

# Uma interpretação simples para os condensados de Bose-Einstein

(*A simple interpretation for the Bose-Einstein condensates*)

B.F. Rizzuti<sup>1</sup>, F.L. Forgerini

*Instituto de Saúde e Biotecnologia, ISB, Universidade Federal do Amazonas, Coari, AM, Brasil*

Recebido em 5/11/2014; Aceito em 19/12/2014; Publicado em 31/3/2015

Os condensados de Bose-Einstein foram previstos teoricamente nos anos de 1924-25. Contudo, sua observação experimental só foi obtida em 1995, laureando seus descobridores com o prêmio Nobel de 2001. No ano de 2015 comemora-se o aniversário de 90 anos de sua previsão teórica e 20 anos de sua realização experimental. Os condensados de Bose-Einstein têm sido usados nos mais variados contextos, que vão da matéria condensada à astrofísica. Este trabalho será dedicado a uma interpretação intuitiva para a condensação. Discutiremos também como modelar armadilhas modernas que aprisionam partículas de um gás de bósons fracamente interagentes para formar os condensados.

**Palavras-chave:** condensados de Bose-Einstein, mecânica estatística, função partição.

The Bose-Einstein condensates were theoretically predicted in 1924-25. However, the experimental observation was reported in 1995, laureating their discoverers with the 2001 Nobel prize. The year of 2015 celebrates the ninetieth anniversary of the theoretical prediction and the twentieth anniversary of its experimental realization. The Bose-Einstein condensates have been used in different contexts, from condensed matter to astrophysics. This work is dedicated to provide a naïve interpretation of the condensation process. We will also model modern traps which imprison the particles of a weak interacting gas of bosons to form the condensates.

**Keywords:** Bose-Einstein condensates, statistical mechanics, partition function.

## 1. Introdução

Uma das grandes descobertas da física estatística foi a condensação de Bose-Einstein, que de maneira simplista pode ser entendida como a tendência dos constituintes de um gás de bósons em ocupar o seu menor estado de energia a baixas temperaturas [1, 2]. O próprio Bose enviou um artigo para Einstein pedindo sua aprovação para publicação, que reconheceu o efeito da condensação [3]. Revisões modernas dos trabalhos de Bose e de Einstein podem ser encontradas em [4]. Foram necessários aproximadamente 70 anos para que o efeito de condensação pudesse ser observado, numa sequência de experimentos realizados em 1995 [5]. Os condensados de Bose-Einstein (CBE) como são conhecidos ganharam um papel central na física contemporânea por diversas razões, que incluem, entre outras:

a) Eles ocorrem a temperaturas próximas ao zero absoluto, num regime propício para efeitos que rom-

pem com a termodinâmica usual, próximo ao limite da terceira lei.

b) Seguindo esta linha, próximo ao zero absoluto os bósons estão na iminência de violar o princípio da incerteza: uma vez que não há mais agitação térmica conseguiríamos detectar posição e momento do condensado. Isto significa testar limites de validade para a mecânica quântica.

c) A baixas temperaturas, um gás de bósons aprisionado é bem descrito pela equação de Gross-Pitaevskii [6]. Numa certa aproximação, os condensados têm sua evolução temporal descrita por uma equação do tipo de Dirac. Dessa forma, os CBE foram utilizados para se observar experimentalmente o chamado *Zitterbewegung* [7-9].<sup>2</sup>

d) O fenômeno da localização de Anderson [11] tem sido estudo de intensa pesquisa, veja por exemplo [12]. Foram utilizados átomos ultra-frios de um CBE para

<sup>1</sup>E-mail: brunorizzuti@ufam.edu.br.

<sup>2</sup>*Zitterbewegung* foi um movimento oscilatório dos elétrons previsto teoricamente por Schrödinger ao analisar a dinâmica dos operadores de posição oriundos da equação de Dirac. Além do movimento retilíneo e uniforme, os elétrons apresentariam também este movimento oscilatório com amplitude da ordem do comprimento de onda Compton do elétron ( $\sim 10^{-12}$  m) e frequência também da ordem de frequência Compton do elétron ( $\sim 10^{20}$  s<sup>-1</sup>). Estes valores poderiam impedir a detecção experimental do *Zitterbewegung*. Para mais detalhes, veja a Ref. [10].

observação deste efeito [13].

e) Recentemente foi sugerido uma possível condensação em objetos compactos da astrofísica, em particular, nas estrelas de nêutrons [14].

Há também razões pedagógicas para se estudar os condensados: estudantes ainda na graduação dos bacharelados em ciências exatas têm oportunidade de entrar em contato com assuntos na fronteira do conhecimento, como os itens (c), (d) e (e) acima. Os únicos pré-requisitos necessários para se analisar a condensação de Bose-Einstein são fundamentos de estatística quântica. O estudo de tópicos modernos é motivante para alunos em geral, já que ao longo de um bacharelado em física, por exemplo, são fornecidos os pilares básicos para carreiras científicas incluindo mecânicas clássica e quântica, eletromagnetismo e física estatística, com pouca ênfase em física contemporânea.

Nosso objetivo neste trabalho será mostrar como ocorre a condensação. O intuito aqui não é substituir a literatura padrão do assunto [3, 15–18] e sim fornecer uma interpretação intuitiva e introdutória para os CBE. Apresentaremos também uma análise teórica mais realista para armadilhas modernas onde estuda-se o gás de bósons fracamente interagentes.

