CONDENSACIÓN DE BOSE-EINSTEIN EN UN POTENCIAL ARMÓNICO

María Collado Caballero

Isabel Mª Martín Ríos

ÍNDICE

CONDENSACIÓN DE BOSE-EINSTEIN EN UN POTENCIAL ARMÓNICO

INTRODUCCIÓN

Este trabajo va a consistir en la realización de un programa en Mathematica. Una vez construido el programa iremos calculando distintas magnitudes, así como variando algunos de los parámetros implicados.

Haremos una representación gráfica de dichos parámetros y los interpretaremos físicamente.

FUNDAMENTO TEÓRICO

Partiremos de un potencial armónico cuya energía viene dada por:

$$\varepsilon(n_1, n_2, n_3) = \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega$$

En esta expresión realizaremos un cambio para simplificar los cálculos, tomaremos:

$$k = n_1 + n_2 + n_3$$

$$\hbar\omega = 1$$

Con lo que tomaremos $\hbar\omega$ como unidad de energía.

Por tanto la expresión final que introduciremos en el programa será:

$$\varepsilon(k) = k + \frac{3}{2} \qquad (1)$$

Por otra parte, lo que queremos ver es el número total de partículas, que nos da la condición de ligadura para obtener μ, para ello utilizaremos la siguiente expresión:

$$N(T,\mu,k) = \sum_{k=0}^{\infty} g(k) n(k,T,\mu)$$

Donde:

$g(k)=\frac{(k+1)(k+2)}{2}$ Es el grado de degeneración de los niveles energéticos, que como podemos ver fácilmente que es 1 para el nivel fundamental.

$n(k,T,\mu)=\frac{1}{e^{(\varepsilon(k)-\mu)/T}-1}$ Es el número medio de partículas para la estadística de Bose-Einstein. Hemos tomado $k_B=1$ para definir la unidad de temperatura. De aquí en adelante mediremos μ en unidades de $\hbar\omega$ y la temperatura en unidades de $\hbar\omega/k_B$.

En nuestro caso tomaremos el límite superior de la suma no como infinito, si no como $k_{\max}$ ya que truncaremos la serie hasta un cierto número. Esto se debe a que no nos interesa conocer el resultado para un número muy grande de partículas, necesitamos ver la variación para un número determinado que pueda darnos resultados aproximados fiables.

En este caso, lo que nos interesa obtener es una expresión para μ que la relacione con T y N y ver como varía ésta al modificarlas.

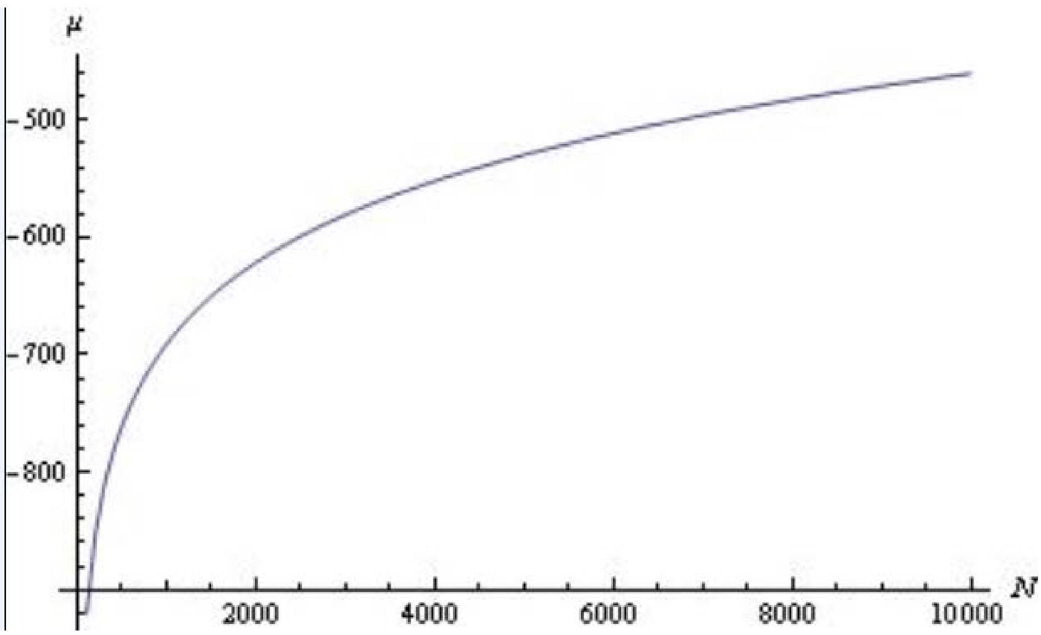
Sabemos de antemano que el valor de μ tiene que ser menor que $3/2$ ya que en el estado fundamental, para $k=0$ la expresión (1) toma el valor de $3/2$. Por ello, μ no puede ser mayor que el valor de la energía en el estado fundamental.

