigen-energías y las eigen-funciones del oscilador armónico cuántico bidimensional en coordenadas cartesianas, dichas eigen-energías fueron necesarias para construir la función Gran Potencial, durante este desarrollo se logró pasar de un espectro discreto a una distribución continua de estados tomando el límite termodinámico y capturando con ello la esencia de la separación de niveles de energía en sistemas macroscópicos.

Una vez obtenida la función Gran Potencial se pudo obtener las propiedades termodinámicas a través de las derivadas parciales. Es decir, se encontraron las expresiones para el número de partículas, la entropía y la energía, después, logramos hacer una analogía de la presión y el volumen usual a través de identificar el carácter extensivo o intensivo de las cantidades obtenidas en este caso, así el volumen armónico corresponde al inverso al cuadrado de la frecuencia de la trampa, $\mathcal{V} = \frac{1}{\omega^2}$. Esta identificación permite discernir que el límite termodinámico corresponde a considerar $\omega \rightarrow 0$. La presión armónica, \mathcal{P} se encuentra como la derivada parcial del Gran Potencial respecto del volumen armónico $\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mathcal{V}}\right)_{T, \mu}$. Con estos resultados se encontró la ecuación de estado que describe la termodinámica del sistema obteniéndose con ello el comportamiento de las isócoras y las isoterma.

Antes de pasar al cálculo de las susceptibilidades, se demostró que la condensación de Bose-Einstein sí sucede a diferencia del caso homogéneo. Identificamos que después de una temperatura asociada al valor máximo del potencial químico, $\mu = 0$, el estado base comienza a tener una ocupación considerable (una ocupación macroscópica). Después se calcularon las expresiones para las susceptibilidades en dos regiones: para $T > T_c$ y para $T < T_c$. Al analizar estas expresiones encontramos que una discontinuidad en el caso de C_V y divergencias en las susceptibilidades C_P , α_T y κ_T cuando evaluamos el punto $T = T_c$, i.e. $\mu = 0$, esto sugirió la existencia de una transición de fase de segundo orden y dicha transición sería la BEC, pues ocurre en el mismo punto.

Para poder concluir que la BEC es la transición de fase encontrada en las susceptibilidades, decidimos estudiar la función de correlación densidad-densidad, que expresa cómo la densidad en un punto está relacionada con la densidad en otro punto. Para ello; se resolvió el problema del oscilador armónico cuántico en dos dimensiones, ahora en coordenadas polares, después se encontró una expresión general para la función de correlación de cualquier sistema en términos de sus funciones de onda. Los dos resultados anteriores se juntaron para dar lugar a la función de correlación de este sistema. Finalmente se consideró uno de los puntos en $r = 0$, además el número cuántico $M = 0$. Esta últi-

ma condición está asociada al hecho de que el análisis es para obtener información de la ocupación macroscópica del estado base. Retomando que la transición de fase ocurre cuando $T = T_c$, es decir considerando $\mu = 0$, verificamos el comportamiento con la función de correlación. Estando lejos de la transición y tomando el límite termodinámico, es decir haciendo tender ω a cero, se observa un comportamiento constante en la longitud de correlación. Sin embargo, cuando estamos en la transición, $\mu = 0$, y tomamos el límite termodinámico como antes, encontramos un crecimiento en la longitud de correlación que va aumentando conforme $\omega \rightarrow 0$. De esta manera, concluimos que cuando estamos a $T = T_c$ siendo $\mu = 0$ y tomamos el límite termodinámico, estamos en presencia de una transición de fase asociada a la BEC. Queda aún mucho por explorar en lo que se refiere al comportamiento de sistemas bidimensionales en el régimen degenerado. Por un lado analizar gases de Fermi atrapados por un potencial armónico, y por otro, el tratar de incorporar las interacciones en el caso del gas de Bose en dos dimensiones a través del modelo más sencillo que representa la interacción entre partículas.

Bibliografía

- [1] Bose. (1924). *Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese*. Zeitschrift für Physik, 26(1), 178–181.
- [2] A. Einstein, *Quantentheorie des einatomigen idealen Gases*, Sitzungberichte, Preussische Akademie der Wissenschaften, Berlin, 261–267 (1924) y 3–14 (1925)
- [3] C. Townsend, W. Ketterle y S. Stringari, *Bose-Einstein condensation*, Physics World, 10 (3), 29 (1997)
- [4] Einstein y el condensado de Bose-Einstein — Cuaderno de Cultura Científica. (s.f.). Cuaderno de Cultura Científica. <https://culturacientifica.com/2022/03/29/einstein-y-el-condensado-de-bose-einstein/>
- [5] I. F. Silvera, *Bose-Einstein condensation*, Am. J. Phys. 65 (6), 570 (1997).
- [6] Cheng, R.; Wang, Q.-Y.; Wang, Y.-L.; Zong, H.-S. *Finite-Size Effects with Boundary Conditions on Bose-Einstein Condensation*. Symmetry 2021, 13, 300
- [7] Kittel, C. y Kroemer, H. (1980). *Thermal Physics* (2a ed.), (p. 199-200)
- [8] Görlitz, A., Vogels, J. M., Leanhardt, A. E., Raman, C., Gustavson, T. L., Abo-Shaer, J. R., Chikkatur, A. P., Gupta, S., Inouye, S., Rosenband, T., Ketterle, W. (2001). *Realization of Bose-Einstein Condensates in Lower Dimensions*. Physical Review Letters, 87(13).
- [9] M. H. Anderson et al. (1995) *Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor*, Science 269 198
- [10] Anderson, M. H.; Ensher, J. R.; Matthews, M. R.; Wieman, C. E.; Cornell, E. A. (1995). *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor*, 269(5221), 198–201.
- [11] Bradley, C. C.; Sackett, C. A.; Tollett, J. J.; Hulet, R. G. (1995). *Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions*. Physical Review Letters, 75(9), 1687–1690.
- [12] Davis, K.; Mewes, M.; Andrews, M.; van Druten, N.; Durfee, D.; Kurn, D.; Ketterle, W. (1995). *Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms*, 75(22), 3969–3973.
- [13] De Marco B.; Jin, D.S. (1999). *Onset of Fermi Degeneracy in a Trapped Atomic Gas*. Science, 285, 1703–1706.