## 2. Descrição de um sistema com $N$ partículas com energia discreta

Vamos assumir daqui para frente que o leitor tenha certa familiaridade com fundamentos de física estatística quântica. Do contrário, direcionamos o leitor para a Seção IV (ou Conclusão), onde discutimos a sentido físico dos CBE. Os cálculos desta Seção e das Seções III, IV e V serão apresentados por completude.

Consideremos um gás de  $N$  partículas não-interagentes de massa  $m$  em uma caixa cúbica com aresta  $L$  (seu volume é dado por  $V = L^3$ ). Da mecânica quântica [15], sabemos que a energia do sistema é discreta,

$$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i \hat{n}_i, \quad (1)$$

onde  $\hat{H}$  é o hamiltoniano do sistema,  $\varepsilon_i$  corresponde aos valores de energia e  $\hat{n}_i$  é o operador número de partículas.  $\hat{n}_i$  atua num espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$  “dividido” em sub-espacos de número de partículas,  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \dots$  de forma que cada vetor de estado tem a seguinte estrutura,

$$|\psi\rangle = |n_1\rangle \oplus |n_2\rangle \oplus \dots = |n_1, n_2, \dots\rangle. \quad (2)$$

Por exemplo,  $|\psi\rangle = |0, 2, 5, 0, 0, \dots\rangle$  representa duas partículas em  $\mathcal{H}_2$ , cinco partículas em  $\mathcal{H}_3$ . Assim,  $\hat{n}_1|\psi\rangle = 0$ ,  $\hat{n}_2|\psi\rangle = 2|\psi\rangle$ , etc. Esta construção é válida

<sup>3</sup>Descrevemos o operador densidade com mais detalhes no Apêndice A.

<sup>4</sup>É costume também usar a letra  $Z$  para a função de partição pois no fundo estamos calculando a *soma de estados* do sistema, que em alemão traduz-se por *Zustandsumme* [3, 15]. Ao longo do texto, usaremos a letra  $\Xi$  por tratar-se do ensemble grande canônico.

para bósons. Para férmions, pelo princípio da exclusão de Pauli só podemos ter zero ou uma partícula em cada  $\mathcal{H}_i$ . Neste caso, o espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$ , como construído acima, é conhecido na literatura como espaço de Fock [18]. Esta é a construção que permite tratar número de partículas como um observável.

## 3. Fundamentos de estatística quântica aplicados ao gás de bósons

Em estatística quântica, o valor esperado de um observável  $A$  é dado por

$$\langle \hat{A} \rangle = Tr(\rho \hat{A}), \quad (3)$$

onde  $\hat{A}$  é o operador que representa o observável,  $Tr$  denota o traço do operador entre parêntesis e  $\rho$  corresponde ao operador densidade.<sup>3</sup> Como trataremos uma condensação, é natural utilizar o *ensemble* grande canônico, uma vez que há variação do número de partículas passando do estado gasoso para o condensado. Assim,

$$\rho = \frac{e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}}{Tr(e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})})}. \quad (4)$$

$\beta = (k_B T)^{-1}$  com  $k_B$  a constante de Boltzmann,  $T$  a temperatura do sistema e  $\mu$  é o potencial químico. Por fim,

$$\hat{N} = \sum_i \hat{n}_i \quad (5)$$

denota o operador número total de partículas. Para o caso em questão, devido às Eqs. (1) e (5), temos

$$\rho = \frac{e^{-\beta \sum_i (\varepsilon_i - \mu) \hat{n}_i}}{Tr(e^{-\beta \sum_i (\varepsilon_i - \mu) \hat{n}_i})}. \quad (6)$$

Valores esperados podem ser calculados diretamente a partir da função partição,<sup>4</sup>

$$\Xi = Tr(e^{-\beta \sum_i (\varepsilon_i - \mu) \hat{n}_i}) \equiv Tr(e^{-\beta \hat{H} - \alpha \hat{N}}), \quad (7)$$

pois, por exemplo,

$$\langle \hat{H} \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \Xi; \quad \langle \hat{N} \rangle = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \Xi, \quad (8)$$

onde usamos  $\alpha \equiv -\mu\beta$ .

Usando a base  $|n_i\rangle$  de  $\mathcal{H}$  de autovetores de  $\hat{N}$  (e também de  $\hat{H}$ ), temos (os detalhes estão no Apêndice B)

$$\Xi = Tr(e^{-\beta \sum_i \varepsilon_i \hat{n}_i - \alpha \sum_i \hat{n}_i}) = \prod_i \sum_{n=0}^{+\infty} e^{-(\beta \varepsilon_i + \alpha)n}. \quad (9)$$

Tomando o logaritmo de  $\Xi$  (veja a Eq. (8)) e levando em conta que a série (9) é a série geométrica, temos,

$$\ln \Xi = - \sum_i \ln(1 - e^{-(\beta\varepsilon_i + \alpha)}). \quad (10)$$

No estado fundamental, quando  $T \rightarrow 0$ , os bósons têm maior probabilidade de serem encontrados em seu menor estado de energia. Assim, separamos do somatório (10) o termo com  $i = 0$ , quando  $\varepsilon_0 = 0$ ,

$$\ln \Xi = - \ln(1 - e^{-\alpha}) - \sum_{i=1}^{+\infty} \ln(1 - e^{-(\beta\varepsilon_i + \alpha)}). \quad (11)$$

Para entender a expressão acima, poderíamos fazer uma analogia com uma mistura que contenha duas fases da mesma substância, sendo cada uma das fases descritas pelos dois termos no lado direito da Eq. (11). Por exemplo, consideremos um recipiente contendo água nas formas líquida e gasosa. A fase líquida (condensada) corresponderia ao primeiro termo e o vapor ao segundo termo.