RESULTADOS OBTENIDOS

Modificación de N

Variamos el número de partículas y vemos como varía el valor que nos devuelve el programa para μ. Fijando $T = 100$ y $k_{max} = 1000$

N	μ
100	-920.761
500	-759.822
800	-712.826
1000	-690.514
2000	-621.212
4000	-551.922
6000	-511.401
8000	-482.658
10000	-460.369

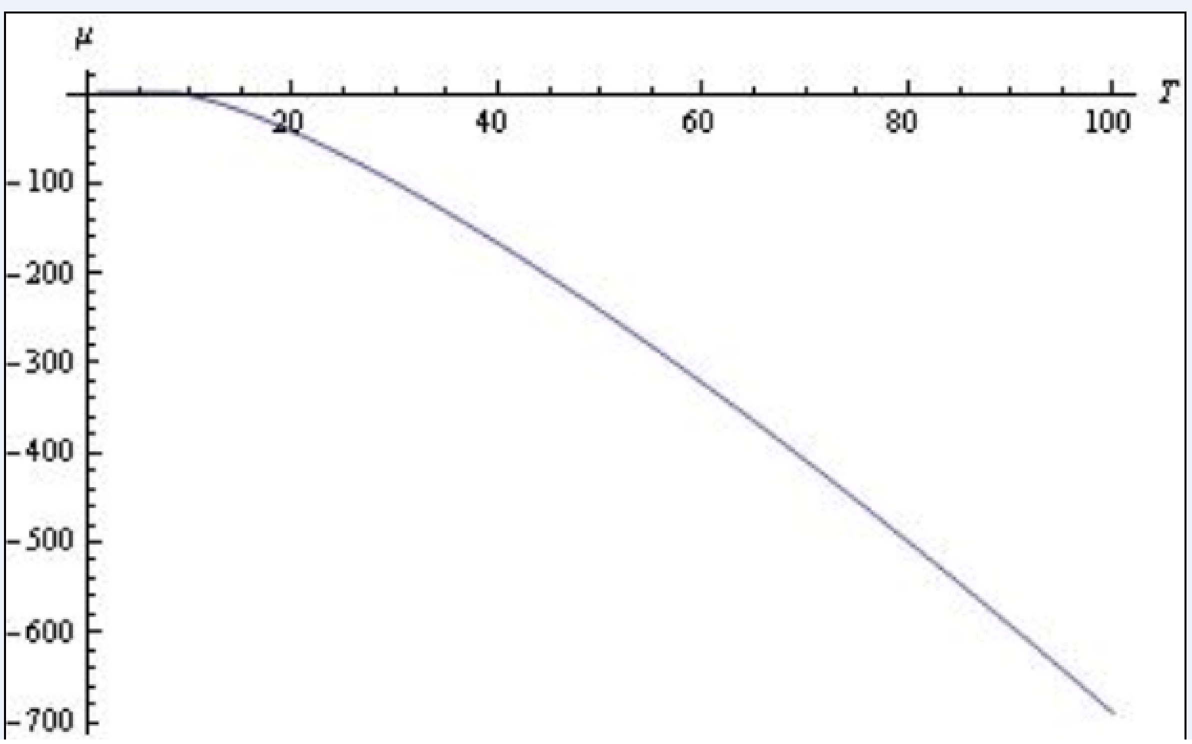


Como podemos ver en la gráfica al ir aumentando el número de partículas, el valor de μ va aumentando, tendiendo a converger a un cierto valor asintótico. También se observa que inicialmente crece más rápidamente que para valores mayores del número de partículas, puesto que en este caso se va estabilizando asintóticamente.