- [14] Romero Rochín, V. (2020). *Notas de Física Estadística: Condensación de Bose-Einstein*. Ciudad de México
- [15] Romero Rochín, V. (2020). *Notas de Física Estadística: Gases Cuánticos I-IV*. Ciudad de México
- [16] Romero-Rochín, V., Bagnato, V. S. (2005). *Thermodynamics of an ideal gas of bosons harmonically trapped: equation of state and susceptibilities*. Brazilian Journal of Physics, 35(3a), 607–613
- [17] V.S. Bagnato, D.E. Pritchard, and D. Kleppner, Phys. Rev. A 35 , 4354 (1987).
- [18] Fluegge, S. (1994). *Practical Quantum Mechanics* (2a ed.). Springer.(p. 107-109)
- [19] Tobochnik, J. (2001). Resource letter CPPPT-1: *Critical point phenomena and phase transitions*. American Journal of Physics, 69(3), 255–263.
- [20] R.K. Pathria, *Statistical Mechanics*, (Pergamon Press, Oxford, 1972)
- [21] L. Landau and L. Lifshitz, *Fluid Mechanics* (Pergamon, Oxford, 1959)
- [22] H.B. Callen, *Thermodynamics* (J. Wiley and Sons, New York, 1960)
- [23] Cohen- Tannoudji, C., Diu, B.,Laloe, F. (1977). *Quantum Mechanics*. Wiley-Interscience.
- [24] Torres, A. V. (2017). *Polinomios Ortogonales Confluentes Matriciales* [Tesis licenciatura]. Universidad Nacional De Cuyo, Facultad De Ciencias Exactas Y Naturales.(p.24)
- [25] *Confluent Hypergeometric Function of the First Kind* - from Wolfram MathWorld. (s.f.). Wolfram MathWorld: The Web's Most Extensive Mathematics Resource. <https://mathworld.wolfram.com/ConfluentHypergeometricFunctionoftheFirstKind.html>
- [26] Sevilla Pérez, F. J. (2000). *Gas de bosones atrapados por potenciales armónicos* [Tesis licenciatura]. Universidad Nacional Autónoma De México, Facultad De Ciencias.
- [27] Regal, C. A., Greiner, M., Jin, D. S. (2004). *Observation of resonance condensation of fermionic atom pairs*. Physical Review Letters, 92(4).
- [28] Zwierlein, M. W., Abo-Shaeer, J. R., Schirotzek, A., Schunck, C. H., Ketterle, W. (2005). *Vortices and superfluidity in a strongly interacting Fermi gas*. Nature, 435(7045).
- [29] Kinast, J., Turlapov, A., Thomas, J. E. (2005). *Heat capacity of a strongly interacting Fermi gas*. Physical Review Letters, 94(17).
- [30] Bartenstein, M., Altmeyer, A., Riedl, S., Geursen, R., Scheck, F., C. Kohstall, C., Grimm, R. (2004). *Crossover from a molecular Bose-Einstein condensate to a degenerate Fermi gas*. Physical Review Letters, 92(12).
- [31] Partridge, G. B., Li, W., Hulet, R. G. (2005). *Pairing and phase separation in a polarized Fermi gas*. Science, 311(5760), 503-505.

- [32] Goldenfeld, N. (1992). *Lectures on phase transitions and the renormalization group*. CRC Press.
- [33] Stanley, H. E. (1971). *Introduction to phase transitions and critical phenomena*. Oxford University Press.
- [34] Greiner, M., Mandel, O., Esslinger, T., Hänsch, T. W., Bloch, I. (2002). *Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms*. Nature, 415(6867), 39-44.
- [35] Ma, S. K. (1976). *Modern theory of critical phenomena*. Benjamin/Cummings.
- [36] Landau, L. D., Lifshitz, E. M. (1980). *Statistical physics*. Pergamon Press.

