

Mec. Estadística 2022 Clase 23

Condensación de Bose-Einstein (Kittel y Kroemer, cap. 7)

Debajo de cierta temperatura T_E la *fracción* de partículas que están en el orbital de menor energía es no cero en el límite de un recipiente de volumen infinito. Por ejemplo, 20% están en el orbital fundamental, 80% en todos los demás orbitales.

(T_E se llama “la temperatura de Einstein”, pero no es la misma que en su modelo de capacidad calorífica de sólidos.)

Encima de esta temperatura $n_0/N \rightarrow 0$ cuando $V \rightarrow \infty$, donde n_0 es el número de partículas en el orbital fundamental, 0, y N el número total.

DIBUJO Grafica de n_0/N vs. T

Es una transición de fase ¡sin que haya interacción entre las partículas!

Históricamente la transición de He⁴ líquido a superfluidez ha sido identificada como una condensación Bose-Einstein (véase Kittel y Kroemer p. 207 – 217) aunque helio dista mucho de ser un gas ideal. Los átomos tienen una interacción importante. Así la teoría desarrollada aquí no se puede aplicar directamente.

En 1995 se observaron ejemplos limpios de condensación BE (BEC) en gases casi ideales – gases de átomos atrapados en trampas magneto-ópticas con concentraciones y temperaturas muy, muy bajas.

¿Como funciona?

La ocupación de un orbital i es $f_i = \langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} - 1}$

Recuerda que para que esto sea un número no-negativo para cada orbital (como debe ser) es necesario que μ sea menor que la energía ϵ_0 del orbital de menor energía.

Ahora ¿que pasa cuando bajamos la temperatura manteniendo μ constante ?

Si T baja entonces β aumenta y, porque $\epsilon_i - \mu > 0$, $e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}$ aumenta y f_i baja. El número total de partículas en el gas baja.

Aumentar μ con temperatura constante tiene el efecto opuesto: $\epsilon_i - \mu$ baja, así $e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}$ baja y f_i aumenta.

La ocupación del orbital mas bajo, $f_0 = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_0 - \mu)} - 1}$, aumenta sin limite cuando μ se acerca a ε_0 desde abajo: $f_0 \rightarrow \infty$ cuando $\mu \rightarrow \varepsilon_0$.

La ocupación de los demás orbitales tienen un tope. Aumentan hasta un valor máximo finito $f_{i\max} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \varepsilon_0)} - 1} < \infty$ alcanzado cuando $\mu = \varepsilon_0$.

Incluso la ocupación de *todos* los orbitales de energía mayor que ε_0 juntos tiene un tope. Para un recipiente grande el numero de partículas en estos orbitales, que llamamos "excitados", es menor que

$$N_e = \int_{\varepsilon_0}^{\infty} f_{\max} D d\varepsilon$$

donde $D = 2\pi \gamma V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \varepsilon^{1/2} = C \varepsilon^{1/2}$ es la densidad de orbitales en energía.

$$\text{Entonces } N_e = \int_{\varepsilon_0}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \varepsilon_0)} - 1} C \varepsilon^{1/2} d\varepsilon = \frac{C}{\beta^{3/2}} \int_0^{\infty} \frac{1}{e^x - 1} (x + \beta\varepsilon_0)^{1/2} dx \quad (x = \beta(\varepsilon - \varepsilon_0))$$

$\frac{C}{\beta^{3/2}} = 2\pi \gamma V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} (k_B T)^{3/2} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \gamma n_Q V$ entonces la máxima concentración de partículas en orbitales excitadas es

$$n_e = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \gamma n_Q \int_0^{\infty} \frac{1}{e^x - 1} (x + \beta\varepsilon_0)^{1/2} dx.$$

Cuando el volumen del recipiente tiende a infinito $\varepsilon_0 \rightarrow 0$. Así, para recipientes grandes

$$n_e = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \gamma n_Q \int_0^{\infty} \frac{1}{e^x - 1} x^{1/2} dx = 2,612 \gamma n_Q$$

y el numero de partículas que caben en los orbitales excitados es

$$N_e = 2,612 \gamma n_Q V = 2,612 \gamma \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{3/2} V$$

Ahora considera un gas con un numero N dado de partículas Si la temperatura es suficientemente alta $N < N_e$, y las partículas podrían todos estar en los orbitales excitados, o algunos allí y otros en el orbital fundamental 0.

Pero en temperaturas suficientemente bajas $N > N_e$, lo cual implica que las partículas no caben todos en los orbitales excitados. Al menos $N - N_e$ de ellos deben estar en el orbital fundamental.