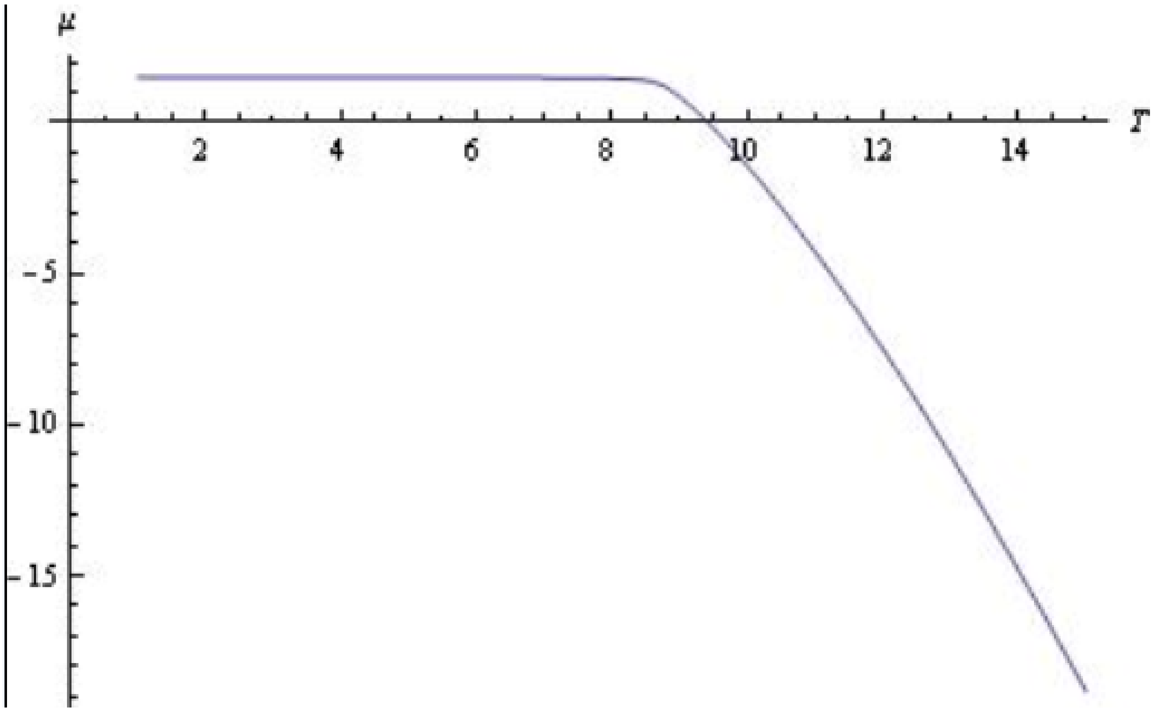
Modificación de T

Variamos la temperatura y vemos cómo varia el valor que nos devuelve el programa para μ. Fijando $N = 1000$ y $k_{max} = 1000$

T	μ
100	-690.514
50	-241.463
20	-41.8993
10	-1.42847
8	1.46325
6	1.49067
4	1.49545
2	1.49796
1	1.499



La gráfica obtenida tiene la forma esperada, puesto que aparece una temperatura que es próxima a 8 (para N=1000) en la cual el potencial químico alcanza su mayor valor posible, es decir $\frac{3}{2}$. Esta temperatura se llama **TEMPERATURA DE BOSE O DE CONDENSACIÓN.**



Como podemos comprobar la temperatura de Bose es aproximadamente de 9.