Nos interessa analisar o comportamento do termo correspondente à fração com  $\varepsilon_i \neq 0$  do gás de bósons. Para estimar seu valor, vamos tomar o limite termodinâmico, que consiste em assumir que  $N, V \rightarrow +\infty$  com a fração  $N/V$  constante. Deste modo pode-se aproximar o somatório em (11) por uma integral. Precisamos neste caso determinar a densidade de estados em função da energia do sistema. Consideramos o gás como partículas livres em uma caixa cúbica de aresta  $L$ . Usando condições de contorno periódicas, as funções de onda têm a forma

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}; \quad \vec{k} = \frac{2\pi}{L}\vec{n} = \frac{2\pi}{L}(n_x\hat{i} + n_y\hat{j} + n_z\hat{k}), \quad (12)$$

com  $n_x, n_y$  e  $n_z$  inteiros não negativos. A energia por sua vez é dada por

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{h^2}{2mL^2}\vec{n}^2 \Leftrightarrow \vec{n}^2 = \frac{2mEL^2}{h^2}, \quad (13)$$

onde usamos  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ . A expressão (13) fornece a estrutura geométrica do espaço de estados: fixado  $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$ , temos um esfera de raio  $R = \frac{\sqrt{2mEL}}{h}$ . Logo, o volume  $\Omega$  no espaço de estados com energia menor ou igual a  $E$  é dado por

$$\Omega = \frac{4\pi}{3} \left( \frac{\sqrt{2mEL}}{h} \right)^3. \quad (14)$$

Por fim, a densidade de estados toma a forma

$$\omega(E) = \frac{\partial\Omega}{\partial E} = 2\pi \left( \frac{L}{h} \right)^3 (2m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E}. \quad (15)$$

Portanto,  $\sum_{i=1}^{+\infty} \ln(1 - e^{-(\beta\varepsilon_i + \alpha)})$  tende a

$$2\pi \left( \frac{L}{h} \right)^3 (2m)^{\frac{3}{2}} \int_0^{+\infty} \ln(1 - e^{-(\beta E + \alpha)}) \sqrt{E} dE. \quad (16)$$

Mas a série para o logaritmo é conhecida,

$$\ln(1 - x) = - \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{x^l}{l}; \quad |x| < 1. \quad (17)$$

Então,

$$\ln(1 - e^{-\alpha} e^{-\beta E}) = - \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{e^{-\alpha l} e^{-\beta E l}}{l}. \quad (18)$$

Assim, a integral em (16) é reescrita como

$$- \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{e^{-\alpha l}}{l} \int_0^{+\infty} e^{-\beta E l} \sqrt{E} dE. \quad (19)$$

Integrando e retornando à expressão (11), chegamos a

$$\ln \Xi = - \ln(1 - e^{-\alpha}) + V \left( \frac{2m\pi k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{e^{-\alpha l}}{l^{\frac{5}{2}}}, \quad (20)$$

onde as funções partições ficam divididas entre condensado ( $\Xi_C$ ) e gás ( $\Xi_G$ )

$$\ln \Xi_C = - \ln(1 - e^{-\alpha}) \quad (21)$$

$$\ln \Xi_G = V \left( \frac{2m\pi k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{e^{-\alpha l}}{l^{\frac{5}{2}}}. \quad (22)$$

Quando  $T \rightarrow 0$ ,  $\langle \hat{n}_0 \rangle \rightarrow N$ , isto é, todo o gás encontra-se no estado de energia  $\varepsilon = 0$ . Assim,

$$\langle \hat{n}_0 \rangle = \frac{1}{e^{\alpha_0} - 1} = N \Rightarrow \alpha_0 = \ln \left( 1 + \frac{1}{N} \right) \approx \frac{1}{N}, \quad (23)$$

onde  $\alpha_0 = \alpha(T \rightarrow 0)$ . Por outro lado, a partir da Eq. (20) vemos que deve existir uma temperatura crítica  $T_C$  quando começa a condensação (as partículas do gás aglomeram-se e passam a ser descritas por  $\Xi_C$  no lugar de  $\Xi_G$ . Nas palavras do próprio Einstein [4]: “Uma separação surge; parte (do gás) se condensa e o resto permanece como um gás ideal saturado” [1]). Como  $\alpha \approx \frac{1}{N}$  quando a temperatura diminui, suponhamos que uma pequena parcela  $p$  do gás se condensou quando  $T \approx T_C$ , digamos  $\langle \hat{n} \rangle_C \approx pN$ , com  $p = 1/\sqrt[3]{N}$ , isto é  $\langle \hat{n} \rangle_C \approx N^{\frac{2}{3}}$ :

$$\langle \hat{n} \rangle_C \approx N^{\frac{2}{3}} = \frac{1}{e^{\alpha(T_C)} - 1} \Rightarrow \alpha(T_C) \approx \frac{1}{N^{\frac{2}{3}}} \approx 0, \quad (24)$$

pois  $N \gg 1$ . Usando que  $\alpha(T_C) \approx 0$  e calculando  $\langle \hat{n} \rangle_G$  para  $T_C$ ,

$$\langle \hat{n} \rangle_G = - \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \Xi_G = V \left( \frac{2m\pi k_B T_C}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{\frac{5}{2}}}. \quad (25)$$

