**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS**

Edmur Braga Martins

**Termodinâmica de condensados de Bose-Einstein
armadilhados, em gases ideais e interagentes,
Capacidade Térmica e Compressibilidade Isotérmica**

São Carlos

2021

Edmur Braga Martins

**Termodinâmica de condensados de Bose-Einstein
armadilhados, em gases ideais e interagentes,
Capacidade Térmica e Compressibilidade Isotérmica**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Área de concentração: Física Teórica e Experimental

Orientador: Dr. Gustavo Deczka Telles

Versão corrigida
(Versão original disponível na Unidade que aloja o Programa)

São Carlos
2021

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Martins, Edmur Braga

Termodinamica de condensados de Bose-Einstein
armadilhados, em gases ideais e interagentes, capacidade
termica e compressibilidade isotermitica. / Edmur Braga
Martins; orientador Gustavo Deczka Telles - versão
corrigida -- São Carlos, 2021.

95 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em
Física Teórica e Experimental) -- Instituto de Física de São
Carlos, Universidade de São Paulo, 2021.

1. Condensados de Bose-Einstein. 2. Termodinamica. 3.
Capacidade termica . 4. Compressibilidade isotermitica. I.
Telles, Gustavo Deczka, orient. II. Título.

AGRADECIMENTOS

Quero inicialmente agradecer à Deus por iluminar nossos caminhos, a cada momento ou etapa pelo qual passamos. Agradeço também as minhas irmãs: Vera, Maria e Edisa, que desde a graduação compreenderam que os estudos nos dias de hoje tem sua importância para o mercado de trabalho. Também quero agradecer em memória de meus pais, Maria José e Francisco, que ficariam contentes se estivessem presentes para acompanhar esse estágio que estamos, pois a geração deles não tiveram as mesmas oportunidades de estudos que nós tivemos.

Quero agradecer ao Prof. Dr. Vanderlei S. Bagnato que nos recepcionou e ofereceu oportunidade de entrar em contato com uma das fronteiras da Física que são os átomos frios, além de ter promovido apoio durante o desenvolvimento do projeto. Quero também agradecer ao Dr. Gustavo D. Telles, orientador do projeto e que deu suporte para que o projeto se concretizasse, ofertando material de pesquisa, apoio na informática e grande quantidade de reuniões para analisar e discutir resultados. Queremos mencionar também as secretárias e o secretário do Prof. Vanderlei, pelos atendimentos que nos auxiliaram e a simpatia da Mônica e Kilvia, colegas de trabalho do Gustavo, o gugs.

Temos também que agradecer ao pessoal dos laboratórios de condensado, tanto de sódio-potássio quanto o de rubídio, que eventualmente fazia comentários à respeito de medidas experimentais, quando íamos a procura deles.

Devo também gratidão aos colegas da sala de informática, pois eventualmente ao longo do projeto tirávamos dúvidas à respeito de como funciona tal coisa no computador, etc.

Queremos também agradecer à Universidade de São Paulo pela estrutura e pelos os serviços, proporcionando condições plenas de desenvolvimento de um projeto de pesquisa. Agradecemos também ao Instituto de Física de São Carlos, Departamento de Física no qual estamos vinculados e que possui uma estrutura e leque de serviços, que amplia e reforça ainda mais as condições da Universidade.

Por fim queremos citar as agências de apoio que diretamente contribuíram para o financiamento e por consequência o desenvolvimento do projeto: Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), Fundação de Apoio à Física e à Química (FAFQ) e a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

“O presente trabalho foi realizado com o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) Código de financiamento 001”.

RESUMO

MARTINS, E. B. **Termodinâmica de condensados de Bose-Einstein armadilhados, em gases ideais e interagentes, Capacidade Térmica e Compressibilidade Isotérmica.** 2021. 95p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2021.

Nesse trabalho foram estudados dois modelos distintos, para poder compreender melhor as características físicas de duas suscetibilidades termodinâmicas em condensados de Bose-Einstein. No primeiro modelo se iniciou com a energia total do sistema e com a densidade de número de átomos, que por sua vez permitiu o cálculo de duas suscetibilidades: a capacidade térmica à volume constante e a compressibilidade isotérmica. No segundo modelo, além da energia total, foi estudado uma grandeza peculiar ao modelo, o parâmetro de pressão, que nos permitiu determinar a compressibilidade isotérmica. Para cada modelo, ambas as suscetibilidades foram estudadas nos seguintes sistemas bosônicos: o gás ideal armadilhado e o gás interagente armadilhado. Os resultados foram então diretamente comparados entre os sistemas e os modelos, tanto da capacidade térmica quanto da compressibilidade isotérmica. Então impôs-se uma restrição na suscetibilidade, para um determinado tipo de gás e de modelo, para se estudar em detalhe um dado parâmetro como, por exemplo, o número total de átomos, N . Em seguida, para verificar a consistência das expressões algébricas de ambos os modelos, foi realizado uma conexão com a capacidade térmica e com a compressibilidade isotérmica, ambas do gás ideal clássico e não foi encontrado problema algum. Assim, uma vez obtidos todos os resultados de interesse, concluiu-se que o primeiro modelo é bem consistente para a determinação das suscetibilidades enquanto o segundo modelo mostra corretamente os comportamentos gerais das mesmas, mas apresenta algumas limitações e descontinuidades intrínsecas, na região próxima à temperatura crítica do sistema investigado.

Palavras-chave: Condensados de Bose-Einstein. Termodinâmica. Capacidade térmica. Compressibilidade isotérmica.

ABSTRACT

MARTINS, E. B. **Thermodynamics of trapped Bose-Einstein condensates, in ideal and interacting gases, Thermal Capacity and Isothermal Compressibility** . 2021. 95p.
Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2021.

In this work, two different models were studied and compared in order to better understand the main physical properties of two thermodynamic susceptibilities of a Bose gas around and across the critical temperature. One model is based on the direct calculation of the total number and energy of the system by transforming discrete summations into continuous integrals assuming infinitesimal energy steps. The second model takes a wider view of the system and determines the grand potential energy based on two newly defined quantities named harmonic volume and pressure. Each susceptibility was calculated for two distinct trapped systems: the ideal, and the interacting Bose gas under various different conditions, such as the total number of atoms. It is important to point out that the two models provide analytical expressions for any thermodynamic quantity, which greatly simplifies the evaluation of the results and the comparison in between them. To further check the consistency of the algebraic expressions, an equation was derived allowing for a direct comparison whenever needed. The general conclusion is that the first model is consistent and robust, allowing for the derivation of extra terms accounting for the systems' finiteness, while the second model is a bit limited and less sensitive to the systems parameters but still robust to assess the properties of out-of-equilibrium Bose gases.

Keywords: Bose-Einstein condensates. Thermodynamics. Thermal capacity. Isothermal compressibility.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	– Fugacidade z em função da temperatura reduzida t , de um gás ideal armadilhado, no modelo de aproximação contínua, CA. A fugacidade é obtida da equação 2.30. A linha pontilhada centralizada indica o limite termodinâmico T_0 , e N é o número total de átomos do sistema.	
	Fonte: Elaborada pelo autor.	48
Figura 2	– Fugacidade z em função da temperatura reduzida t , de um gás ideal armadilhado, para os modelos: variáveis globais GV e aproximação contínua CA. A fugacidade z de GV é obtida da equação 2.51. A linha pontilhada indica ao limite termodinâmico T_0 , e N é o número total de átomos, sendo $N = 10^5$ átomos.	
	Fonte: Elaborada pelo autor.	49
Figura 3	– Potencial químico μ reduzido em função da temperatura reduzida t , de um gás ideal armadilhado, para o modelo de aproximação contínua, CA. O potencial químico μ é obtido da fugacidade z do gás ideal armadilhado em CA.	
	Fonte: Elaborada pelo autor.	50
Figura 4	– Potencial químico μ reduzido em função da temperatura reduzida t , de um gás interagente, para o modelo de aproximação contínua, CA. O potencial químico μ é obtido da equação 2.72 e da fugacidade z do gás ideal armadilhado em CA.	
	Fonte: Elaborada pelo autor.	51
Figura 5	– Energia total E como função da temperatura reduzida t , de um gás ideal armadilhado, nos modelos de aproximação contínua CA e variáveis globais GV. Cada uma das três curvas indica à $N = 10^5$ átomos e a temperatura crítica T_c está marcada pela linha pontilhada. A energia é obtida das equações 2.33, 2.49 e 2.50 do texto.	
	Fonte: Elaborada pelo autor.	52
Figura 6	– Energia total E em função da temperatura reduzida t , de um gás interagente, nos modelos de aproximação contínua CA e variáveis globais GV. Cada uma das três curvas indica à $N = 5 \times 10^5$ átomos e a temperatura crítica T_c para esse valor de N está representado pela linha pontilhada. A energia é obtida das equações 2.79, 2.96 e 2.97 do texto.	
	Fonte: Elaborada pelo autor.	53
Figura 7	– Capacidade térmica em função da temperatura reduzida t , de um gás ideal armadilhado, nos modelos de aproximação contínua CA e variáveis globais GV. Cada uma das duas curvas indica à $N = 5 \times 10^5$ átomos e a temperatura crítica T_c para esse valor de N está representado pela linha pontilhada. A capacidade térmica é obtida das equações 2.35, 2.52 e 2.53 do texto.	
	Fonte: Elaborada pelo autor.	54