Apéndice A

Estados 2D

En este apéndice se coloca el código asociado a la gráfica 3.1, que corresponde a la representación de los estados en un plano cartesiano 2D.

```
A = Plot[-x + 1, {x, 0, 1}, Filling -> Axis, PlotRange -> All,
  Frame -> True, Axes -> False, PlotStyle -> {Green, Thick},
  FrameLabel -> {Style["T/\!\(\!*SubscriptBox[\(T\),_\(c\)]\)"],
    FontFamily -> "Times", Italic, 10],
    Style["\!\(\!*SubscriptBox[\(\[Kappa]\),_\(T\)]\)"],
    FontFamily -> "Times", 10]},
  LabelStyle -> Directive[Black, 10, FontFamily -> "Times"]]
```

```
B = Line[{{0, 0}, {1.2, 0}}];
```

```
B1 = Graphics[{{Black, B}}];
```

```
Cc = Line[{{0, 0}, {0, 1.2}}];
```

```
C1 = Graphics[{{Black, Cc}}];
```

```
Show[{B1, A, C1}, PlotRange -> All, Frame -> True, Axes -> False,
  FrameLabel -> {Style["\!\(\!*
StyleBox[\`"i\`",\nFontSlant->\`"Italic\`"]\)"], FontFamily -> "Times",
  Italic, 14], Style["\!\(\!*
StyleBox[\`"j\`",\nFontSlant->\`"Italic\`"]\)"], FontFamily -> "Times",
  14]}, FrameTicks -> {{{{1., "\!\(\!*
StyleBox[\`"L\`",\nFontSlant->\`"Italic\`"]\)"}, {0., "0"}},
  None}, {{{{1., "\!\(\!*
StyleBox[\`"L\`",\nFontSlant->\`"Italic\`"]\)"}, {0., "0"}}, None}}}]
```

Apéndice B

Presión vs temperatura a densidad constante

En este apéndice se coloca el código asociado a la gráfica 4.1, que es la ecuación de estado: presión armónica vs temperatura a densidad N/\mathcal{V} constante, cuyos valores fueron 2.0, 1.5, 1.0, 0.5.

```
PresT[T_, a_, N_] :=  
  T N PolyLog[3, Exp[-(a/T)]] / PolyLog[2, Exp[-(a/T)]]  
  
pT2 = PresT[Range[1.26, 2.5, 0.002], Range[1.26, 7.46, 0.01], 2];  
  
pts2 = Partition[Riffle[Range[1.26, 2.5, 0.002], pT2], 2];  
  
PT2 = ListLinePlot[pts2, PlotRange -> All, Frame -> True,  
  Axes -> False, PlotStyle -> {Grey, Thick},  
  FrameLabel -> {Style["T", FontFamily -> "Times", Italic, 10],  
    Style["Presi n_Ar m nica", FontFamily -> "Times", 10]},  
  LabelStyle -> Directive[Black, 10, FontFamily -> "Times"]];  
  
pT15 = PresT[Range[1.1, 2.5, 0.002], Range[1.1, 8.1, 0.01], 1.5];  
  
pts15 = Partition[Riffle[Range[1.1, 2.5, 0.002], pT15], 2];  
  
PT15 = ListLinePlot[pts15, PlotRange -> All, Frame -> True,  
  Axes -> False, PlotStyle -> {Grey, Thick},  
  FrameLabel -> {Style["T", FontFamily -> "Times", Italic, 10],  
    Style["Presi n_Ar m nica", FontFamily -> "Times", 10]},  
  LabelStyle -> Directive[Black, 10, FontFamily -> "Times"]];  
  
pT3 = PresT[Range[1.532, 2.5, 0.002], Range[1.532, 6.38, 0.01], 3.];  
  
pts3 = Partition[Riffle[Range[1.532, 2.5, 0.002], pT3], 2];  
  
PT3 = ListLinePlot[pts3, PlotRange -> All, Frame -> True,  
  Axes -> False, PlotStyle -> {Grey, Thick},  
  FrameLabel -> {Style["T", FontFamily -> "Times", Italic, 10],  
    Style["Presi n_Ar m nica", FontFamily -> "Times", 10]},
```

```

LabelStyle -> Directive[Black, 10, FontFamily -> "Times"]]
pT05 = PresT[Range[0.67, 2.5, 0.002], Range[0.67, 9.82, 0.01], 0.5];

pts05 = Partition[Riffle[Range[0.67, 2.5, 0.002], pT05], 2];

PT05 = ListLinePlot[pts05, PlotRange -> All, Frame -> True,
  Axes -> False, PlotStyle -> {Grey, Thick},
  FrameLabel -> {Style["T", FontFamily -> "Times", Italic, 10],
    Style["Presi n - Arm nica", FontFamily -> "Times", 10]},
  LabelStyle -> Directive[Black, 10, FontFamily -> "Times"]];

PresTtrans[T_] := (T^3) Zeta[3]

pTran = PresTtrans[Range[0.0001, 2, 0.002]];

ptrans = Partition[Riffle[Range[0.0001, 2, 0.002], pTran], 2];

PTRAN = ListLinePlot[ptrans, PlotRange -> All, Frame -> True,
  Axes -> False, PlotStyle -> {Red, Thick},
  FrameLabel -> {Style["T", FontFamily -> "Times", Italic, 10],
    Style["Presi n - Arm nica", FontFamily -> "Times", 10]},
  LabelStyle -> Directive[Black, 10, FontFamily -> "Times"]];

Show[{PT3, PT2, PT15, PT05, PTRAN}, PlotRange -> All,
  FrameTicks -> {{{{0., "0"}, {2., "2"}, {4., "4"}, {6., "6"}, {8.,
    "8"}, {10., "10"}},
  None}, {{{0., "0"}, {0.5, "0.5"}, {1., "1"}, {1.5, "1.5"}, {2.,
    "2"}, {2.5, "2.5"}}, None}},
  Epilog -> {Text[
    Style[Red, 8, FontFamily -> "Times", Italic, 8], {0.25, 8}],
  Text[Style["!\(\(*SuperscriptBox[\(PT\), -\(-3\)]\) \[Tilde]_cte",
    10, FontFamily -> "Times", Italic, 10], {0.48, 8}]]]