A série que aparece na última expressão é a função  $\zeta$  de Riemann (para  $s = \frac{3}{2}$ ),

$$\zeta(s) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^s}. \quad (26)$$

Assim,

$$N \approx \langle \hat{n} \rangle_G = V \left( \frac{2m\pi k_B T_C}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \zeta(3/2). \quad (27)$$

A expressão (27) foi obtida com algumas aproximações. Uma fórmula mais acurada que fornece  $T_C$ , conhecida como temperatura de Bose-Einstein pode ser vista na Ref. [17].

#### 4. Interpretando o condensado

Vamos focar nossa atenção na expressão (27), obtida na Seção anterior. Primeiro, estimamos  $T_C$ ,

$$T_C = \left( \frac{\langle \hat{n} \rangle_G}{V} \frac{1}{\zeta(3/2)} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{h^2}{2m\pi k_B}. \quad (28)$$

Para valores típicos,  $\langle \hat{n} \rangle_G \approx N \sim 10^{24}$ ,  $V \sim 125 \text{ cm}^3$  (cubo com 5 cm de aresta),  $m \sim 1,8 \times 10^{-27} \text{ kg}$  (como só queremos uma estimativa, tomamos a massa de um próton) e sabendo que  $\zeta(3/2) \approx 2,6$ , temos  $T_C \sim 6 \text{ K}$ . Vamos reescrever a expressão que obtivemos para  $T_C$  da seguinte maneira,

$$\zeta(3/2) = \text{const.} = \frac{\langle \hat{n} \rangle_G}{V} \lambda^3, \quad (29)$$

onde

$$\lambda = \left( \frac{h}{\sqrt{2m\pi k_B T_C}} \right). \quad (30)$$

Com esta fórmula chegamos ao objetivo central deste trabalho, a interpretação intuitiva do condensado. O fator  $\sqrt{2m\pi k_B T_C}$  tem unidades de momento linear. Logo,  $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m\pi k_B T_C}}$  tem unidades de distância: interpretamos este fator como a aresta de um cubo com tamanho da ordem do comprimento de onda térmico de de Broglie de uma partícula, onde elas se agrupam. Quando  $T$  diminui ( $T < T_C$ ),  $\lambda$  aumenta. Para manter o lado esquerdo da expressão (29) constante, o valor esperado do número de partículas do gás  $\langle \hat{n} \rangle_G$  diminui, isto é, o gás condensa-se.

#### 5. Formulação mais realista para os CBE

Anteriormente descrevemos um gás de bósons em uma caixa. A condição de contorno dada pela caixa não é uma boa modelagem para experiências modernas de condensação. Assim, nosso objetivo agora é fazer uma

<sup>5</sup>Os autores agradecem ao referee pela sugestão desta referência.

<sup>6</sup>A contagem de estados e sua relação com a entropia é tão fundamental que a expressão  $S = k \log W$  está gravada no túmulo de Boltzmann no *Zentralfriedhof*, em Viena. Veja a foto na Ref. [17].

descrição mais realista dos CBE. Inicialmente, vamos discutir de maneira sucinta um método fortemente utilizado para aprisionamento de átomos [19], as armadilhas magnéticas. Maiores detalhes podem ser encontrados em [20].<sup>5</sup> Na presença de campo magnético  $\vec{B}$ , um átomo com momento magnético  $\vec{\mu}$  (proporcional ao seu spin) ganha energia potencial

$$V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}. \quad (31)$$

Em teoria da perturbação, a presença de  $V$  no Hamiltoniano gera um *split* nos níveis de energia do átomo. Este é o famoso efeito Zeeman. De acordo com o ângulo  $\theta$  entre  $\vec{\mu}$  e  $\vec{B}$ , podemos ter átomos com energia crescente ou decrescente com o módulo de  $\vec{B}$  já que  $V = -|\vec{\mu}||\vec{B}| \cos \theta$ . O grupo de átomos cuja energia aumenta com o módulo de  $\vec{B}$  são aqueles que serão aprisionados. De fato, pela tendência de um sistema físico de minimizar sua energia, os átomos serão atraídos para um ponto de mínimo de  $|\vec{B}|$ . O contrário também seria possível: aprisionar átomos cuja energia decresce com  $|\vec{B}|$  já que eles buscariam um máximo de  $|\vec{B}|$ . Contudo descartamos esta última possibilidade uma vez que só é possível gerar mínimos de campo na ausência de correntes [19,20]. O confinamento de átomos nestas armadilhas é bem aproximado por um oscilador harmônico (isotrópico) [20,21], cuja energia potencial de um átomo de massa  $m$  aprisionado é dada por,

$$U(x, y, z) = \frac{k}{2}(x^2 + y^2 + z^2) - \frac{3}{2}\hbar\sqrt{\frac{k}{m}}, \quad (32)$$

onde  $x$ ,  $y$  e  $z$  são as coordenadas de posição do átomo e a subtração do fator  $\frac{3}{2}\hbar\sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{3}{2}h\nu$  atribui energia 0 para o estado fundamental. Seguiremos os mesmos passos da Seção anterior para mostrar que a temperatura crítica quando começa a condensação é da ordem de mili Kelvins. Como veremos, a estrutura da função de onda do oscilador no estado fundamental nos permite prever que a condensação ocorre numa região espacial bem delimitada. Um outro ponto que discutiremos nesta Seção, por razões pedagógicas, é a contagem de estados para um sistema quântico. Como temos uma estrutura discreta na mecânica quântica, este procedimento, central em Física estatística,<sup>6</sup> é feito de maneira enumerável.