Figura 8 – Capacidade térmica em função da temperatura reduzida t , de um gás interagente pelos modelos de aproximação contínua CA e variáveis globais GV. Cada uma das três curvas indica à $N = 5 \times 10^5$ átomos e a temperatura crítica T_c para esse valor de N está representado pela linha pontilhada. A capacidade térmica é obtida das equações 2.80, 2.35, 2.98 e 2.99 do texto.	
Fonte: Elaborada pelo autor.	55
Figura 9 – Capacidade térmica como função da temperatura reduzida t . O modelo de aproximação contínua CA, indica as curvas contínuas (azul e verde), e no modelo de variáveis globais GV as curvas que a representa são as lacunadas (preta e vermelha). O gás ideal armadilhado está representado pelas curvas: contínua-verde e traço-ponto-vermelha. Já o gás interagente está representado pelas curvas: contínua-azul e tracejado-preta. A linha pontilhada ao centro indica ao limite termodinâmico T_0 , para $N = 10^4$ átomos.	
Fonte: Elaborada pelo autor.	56
Figura 10 – Capacidade térmica como função da temperatura reduzida t . O modelo de aproximação contínua CA, indica as curvas contínuas (azul e verde) e no modelo de variáveis globais GV as curvas que a representa são as lacunadas (preta e vermelha). O gás ideal armadilhado está representado pelas curvas: contínua-verde e traço-ponto-vermelha. Já o gás interagente está representado pelas curvas: contínua-azul e tracejado-preta. Cada uma das curvas indica a $N = 10^6$ átomos. Por fim, a linha pontilhada ao centro indica ao limite termodinâmico.	
Fonte: Elaborada pelo autor.	57
Figura 11 – Capacidade térmica como função da temperatura reduzida t . No modelo de aproximação contínua CA, para o gás ideal armadilhado. A linha pontilhada no centro indica ao limite termodinâmico.	
Fonte: Elaborada pelo autor.	58
Figura 12 – Capacidade térmica como função da temperatura reduzida t . A figura indica ao modelo de aproximação contínua CA e as duas curvas são do gás interagente, sendo azul claro $N = 10^4$ e azul escuro $N = 10^6$. A linha pontilhada no centro indica ao limite termodinâmico.	
Fonte: Elaborada pelo autor.	59
Figura 13 – Capacidade térmica como função da temperatura, no limite termodinâmico, em que N é muito grande, tanto para o gás ideal armadilhado, curva sólida, quanto para o gás ideal livre de Bose, curva tracejada. Ambas as curvas são para o modelo de aproximação contínua original.	
Fonte: GROSSMANN,S. ; HOLTHAUS, M. ¹	60

Figura 14 – Densidades para um gás ideal armadilhado como função da temperatura reduzida t , no modelo de aproximação contínua CA. A curva azul do gráfico indica a densidade do condensado n_0 , com escala a esquerda e a curva vermelha indica a densidade dos átomos térmicos n_T , com escala a direita, ambas expressas em unidades Do SI, átomos/m ³ . A linha pontilhada, no centro, refere-se a temperatura crítica T_c . Cada uma das duas curvas foi obtida para $N = 10^5$ através das expressões 2.39 e 2.40 do texto.	
Fonte: Elaborada pelo autor.	61
Figura 15 – Parâmetro de pressão como função da temperatura reduzida t , para um gás ideal armadilhado, no modelo das variáveis globais. A unidade de medida de Π é: (J-rad ³)/s ³ . A linha pontilhada, no centro, indica ao limite termodinâmico e a curva é obtida das expressões 2.63, 2.64, 2.65, 2.66 do texto.	
Fonte: Elaborada pelo autor.	62
Figura 16 – Compressibilidade isotérmica total κ_T em função da temperatura reduzida t , de um gás ideal armadilhado, nos modelos: de variáveis globais GV, curva rosa e aproximação contínua CA, curva azul marinho. Cada uma das duas curvas indica a $N = 10^5$ e as curvas são obtidas das expressões 2.42, 2.67 e 2.68 do texto. A linha pontilhada no centro indica ao limite termodinâmico.	
Fonte: Elaborada pelo autor.	63
Figura 17 – Compressibilidade isotérmica total κ_T em função da temperatura reduzida t , de um gás ideal armadilhado, no modelo de aproximação contínua CA. A linha pontilhada no centro indica ao limite termodinâmico e as curvas são obtidas da expressão 2.42 do texto.	
Fonte: Elaborada pelo autor.	64
Figura 18 – Compressibilidade isotérmica total como função da temperatura reduzida t , de um gás ideal armadilhado, no modelo de aproximação contínua CA. A linha tracejada do gás ideal clássico serve como uma referência e a linha pontilhada no centro indica ao limite termodinâmico. As curvas são obtidas da expressão 2.42 do texto.	
Fonte: Elaborada pelo autor.	65
Figura 19 – Densidades, do condensado n_0^{TF} , curva azul marinho e dos átomos térmicos n_T^{TF} , curva vermelha, do gás interagente em CA, em função da temperatura reduzida t . Cada uma das duas curvas foi obtida para $N = 10^5$ e as expressões são 2.84 e 2.85 do texto.	
Fonte: Elaborada pelo autor.	66
Figura 20 – Compressibilidade isotérmica em SI para o gás interagente em CA, em função da temperatura reduzida t . A curva foi obtida para $N = 10^5$ e a expressão do texto utilizada é a 2.87.	
Fonte: Elaborada pelo autor.	67

Figura 21 – Compressibilidade isotérmica normalizada do gás interagente em CA, em função da temperatura reduzida t . A expressão indica a equação 2.87 do texto. A linha pontilhada no centro indica ao limite termodinâmico.	
Fonte: Elaborada pelo autor.	68
Figura 22 – Parâmetro de pressão para o gás interagente na GV em função da temperatura reduzida t . A curva foi obtida para $N = 5 \times 10^5$ e as expressões são 2.92, 2.93 e 2.94 do texto. A linha pontilhada no centro indica ao limite termodinâmico.	
Fonte: Elaborada pelo autor.	69
Figura 23 – Compressibilidade isotérmica para o gás interagente em CA e GV, em função da temperatura reduzida t . As curvas foram geradas a partir de $N = 5 \times 10^5$ e as expressões são 2.100, 2.101 e 2.87 do texto. A linha pontilhada ao centro é o limite termodinâmico.	
Fonte: Elaborada pelo autor.	70
Figura 24 – Compressibilidade isotérmica κ_T^{th} em função da temperatura reduzida t . As curvas são obtidas das expressões 2.42 ($n_0 = 0$), 2.59 e 2.60 do texto.	
Fonte: Elaborada pelo autor.	71
Figura 25 – Compressibilidade isotérmica de átomos térmicos, em função da temperatura reduzida t , de um gás ideal armadilhado, nos modelos: variáveis globais, curvas lacunadas e aproximação contínua, curvas contínuas. A linha pontilhada no centro indica ao limite termodinâmico e as curvas são obtidas das expressões 2.42 ($n_0 = 0$), 2.59 e 2.60 do texto.	
Fonte: Elaborada pelo autor.	72
Figura 26 – Compressibilidade isotérmica como função da temperatura reduzida t , para átomos térmicos, de um gás ideal armadilhado, nos modelos CA e GV. Cada uma das três curvas indica a $N = 10^5$. A linha pontilhada no centro indica ao limite termodinâmico e as curvas são obtidas das expressões 2.104, 2.105 e 2.106 do texto.	
Fonte: Elaborada pelo autor.	73
Figura 27 – Compressibilidade isotérmica κ_T^{th} em função da temperatura reduzida t , de um gás ideal armadilhado, no modelo de variáveis globais GV, curva preta. A curva verde-lacunada indica a semi-compressibilidade κ_G em GV, para o gás ideal armadilhado. Cada uma das curvas indica a $N = 10^4$ e as curvas são obtidas das expressões 2.59, 2.60, 2.112 e 2.113 do texto.	
Fonte: Elaborada pelo autor.	74
Figura 28 – Semi-Compressibilidade isotérmica do gás interagente em GV, em função da temperatura reduzida t . A curva foi gerada com $N = 5 \times 10^5$ e as expressões são 2.114 e 2.115 do texto.	
Fonte: Elaborada pelo autor.	75

Figura 29 – Imagem de um condensado de Bose-Einstein, obtido com átomos de rubídio ^{87}Rb . A foto, nos revela: os átomos do condensado, mancha oval cor de vinho ao centro da imagem, os átomos térmicos "coroa" cor azul médio que circunda a mancha oval vinho e ao redor da coroa de azul médio, tem-se a parte azul escuro, onde se encontra alguns átomos, do gás ideal clássico. Fonte: Cortesia do Laboratório de Condensado de Bose-Einstein, BEC-1, ^{87}Rb , IFSC-USP, 2018.	89
Figura 30 – Capacidade Térmica reduzida, em função da Temperatura reduzida T/T_c , para um Gás ideal livre de Bose. Fonte: GREINER, W.; NEISE, L.; STOCKER, H. ²	93
Figura 31 – Semilog da compressibilidade isotérmica reduzida em função da temperatura reduzida, do gás ideal livre de Bose. Fonte: Elaborada pelo autor.	94

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	17
2	TERMODINÂMICA DE CONDENSADOS DE BOSE-EINSTEIN	21
2.1	Condição para iniciar à condensação de Bose-Einstein: Gás ideal livre e gás ideal armadilhado	21
2.2	Densidade de um condensado de Bose-Einstein, gases: ideal e interagente	24
2.3	Os modelos: aproximação contínua e variáveis globais, aspectos gerais	26
2.4	O gás ideal armadilhado, no modelo CA, C_V e κ_T	28
2.5	O gás ideal armadilhado, no modelo GV, C_V e κ_T	32
2.6	O gás interagente, no modelo CA, C_V e κ_T	36
2.7	O gás interagente, no modelo GV, C_V e κ_T	41
2.8	Outras quantidades relacionadas à compressibilidade isotérmica κ_T , modelos CA e GV	42
3	TERMODINÂMICA: RESULTADOS	47
3.1	Capacidade térmica C_V	47
3.2	Compressibilidade Isotérmica κ_T	60
4	CONCLUSÃO	77
	REFERÊNCIAS	81
	APÊNDICES	87
	APÊNDICE A – FOTO DE UM CONDENSADO DE BOSE-EINSTEIN EXPERIMENTAL E ALGUNS DADOS	89
	APÊNDICE B – SOMA DAS DENSIDADES LOCAIS, LDA, PARA OBTENÇÃO DO NÚMERO TOTAL DE ÁTOMOS N , DE UM GÁS IDEAL ARMADILHADO EM CA	91
	APÊNDICE C – CAPACIDADE TÉRMICA E COMPRESSIBILIDADE ISOTÉRMICA, AMBAS DO GÁS IDEAL LIVRE DE BOSE	93

1 INTRODUÇÃO

Dentre a diversidade de sistemas físicos, a ciência possui alguns que são descritos por elementos macroscópicos à partir de elementos microscópicos. Como exemplo, podemos citar os condensados de Bose-Einstein, que são uma manifestação quântica macroscópica de sistemas físicos, onde um dos elementos macroscópicos de interesse é a temperatura média do sistema, determinada à partir das propriedades microscópicas³⁻⁴. Além disso, é importante ter o conhecimento da estrutura atômica dos átomos e suas propriedades para poder criar mecanismos de manipulações eficientes. Uma consequência do entendimento da estrutura atômica é a capacidade de se produzir condensados de Bose-Einstein em laboratórios, utilizando laser, campos magnéticos e de ondas eletromagnéticas⁴⁻⁵. Já pelo ponto de vista teórico, através da mecânica estatística, são estudadas variáveis termodinâmicas do condensado via a estatística de Bose-Einstein, que considera o estado energético. Como exemplo, podem ser determinados: o número total de átomos N e a energia total E do sistema.⁶⁻⁷

O trabalho anterior ao estudo de condensação que se tem registro, foi realizado pelo físico Satyendra N. Bose, com estudos sobre fótons, em 1924. Com base no artigo fundamental de Bose, Albert Einstein estendeu os resultados de fótons para partículas massivas, em 1925, prevendo que um gás de átomos não interagente poderia sofrer uma transição de fase para o estado de menor energia, atingindo um estado condensado⁷. Em 1938 quando se observou a superfluidez do líquido de ^4He , no mesmo ano F. London lançou uma hipótese de que o superfluido de ^4He líquido poderia ter relação com a condensação de Bose-Einstein⁸. Porém a primeira teoria consistente sobre superfluidez só surgiu em 1941, desenvolvida por Landau⁶⁻⁷. Nos anos de 1950 houve intensos estudos para entender a relação entre os condensados de Bose-Einstein e a superfluidez.