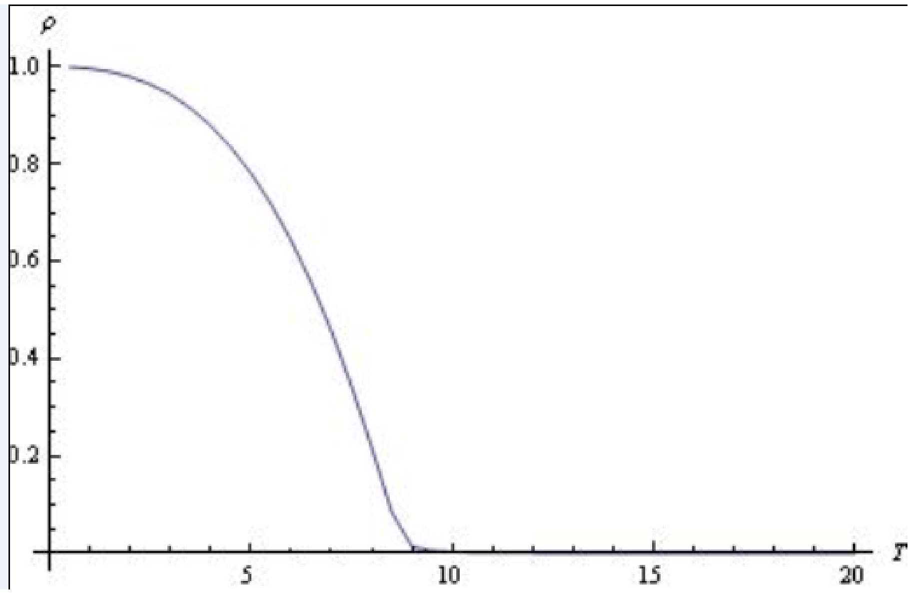
Cálculo de la fracción de partículas en el estado fundamental.

Calculamos la fracción del número de partículas que se encuentran en el estado fundamental para diferentes temperaturas.

$$\rho(T,N,k)=\frac{n(0,T,\mu(T,N,k))}{N}$$

Ahora veremos los resultados para N=1000.

T	P
100	9.88668×10^{-7}
50	7.81682×10^{-6}
20	0.0001289
10	0.00293912
8	0.217214
6	0.64266
4	0.878815
2	0.979279
1	0.996244



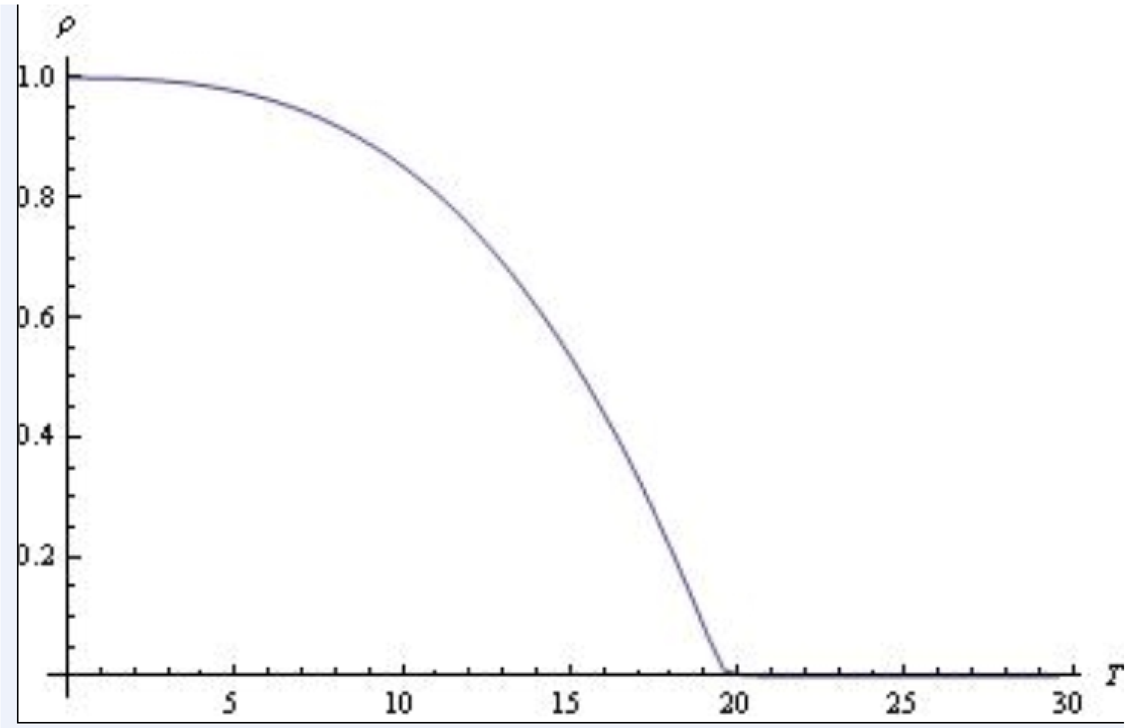
Podemos ver en la gráfica anterior, como era de esperar, para $T < T_0$ bajas temperaturas, la mayoría de las partículas se encuentran en el nivel fundamental, es decir, existe un número macroscópico de partículas que se encuentran en el mismo estado fundamental.