Para obter a função partição grande canônica de um gás de bósons na armadilha, precisamos determinar a densidade de estados em função da energia. Os autovalores de energia do oscilador isotrópico são dados por

$$E = (n_x + n_y + n_z)h\nu \Rightarrow n \equiv n_x + n_y + n_z = \frac{E}{h\nu}, \quad (33)$$

uma vez que a energia é zero no estado fundamental.  $n_x$ ,  $n_y$  e  $n_z$  são inteiros não negativos. No espaço dos  $n$ 's, a Eq. (33) representa um plano para cada valor de  $n$ , como pode ser visto na Fig. 1.

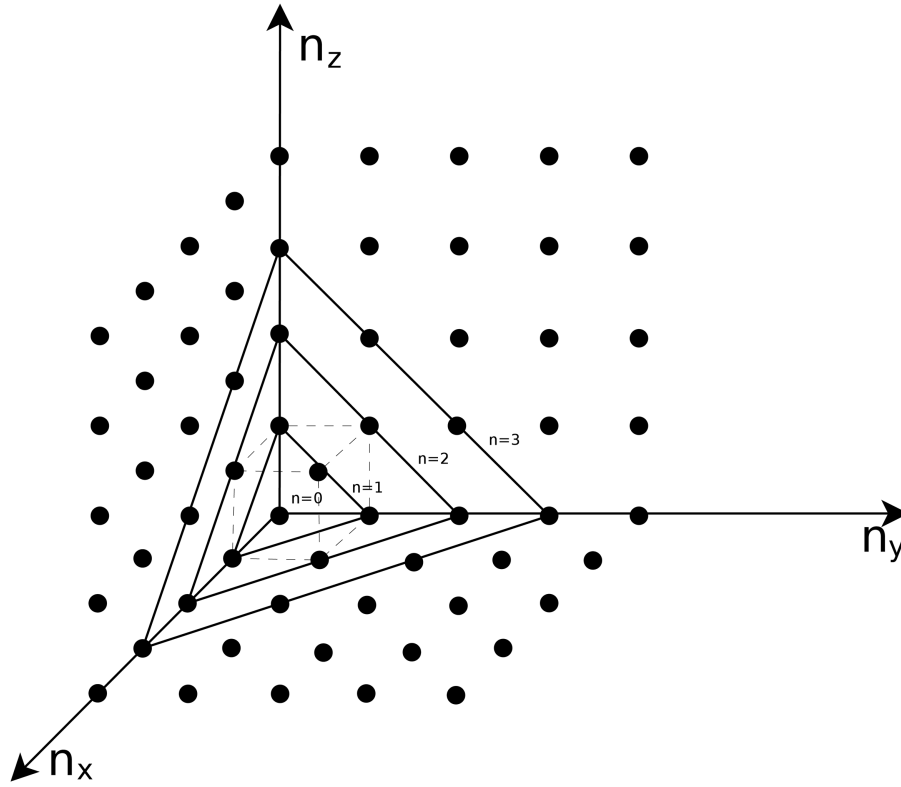


Figura 1 - Representação geométrica da expressão (33).

Aumentando o valor de  $n$ , teremos o seguinte número de sítios,

$$\begin{aligned} n = 0 &\Rightarrow \aleph_0 = 1 \\ n = 1 &\Rightarrow \aleph_1 = 3 \\ n = 2 &\Rightarrow \aleph_2 = 6 \\ n = 3 &\Rightarrow \aleph_3 = 10 \end{aligned} \quad (34)$$

e assim sucessivamente, de forma que<sup>7</sup>

$$\aleph_n = \frac{(n+1)(n+2)}{2}. \quad (35)$$

Na física estatística clássica, a contagem de microestados acessíveis a determinado sistema é feita de forma “contínua”: efetivamente calculamos um volume no espaço de fase. Já na estatística quântica, estados acessíveis são literalmente enumerados uma vez que temos uma estrutura discreta dos estados, fixada a energia. A densidade de estados é então dada por

$$\omega(E) = \frac{(n+1)(n+2)}{2\Delta E} = \frac{E^2}{2(h\nu)^3} + \frac{3E}{2(h\nu)^2} + \frac{1}{h\nu}, \quad (36)$$

onde usamos a Eq. (33) e  $\Delta E = h\nu$  corresponde à variação de energia do sistema quando passamos de um estado  $n$  para  $n+1$ . A função partição é dada por

$$\Xi = \prod_i \frac{1}{1 - e^{-(\beta\varepsilon_i + \alpha)}} \quad (37)$$

<sup>7</sup>Observemos que para  $n = 3$ , além dos 9 sítios nas arestas do tetraedro, temos ainda um deles pertencente ao interior do plano. Isto pode ser mostrado notando que a diagonal de um cubo com lado unitário tem o mesmo tamanho que a altura do tetraedro com base no plano definido por  $n = 3$  e vértice na origem  $n = 0$ .