A partir de 1970 desenvolveram-se as primeiras técnicas de resfriamento à laser de átomos alcalinos, para se chegar na condensação. Os átomos alcalinos possuem uma estrutura interna de níveis de energia, favoráveis a manipulação. Entretanto, somente em 1995 foi possível de se chegar nos primeiros condensados de Bose-Einstein, ao se fazer uma combinação de técnicas experimentais de resfriamento, por três grupos de pesquisadores independentes⁶⁻⁷. Um dos grupos foi liderado por Cornell e Wieman que produziram as primeiras amostras, compostas por átomos de rubídio ^{87}Rb , em seguida o grupo de Ketterle com um condensado de sódio ^{23}Na e o outro grupo foi com Hulet com o condensado de lítio ^7Li . Após 1995, outros condensados de Bose-Einstein foram obtidos, como por exemplo: hidrogênio ^1H , hélio ^4He metaestável, potássio ^{41}K e outros condensados de espécies atômicas diferentes.⁶⁻⁷

Os gases quânticos dilutos diferem dos gases comuns, líquidos e sólidos, de várias maneiras como, por exemplo, em propriedades físicas quando comparadas a outros sistemas físicos. A densidade de átomos no centro de um condensado de Bose-Einstein é tipicamente

da ordem de $10^{13} - 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Por outro lado, a densidade de moléculas no ar à temperatura ambiente e pressão atmosférica é de cerca de 10^{19} cm^{-3} . Em líquidos e sólidos, a densidade dos átomos é da ordem de 10^{22} cm^{-3} , enquanto a densidade de partículas nos núcleos atômicos é de cerca de 10^{38} cm^{-3} . Para se observar fenômenos quânticos em sistemas de baixa densidade, como os condensados, a temperatura deve ser da ordem de 10^{-6} K ou menor. Para o hélio ^4He líquido, as temperaturas necessárias para se observar fenômenos quânticos são da ordem de 1 K ⁶. Em gases comuns, como alguns da atmosfera (O_2 , N_2 , CO_2), as temperaturas de condensação são: 90 K , 77 K e $216,6 \text{ K}$, respectivamente.

Em relação ao projeto desenvolvido, o interesse foi estudar duas suscetibilidades termodinâmicas para os condensados de Bose-Einstein: a capacidade térmica à volume constante e a compressibilidade isotérmica. O objetivo surgiu do fato de que não se encontra estudos bem estabelecidos a respeito dessas duas suscetibilidades, a níveis teórico e experimental. Pode ser citado, como exemplo, a capacidade térmica do gás interagente armadilhado que não tinha uma expressão algébrica que a representasse. Podemos também citar a compressibilidade isotérmica que tanto no gás ideal armadilhado quanto no gás interagente armadilhado não possui expressões algébricas, nem mesmo qualquer esboço gráfico relacionado a ela. ^{2,6-7,9-11}

De forma geral, uma suscetibilidade expressa o quanto um sistema físico é sensível a influências externas. Para a capacidade térmica, isso significa a quantidade de calor ou energia térmica que o sistema ganha por unidade de temperatura. Dentre uma quantidade enorme de sistemas físicos que envolve capacidade térmica, pode ser citado, como exemplo, uma certa quantidade de água num recipiente, que ao ser aquecida, atinge o ponto de ebulição. A compressibilidade isotérmica indica o quanto a matéria ou sistema altera o seu volume por ação de forças externas. Se a compressibilidade aumenta significativamente, a amostra pode ter seu volume bastante reduzido, como os gases, em geral. Também nos gases, se a compressibilidade diminui bastante, isso indica que o volume pode aumentar de forma significativa. Em outros sistemas há pouca variação de volume como ocorre, por exemplo, com sólidos e líquidos, em geral. Por curiosidade os diamantes naturais e seus assemelhados ou uma estrela de nêutrons são sistemas menos compressíveis que se conhece na natureza.

Porém, para estudar tais suscetibilidades em gases bosônicos é necessário conhecermos outras quantidades termodinâmicas. Nesse projeto, estudamos a capacidade térmica através da energia total do sistema, utilizando uma relação termodinâmica. No caso da compressibilidade isotérmica, o estudo se baseia na densidade de número do sistema, em relação ao número de partículas que entra ou sai do sistema. Também, a compressibilidade isotérmica é calculada a partir de uma relação termodinâmica. Queremos mencionar que existem outras suscetibilidades, além das mencionadas, porém estudamos detalhadamente aquelas citadas pelo fato de elas terem um papel importante aos experimentos atuais realizados pelo nosso grupo de pesquisa. A capacidade térmica tem relação com a energia, grandeza de alto interesse, e a compressibilidade isotérmica tem relação com a pressão, que por sua vez se relaciona com a equação de estado do

sistema, sendo outra grandeza de interesse.

Para estudar tais suscetibilidades utilizamos dois modelos. No primeiro modelo, que já está estabelecido na literatura há um bom tempo é encontrado a capacidade térmica para o gás ideal livre de Bose ^{2,10}, e no mesmo tipo de gás a compressibilidade isotérmica é apresentada e discutida por Pathria ⁹. Ainda no mesmo modelo, a capacidade térmica para o gás ideal armadilhado já esta bem estabelecida ^{1,7}. No segundo modelo, publicado em 2005 ^{12–13}, é apresentada uma abordagem da capacidade térmica do gás ideal armadilhado ¹² e da mesma suscetibilidade no gás interagente ¹⁴. Ainda nesse segundo modelo não se tinha, até o momento, a compressibilidade isotérmica para o gás ideal armadilhado ou para o gás interagente armadilhado. Entretanto, no segundo modelo, já havia a compressibilidade isotérmica do gás ideal de densidade homogênea e também do gás interagente de densidade homogênea ^{15–16}. Tanto para o primeiro modelo quanto para o segundo, a inovação foi considerar o volume que os átomos devem ocupar no espaço, para a obtenção da compressibilidade isotérmica.

No capítulo 2 apresentamos as deduções algébricas necessárias para a obtenção dos resultados. Inicialmente, mostramos a condição em que a condensação de Bose-Einstein se inicia, tanto para o gás ideal livre de Bose, quanto para o gás ideal armadilhado. No que se refere aos modelos, o primeiro deles, denominado por nós de aproximação contínua, possui as seguintes informações: *a)* para o gás ideal armadilhado, a energia total e a capacidade térmica já estavam deduzidas e calculadas na literatura, com discussão em foco no baixo número de átomos e foi estendido para um número alto. Em relação a densidade total de número, definimos o volume ocupado pelos átomos no espaço, sem paredes impenetráveis. Pela consideração do volume, determinamos a densidade do sistema, que permite o cálculo da compressibilidade isotérmica. *b)* para o gás interagente, a energia total encontrada na literatura, possuía dois termos: um termo vindo da contribuição do gás ideal armadilhado e o outro termo vindo da contribuição da interação. De nossa parte, trocamos o termo do gás ideal armadilhado por outros três termos e o termo devido a interação passou por uma correção algébrica. Como consequência, a capacidade térmica também teve de ser recalculada. Na densidade de número total do sistema, utilizamos o volume ocupado pelos átomos no espaço e o número de átomos N , tanto para o gás ideal armadilhado quanto para o gás interagente, sendo essas considerações uma inovação. A compressibilidade isotérmica em nossos estudos dependente da densidade e dessa forma ela pode ser calculada. Já no outro modelo estudado, conhecido como variáveis globais, se observa o seguinte: *i)* para o gás ideal armadilhado já se havia calculado a energia total do sistema, a capacidade térmica e o número total de átomos. Também nesse modelo se define uma grandeza peculiar, denominada pressão harmônica que atua em conjunto com outra variável, também peculiar, conhecida como volume harmônico. A inovação que se tem para esse modelo é a obtenção da compressibilidade isotérmica, considerando o volume do sistema. Até então o modelo não tinha tal grandeza propriamente dita. *ii)* para o gás interagente já se tinha a energia total do sistema, a capacidade térmica, o parâmetro de pressão e o volume harmônico, além do número de átomos N . A inovação para a compressibilidade isotérmica foi a

consideração do volume. Também no capítulo 2, foi estudado um outro tipo de volume como segunda alternativa para o gás ideal armadilhado, no modelo de aproximação contínua, o que por sua vez reflete na compressibilidade isotérmica. Em seguida, no capítulo 3 apresentamos e discutimos os resultados do capítulo 2 na forma gráfica e comparativa. Finalmente, no capítulo 4 apresentamos as conclusões do trabalho e dos resultados obtidos.

2 TERMODINÂMICA DE CONDENSADOS DE BOSE-EINSTEIN

Para iniciar esse capítulo, discutiremos primeiro o caso do gás ideal livre de Bose, que é um gás quântico de densidade uniforme, contido numa caixa de volume V . Esse sistema é importante pelo fato de ser um dos primeiros modelos teóricos para condensados de Bose-Einstein e é largamente difundido na literatura e livros textos. ^{2,9–10}

Nesse sistema, quantidades termodinâmicas se comportam de maneira diferenciada, se comparados com a Física Clássica. Como, por exemplo, podemos citar a capacidade térmica (C_V) que numa determinada temperatura, chamada de temperatura crítica (T_c), apresenta um pico e se diminuir mais a temperatura o C_V vai para zero. Já para o gás ideal clássico, dentro da uma caixa de volume V , o C_V tem um valor constante. O estudo desse modelo, gás ideal livre de Bose, tem uma importância teórica, pois ainda é extremamente difícil de obtê-lo no laboratório numa escala macroscópica.