Aquí podemos hacer un símil con un edificio: cuanto mayor sea el número de plantas (temperatura) mayor será la ocupación de las mismas (estados excitados), de modo que si sólo hubiese una única planta (temperatura mínima) todas las personas se encontrarían en la misma planta (estado fundamental).

También se observa que la temperatura de Bose se encuentra entre 9 y 10.

Ahora veremos los resultados para N=10000.

T	P
100	9.96404×10^{-7}
50	8.32596×10^{-6}
20	0.00213778
10	0.853029
8	0.921154
6	0.964181
4	0.987861
2	0.997925
1	-0.000158225

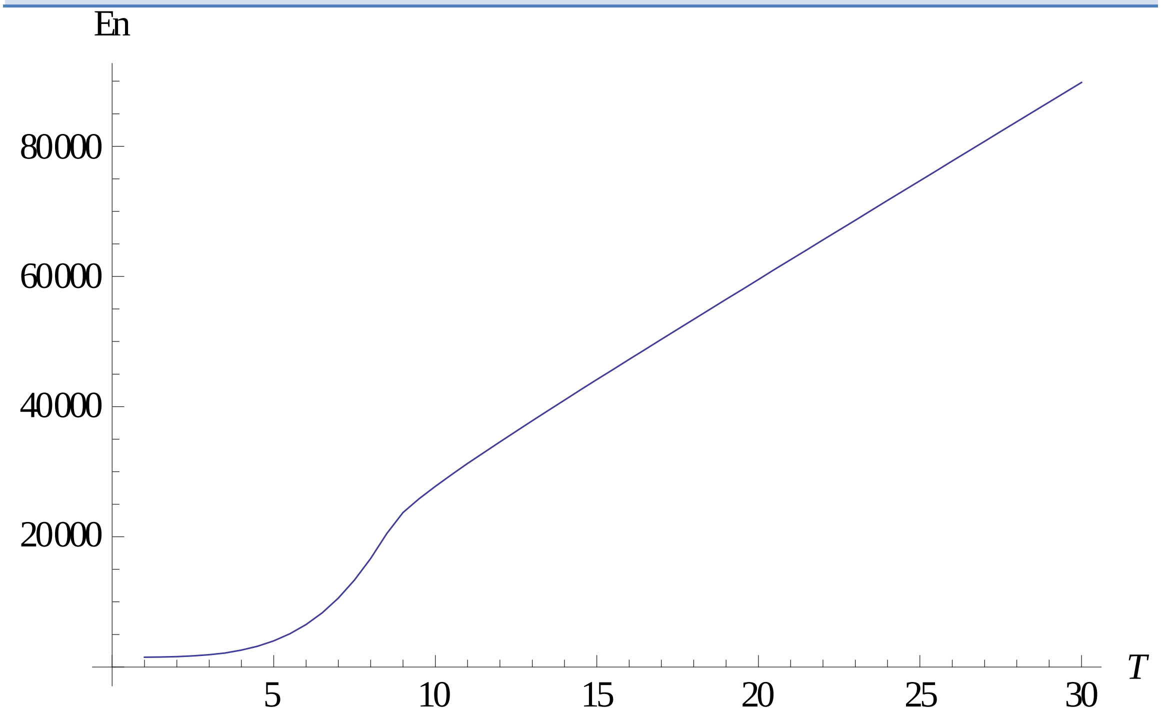


Observamos, en este caso, al disminuir la temperatura, para un número mayor de partículas, la gráfica sufre un cambio significativo, puesto que se ha desplazado la temperatura a la que las partículas comienzan a promocionar hacia el estado fundamental.