cujo logaritmo fornece,

$$\ln \Xi = -\ln(1 - e^{-\alpha}) - \sum_{i=1}^{+\infty} \ln(1 - e^{-(\beta\varepsilon_i + \alpha)}). \quad (38)$$

Assim como antes o primeiro termo corresponde ao condensado e o segundo, ao gás, que pode ser aproximado pela integral utilizando  $\omega(E)$  (já expandimos o logaritmo em série)

$$\sum_{l=1}^{+\infty} \frac{e^{-\alpha l}}{l} \int_0^{+\infty} e^{-\beta E} \left( \frac{E^2}{2(h\nu)^3} + \frac{3E}{2(h\nu)^2} + \frac{1}{h\nu} \right) dE. \quad (39)$$

Supondo ainda que a energia das partículas do gás seja maior que a energia do estado fundamental  $E \gg h\nu$ , fazemos  $\omega(E) \approx \frac{E^2}{2(h\nu)^3}$ . Assim,

$$\ln \Xi_G \approx \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{e^{-\alpha l}}{l} \int_0^{+\infty} \frac{e^{-\beta E} E^2}{2(h\nu)^3} dE = \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{e^{-\alpha l}}{l^4 (h\nu\beta)^3}. \quad (40)$$

Como antes, o índice  $G$  refere-se ao gás. Desta maneira,

$$\langle \hat{n} \rangle_G = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \Xi_G = \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{e^{-\alpha l}}{(h\nu\beta l)^3}. \quad (41)$$

Quando começa a condensação em  $T = T_C$ ,  $\alpha(T_C) \approx 0$  (veja a Eq. (24)) e  $\langle \hat{n} \rangle_G = N$ , isto é, ainda não há partículas condensadas

$$\langle \hat{n} \rangle_G = N = \frac{1}{(h\nu\beta)^3} \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{1}{l^3} = \left( \frac{k_B T_C}{h\nu} \right)^3 \zeta(3), \quad (42)$$

ou,

$$T_C = \left( \frac{N}{\zeta(3)} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{h\nu}{k_B}. \quad (43)$$

Para estimar  $T_C$ , consideramos que os átomos estejam no estado fundamental, com função de onda em forma de gaussiana [22],

$$\psi(x, y, z) \sim e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{R^2}}. \quad (44)$$

$R$  corresponde a uma estimativa do raio de uma região esférica onde ocorre a condensação. Neste caso,

$$\frac{k}{2}R^2 = \frac{k}{2}(x^2 + y^2 + z^2) = \frac{3}{2}\hbar\sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (45)$$

Assim,  $k = \frac{9\hbar^2}{mR^4}$ . Por outro lado,

$$h\nu = \hbar\sqrt{\frac{k}{m}} \Rightarrow h\nu = \frac{3\hbar^2}{mR^2}. \quad (46)$$

A temperatura de condensação então é dada por,

$$T_C = \left( \frac{N}{\zeta(3)} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{3\hbar^2}{mR^2 k_B}. \quad (47)$$

Supondo que a condensação ocorra em uma região espacial da ordem  $R \approx 1 \mu\text{m}$ , e tomando dados fornecidos pelos experimentos de 1995 [5]: população da ordem de  $N \approx 10^7$  átomos de rubídio com massa  $m = 85.1, 66 \cdot 10^{-27}$  kg, encontramos  $T_C \sim 3 \mu\text{K}$ . Para o Rubídio,  $T_C = 170$  nK. Nossa estimativa foi feita para um gás não-interagente e ainda assim o resultado é razoável.

## 6. Conclusão

Neste artigo apresentamos uma interpretação intuitiva para os condensados de Bose-Einstein. Usando fundamentos de estatística quântica, obtivemos a expressão (29): as partículas do gás de bósons se aloca dentro de um cubo com aresta da ordem do comprimento de onda térmico de de Broglie de uma partícula formadora do gás. Uma outra maneira para se interpretar a Eq. (29) é a seguinte:  $d = \frac{\langle \hat{n} \rangle_G}{V}$  fornece a densidade do gás quando começa a condensação.  $\lambda^3 = \left( \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T_C}} \right)^3$  é o volume que aproximadamente cada partícula vai ocupar já que  $d\lambda^3 \approx 1$ .

As experiências modernas que envolvem armadilhas que

formam os CBE são bem descritas pelo potencial de um oscilador harmônico isotrópico. Assim, descreveremos também como são formados os condensados. Com dados da literatura, obtivemos, por exemplo, a temperatura em que ocorre o condensado, da ordem de  $\mu\text{K}$ . Esperamos que este trabalho possa ser utilizado tanto por alunos de graduação e pós-graduação ao cursar a disciplina de mecânica estatística quanto por professores do ensino médio que queriam ter uma visão global sobre os famosos condensados de Bose-Einstein.