La temperatura de Einstein T_E es la temperatura en que $N = N_e$.

$$T_E = \frac{h^2}{2\pi m k_B} \left(\frac{n}{2,612 \gamma} \right)^{2/3}$$

$$N_e = N \left(\frac{T}{T_E} \right)^{3/2}$$

y el número mínimo de partículas en el orbital fundamental es

$$N_0 = N - N_e = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_E} \right)^{3/2} \right]$$

Por ejemplo, si la temperatura es $T = 1/4 T_E$ al menos $100\% \times \left(1 - \left(\frac{1}{4} \right)^{3/2} \right) = 87,5\%$

de las partículas deben estar estrictamente en el orbital fundamental. Aun si el recipiente es muy grande y los primeros orbitales excitados tienen una energía muy, muy poco mayor que el fundamental.

La condensación de Bose-Einstein ocurre en condiciones opuestas a las del régimen clásico. En el gas ideal que estamos tratando las partículas tienen γ estados internos y el estado interno no contribuye a la energía (la energía es toda cinética del centro de masa). Entonces la función de partición interna es $Z_{\text{int}} = \gamma$. Hemos visto que el gas está en régimen clásico, es decir, bien descrito por teoría clásica, cuando la concentración es mucho menor a $n_Q Z_{\text{int}}$, entonces cuando $n \ll n_Q \gamma$ en nuestro gas. Por otro lado la condensación BE se da cuando $n > 2,612 n_Q \gamma$.

Hemos hablado solo de cotas superiores e inferiores, pero para un sistema grande - de volumen y número de partículas grande - las cotas N_e y N_0 son realmente el número de partículas en los orbitales excitados y en el orbital fundamental respectivamente:

El motivo fundamental es que para un gas de muchas partículas a temperatura $T < T_E$ el potencial químico μ debe estar mucho más cerca a ϵ_0 , la energía del orbital fundamental, que ϵ_0 es a ϵ_1 , la energía del primer nivel excitado.

DIBUJO μ , ϵ_0 , ϵ_1 dibujados como niveles de energía.

¿Porque?

Supongamos que $T < T_E$ y que entonces $N_0 = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_E} \right)^{3/2} \right]$ es un número muy grande si N lo es.

Sabemos que $f_0 = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_0 - \mu)} - 1} > N_0$. Entonces $e^{\beta(\varepsilon_0 - \mu)} < 1 + \frac{1}{N_0}$

$$\Rightarrow \beta(\varepsilon_0 - \mu) < \frac{1}{N_0}$$

$$\Rightarrow \varepsilon_0 - \mu < \frac{\tau}{N_0} = \frac{k_B T}{n \left[1 - \left(\frac{T}{T_E} \right)^{3/2} \right]} \frac{1}{V} = \frac{h^2}{2m} \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{2,612 \gamma} \right)^{2/3} \frac{\alpha}{1 - \alpha^{3/2}} \frac{1}{n^{1/3}} \frac{1}{V}$$

con $\alpha = T/T_E$.

Mientras tanto, en un cubo de lado L

$$\varepsilon_1 - \varepsilon_0 = \frac{1}{2m} \left(\frac{h}{2L} \right)^2 [(1^2 + 1^2 + 4^2) - (1^2 + 1^2 + 1^2)] = \frac{3}{2m} \left(\frac{h}{2L} \right)^2$$

Si mantenemos a las cantidades intensivas n y T constantes entonces $\varepsilon_0 - \mu$ va como $1/L^3$ mientras $\varepsilon_1 - \varepsilon_0$ va como $1/L^2$. Cuando el volumen es suficientemente grande $\varepsilon_1 - \varepsilon_0 \gg \varepsilon_0 - \mu$.

Ponemos números típicos: $\frac{\varepsilon_0 - \mu}{\varepsilon_1 - \varepsilon_0} < \frac{4}{3} \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{2,612 \gamma} \right)^{2/3} \frac{\alpha}{1 - \alpha^{3/2}} \frac{1}{n^{1/3}} \frac{1}{L}$. Si ponemos $\gamma = 1$, $\alpha = 0,99$ - temperatura solo 1% menos que T_E , y $n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ - un valor típico para los primeros condensados en trampas magneto-ópticas. Entonces

$$\frac{\varepsilon_0 - \mu}{\varepsilon_1 - \varepsilon_0} < \frac{1,48 \times 10^{-4} \text{ cm}}{L}$$

Un condensado de 1998 medía $250 \mu\text{m}$ en diámetro (en una trampa armónica). Entonces $\frac{\varepsilon_0 - \mu}{\varepsilon_1 - \varepsilon_0} < 1/100$. Efectivamente, μ es mucho mas cerca a ε_0 que ε_0 es a ε_1 . Y esto se hace mucho mas extremo en la medida que el tamaño L del condensado aumenta.

DIBUJO Grafica de μ vs. T para sistema de volumen grande.

Pero si μ es tan extraordinariamente pegado a ε_0 entonces $f_i = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \varepsilon_0)} e^{\beta(\varepsilon_0 - \mu)} - 1}$ va ser extraordinariamente pegado a $f_{imax} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \varepsilon_0)} - 1}$, y el numero de partículas en orbitales excitados a N_e .