Na primeira seção discutiremos o início da condensação de Bose-Einstein e sua dependência com a temperatura. Na segunda seção abordaremos o gás ideal livre de Bose, submetido a um potencial externo confinante e as implicações. Também naquela seção, discutiremos as implicações, o confinamento e o cálculo para obter a equação que quantifica o número total de átomos N . Na terceira seção, traremos informações qualitativas a respeito do modelo da aproximação contínua (*continuum approximation* ou CA, em inglês) e as características gerais do outro modelo, que é o das variáveis globais (*global variables* ou GV, em inglês).

Nas demais seções foram desenvolvidas as expressões algébricas, comentários e observações das mesmas, que permitiu a obtenção dos resultados do capítulo 3. Em relação aos dois modelos, CA e GV, cada um abrange dois sistemas estudados: o gás ideal armadilhado e o gás interagente armadilhado. Durante as seções, iremos apresentar os dois principais estudos de interesse: a compressibilidade isotérmica (κ_T) e a capacidade térmica C_V , para cada um dos sistemas. No final das seções, apresentaremos uma segunda forma de obter a densidade do gás ideal armadilhado para átomos térmicos, o que permitiu também obter a compressibilidade isotérmica. Por fim será exposto a semi-compressibilidade isotérmica, uma grandeza exclusiva do modelo GV.

2.1 Condição para iniciar à condensação de Bose-Einstein: Gás ideal livre e gás ideal armadilhado

Nessa seção apresentaremos e discutiremos um indicativo para o início da condensação de Bose-Einstein, tanto para um gás ideal livre de Bose, quanto para um gás ideal armadilhado, cujo os átomos estão sob a ação de um potencial externo confinante. Vamos começar pelo gás ideal livre de Bose, deduzindo a equação que permite observar o início da condensação.

Inicialmente se faz a contagem de estados energéticos do sistema.

No regime quântico a energia cinética de um átomo é $\epsilon = \frac{p^2}{2m}$ para um determinado estado. Se queremos somar todos os estados, representado por $G(\epsilon)$, temos ²:

$$G(\epsilon) = \frac{V}{h^3} 2\pi (2m)^{3/2} \int_0^\epsilon \epsilon^{1/2} d\epsilon, \quad (2.1)$$

onde V é o volume fixo que contém todos os N átomos, h é a constante de Planck e m é a massa de um átomo.

Daí, pode-se determinar a densidade de estados para um átomo ^{2,6}:

$$g(\epsilon) = \frac{dG(\epsilon)}{d\epsilon} = \frac{V}{h^3} 2\pi (2m)^{3/2} \epsilon^{1/2}. \quad (2.2)$$

A densidade de estados é importante pelo fato que através dela podem ser obtidos o número total de átomos N e a energia total E .

Considerando a estatística de Bose-Einstein expressa por ⁶:

$$\langle n_\epsilon \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} - 1}, \quad (2.3)$$

onde $\langle n_\epsilon \rangle$ representa o número médio de partículas no estado ϵ e com $\beta = \frac{1}{k_B T}$, podemos obter o número total de átomos através de $N = \sum_\epsilon \langle n_\epsilon \rangle$. Substituindo o símbolo de somatório pela expressão: $\sum_\epsilon = \int g(\epsilon) d\epsilon$, em N e separando desse somatório o estado fundamental, $\epsilon = 0$ que representa os átomos do condensado N_0 , temos:

$$N = \left(\frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^\infty \epsilon^{1/2} \langle n_\epsilon \rangle d\epsilon \right) + \left(\frac{z}{1 - z} \right), \quad (2.4)$$

onde $z = e^{\beta\mu}$ e μ é o potencial químico. O primeiro termo da equação 2.4 representa somente os átomos térmicos N_T do gás ideal livre de Bose, no regime quântico, e o resultado da integral já é conhecido da física matemática ²:

$$N = \frac{V}{\lambda_T^3} g_{3/2}(z) + \frac{z}{1 - z} = N_T + N_0, \quad (2.5)$$

onde as funções $g_n(z)$ são conhecidas como funções de Bose. Para temperaturas acima da temperatura crítica T_c , tem-se apenas os átomos térmicos N_T , ou seja, $N_0 = 0$, e a expressão do sistema em termos de densidade, pode ser escrita como:

$$n_T = \frac{N_T}{V} = \frac{g_{3/2}(z)}{\lambda_T^3}, \quad (2.6)$$

onde $\lambda_T = \frac{h}{(2\pi m k_B T)^{1/2}}$ é o comprimento de onda térmico.

Porém a medida que a amostra é resfriada a fugacidade z aumenta de valor. Quando $z \approx 1$, numa temperatura T próximo à $T_0 = \frac{\hbar\omega_{ho}}{k_B} \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{1/3}$ ⁶, tem-se o surgimento dos primeiros

átomos do condensado N_0 . A fugacidade z é sempre menor ou igual a 1, em $T = 0$. Assim a condição para que a condensação de Bose-Einstein se inicie, no caso do gás ideal livre de Bose, pode ser expressa como ⁶:

$$n_T \lambda_T^3 \approx g_{3/2}(1) \approx 2,6124. \quad (2.7)$$

Na equação 2.7 o termo $g_{3/2}(1)$ é conhecido como função zeta de Riemann de ordem $3/2$ e $g_{3/2}(1) = \zeta(3/2)$, e a expressão $n_T \lambda_T^3$ é a densidade no espaço de fase. Para ter uma melhor compreensão sobre a densidade no espaço de fase, segue as considerações: em n_T , N é o número total de átomos e fixo, independente de eles ocuparem toda a caixa (gás ideal clássico) ou de estarem muito próximos uns dos outros formando o condensado (gás ideal de Bose) e deixando espaços vazios dentro da caixa. O volume da caixa continua fixo, logo n_T é constante. Em relação ao comprimento de onda térmico λ_T , observa-se que somente há dependência com a temperatura T , portanto, a densidade no espaço de fase fica apenas em função da temperatura. Também, sobre um outro ponto de vista, considerando que a densidade do sistema está relacionada ao tamanho da nuvem de átomos, nesse caso n_T varia, de forma a competir com λ_T^3 e gerando o valor de 2,6124.

Agora, vamos ao caso do gás ideal armadilhado, onde a contagem de estados tem uma situação diferente. O espectro de energia é dado por:

$$\epsilon = \epsilon_{n_x, n_y, n_z} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_z, \quad (2.8)$$

onde n_x, n_y, n_z são os números quânticos e $\omega_x, \omega_y, \omega_z$ são as frequências da armadilha ¹⁷. A soma de todos os estados pode ser expressa como:

$$G(\epsilon) = \frac{1}{8\pi} \int dn_x dn_y dn_z, \quad (2.9)$$

onde $1/8$ representa um octante de todo o espaço, pois queremos somente números quânticos, n_x, n_y, n_z , inteiros e positivos. O fator π que aparece na última expressão surge pelo fato que o número total de átomos N tem apenas valores naturais. Assim o fator π é apenas uma constante de normalização. Utilizando a equação 2.8 e deixando um número quântico livre, com os outros números quânticos constantes, tem-se o número total de estados $G(\epsilon)$ do sistema:

$$G(\epsilon) = \frac{1}{8\pi} \int_0^\epsilon \frac{d^3\epsilon}{\hbar \omega_x \hbar \omega_y \hbar \omega_z} = \frac{1}{8\pi} 4\pi \int_0^\epsilon \frac{\epsilon^2 d\epsilon}{(\hbar \omega_{ho})^3}. \quad (2.10)$$

Aqui, novamente, se considerou uma esfera e $\omega_{ho}^3 = \omega_x \omega_y \omega_z$. Logo, a densidade de estados para um átomo pode ser expressa como ¹⁷:

$$g(\epsilon) = \frac{dG(\epsilon)}{d\epsilon} = \frac{1}{2} \frac{\epsilon^2}{(\hbar \omega_{ho})^3}, \quad (2.11)$$

que é bem conhecida na literatura. A densidade de estados da equação 2.11, pode ser obtida também por um outro caminho. ⁶

Seguindo o mesmo raciocínio do gás ideal livre de Bose e considerando essa nova densidade de estados, determina-se a equação do número N para o gás ideal armadilhado:

$$N = \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_{ho}} \right)^3 g_3(z) + \left(\frac{z}{1-z} \right) = N_T + N_0. \quad (2.12)$$

Sabendo que a núvem de átomos do gás ideal armadilhado ocupa um certo volume V no espaço, mesmo sem paredes rígidas para confiná-la, pode-se encontrar uma relação que seja equivalente a esse fator ao cubo, tal que:

$$N_T = \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_{ho}} \right)^3 g_3(z) = \frac{V}{\lambda_T^3} g_3(z), \quad (2.13)$$

cujas expressões permitem obter a densidade no espaço de fase. Em analogia ao gás ideal livre de Bose, a densidade no espaço de fase para o gás ideal armadilhado, será expressa por:

$$n_T \lambda_T^3 \approx g_3(1) \approx 1,2021, \quad (2.14)$$

cujos valores nos indicam que a condensação de Bose-Einstein se inicia e o termo $g_3(1)$ é $\zeta(3)$. No final do capítulo veremos que, na verdade, essa densidade no espaço de fase depende do número de átomos N em questão.

2.2 Densidade de um condensado de Bose-Einstein, gases: ideal e interagente

Nessa seção mostraremos o que ocorre, quando um gás ideal livre de Bose é submetido a um potencial externo de confinamento, $U(x, y, z)$. A densidade de número do gás ideal livre é uniforme, mas quando ele está sob a ação do potencial externo, essa densidade passa a depender da posição no espaço. Em seguida, deduziremos a equação de número total de átomos N do gás ideal armadilhado, através de uma integral da densidade espacial. Na sequência, temos a fração de partículas N_0/N do condensado, obtida da equação de número N . A fração de partículas é um indicativo da taxa de ocupação do estado fundamental de energia e ela aumenta à medida que a amostra esfria. Por fim, a densidade espacial do condensado do gás interagente será citada nessa seção, porém apresentada e utilizada em seções futuras.

Inicialmente faremos uma abordagem do gás ideal livre submetido a um potencial externo confinante, gerando um gás ideal armadilhado, com densidade inhomogênea.

A densidade de número é discutida amplamente na literatura,^{6–7, 12–14} e tem dependência espacial $n(x, y, z)$ devido à ação do potencial externo $U(x, y, z)$ que confina os átomos no centro da armadilha. Essa densidade aparece tanto em gases ideais armadilhados quanto em gases interagentes armadilhados.