```

Apéndice C

Presión armónica vs densidad a temperatura constante

En este apéndice se coloca el código asociado a la gráfica 4.2, que es la ecuación de estado: presión armónica vs densidad N/\mathcal{V} a Temperatura constante, cuyos valores fueron 1.3, 1.1, 0.8, 0.5.

```

PresN[N_, a_, T_] :=
  T /N PolyLog[3, Exp[-(a/T)]]/PolyLog[2, Exp[-(a/T)]]

PresNtrans[N_] := (1/N^(3/2)) Zeta[3]/Zeta[2]^(3/2)

pNTran = PresNtrans[Range[0.5, 3, 0.001]];

pntrans = Partition[Riffle[Range[0.5, 3, 0.001], pNTran], 2];

PNTRAN = ListLinePlot[{pntrans}, PlotRange -> All, Frame -> True,
  Axes -> False, PlotStyle -> {Red, Thick},
  FrameLabel -> {Style["N/[ScriptCapitalV]", FontFamily -> "Times",
    Italic, 10],
    Style["Presi n_Ar m nica", FontFamily -> "Times", 10]},
  LabelStyle -> Directive[Black, 10, FontFamily -> "Times"]];
pN1 = PresN[Range[0.51, 3, 0.003], Range[0.51, 8.81, 0.01], 0.9];

pns1 = Partition[Riffle[Range[0.51, 3, 0.003], pN1], 2];

pN15 = PresN[Range[0.61, 3, 0.003], Range[0.61, 8.57, 0.01], 0.8];

pns15 = Partition[Riffle[Range[0.61, 3, 0.003], pN15], 2];

PN1 = ListLinePlot[pns1, PlotRange -> All, Frame -> True,
  Axes -> False, PlotStyle -> {Grey, Thick},
  FrameLabel -> {Style["N/[ScriptCapitalV]", FontFamily -> "Times",
    Italic, 10],
    Style["Presi n_Ar m nica", FontFamily -> "Times", 10]},
  LabelStyle -> Directive[Black, 10, FontFamily -> "Times"]];

PN15 = ListLinePlot[pns15, PlotRange -> All, Frame -> True,

```

```

Axes -> False, PlotStyle -> {Grey, Thick},
FrameLabel -> {Style["N/[ScriptCapitalV]", FontFamily -> "Times",
  Italic, 20],
  Style["Presi n_Ar m nica", FontFamily -> "Times", 20]},
LabelStyle -> Directive[Black, 18, FontFamily -> "Times"]];

pN05 = PresN[Range[0.98, 3, 0.003], Range[0.98, 7.71, 0.01], 0.6];

pns05 = Partition[Riffle[Range[0.98, 3, 0.003], pN05], 2];

PN05 = ListLinePlot[pns05, PlotRange -> All, Frame -> True,
  Axes -> False, PlotStyle -> {Grey, Thick},
  FrameLabel -> {Style["N/[ScriptCapitalV]", FontFamily -> "Times",
    Italic, 20],
  Style["Presi n_Ar m nica", FontFamily -> "Times", 20]},
  LabelStyle -> Directive[Black, 18, FontFamily -> "Times"]];

Show{PNTRAN, PN15, PN05, PN1}, PlotRange -> All,
FrameTicks -> {{{{0., "0"}, {0.2, "0.2"}, {0.4, "0.4"}, {0.6,
  "0.6"}, {0.8, "0.8"}, {1.0, "1.0"}, {1.2, "1.2"}, {1.4,
  "1.4"}, {1.6, "1.6"}},
  None}, {{{0., "0"}, {0.5, "0.5"}, {1., "1"}, {1.5, "1.5"}, {2.,
  "2"}, {2.5, "2.5"}, {3, "3"}}, None}},
Epilog -> {Text[
  Style[Red, 8, FontFamily -> "Times", Italic, 8], {1.7, 1.4}],
  Text[Style[
    "\!\(\*SuperscriptBox[\(\([ScriptCapitalP][ScriptCapitalV]\)\), -\(\(\)
    \(-3\)/2\)\)]\)\[Tilde]_cte", 10, FontFamily -> "Times", Italic,
    10], {2.0, 1.41}]]]

```

Apéndice D

Función de Bose $g_2(\alpha)$

En este apéndice se coloca el código asociado a la gráfica 5.1, que es la función $g_2(\alpha)$, con el potencial químico $\alpha \leq 0$.

```
g2 = Plot[PolyLog[2, Exp[x]], {x, -5, 0}, PlotRange -> All,
  Frame -> True, Axes -> False, PlotStyle -> {Blue, Thick},
  FrameLabel -> {Style["\[Alpha]", FontFamily -> "Times", Italic, 10],
    Style["!\(\(*SubscriptBox[\(g\), -\((2\))]\)\)(\[Alpha])",
      FontFamily -> "Times", 10]},
  LabelStyle -> Directive[Black, 10, FontFamily -> "Times"]}
zeta2 = ListPlot[{{0, Zeta[2]}}, PlotRange -> All, Frame -> True,
  Axes -> False, PlotStyle -> {Red, Thick},
  FrameLabel -> {Style["\[Alpha]", FontFamily -> "Times", Italic, 10],
    Style["!\(\(*SubscriptBox[\(g\), -\((2\))]\)\)(\[Alpha])",
      FontFamily -> "Times", 10]},
  LabelStyle -> Directive[Black, 10, FontFamily -> "Times"]]
```