Cálculo de la energía.

Ahora haremos un cálculo de la energía de las partículas y para ello fijaremos el número de partículas en 1000.

T	E
0.1	1500.
1.5	1531.37
3	1872.87
5	4014.42
8	16666.3
10	27751.2
15	44145.8
20	59535.4
30	89799.

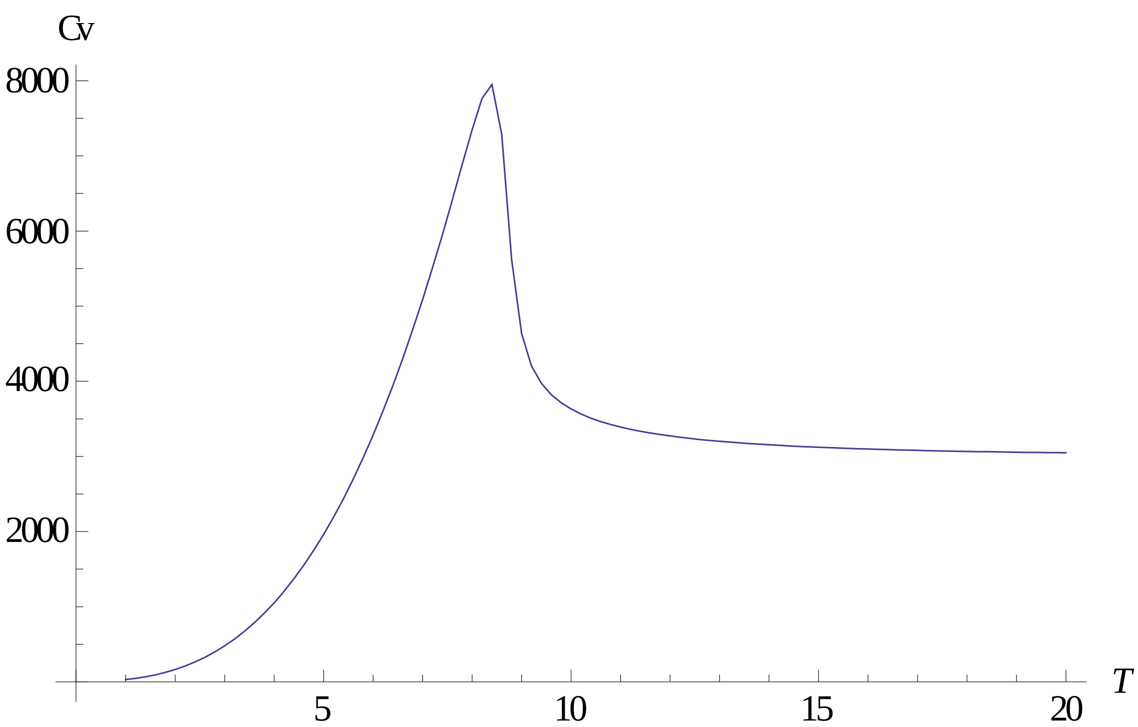


En este caso, observamos que a una cierta temperatura T_0 tenemos un punto de inflexión, que está en la temperatura de Bose, que se encuntra en torno a 9.