## Apêndice A

Vamos descrever neste apêndice a estrutura das expressões (3) e (4), fornecendo uma interpretação para o operador densidade. Consideremos um observável  $A$  representado por um operador auto-adjunto  $\hat{A}$ . Usando a decomposição espectral de  $\hat{A}$  [24], temos

$$\hat{A} = \sum_i a_i \mathcal{P}_{a_i}; \quad \mathcal{P}_{a_i} = |a_i\rangle\langle a_i|, \quad (48)$$

onde os  $a_i$ 's são os autovalores associados aos autovetores ortonormais  $|a_i\rangle$ . Cada  $\mathcal{P}_{a_i}$  é o projetor ao auto-subespaço gerado por  $|a_i\rangle$ . Se um sistema está em um estado representado por um vetor  $|\psi\rangle$ , então o valor esperado  $\langle \hat{A} \rangle$  de uma medida de  $A$  é dado pela média dos possíveis valores da medida, ponderado por pesos, que correspondem ao quadrado das componentes de  $|\psi\rangle$  em cada autosubespaço

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \sum_i a_i \|\mathcal{P}_{a_i}|\psi\rangle\|^2 \\ &= \sum_i a_i \langle \psi|a_i\rangle\langle a_i|a_i\rangle\langle a_i|\psi\rangle. \end{aligned} \quad (49)$$

Como  $\langle a_i|a_i\rangle = 1$ , temos

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi| \left( \sum_i a_i |a_i\rangle\langle a_i| \right) |\psi\rangle = \langle \psi|\hat{A}|\psi\rangle. \quad (50)$$

Em geral, o estado de um sistema é representado não só por um vetor, mas por uma sobreposição de vetores de estado com respectivas probabilidades de entrarem na mistura,

$$|\psi\rangle = \sum_l p_l |\psi_l\rangle; \quad p_l \geq 0, \quad \sum_l p_l = 1. \quad (51)$$

Assim, o valor esperado de  $A$  quando o sistema encontra-se no estado dado pela Eq. (51) é

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_l p_l \langle \psi_l|\hat{A}|\psi_l\rangle. \quad (52)$$

Seja  $\{|\varphi_i\rangle\}$  uma base do espaço onde  $\hat{A}$  atua. Inserindo a relação de completudeza [23]

$$\mathbb{I} = \sum_i |\varphi_i\rangle\langle \varphi_i| \quad (53)$$

na Eq. (52), encontramos

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_l p_l \langle \psi_l | \left( \sum_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| \right) \hat{A} | \psi_l \rangle. \quad (54)$$

Reagrupando os termos

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_i \langle \varphi_i | \left( \hat{A} \sum_l p_l |\psi_l\rangle \langle \psi_l| \right) | \varphi_i \rangle. \quad (55)$$

Definindo  $\rho = \sum_l p_l |\psi_l\rangle \langle \psi_l|$  e lembrando que a representação matricial de um operador é feita pelo seu sanduíche com bras e kets,  $(\hat{A})_{ij} = \langle \varphi_i | \hat{A} | \varphi_j \rangle$ , a Eq. (55) toma a forma

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{A}\rho), \quad (56)$$

já que o traço de um operador é a soma dos elementos da diagonal principal da matriz que o representa. Deixemos o formalismo da estatística quântica de lado por um momento. No caso clássico, o valor esperado de uma variável dinâmica definida no espaço de fase  $B = B(q_i, p_i); i = 1, \dots, 3N$  é dada por

$$\langle B \rangle = \frac{\frac{1}{N!h^{3N}} \int B \varrho d\Gamma}{\frac{1}{N!h^{3N}} \int \varrho d\Gamma}, \quad (57)$$

onde  $d\Gamma = dq_1 \cdots dq_{3N} dp_1 \cdots dp_{3N}$  e  $\varrho$  corresponde à densidade de probabilidade de encontrarmos o sistema em questão em determinado microestado definido por um ponto  $(q_i, p_i)$  no espaço de fase e tem a forma dos pesos de Boltzmann

$$\varrho = e^{-\beta E}. \quad (58)$$

Para o caso particular do *ensemble* grande canônico, em que o sistema tem Hamiltoniana  $H$  e troca energia mediante a troca de partículas,

$$E = H - \mu N. \quad (59)$$

Fazendo as identificações abaixo a partir das expressões (56) e (57),

Estatística quântica	$\leftrightarrow$	Estatística clássica
$\hat{A}$	$\leftrightarrow$	$B(q_i, p_i)$
$\text{Tr}$	$\leftrightarrow$	$\frac{1}{N!h^{3N}} \int d\Gamma$
$\rho$	$\leftrightarrow$	$\varrho$

(60)

é sugestivo chamarmos  $\rho$  na Eq. (56) de operador densidade. Vamos construí-lo para o *ensemble* grande canônico, utilizado ao longo deste trabalho. Tomemos uma base  $\{|\varphi_l\rangle\}$  do espaço de Fock discutido na Seção II e utilizando os pesos  $p_l = C e^{-(\varepsilon_l - \mu n_l)}$  ( $C$  é uma constante determinada por normalização)

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_l p_l |\varphi_l\rangle \langle \varphi_l| \\ &= \sum_l C e^{-(\varepsilon_l - \mu n_l)} |\varphi_l\rangle \langle \varphi_l| \end{aligned}$$

$$= C e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \sum_l |\varphi_l\rangle \langle \varphi_l|. \quad (61)$$

Utilizando novamente o fato que  $\sum_l |\varphi_l\rangle \langle \varphi_l| = \mathbb{I}$  e normalizando a constante  $C$

$$C = \frac{1}{\text{Tr}(e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})})}, \quad (62)$$

chegamos finalmente a

$$\rho = \frac{e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}}{\text{Tr}(e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})})}. \quad (63)$$