Apéndice E

Capacidad calorífica a volumen armónico constante C_V

En este apéndice se coloca el código asociado a la gráfica 6.1, que es el comportamiento de capacidad calorífica a volumen armónico constante C_V para un gas ideal de Bosones confinado en una trampa armónica 2D como función de la temperatura, considerando $k = \hbar = 1$

```

T2d = Table[
  T /. FindRoot[
    PolyLog[2, Exp[-a/T]] ((T)^2) == Zeta[2], {T, 1}], {a, 0.00001,
    10, 0.01}];

CV2d[T_, a_] :=
  2 ((3 PolyLog[3, Exp[-(a/T)]]) / PolyLog[2, Exp[-(a/T)]] - (
    2 PolyLog[2, Exp[-(a/T)]] / PolyLog[1, Exp[-(a/T)]]);

Cv2d = CV2d[T2d, Range[0.0001, 10, 0.01]];

cvs2d = Partition[Riffle[T2d, Cv2d], 2];

CV2dd = ListLinePlot[cvs2d, PlotRange -> All, Frame -> True,
  Axes -> False, PlotStyle -> {Blue, Thick},
  FrameLabel -> {Style["T/\!\(\*SubscriptBox[\(T\), -\(\(c\)\)]\)"],
    FontFamily -> "Times", Italic, 14],
    Style["\!\(\*SubscriptBox[\(C\), -\(\[Nu]\)\)]\"",
    FontFamily -> "Times", 14]},
  LabelStyle -> Directive[Black, 14, FontFamily -> "Times"],
  PlotLegends ->
    Placed[{ "\!\(\*SubscriptBox[\(C\), -\(\[Nu]\)\)]\)(T>\!\(\*SubscriptBox[\(T\), -\(\(c\)\)]\))" }, Center]];

CV2d2[T_] := 6 T^2 Zeta[3];

Cv2d2 = CV2d2[Range[0, 1, 0.01]];

cvs2d2 = Partition[Riffle[Range[0, 1, 0.01], Cv2d2], 2];

```

```

CV2dd2 = ListLinePlot[cvs2d2, PlotRange -> All, Frame -> True,
  Axes -> False, PlotStyle -> {Red, Thick},
  FrameLabel -> {Style["T/\!\(\(*SubscriptBox[\(T\),_\(c\)]\)")",
    FontFamily -> "Times", Italic, 14],
    Style["\!\(\(*SubscriptBox[\(C\),_\(\[Nu]\)]\)")",
    FontFamily -> "Times", 14]},
  LabelStyle -> Directive[Black, 14, FontFamily -> "Times"]];

l2 = Line[{{1, 0}, {1, 8}}];

asympy2 = Graphics[{Dashed, Black, l2}];

lx21 = Line[{{0, 2}, {4.2, 2}}];

asympx21 = Graphics[{Dashed, Black, lx21}];

Show[{CV2dd, CV2dd2, asympx21, asympy2}, PlotRange -> All,
  FrameLabel -> {Style["T/\!\(\(*SubscriptBox[\(T\),_\(c\)]\)")",
    FontFamily -> "Times", Italic, 14],
    Style["\!\(\(*SubscriptBox[\(C\),_\(\[Nu]\)]\)")",
    FontFamily -> "Times", 14]},
  LabelStyle -> Directive[Black, 10, FontFamily -> "Times"],
  FrameTicks -> {{{{0., "0"}, {2., "2Nk"}, {4., "4"}, {6., "6"}, {8.,
    "8"}}, None}, {{{0., "0"}, {1., "1"}, {2., "2"}, {3., "3"}, {4.,
    "4"}}, None}}]

```

Apéndice F

Capacidad calorífica a presión armónica constante C_p

En este apéndice se coloca el código asociado a la gráfica 6.2, que es el comportamiento de capacidad calorífica a presión armónica constante como función de la temperatura para un gas ideal de bosones confinado en una trampa armónica 2D, considerando $k = \hbar = 1$.

```

T2d = Table[
  T /. FindRoot[
    PolyLog[2, Exp[-a/T]] ((T)^2) == Zeta[2], {T, 1}], {a, 0.00001,
    10, 0.01}];
Cp2d[T_, a_] :=
  3 PolyLog[1, Exp[-(a/T)]] PolyLog[3, Exp[-(a/T)]] /
  PolyLog[2,
    Exp[-(a/T)]^2 ((3 PolyLog[3, Exp[-(a/T)]]) /
    PolyLog[2, Exp[-(a/T)]] - (2 PolyLog[2, Exp[-(a/T)]]) /
    PolyLog[1, Exp[-(a/T)]])];

CP2d = Cp2d[T2d, Range[0.0001, 10, 0.01]];

cps2d = Partition[Riffle[T2d, CP2d], 2];

Cp2dd = ListLinePlot[cps2d, PlotRange -> All, Frame -> True,
  Axes -> False, PlotStyle -> {Blue, Thick},
  FrameLabel -> {Style["T/!(\(*SubscriptBox[(T),_](c)\)\)",
    FontFamily -> "Times", Italic, 10],
    Style["!\(*SubscriptBox[(C),_](p)\)\)",
    FontFamily -> "Times", 10]},
  LabelStyle -> Directive[Black, 10, FontFamily -> "Times"],
  FrameTicks -> {{{{3., "3Nk"}, {6., "6"}, {10., "10"}, {14.,
    "14"}, {18., "18"}, {22., "22"}},
    None}, {{{1., "1"}, {2., "2"}, {3., "3"}, {4., "4"}}, None}}];
l = Line[{{1, 0}, {1, 23}}];
asympt = Graphics[{Dashed, Black, l}];
lx2 = Line[{{0, 3}, {7, 3}}];
asymptx2 = Graphics[{Dashed, Black, lx2}];

Show[{Cp2dd, asymptx2, asympt}]