Em seguida, apresentamos uma sequência, desde o gás ideal livre de Bose até chegar ao gás ideal armadilhado. O primeiro sistema, gás ideal livre, é submetido a um potencial externo do tipo harmônico, gerando o segundo sistema que é o gás ideal armadilhado. Também é apresentada

a fração de partículas do condensado de Bose-Einstein do gás ideal armadilhado, pela integração da densidade.

Vamos então considerar um gás ideal clássico que passa por um processo de resfriamento de tal maneira que a temperatura que ele atinge seja da ordem da temperatura crítica T_c , em centenas de nano-kelvin ^{1,7}. Quando o gás atinge esse regime de temperatura, ele entra no regime quântico onde as quantidades termodinâmicas mudam de comportamento. Se esse gás estiver num caixa de volume V e no regime quântico, sua densidade é uniforme ⁷ e é expressa pela relação:

$$n(\mu, T) = \frac{N}{V} = \frac{g_{3/2}(z)}{\lambda_T^3}, \quad (2.15)$$

onde $z = e^{\mu/k_B T}$ é a fugacidade, λ_T é o comprimento de onda térmico, μ é o potencial químico e N é o número total de átomos. As funções de Bose-Einstein podem ser representadas na forma de série $g_n(z) = \sum_{l=1}^{\infty} \left(\frac{z^l}{l^n}\right)$ e a densidade $n(\mu, T)$ se refere ao gás ideal livre de Bose.

Entretanto, se um sistema com o mesmo número de átomos N , é confinado num potencial externo harmônico:

$$U(x, y, z) = \left(\frac{m}{2}\right) (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2), \quad (2.16)$$

ele será então considerado um gás ideal armadilhado. Esse é o método utilizado por muitos experimentalistas. Dessa forma a densidade do gás passa a ter uma dependência espacial ^{7,15}. A nova densidade é:

$$n'(\mu, T, r) = \frac{g_{3/2}(z')}{\lambda_T^3}, \quad (2.17)$$

onde $z' = e^{\frac{\mu - U(x, y, z)}{k_B T}}$ é a nova fugacidade para esse gás.

Assim, podemos obter a equação de número total de átomos à partir da integração da equação 2.17, em todo o espaço, fornecendo o número total de átomos N , eliminando assim a dependência espacial de coordenadas. Ou seja:

$$N = \int_0^{\infty} n'(\mu, T, r) d^3r = \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega}\right)^3 g_3(z), \quad (2.18)$$

onde consideramos o caso isotrópico das frequências e a variável r é expressa por $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$. No apêndice B, é apresentado de forma explícita o cálculo tanto para o caso isotrópico quanto para o caso anisotrópico.

Para o caso anisotrópico, temos: $\omega = \omega_{ho} = (\omega_x \omega_y \omega_z)^{1/3}$. Na expressão 2.18, k_B e $\hbar$ são constantes universais de Boltzmann e de Planck, respectivamente, e a fugacidade z é obtida resolvendo essa equação. Para encontrar um valor de z precisamos de N e ω na equação 2.18, além da temperatura T . Assim, podemos obter o primeiro valor da fugacidade z para essa temperatura T . Mantendo N e ω fixos, outros valores de z podem ser obtidos conforme um determinado valor da temperatura T . Futuramente veremos que a equação 2.18 pode apresentar três ou mais termos ao invés de apenas um. ¹⁸

Em seguida, a fração de partículas pode ser obtida à partir da equação de N , utilizando-se a equação 2.18. Quando se mapeia a fugacidade z como descrito a pouco, notamos que ela tem valores próximos a um, numa faixa de temperatura de $T = 0$ à $T = T_0$ e depois ela decai. Então podemos, via equação 2.18, "saturar" a fugacidade em $z \approx 1$ e obter o valor aproximado da temperatura de transição, que é expressa por:

$$T_0 = \frac{\hbar\omega_{ho}}{k_B} \left[\frac{N}{\zeta(3)} \right]^{1/3}. \quad (2.19)$$

Para $T \leq T_c$, onde há condensado, a equação 2.18 pode ser nomeada como ($N_T = N$) e utilizando a equação 2.19, chegamos na expressão:

$$N_T = N \left(\frac{T}{T_0} \right)^3, \quad (2.20)$$

que representa o número de átomos térmicos, que estão em estados excitados de energia, do gás ideal armadilhado. O condensado é onde os átomos estão no estado de menor energia.

É interessante notar que se integrarmos a densidade da equação 2.17 em todo o espaço, considerando nulo o potencial químico em $T \leq T_0$, chegamos no mesmo resultado da equação 2.20. Na integral que envolve a densidade $N_T = \frac{1}{\lambda_T^3} \int_0^\infty \sum_{l=1}^\infty \frac{e^{-\beta U_{ext,l}}}{l^{3/2}} d^3r$, foi utilizado o potencial isotrópico.

Um outro ponto de se observar é que N_T diminui com a temperatura e sabe-se que esses átomos ejetados vão popular o estado de mais baixa energia, pois a temperatura está diminuindo. Então podemos escrever uma equação de conservação do número total N ⁷:

$$N = N_0 + N_T, \quad (2.21)$$

onde N_0 representa os átomos condensado. Utilizando as equações 2.20 e 2.21, chegamos em:

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_0} \right)^3, \quad (2.22)$$

cujas expressões representam a fração de partículas do condensado. ^{6,7}

Em relação ao que foi exposto nessa seção, podemos notar que a densidade de um gás ideal armadilhado e que passou por um processo de integração, forneceu diretamente uma equação de número N_T para átomos térmicos e indiretamente uma expressão para átomos do condensado N_0 .

No que diz respeito ao gás interagente armadilhado, ele será retomado mais adiante apresentando-se a equação da densidade do condensado e a respectiva utilização, além de comentários adicionais.

2.3 Os modelos: aproximação contínua e variáveis globais, aspectos gerais

Nessa seção, iremos expor os aspectos gerais dos dois modelos utilizados no projeto: o de aproximação contínua CA e o de variáveis globais GV. Na primeira parte, abordaremos o modelo CA e em seguida, o modelo GV.

Para nossos estudos podemos contornar a inhomogeneidade da densidade, considerando o número total de átomos que ocupa um certo volume no espaço. Ao tirar a razão do número de átomos pelo volume, estamos calculando a densidade média do sistema. É nesse sentido que iremos desenvolver as expressões de interesse e é válida tanto para o condensado quanto para os átomos térmicos.

Esse procedimento de média geral é bem aplicado para o gás ideal armadilhado. No caso do gás interagente e especificamente para o condensado, substituímos o termo de dependência local por uma média do sistema, ou seja, dividimos o número de átomos pelo volume ocupado no espaço.

Assim tem-se uma outra forma de interpretar o modelo da aproximação contínua CA ^{1,7}, além da interpretação que se tem, quando se faz a integração das densidades. Também podemos citar o uso da densidade de estado para obter a equação de número N , através da transformação de série em integral.

Como veremos, tanto para o gás ideal armadilhado quanto para o gás interagente, em nenhum momento aparece dependência espacial de coordenadas (x, y, z) nas expressões algébricas e mesmo assim se consegue obter alguns resultados de interesse, que são: a energia total (E) do sistema, a densidade total (n), a compressibilidade isotérmica (κ_T) e a capacidade térmica C_V .

No caso do gás ideal armadilhado, para o modelo CA, as informações necessárias são: (N) número total de átomos, (N_0) número de átomos do condensado, (N_T) número de átomos térmicos, temperatura (T) e as frequências da armadilha (ω_i), onde ($i = r, z$) são as direções ortogonais. Já no caso do gás interagente, no mesmo modelo, são necessárias as mesmas informações que foram citados para o gás ideal armadilhado, além do comprimento de espalhamento (a_s), cujo valor utilizado em todo os nossos estudos foi de $a_s \approx 5,2 \times 10^{-9}$ m, para o ^{87}Rb ^{7,19}. Assim temos tudo o que precisamos para o gás interagente, para obter as densidades do condensado n_0 e dos átomos térmicos n_T , a compressibilidade isotérmica κ_T , a energia total E e a capacidade térmica C_V .

Agora descreveremos sucintamente o modelo das variáveis globais, que foi originalmente publicado em 2005 por Bagnato e Rochin ¹². Nesse modelo o parâmetro de referência se baseia em duas variáveis conjugadas: O de volume "harmônico" ($\mathcal{V}$) e da pressão "harmônica" (Π), onde o produto dessas duas variáveis resulta em energia. Para caracterizar esse modelo, podemos iniciar com o gás ideal armadilhado e construir o grande potencial (Ω) para tal sistema ¹²:

$$\Omega = -k_B T \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_{ho}} \right)^3 g_4(z). \quad (2.23)$$

Da expressão 2.23, se reconhece o volume harmônico:

$$\mathcal{V} = \frac{1}{\omega_{ho}^3}, \quad (2.24)$$

onde $\omega_{ho} = (\omega_x \omega_y \omega_z)^{1/3}$ é a média geométrica das frequências da armadilha. Em relação ao

parâmetro de pressão, para obtê-lo basta tomar a derivada parcial do grande potencial em relação ao volume harmônico: $\Pi = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mathcal{V}} \right)$.

Como veremos em seções futuras, a partir do grande potencial Ω do gás ideal armadilhado, podem ser obtidos: o número total de átomos N , a energia total E , o que por sua vez se obtém a capacidade térmica C_V , e a compressibilidade isotérmica κ_T .

Em relação ao gás interagente na GV, se obtém o parâmetro de pressão Π a partir da energia livre de Helmholtz F , ^{2,13-15}:

$$F = - \frac{1}{\beta} \ln (\text{Tr } e^{-\beta \hat{H}}), \quad (2.25)$$

$$\Pi = - \left(\frac{\partial F}{\partial \mathcal{V}} \right), \quad (2.26)$$

onde em F , $\beta = (1/k_B T)$ e $\hat{H} = (\hat{K} + \hat{U}_{int} + \hat{V}_{ext})$ é o operador hamiltoniano, com as energias cinética, de interação e o potencial externo.

Com o parâmetro de pressão Π é possível obter-se a energia total E do sistema ¹⁴ e por consequência C_V . A compressibilidade isotérmica κ_T , também deriva de Π , através de manipulações algébricas.

Gostaríamos de salientar que a energia livre de Helmholtz F ², já estava estabelecida na literatura bem antes do surgimento do modelo GV e que foi utilizada pelos pesquisadores do modelo em questão.

Assim como no modelo CA, o modelo GV busca superar a dependência local e espacial da densidade.

2.4 O gás ideal armadilhado, no modelo CA, C_V e κ_T

Iniciamos apresentando a equação de número N e a obtenção da temperatura crítica T_c , à partir dessa equação. Depois apresentamos a energia total E e a obtenção da capacidade térmica à partir dessa grandeza. Na sequência, temos a determinação dos volumes e das densidades. E por último, a obtenção da compressibilidade isotérmica à partir das densidades.