Se puede poner una cota de la siguiente manera:

$$f_i = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \varepsilon_0)} e^{\beta(\varepsilon_0 - \mu)} - 1} = \frac{1}{(1 + 1/f_{imax})(1 + 1/f_0) - 1} = \frac{f_0 f_{imax}}{f_0 + f_{imax} + 1} .$$

Pero si $a < b$ entonces $\frac{a-1}{b-1} < \frac{a}{b}$. Así $f_i > \frac{f_0 - 1}{f_0 + f_{imax}} f_{imax} \geq \frac{f_0 - 1}{f_0 + f_{1max}} f_{imax}$,

porque $f_{1max} \geq f_{imax}$ para todo orbital i salvo el fundamental.

La concentración de partículas en orbitales excitados es entonces mayor que

$$\frac{f_0 - 1}{f_0 + f_{1max}} n_e$$

Hemos visto que $\frac{\varepsilon_0 - \mu}{\varepsilon_1 - \varepsilon_0} \rightarrow 0$ en el limite $V \rightarrow \infty$ cuando $T < T_E$. Entonces

$$\frac{f_{1max}}{f_0} = \frac{e^{\beta(\varepsilon_0 - \mu)} - 1}{e^{\beta(\varepsilon_1 - \varepsilon_0)} - 1} \rightarrow 0 .$$

En las mismas circunstancias $f_0 > N_0 \rightarrow \infty$, así $\frac{f_0 - 1}{f_0 + f_{1max}} \rightarrow 1$, y la concentración de partículas en orbitales excitados debe acercarse a n_e .

¿Porque los bosones condensan?

A Einstein le sorprendió que se puede producir una transición de fase sin que haya interacción. Relativo al comportamiento de partículas distinguibles sin interacción bosones libres tienen una suerte de pseudo atracción, o “gregariedad”, entre si, porque el numero de estados en los cuales las partículas ocupan orbitales distintos es mucho menor para bosones que para partículas distinguibles. Un sistema de bosones sin interacción con dos orbitales, A y B , tiene 3 estados de dos partículas: $n_A=2, n_B=0$, $n_A=0, n_B=2$, $n_A=1, n_B=1$. Mientras tanto 2 partículas distinguibles pueden ocupar a los dos orbitales en 4 estados distintos: 1 y 2 en A , 1 y 2 en B , 1 en A y 2 en B , 2 en A y 1 en B . Así hay mas estados con las partículas en orbitales distintos si las partículas son distinguibles. El efecto es mas pronunciado si hay un numero, N , grande de partículas y un numero grande de orbitales. Tanto para bosones como para partículas distinguibles hay un solo estado en el cual todas las N partículas están en un solo orbital C . Pero si las partículas son distribuidas sobre un conjunto $\{C_i\}_{i=1}^N$ de N orbitales distintas hay $N!$ estados si las partículas son distinguibles y solo un estado si son bosones. Esto hace que en sumas sobre ensembles los estados en que las partículas están juntos van a tener mucho mas peso para bosones que para partículas distinguibles.

Distribución del condensado en el espacio

Las partículas en el condensado BE están todos en el orbital fundamental. Entonces la densidad en el espacio de partículas del condensado es $N_0 |\psi_0|^2$, con ψ_0 la función de onda (normalizada) del orbital fundamental. En una caja cubica de lado L la densidad es entonces

$$N_0 \left(\frac{2}{L} \right)^3 \sin^2 \frac{x}{2L} \sin^2 \frac{y}{2L} \sin^2 \frac{z}{2L}$$

(En una trampa magneto óptica es una función algo distinta.) Las partículas en el condensado no están distribuidas uniformemente en el recipiente. En un recipiente de paredes duras, sin potencial en su interior, las partículas en orbitales excitados si son distribuidos uniformemente.

Se han producido condensados que están rotando, que entonces tienen función de onda con momento angular no cero. Estos son vórtices de condensado BE.

Se han producido también condensados con momento lineal no cero, y se ha mostrado interferencia entre condensados.

Condensados de Bose Einstein reales

Condensados de Bose-Einstein reales suelen ser de partículas que interactúan al menos un poco. En el caso de los condensados en de átomos en trampas las densidades son tan bajas que las interacciones se pueden tratar como perturbaciones. Entonces la densidad de partículas todavía se puede escribir como $N_0 |\psi_0|^2$, pero $N_0^{1/2} \psi_0$ satisface una generalización no-lineal de la ecuación de Schroedinger, llamada la ecuación de Gross-Pitaevski.

En el caso de helio líquido las interacciones son tan grandes que según yo se, todavía no se puede calcular el comportamiento esperado. Pero la transición a superfluidez ocurre a una temperatura cercana a la temperatura de Einstein y tiene también la coexistencia de un fluido normal, que corresponde a la población de partículas en los orbitales excitados y un súperfluido descrito por una función de onda, que corresponde al condensado. Es posible entonces que el mecanismo de condensación Bose-Einstein tiene un rol en la transición a superfluidez.