```

Apéndice G

Coeficiente de expansión térmica α_T

En este apéndice se coloca el código asociado a la gráfica 6.3, que es el comportamiento de coeficiente de expansión térmica para un gas ideal de bosones confinado en una trampa armónica 2D como función de la temperatura, considerando $k = \hbar = 1$.

```

T2dA = Table[
  T /. FindRoot[
    PolyLog[2, Exp[-a/T]] ((T)^2) == Zeta[2], {T, 1}], {a, 0.00001,
    35, 0.01}];

AT2d[T_, a_] :=
  1/T PolyLog[1, Exp[-(a/T)]] /
  PolyLog[2,
    Exp[-(a/T)]] ((3 PolyLog[3, Exp[-(a/T)]])) /
  PolyLog[2, Exp[-(a/T)]] - (2 PolyLog[2, Exp[-(a/T)]])) /
  PolyLog[1, Exp[-(a/T)]]

At2d = AT2d[T2dA, Range[0.0001, 35, 0.01]];
ats2d = Partition[Riffle[T2dA, At2d], 2];

aT2dd = ListLinePlot[ats2d, PlotRange -> All, Frame -> True,
  Axes -> False, PlotStyle -> {Blue, Thick},
  FrameLabel -> {Style["T/!(\(*SubscriptBox[(T), -(c)]\)")",
    FontFamily -> "Times", Italic, 10],
    Style["!\(\(*SubscriptBox[(\([Alpha])\), -(T)]\)")",
    FontFamily -> "Times", 10]},
  LabelStyle -> Directive[Black, 10, FontFamily -> "Times"],
  FrameTicks -> {{{{0., "0"}, {2., "2"}, {4., "4"}, {6., "6"}, {8.,
    "8"}, {10., "10"}},
    None}, {{{0., "0"}, {1., "1"}, {2., "2"}, {3., "3"}, {4.,
    "4"}, {5., "5"}, {6., "6"}, {7., "7"}, {8., "8"}, {9., "9"}},
    None}}];
l2 = Line[{{1, 0}, {1, 8}}];
asympy2 = Graphics[{Dashed, Black, l2}];
lx0A = Line[{{0, 0}, {9.2, 0}}];
asympx0A = Graphics[{Dashed, Black, lx0A}];

Show[{aT2dd, asympy2, asympx0A}]

```

Apéndice H

Compresibilidad isotérmica κ_T

En este apéndice se coloca el código asociado a la gráfica 6.3, que es el comportamiento de Compresibilidad isotérmica como función de la temperatura para un gas ideal de Bosones confinado en una trampa armónica 2D, considerando $k = \hbar = 1$.

```

KT2d[T_, a_] := 1/T PolyLog[1, Exp[-(a/T)]]/PolyLog[2, Exp[-(a/T)]]

Kt2d = KT2d[T2dA, Range[0.0001, 35, 0.01]];

kts2d = Partition[Riffle[T2dA, Kt2d], 2];

kT2dd = ListLinePlot[kts2d, PlotRange -> All, Frame -> True,
  Axes -> False, PlotStyle -> {Blue, Thick},
  FrameLabel -> {Style["T/!(\(*SubscriptBox[(T),_(c)]\)")",
    FontFamily -> "Times", Italic, 10],
    Style["!\(*SubscriptBox[(\([Kappa])\),_(T)]\)")",
    FontFamily -> "Times", 10]},
  LabelStyle -> Directive[Black, 10, FontFamily -> "Times"],
  FrameTicks -> {{{{0., "0"}, {1., "1"}, {2., "2"}, {3., "3"}, {4.,
    "4"}, {5., "5"}, {6., "6"}},
    None}, {{{0., "0"}, {1., "1"}, {2., "2"}, {3., "3"}, {4.,
    "4"}, {5., "5"}, {6., "6"}, {7., "7"}, {8., "8"}, {9., "9"}},
    None}}];
l2 = Line[{{1, 0}, {1, 8}}];
asympy2 = Graphics[{{Dashed, Black, l2}}];
lx0A = Line[{{0, 0}, {9.2, 0}}];
asympx0A = Graphics[{{Dashed, Black, lx0A}}];

Show[{kT2dd, asympy2, asympx0A}]