## Apêndice B

Neste apêndice detalharemos os passos para a obtenção da função partição (9). Sabendo que o traço de um operador é independente da base do espaço que se utiliza para calculá-lo [23], para se obter a Eq. (9) usaremos  $\{|\hat{n}_i\rangle\}$ , a base de  $\mathcal{H}$  formada por autovetores comuns a  $\hat{N}$  e  $\hat{H}$ . Temos então,

$$\begin{aligned} \Xi &= \text{Tr} \left( e^{-\beta \sum_i \varepsilon_i \hat{n}_i - \alpha \sum_i \hat{n}_i} \right) \\ &= \text{Tr} \left( e^{-\sum_i (\beta \varepsilon_i + \alpha) \hat{n}_i} \right) \\ &= \langle \dots, n_2, n_1 | e^{-\sum_i (\beta \varepsilon_i + \alpha) \hat{n}_i} | n_1, n_2, \dots \rangle. \end{aligned} \quad (64)$$

A expressão acima é composto pelo produto de fatores da forma,

$$\langle n_i | e^{-\sum_i (\beta \varepsilon_i + \alpha) \hat{n}_i} | n_i \rangle. \quad (65)$$

Atuando com o operador  $\hat{n}_i$ , chegamos à expressão

$$\begin{aligned} \Xi &= \sum_{n_1, n_2, \dots} \prod_i e^{-(\beta \varepsilon_i + \alpha) n_i} \\ &= \left( \sum_{n_1} e^{-(\beta \varepsilon_1 + \alpha) n_1} \right) \left( \sum_{n_2} e^{-(\beta \varepsilon_2 + \alpha) n_2} \right) \dots \end{aligned} \quad (66)$$

Finalmente, como os índices  $n_i$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots$  assumem os mesmos valores em cada um das somas acima, podemos escrever a função de partição como o seguinte produto

$$\Xi = \prod_i \sum_{n=0}^{+\infty} e^{-(\beta \varepsilon_i + \alpha) n}. \quad (67)$$

## Referências

- [1] A. Einstein, Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften I, 3-14 (1925). A tradução deste trabalho foi feita na Revista Brasileira de Ensino de Física **27**, 113 (2005) pelo Prof. Sílvio R. Dahmen.
- [2] S.N. Bose, Zeit. Phys. **26**, 178 (1924).
- [3] Luca Peliti, *Statistical Mechanics in a Nutshell* (Princeton University Press, Princeton, 2011).
- [4] Sílvio R. Dahmen, Revista Brasileira de Ensino de Física **27**, 271 (2005); **27**, 283 (2005).

- [5] M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman and E.A. Cornell, *Science* **269**, 198 (1995).
- [6] A.G. de Sousa e V.S. Bagnato, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **26**, 43 (2004).
- [7] L.J. LeBlanc, M.C. Beeler, K. Jiménez-García, A.R. Perry, S. Sugawa, R.A. Williams and I.B. Spielman, *New J. Phys.* **15**, 073011 (2013).
- [8] Chunlei Qu, Chris Hamner, Ming Gong, Chuanwei Zhang and Peter Engels, *Phys. Rev. A* **88**, 021604 (2013).
- [9] V. Achilleos, D.J. Frantzeskakis and P.G. Kevrekidis, *Phys. Rev. A* **89**, 033636 (2014).
- [10] A. Deriglazov, B. Rizzuti and G. Zamudio, *Spinning Particles: Possibility of Space-Time Interpretation for the Inner Space of Spin* (Lap Lambert Academic Publishing, Saarbrücken, 2012).
- [11] P.W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [12] T. Micklitz, C.A. Müller, A. Altland, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 110602 (2014).
- [13] Giacomo Roati, Chiara D'Errico, Leonardo Fallani, Marco Fattori, Chiara Fort, Matteo Zaccanti, Giovanni Modugno, Michele Modugno, *Nature* **453**, 895 (2008).
- [14] Christine Gruber and Axel Pelster, arXiv: 1403.3812v1 [gr-qc].
- [15] R.K. Pathria, *Statistical Mechanics* (Butterworth Heinemann, Oxford, 1996).
- [16] F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics* (McGraw-Hill Book Company, New York, 1965).
- [17] Sílvio R.A. Salinas, *Introdução à Física Estatística* (Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2005).
- [18] M. Kardar, *Statistical Physics of Particles* (Cambridge University Press, Cambridge, 2007).
- [19] A.H. Iavaronni, E.A.L. Henn, E.R. F. Ramos, J.A. Seman, T. Amthor e V.S. Bagnato, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **29**, 209 (2007).
- [20] C.J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* (Cambridge, Cambridge University Press, 2008).
- [21] Franco Dalfovo, Stefano Giorgini, Lev P. Pitaevskii and Sandro Stringari, *Reviews of Modern Physics* **71**, 463 (1999).
- [22] David J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics* (Prentice Hall, New Jersey, 1995).
- [23] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Quantum Mechanics* (John Wiley and Sons, New York, 1977), v. I.
- [24] R.C. de Cerqueira Leite e A.R. Britto de Castro, *Física do Estado Sólido* (Editora Edgard Blücher, São Paulo, 1978).