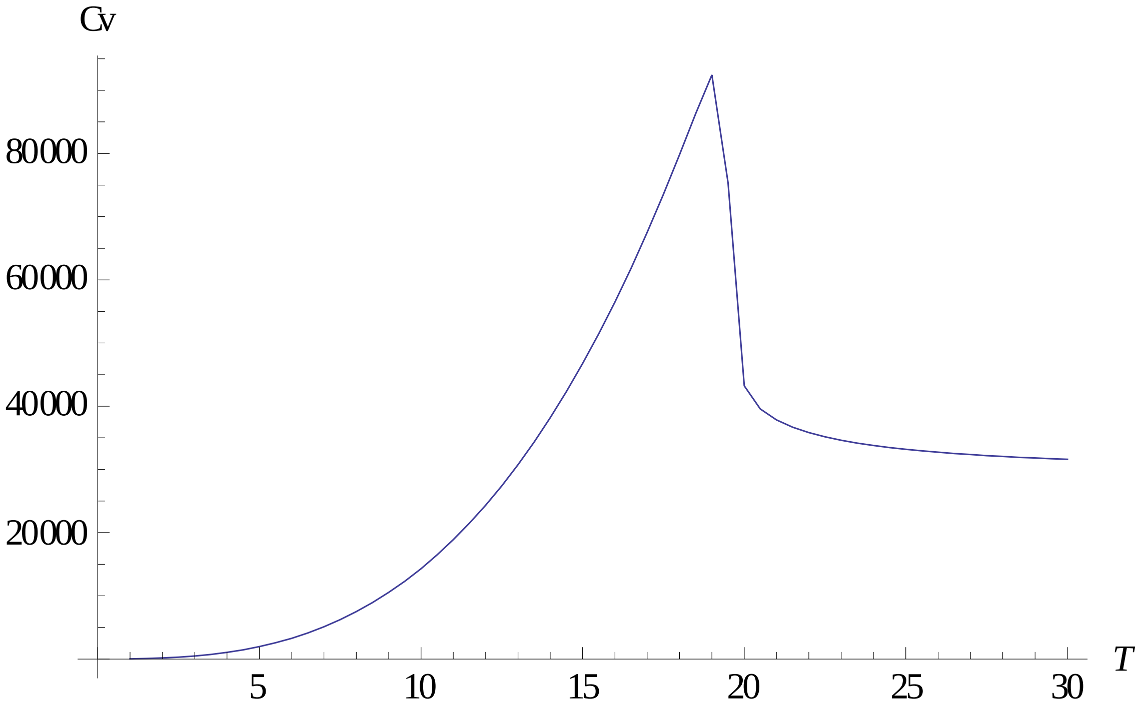
Cálculo de la capacidad calorífica

En este caso fijaremos N=1000.

T	Cv
0.1	0.20748
1.5	78.7935
3	478.033
5	1961.22
8	7347.07
10	3631.09
15	3122.02
20	3048.02
30	3013.72



Para N=10000 partículas.



Un punto importante a resaltar es que c_v respecto de la temperatura, como puede deducirse, se produce un salto discontinuo para una temperatura igual a la temperatura de Bose, que es lo que esperábamos.

También podemos observar que al aumentar el número de partículas de 1000 a 10 000, la temperatura de Bose se ha desplazado.

APÉNDICE

Cálculo del potencial químico

```
ϵ[k_] := k + 3/2
```

$$g[k\_] := \frac{(k+1)(k+2)}{2}$$

$$n[k\_, T\_, \mu\_] := \frac{1}{e^{(\epsilon[k]-\mu)/T} - 1}$$

$$S[T\_, \mu\_, kmax\_] := \sum_{k=0}^{kmax} g[k]\, n[k, T, \mu]$$

```
μini := 1.49

μsol[T_, N_, kmax_] := FindRoot[S[T, μ, kmax] == N, {μ, μini}][[1, 2]]
```

Cálculo de la fracción de partículas en el estado fundamental

```
p0[T_, N_, kmax_] := n[0, T, μsol[T, N, kmax]] / N

p0[10, 1000, 100]

0.0029587

p0[8, 1000, 100]

0.217379
```

Cálculo de la energía

$$En[T\_, \mu\_, kmax\_] := \sum_{k=0}^{kmax} g[k]\, n[k, T, \mu]\, \epsilon[k]$$

```
Ensol[T_, N_, kmax_] := En[T, μsol[T, N, kmax], kmax]

Ensol[30, 1000, 1000]

89799.
```

Cálculo de la capacidad calorífica

```
Cv[T_, N_, kmax_] := (Ensol[T + .1, N, kmax] - Ensol[T, N, kmax]) / .1

Cv[30, 1000, 1000]

3013.72
```