```

Apéndice I

Función de correlación densidad-densidad

En este apéndice se coloca el código asociado a la gráfica 7.1, que corresponden al comportamiento de la función de correlación densidad-densidad

```
T2 = Table[
  T /. FindRoot[
    PolyLog[2, Exp[a/T]] ((T)^2) == Zeta[2], {T, 1}], {a, -10, 0,
    0.1}];
```

```
Mu = Range[-10, 0, 0.1];
```

```
Gc[r_, w_, n_, m_, T_] := 4 (Sqrt[w/\[Pi]]) Exp[-w r^2] ((\!\(\
*\UnderoverscriptBox[\(\[Sum]\), \(\i = 0\), \(\n\)]
*\FractionBox[\(\LaguerreL[i, w\
*\SuperscriptBox[\(\r\), \(\2\)]\)\], \(\Exp[
*\FractionBox[\(\w \((2\ i + 1)\) - m\), \(\T\)] - 1\)]\)\)^2)
```

```
Mu[[100]]
```

```
-0.1
```

```
(* mu=-10 y Omega=1 *)
```

```
g0 = Gc[Range[0, 3, 0.1], 1, 100, Mu[[1]], T2[[1]]];
```

```
g02 = Gc[Range[0, 3, 0.1], 1, 500, Mu[[1]], T2[[1]]];
```

```
x = Table[i, {i, 0, 3, 0.1}];
```

```
difg0 = Table[Abs[g0[[i]] - g02[[i]]], {i, 1, Length[x]}]
```

*(*como la diferencia es muy peque a las graficas esperadas se van a super poner*)*

*(*Hacemos la tabla de la ltima *)*

```

gp02 = Table[{x[[i]], g02[[i]]/Max[g02]}, {i, Length[x]}];

(* hacemos omega = 0.1 *)

g1 = Gc[Range[0, 3, 0.1], 0.1, 600, Mu[[1]], T2[[1]]];

g12 = Gc[Range[0, 20, 0.05], 0.1, 800, Mu[[1]], T2[[1]]];
xbn = Table[i, {i, 0, 20, 0.05}];

(*Hacemos una diferencia*)

difg1 = Table[Abs[g1[[i]] - g12[[i]]], {i, 1, Length[x]}]
gp12 = Table[{xbn[[i]], g12[[i]]/Max[g12]}, {i, Length[xbn]}];

(*graficamos gp12 y gp02*)

Grgp02 = ListLinePlot[gp02, PlotStyle -> {Red, Thick}]
Grgp12 =
  ListLinePlot[gp12, PlotStyle -> {Blue, Thick}, PlotRange -> All]
Show[Grgp02, Grgp12]

(*Como practicamente son las mismas, ya no hacemos para otro omega \
m s peque o , entonces para mu=-10 , omega = 0.1 y n=800*)

(*se procede a hacer una partici n mas peque a de r para que la \
funci n quede mejor, por lo que la grafica que ya aparece es despues \
de esta correcci n*)

(*Para mu= -1 omega=0.1*)
f0 = Gc[Range[0, 3, 0.1], 0.1, 500, Mu[[91]], T2[[91]]];

f02 = Gc[Range[0, 3, 0.1], 0.1, 800, Mu[[91]], T2[[91]]];

diff0 = Table[Abs[f0[[i]] - f02[[i]]], {i, 1, Length[x]}]

(*con omega = 0.01*)

f1 = Gc[Range[0, 20, 0.05], 0.01, 1400, Mu[[91]], T2[[91]]];

f12 = Gc[Range[0, 3, 0.1], 0.01, 1200, Mu[[91]], T2[[91]]];

diff1 = Table[Abs[f1[[i]] - f12[[i]]], {i, 1, Length[x]}]
(*Hacemos las raficas para omega = 0.1 y omega =0.01*)

fp02 = Table[{x[[i]], f02[[i]]/Max[f02]}, {i, Length[x]}];

Grfp0 = ListLinePlot[fp01, PlotStyle -> {Red, Thick}]
fp1 = Table[{xbn[[i]], f1[[i]]/Max[f1]}, {i, Length[xbn]}]

```

```

Grfp1 = ListLinePlot[fp1, PlotStyle -> {Blue, Thick}]
Show[Grfp0, Grfp1]
(*Como practicamente son las mismas, ya no hacemos para otro omega \
m s peque o , entonces para mu=-1 , omega = 0.01 y n=1400*)

(*se procede a hacer una partici n mas peque a de r para que la \
funci n quede mejor, por lo que la grafica que ya aparece es despues \
de esta correcci n*)

(*Para mu= -0.1 omega=0.1*)

x2 = Table[i, {i, 0, 5, 0.2}];

h0 = Gc[Range[0, 5, 0.2], 0.1, 500, Mu[[100]], T2[[100]]];

h02 = Gc[Range[0, 5, 0.2], 0.1, 800, Mu[[100]], T2[[100]]];

difh0 = Table[Abs[h0[[i]] - h02[[i]]], {i, 1, Length[x2]}]
(*con omega=0.01*)

h1 = Gc[Range[0, 5, 0.2], 0.01, 1000, Mu[[100]], T2[[100]]];

h12 = Gc[Range[0, 5, 0.2], 0.01, 1200, Mu[[100]], T2[[100]]];

difh1 = Table[Abs[h1[[i]] - h12[[i]]], {i, 1, Length[x2]}]
hp02 = Table[{x2[[i]], h02[[i]]/Max[h02]}, {i, Length[x2]}];

Grhp0 = ListLinePlot[hp02, PlotStyle -> {Red, Thick}]
hp12 = Table[{x2[[i]], h12[[i]]/Max[h12]}, {i, Length[x2]}];

Grhp12 = ListLinePlot[hp12, PlotStyle -> {Blue, Thick}]
Show[Grhp0, Grhp12]
(*Como aun se despegan , hacemos otro omega = 0.001*)

(*con omega=0.001*)

x3 = Table[i, {i, 0, 5, 0.5}]
h2 = Gc[Range[0, 5, 0.5], 0.001, 10000, Mu[[100]], T2[[100]]];

h22 = Gc[Range[0, 20, 0.05], 0.001, 10500, Mu[[100]], T2[[100]]];

difh2 = Table[Abs[h2[[i]] - h22[[i]]], {i, 1, Length[x3]}]
hp22 = Table[{x3[[i]], h22[[i]]/Max[h22]}, {i, Length[x3]}]

(*graficamos*)

Grhp22 = ListLinePlot[hp22, PlotStyle -> {Green, Thick}]