O gás ideal é aquele em que não há interação entre os átomos e armadilhado pelo fato de estar submetido a um potencial harmônico externo, de confinamento $U_{ext}(x, y, z)$ ⁷. Como estamos estudando o gás no regime quântico, precisamos de uma estatística que seja adequada. No caso se trata da estatística de Bose-Einstein por se tratar de bósons e com ela pode-se obter as primeiras quantidades termodinâmicas.

De acordo com a estatística de Bose-Einstein,

$$\langle n_{n_x, n_y, n_z} \rangle = \frac{1}{e^{\beta(E_{n_x, n_y, n_z} - \mu)} - 1}, \quad (2.27)$$

tem-se o número médio de partículas que ocupam o mesmo estado energético. Através dela pode ser determinado o número total de átomos N e a energia total E . Na equação 2.27, (n_x, n_y, n_z) representa os números quânticos, E_{n_x, n_y, n_z} é a energia de cada estado e μ é o potencial químico.

A seguir são apresentadas as equações gerais, para número total de átomos N :

$$N = \sum_{n_x, n_y, n_z} \left(\frac{1}{e^{\beta(E_{n_x, n_y, n_z} - \mu)} - 1} \right), \quad (2.28)$$

e a energia total E :

$$E = \sum_{n_x, n_y, n_z} E_{n_x, n_y, n_z} \left(\frac{1}{e^{\beta(E_{n_x, n_y, n_z} - \mu)} - 1} \right). \quad (2.29)$$

Com as equações 2.28 e 2.29 tem todo um procedimento para se chegar em integrais e fazer os cálculos. Na seção 2.1 foi demonstrado como se transforma o símbolo da série pelo símbolo da integral, considerando a densidade de estados $g(\epsilon)$. Nessa passagem da série para integral e os cálculos realizados vê-se uma outra forma de observar o surgimento do modelo de aproximação contínua CA, além de outro ponto de vista já mencionado na seção 2.2. Em ^{1,7} podem ser obtidos maiores detalhes.

Assim tem-se a primeira quantidade termodinâmica para o gás ideal armadilhado, que é a equação para N ¹:

$$N = \left(\frac{z}{1-z} \right) + \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_{ho}} \right)^3 g_3(z) + \gamma \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_{ho}} \right)^2 g_2(z), \quad (2.30)$$

com a fugacidade z expressa por: $z = e^{\beta(\mu - E_0)}$.

Em relação a equação 2.30, seguem as informações:

$\beta = \frac{1}{k_B T}$, $E_0 = \frac{\hbar}{2} (\omega_x + \omega_y + \omega_z)$ é a energia de ponto zero, ω_{ho} é a média geométrica das frequências da armadilha, $g_n(z) = \sum_{l=1}^{\infty} \left(\frac{z^l}{l^n} \right)$ é a função de Bose-Einstein e $\gamma = \frac{3}{2} \left(\frac{\bar{\omega}}{\omega_{ho}} \right)$ ¹¹ é um parâmetro dependente da geometria da armadilha, com $\bar{\omega} = \frac{\omega_x + \omega_y + \omega_z}{3}$. A fugacidade z tem grande importância para auxiliar na determinação do potencial químico μ do gás interagente.

O primeiro termo da equação 2.30 representa o número de átomos no estado de mais baixa energia, N_0 , e os demais termos representam os átomos térmicos, N_T .

Com a equação 2.30, a temperatura crítica T_c do sistema pode ser obtida de forma algébrica, marco inicial para a condensação. Conhecendo o comportamento da fugacidade, pode-se então "saturar" a fugacidade na equação 2.30 para $z \approx 1$ e impor a condição que no início da condensação, $N_0 = 0$. Assim a temperatura crítica nessas condições, pode ser expressa como:

$$T_c = \frac{\hbar \omega_{ho}}{k_B} \left[\frac{N}{\zeta(3)} \right]^{1/3} \left[1 - \gamma \frac{\zeta(2)}{N} \left(\frac{k_B T_c}{\hbar \omega_{ho}} \right)^2 \right]^{1/3}. \quad (2.31)$$

A temperatura T_c pode também ser expressa da seguinte maneira ¹:

$$T_c \approx T_0 \left[1 - \frac{\gamma}{3} \left(\frac{\zeta(2)}{\zeta(3)^{2/3}} \right) \left(\frac{1}{N^{1/3}} \right) \right], \quad (2.32)$$

onde $T_0 = \frac{\hbar\omega_{ho}}{k_B} \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{1/3}$.

A temperatura T_c , dada pela equação 2.31 acima, é importante porque marca a ocorrência da transição de fase quântica, além da mudança de comportamento de outras quantidades termodinâmicas, como veremos no capítulo 3. Uma característica marcante de T_c é que ela é menor que T_0 , devido ao valor finito de N , mas a medida que N tende para o limite termodinâmico, ou seja, N tendendo ao infinito, $T_c \rightarrow T_0$, como pode ser notado mais claramente pela equação 2.32.

Na sequência apresentamos a energia total E ¹, para o gás ideal armadilhado em CA:

$$E = \left(\frac{3k_B T_0 N}{\zeta(3)} \right) t^4 g_4(z) + 2\gamma k_B T_0 \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{2/3} t^3 g_3(z) + N E_0, \quad (2.33)$$

onde $t = \frac{T}{T_0}$ é a temperatura reduzida, sendo T a temperatura da amostra. A temperatura reduzida t , de interesse, se restringe ao regime quântico, que predominantemente se encontra na faixa de $0 \leq t \approx 2$.

Pela energia E nota-se a importância de se obter a fugacidade z mencionada antes, e como será visto ela também é importante em outras grandezas.

Em seguida, a capacidade térmica C_V , será expressa através da relação termodinâmica:

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right) = \frac{1}{T_0} \left(\frac{\partial E}{\partial t} \right), \quad (2.34)$$

que nos indica o quanto de energia entra ou sai do sistema por unidade de temperatura. A expressão para o gás em questão é:

$$\begin{aligned} C_V = & 12k_B \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right) t^3 g_4(z) + 6\gamma k_B \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{2/3} t^2 g_3(z) + \\ & + \left[3k_B T_0 \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right) t^4 g_3(z) + 2\gamma k_B T_0 \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{2/3} t^3 g_2(z) \right] \left(\frac{-3}{T_0 t} \right) \times \\ & \times \left(\frac{g_3(z) + (2\gamma/3)(\zeta(3)/N)^{1/3}(1/t)g_2(z)}{\left(\frac{z}{(1-z)^2} \right) \left(\frac{\zeta(3)}{N} \right)^{1/3} + g_2(z) + \gamma(\zeta(3)/N)^{1/3}(1/t)g_1(z)} \right). \end{aligned} \quad (2.35)$$

Além da expressão analítica, a capacidade térmica poderia ser obtida também diretamente da derivada numérica da energia, chegando no mesmo resultado, através dos códigos computacionais que gera os gráficos. Queremos salientar que a equação 2.35 possui uma pequena correção de adição em relação a Grossmann e Holthaus¹, cujo o termo é: $\left(\frac{z}{(1-z)^2} \frac{\zeta(3)}{N} \frac{1}{t^3} \right)$ e que faz uma diferença considerável na geração de resultados, caso não tenha esse termo.

Agora podemos ir para uma outra etapa, cujo objetivo é encontrar as densidades de número, tanto para o condensado quanto para os átomos térmicos. Pela densidade é possível obter a compressibilidade isotérmica. Primeiramente, precisamos de expressões que representem

realisticamente o volume que os átomos ocupam espaço, observando que o gás não tem paredes que o confina, pois o mesmo é formado devido a ação de um potencial externo de confinamento.

Para um gás ideal armadilhado, as dimensões do condensado se restringe ao comprimento do oscilador a_i :

$$a_i = \left(\frac{\hbar}{m\omega_i} \right)^{1/2}, \quad (2.36)$$

no qual $i = (r, z)$, são as direções. Em relação aos átomos térmicos, o volume é um pouco maior que o condensado e por isso as direções precisa de um fator de ampliação, o que permite gerar as seguintes direções¹⁷: $R_i = a_i(k_B T / \hbar \omega_i)^{1/2}$. No caso de um oscilador anisotrópico, o volume pode ser representado por um elipsoide: $V = (4\pi/3)abc$, onde a, b, c são os semi-eixos do elipsoide. Esse volume será válido tanto para os átomos térmicos, quanto para o condensado, bastando substituir as direções adequadamente.

A seguir são expressos, o volume do condensado (V_0) e o volume dos átomos térmicos (V_T):

$$V_0 = \left(\frac{4\pi}{3} \right) \left(\frac{\hbar}{m} \right)^{3/2} \left(\frac{1}{\omega_r} \right) \left(\frac{1}{\omega_z} \right)^{1/2}, \quad (2.37)$$

$$V_T = \left(\frac{4\pi}{3} \right) \left(\frac{k_B T_0 t}{m} \right)^{3/2} \left(\frac{1}{\omega_r^2} \right) \left(\frac{1}{\omega_z} \right), \quad (2.38)$$

onde os índices r e z são as direções radial e axial, respectivamente. Queremos emitir um alerta sobre a equação 2.38, referente ao volume dos átomos térmicos. Possivelmente ela tem um fator numérico de 2 multiplicando-a, evidência que foi notada ao longo do projeto. Também, na última seção desse capítulo, tem-se uma discussão sobre o surgimento desse fator 2, na equação 2.38. Assim, nas expressões que dependem da equação 2.38, iremos considerar esse fator numérico, nos dois modelos CA e GV, e inclusive para os resultados.

Uma vez que se tem o número de átomos e o volume, pode ser encontrado a densidade, pelo cálculo da razão de um pelo outro. Utilizando a equação 2.30 reescrita em termos de T_0 , temos:

$$n_0 = \frac{\left(\frac{z}{1-z} \right)}{\left(\frac{4\pi}{3} \right) \left(\frac{\hbar}{m} \right)^{3/2} \left(\frac{1}{\omega_r} \right) \left(\frac{1}{\omega_z} \right)^{1/2}}, \quad (2.39)$$

$$n_T = \frac{\left(\frac{N}{\zeta(3)} \right) t^3 g_3(z) + \gamma \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{2/3} t^2 g_2(z)}{\left(\frac{4\pi}{3} \right) \left(\frac{k_B T_0 t}{m} \right)^{3/2} \left(\frac{1}{\omega_r^2} \right) \left(\frac{2}{\omega_z} \right)}, \quad (2.40)$$

onde n_0 é a densidade do condensado e n_T é a densidade dos átomos térmicos. Com a densidade total do sistema $n = (n_0 + n_T)$, podemos encontrar a compressibilidade isotérmica κ_T , através da relação:

$$\kappa_T = \frac{1}{n^2} \left(\frac{\partial n}{\partial \mu} \right), \quad (2.41)$$

cujo o significado Físico revela o quanto a densidade do sistema varia em relação a adição ou subtração de partículas, relacionadas ao potencial químico μ .