```

*(*superponemos las 3 graficas*)*

Show[Grhp0, Grhp22, Grhp12]

*(*Como practicamente las ultimas 2 son las mismas, ya no hacemos para \ otro omega m s peque o , entonces para mu=-0.1 , omega = 0.001 y \ n=10,500*)*

*(*Para el siguiente valor de MU tenemos que volver a coorrer el find \ root con una particion m s peque a pues ya no est definido el valor \ mu=-0.01*)*

*(*Para mu=-0.01*)*

T22 = Table[
T /. FindRoot[
PolyLog[2, **Exp**[a/T]] **((T)^2) = Zeta**[2], {T, 1}], {a, -0.01, 0,
0.001}];

Mu2 = Range[-0.01, 0, 0.001];

Mu2[[1]]

*(*Para omega = 0.01*)*

j0 = Gc[**Range**[0, 5, 0.5], 0.01, 1000, **Mu2**[[1]], **T22**[[1]]];

j02 = Gc[**Range**[0, 5, 0.5], 0.01, 1200, **Mu2**[[1]], **T22**[[1]]];

difj0 = Table[**Abs**[**j0**[[i]] - **j02**[[i]]], {i, 1, **Length**[x3]}]
*(*Para omega = 0.001*)*

j1 = Gc[**Range**[0, 5, 0.5], 0.001, 10000, **Mu2**[[1]], **T22**[[1]]];

j12 = Gc[**Range**[0, 5, 0.5], 0.001, 10500, **Mu2**[[1]], **T22**[[1]]];

difj1 = Table[**Abs**[**j1**[[i]] - **j12**[[i]]], {i, 1, **Length**[x3]}]
*(*graficamos las dos anteriores*)*

jp02 = Table[{x3[[i]], **j02**[[i]]/**Max**[**j02**]}, {i, **Length**[x3]}];

Grjp0 = ListLinePlot[**jp02**, **PlotStyle** -> {**Red**, **Thick**}]

jp12 = Table[{x3[[i]], **j12**[[i]]/**Max**[**j12**]}, {i, **Length**[x3]}];

Grjp2 = ListLinePlot[**jp12**, **PlotStyle** -> {**Blue**, **Thick**}]

```
Show[Grjp2, Grjp0]
```

```
(*Se despegan un poquito asi que vamos a haer otro omega= 0.0001*)
```

```
j2 = Gc[Range[0, 5, 0.5], 0.0001, 90000, Mu2[[1]], T22[[1]]];
```

```
Xbn = Table[i, {i, 0, 20, 0.5}];
```

```
j22 = Gc[Range[0, 20, 0.1], 0.0001, 90500, Mu2[[1]], T22[[1]]];
```

```
difj2 = Table[Abs[j2[[i]] - j22[[i]]], {i, 1, Length[x3]}]
```

```
jp22 = Table[{Xbn[[i]], j22[[i]]/Max[j22]}, {i, Length[Xbn]}];
```

```
Grjp22 = ListLinePlot[jp22, PlotStyle -> {Green, Thick}]
```

```
Show[Grjp22, Grjp2]
```

```
(*Hacemos export de los puntos con un intervalo en x mas fino y m s grande
```

```
l = Line[{{0, -0.05}, {0, 1.5}}];
```

```
asymphy = Graphics[{Dashed, Black, l}];
```

```
l2 = Line[{{0, 0}, {15, 0}}];
```

```
asympx = Graphics[{Dashed, Black, l2}];
```

```
G1 = ListLinePlot[Import["Mu_10_Omega_0.1_n_800.dat"],  
PlotRange -> All, PlotStyle -> {Red, Thick}]
```

```
G2 = ListLinePlot[Import["Mu_1_Omega_0.01_n_1400.dat"],  
PlotRange -> All, PlotStyle -> {Magenta, Thick}]
```

```
G3 = ListLinePlot[Import["Mu_0.1_Omega_0.001_n_10500.dat"],  
PlotRange -> All, PlotStyle -> {Blue, Thick}]
```

```
G4 = ListLinePlot[Import["Mu_0.01_Omega_0.0001_n_90500_Prueba.dat"],  
PlotRange -> All, PlotStyle -> {Orange, Thick}]
```

```
Show[{G1, G2, G3, G4, asymphy, asympx, Gri2},
```

```
PlotRange -> {{0, 10}, {-0.05, 1.1}}, Frame -> True, Axes -> False,  
FrameLabel -> {Style["r", FontFamily -> "Times", Italic, 15],
```

```
Style["Correlaci n", FontFamily -> "Times", 15]}},
```

```
LabelStyle -> Directive[Black, 15, FontFamily -> "Times"]]
```