Por consequência, a compressibilidade isotérmica κ_T para o gás ideal armadilhado em CA, pode ser expressa por:

$$\kappa_T = \frac{1}{(n_0 + n_T)^2} \beta \left(\frac{n_0}{(1-z)} + c_1 g_2(z) + c_2 g_1(z) \right), \quad (2.42)$$

onde as constantes $c_i, i = 1, 2$, são expressas por:

$$c_1 = \frac{\left(\frac{N}{\zeta(3)} \right) t^3}{\left(\frac{4\pi}{3} \right) \left(\frac{k_B T_0 t}{m} \right)^{3/2} \left(\frac{1}{\omega_r^2} \right) \left(\frac{2}{\omega_z} \right)}. \quad (2.43)$$

$$c_2 = \frac{\gamma \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{2/3} t^2}{\left(\frac{4\pi}{3} \right) \left(\frac{k_B T_0 t}{m} \right)^{3/2} \left(\frac{1}{\omega_r^2} \right) \left(\frac{2}{\omega_z} \right)}. \quad (2.44)$$

2.5 O gás ideal armadilhado, no modelo GV, C_V e κ_T

Nessa seção, iniciamos com a apresentação de relações termodinâmicas e com as respectivas quantidades termodinâmicas de maior interesse, como: energia total e do parâmetro de pressão, que permite obter a capacidade térmica e a compressibilidade isotérmica, respectivamente.

Inicialmente é preciso determinar o grande potencial Ω , que possibilita obter outras quantidades termodinâmicas de interesse ¹²:

$$\Omega = -k_B T \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_{ho}} \right)^3 g_4(z). \quad (2.45)$$

Utilizando relações termodinâmicas ^{7,12}, temos:

$$N = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = \left(\frac{k_B T_0 t}{\hbar \omega_{ho}} \right)^3 g_3(z), \quad (2.46)$$

$$E = \Omega - T \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right) - \mu \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right), \quad (2.47)$$

$$\Pi = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mathcal{V}} \right) = \frac{(k_B T_0)^4}{\hbar^3} t^4 g_4(z), \quad (2.48)$$

onde N é o número total de átomos, E é a energia total e Π o parâmetro de pressão. As expressões para a energia, são as seguintes:

$$E = 3k_B T_0 \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right) t^4 \zeta(4) \quad t \leq 1, \quad (2.49)$$

$$E = 3k_B T_0 N t \left(\frac{g_4(z)}{g_3(z)} \right) \quad t > 1. \quad (2.50)$$

Para o modelo da GV, a fugacidade z é simplesmente: $z = e^{\mu/k_B T}$ e os outros parâmetros que estão presentes em N , E e Π , tem o mesmo significado daqueles parâmetros que foram citados em outras expressões, ao longo do capítulo, como por exemplo o gás ideal armadilhado de CA.

Fazendo uma observação em relação a equação 2.46, ela não possui a parte que representa os átomos do condensado N_0 , quando se faz a comparação com outras expressões: gás ideal livre de Bose e gás ideal armadilhado em CA, no início do capítulo. Assim a equação 2.46 representa apenas os átomos térmicos. Considerando a faixa de temperatura $t \leq 1$, temos que $N = N_T$ e a expressão cresce com t^3 , pois $z \approx 1$. Para $t > 1$ a equação 2.46 tem temperatura crescente ao cubo, mas a função $g_3(z)$ diminui rapidamente, deixando N aproximadamente linear.

Para a fugacidade adotada no modelo, foi considerado o caso em que há inversão da série de $g_n(z)$ gerando uma outra série para z . Nessa última série foi considerado somente os três primeiros coeficientes, quando $z < 1$ e a temperatura é $t > 1$.²⁰

A fugacidade z , para $t > 1$, pode ser expressa por:

$$z \approx \left[1, 2 \left(\frac{1}{t^3} \right) - 0, 18 \left(\frac{1}{t^6} \right) - 0, 01 \left(\frac{1}{t^9} \right) \right] e^{\left(\frac{-E_0}{k_B T_0 t} \right)}, \quad (2.51)$$

onde o termo que multiplica os colchetes foi uma adaptação realizada por nós, tomando como referência a fugacidade do gás ideal armadilhado em CA. O motivo da adaptação é que a fugacidade tem uma certa variação em relação ao valor de N . Por fim quando a temperatura é $t \leq 1$, está sendo considerado que $z = 1$.

Utilizando as expressões 2.49 e 2.50, pode ser obtido a capacidade térmica C_V , como segue:

$$C_V = 12Nk_B \left(\frac{\zeta(4)}{\zeta(3)} \right) t^3 \quad t \leq 1, \quad (2.52)$$

$$C_V = Nk_B \left[12 \left(\frac{g_4(z)}{g_3(z)} \right) - 9 \left(\frac{g_3(z)}{g_2(z)} \right) \right], \quad t > 1. \quad (2.53)$$

Na sequência, apresentamos a compressibilidade isotérmica κ_T , para átomos térmicos, no modelo GV. Inicialmente é preciso escrever o grande potencial Ω em termos das variáveis globais^{7,12}, e depois precisamos da definição usual de compressibilidade isotérmica κ_T , que ao relacionar as duas expressões, permite obter a expressão de κ_T , isto é:

$$\Omega = -PV = -\Pi V. \quad (2.54)$$

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right). \quad (2.55)$$

Com um pouco de manipulação algébrica com as duas últimas expressões, temos:

$$\kappa_T = -\frac{V}{\mathcal{V}^2} \left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial \Pi} \right). \quad (2.56)$$

A direção contrária também é válida, ou seja, se forem utilizadas as equações 2.56 e 2.54, chega-se novamente na equação 2.55. Gostaríamos de fazer uma observação em relação a equação 2.56, no que se refere ao volume V , pois esse volume pode ser reescrito em função da variável $\mathcal{V}$, com constantes de normalização. O objetivo dessa observação é mostrar que a equação 2.56 não possui três variáveis e sim apenas duas.

Se tomarmos como referência a equação 2.37 do volume V_0 do condensado, para o gás ideal armadilhado em CA, tem-se que:

$$V_0 = \left(\frac{4\pi}{3} \right) \left(\frac{\hbar}{m} \right)^{3/2} \left(\frac{1}{\omega_r} \right) \left(\frac{1}{\omega_z} \right)^{1/2} = c_4 \left(\frac{1}{\omega_r} \right) \left(\frac{1}{\omega_z} \right)^{1/2} = c_4 \mathcal{V}^{1/2}, \quad (2.57)$$

onde c_4 é uma constante.

Em relação ao volume dos átomos térmicos V_T do gás ideal armadilhado em CA, e utilizando a equação 2.38, tem-se que:

$$V_T = \left(\frac{4\pi}{3} \right) \left(\frac{k_B T_0}{m} \right)^{3/2} \left(\frac{1}{\omega_r^2} \right) \left(\frac{2}{\omega_z} \right) = c_5 \left(\frac{1}{\omega_r^2} \right) \left(\frac{1}{\omega_z} \right) = c_5 \mathcal{V}, \quad (2.58)$$

onde c_5 é uma constante. Mencionamos que c_5 é uma constante porque a compressibilidade é isotérmica.

Assim pela equação 2.54, $\Omega = -PV = -\Pi\mathcal{V}$, temos a variável $\mathcal{V}$ de um lado e $\mathcal{V}$ normalizado do outro lado, representando o volume, válido apenas para κ_T .

A equação 2.56 surgiu de uma necessidade, de se comparar quantidades termodinâmicas de modelos diferentes, pois não se tinha até o momento uma expressão equivalente para κ_T em GV. A expressão foi uma iniciativa de nossa parte e observando o aspecto físico, ela possui sentido. O que se tinha na GV era uma outra grandeza: a semi-compressibilidade isotérmica, que possuía alguma proximidade com o comportamento de κ_T . Nós identificamos como sendo semi-compressibilidade através da equação: $\Omega = -PV = -\Pi\mathcal{V}$. Se derivarmos $\Omega = -PV$, com $\Omega = cte$, deduzimos a expressão da compressibilidade isotérmica convencional: $\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)$. Agora, se derivarmos $\Omega = -\Pi\mathcal{V}$, com $\Omega = cte$, deduzimos a expressão da semi-compressibilidade isotérmica: $\kappa_G = -\frac{1}{\mathcal{V}} \left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial \Pi} \right)$, pois o volume harmônico $\mathcal{V}$ está relacionado com as frequências da armadilha e não representa diretamente o volume cartesiano do sistema. Dessa forma, a semi-compressibilidade tem dimensão própria, diferente de dimensão de compressibilidade, e é uma grandeza exclusiva da GV. ^{12,21}

Uma vez que se tem o volume V , o parâmetro de pressão Π e o volume harmônico $\mathcal{V}$, pode ser obtido a compressibilidade isotérmica na GV. Antes de as expressões serem apresentadas, queremos lembrar que, no gás ideal armadilhado em GV, apenas os átomos térmicos estão presentes e por isso será utilizado o volume V_T da expressão 2.38.

As expressões para o $\kappa_T = \kappa_T^{th}$ do gás ideal armadilhado em GV, são:

$$\kappa_T^{th} = \frac{8\pi}{3} \left[\frac{(k_B T_0)^{1/2}}{m^{3/2}} \right] \frac{1}{N} \left(\frac{1}{\omega_z} \right) \left(\frac{1}{\omega_r^2} \right) \left[\frac{\zeta(3)}{\zeta(4)} \right] \frac{1}{t^{5/2}} \quad t \leq 1, \quad (2.59)$$

$$\kappa_T^{th} = \frac{8\pi}{3} \left[\frac{(k_B T_0)^{1/2}}{m^{3/2}} \right] \frac{1}{N} \left(\frac{1}{\omega_z} \right) \left(\frac{1}{\omega_r^2} \right) \left(\frac{g_3(z)}{g_4(z)} \right) t^{1/2} \quad t > 1. \quad (2.60)$$

Em seguida apresentamos a compressibilidade isotérmica κ_T total, que envolve átomos térmicos e condensado, para o gás ideal armadilhado no modelo GV.

Ao longo de nosso trabalho, mencionamos que o gás ideal armadilhado no modelo da GV não levava em consideração os átomos do condensado N_0 , conforme os primeiros pesquisadores do modelo em 2005 ¹². Porém essa consideração pode ser feita se nos basearmos no modelo de CA, para o gás ideal armadilhado e também por Cuevas ²². O pesquisador mencionado por último, introduziu o N_0 no modelo da GV, para o gás ideal armadilhado e irá nos fornecer o parâmetro de pressão Π_0 do condensado.

A equação de número N para esse sistema fica:

$$N = N_0 + \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_{ho}} \right)^3 g_3(z), \quad (2.61)$$

onde $N_0 = \frac{z}{1-z}$.

Se for utilizado a expressão de N_0 e a equação 2.22 da fração de partículas para condensado, temos a fugacidade z , para $t < 1$ e até próximo de $t = 1$. A equação dessa fugacidade, pode ser expressa como:

$$z = \frac{N(1-t^3)}{N(1-t^3) + 1} \quad t < 1, \quad (2.62)$$

cujo os valores são sempre $z < 1$.

Considerando o parâmetro de pressão total: $\Pi = \Pi_0 + \Pi_T$, com Π_0 de Cuevas ²², e as expressões abaixo:

$$\Pi_0 = -\frac{k_B T}{\mathcal{V}} \ln(1-z) \quad t < 1, \quad (2.63)$$

$$\Pi_T = \frac{k_B T}{\mathcal{V}} \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_{ho}} \right)^3 g_4(z) \quad t < 1, \quad (2.64)$$

$$\Pi_T = \frac{k_B T}{\mathcal{V}} N \frac{g_4(z)}{g_3(z)} \quad t > 1, \quad (2.65)$$

$$\Pi_0 = 0 \quad t > 1, \quad (2.66)$$

pode serem obtidas as expressões para a compressibilidade isotérmica total κ_T , no modelo GV e para o gás ideal armadilhado.

Utilizando a relação termodinâmica pertinente para o modelo, temos:

$$\kappa_T = \frac{\left(\frac{4\pi}{3}\right) \left(\frac{\hbar}{m}\right)^{3/2} \left(\frac{1}{\omega_r}\right) \left(\frac{1}{\omega_z}\right)^{1/2}}{k_B t T_0 \left(-\ln(1-z) + \left(\frac{k_B t T_0}{\hbar \omega_{ho}}\right)^3 g_4(z)\right)} \quad t < 1, \quad (2.67)$$

$$\kappa_T = \frac{\left(\frac{4\pi}{3}\right) \left(\frac{k_B T_0 t}{m}\right)^{3/2} \left(\frac{1}{\omega_r^2}\right) \left(\frac{1}{\omega_z}\right)^2}{k_B t T_0 N} \left(\frac{g_3(z)}{g_4(z)}\right) \quad t > 1, \quad (2.68)$$

onde os volumes utilizados, são os mesmos da seção do modelo do gás ideal armadilhado em CA, V_0 e V_T .

Para $t > 1$, a fugacidade z é dada pela equação 2.51.

2.6 O gás interagente, no modelo CA, C_V e κ_T

Nessa seção, como em outras, temos inicialmente as considerações prévias. Começamos com apresentação da densidade do condensado, que permite obter o potencial químico μ , em $T = 0$, à partir da normalização. Depois é apresentada uma correção algébrica no potencial químico, numa faixa de temperatura que vai de $T = 0$ à $T = T_0$. Com a correção do potencial químico, é possível de obter a energia total E do sistema, o que por consequência pode ser obtido a capacidade térmica. Por fim são apresentadas as densidades dos átomos, condensado e térmicos, e a compressibilidade isotérmica, à partir delas.

O gás interagente armadilhado, assim como no gás ideal armadilhado, é composto por duas partes: o condensado de Bose-Einstein e os átomos térmicos. No condensado, a interação entre os átomos deve ser considerada, pois eles estão próximos entre si. Já para os átomos térmicos, a interação entre eles é extremamente fraca⁷, pois eles estão muito diluídos e por isso o tratamento para eles será o mesmo que foi dado para os átomos térmicos do gás ideal armadilhado em CA. Uma das motivações de se estudar o gás ideal armadilhado é a sua contribuição no gás interagente.

Devido a interação entre os átomos é que se tem um tratamento diferenciado para o gás.

Para estudar o condensado do gás interagente, utilizaremos a equação de Gross-Pitaevskii^{7,17}, sendo expressa por:

$$\left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U_{ext}(x, y, z) + g|\Psi_0(\vec{r})|^2\right) \Psi_0(\vec{r}) = \mu \Psi_0(\vec{r}), \quad (2.69)$$

onde entre parênteses e na sequência temos: a energia cinética, o potencial externo e a energia de interação entre dois átomos. Dos dois lados da equação tem a função de onda e μ é o potencial químico.

Como se sabe, os átomos do condensado estão no estado de mais baixa energia e com energia cinética desprezível. Por esse motivo, a energia cinética pode ser desconsiderada na

equação 2.69, e assim podemos obter a expressão que representa o perfil da densidade do condensado. Essa interpretação mencionada por último é conhecida como aproximação de Thomas-Fermi e o perfil de densidade está representado pelo módulo da função de onda ao quadrado. Assim a densidade do condensado $n_0(x, y, z)$ pode ser expressa como ⁷:

$$n_0(x, y, z) = g^{-1}[\mu - U_{ext}(x, y, z)]. \quad (2.70)$$

Na densidade do condensado, g é uma constante dada por $g = \left(\frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\right)$, onde a é o comprimento de espalhamento, identificada também por ($a = a_s$) cuja a origem e o significado está presente na literatura ^{6,9,17}. O potencial externo $U_{ext}(x, y, z)$ dado pela equação 2.16, é o que confina átomos na região do espaço, quadrático nas coordenadas espaciais, sendo o mesmo do gás ideal armadilhado em CA, dado pela equação 2.16. Pela densidade do condensado pode ser notado que se trata da densidade local LDA, onde cada porção do condensado tem uma densidade.

A seguir temos o resultado da normalização $N_0 = N$ ¹⁷, que gerou o potencial químico μ , à $T = 0$:

$$\mu = \frac{\hbar\omega_{ho}}{2} \left(\frac{15Na}{a_{ho}}\right)^{2/5}. \quad (2.71)$$

No potencial químico μ , a média geométrica das frequências da armadilha está representada por ω_{ho} e $a_{ho} = \left(\frac{\hbar}{m\omega_{ho}}\right)^{1/2}$ é o comprimento do oscilador.

Na equação 2.71, pode ser notado que o potencial químico é uma constante e com um valor positivo, condição essa que ocorre se fixarmos as frequências, o número total de átomos e o comprimento de espalhamento.

Como veremos na parte de resultados, o gráfico do potencial químico do gás ideal armadilhado em CA, nos revela que numa faixa de temperatura que vai de $T = 0$ à $T \approx T_c$, o potencial químico é próximo de zero. Após T_c , o potencial químico do gás ideal começa a decair e negativamente.

Comparando o potencial químico do gás interagente com o potencial químico do gás ideal armadilhado, notamos que há uma descontinuidade, quando ambos são observados, na região de temperatura próximo a T_c .

Porém como se sabe, essa descontinuidade é inconsistente do ponto de vista Físico. Dalfovo *et al* ¹⁷ notaram que o valor de N na equação 2.71, era um valor aproximado de: $N \approx N_0 = N(1 - t^3)$, quando $T \approx 0$. Assim, na equação 2.71, fazendo a substituição de N por $N(1 - t^3)$, o potencial químico toma a forma de: $\mu = \frac{\hbar\omega_{ho}}{2} \left(\frac{15Na}{a_{ho}}\right)^{2/5} (1 - t^3)^{2/5}$. Desse modo, o problema estava resolvido parcialmente.

Notamos que o expoente (2/5) era apenas um caso particular de todo o processo, e que se esse expoente fosse estendido para um parâmetro genérico, como por exemplo um parâmetro α , o problema da descontinuidade é resolvido.

A seguir, expressamos o novo potencial químico μ' para o gás interagente em CA, válido para $t \leq 1$:

$$\mu' = \frac{\hbar\omega_{ho}}{2} \left(\frac{15Na}{a_{ho}} \right)^{2/5} (1 - t^3)^\alpha. \quad (2.72)$$

Na sequência, iremos desenvolver expressões para se chegar no valor de α , para um dado valor de N .

Primeiro, é preciso que tenhamos uma temperatura de referência, para que seja possível igualar o potencial químico do gás interagente com o potencial químico do gás ideal armadilhado. Esse procedimento é válido pelo fato que estamos considerando que acima de T_c , o gás torna-se ideal. Assim a temperatura de equivalência dos dois gases é obtida do gás ideal armadilhado, conforme a equação 2.32 e expressa na forma reduzida como temperatura de referência t_r :

$$t_r = \frac{T_c}{T_0} = \left[1 - \frac{\gamma}{3} \left(\frac{\zeta(2)}{\zeta(3)^{2/3}} \right) \left(\frac{1}{N^{1/3}} \right) \right]. \quad (2.73)$$

Dessa forma, os potenciais químicos podem ser igualados em t_r , sendo o do gás ideal dado por:

$$\mu'' = k_B T \times \ln(z) + E_0, \quad (2.74)$$

obtido da equação $z = e^{\beta(\mu - E_0)}$.

Considerando o último valor do potencial químico do gás interagente e o primeiro valor do potencial químico gás ideal, expressamos o parâmetro α da seguinte maneira:

$$\alpha = \left[\ln \left(\frac{(t_r k_B T_0 \ln(z^{t_r})) + E_0}{\eta k_B T_0} \right) \right] \left(\frac{1}{\ln(1 - t_r^3)} \right), \quad (2.75)$$

onde o parâmetro η é dado por ⁷:

$$\eta = \left[\frac{\frac{\hbar\omega_{ho}}{2} \left(\frac{15Na}{a_{ho}} \right)^{2/5}}{k_B T_0} \right]. \quad (2.76)$$

O parâmetro α é muito útil para o potencial químico, para a energia total, para a densidade de número, etc. No entanto, não é preciso calculá-lo a todo momento, pois nosso estudo se restringe a apenas alguns valores de N . Como por exemplo para $N = 10^4, 10^5, 10^6$, os valores respectivos são: $\alpha = 0.8621, 1.0035, 1.0372$.

Com os elementos anteriores e com a relação termodinâmica seguinte ⁷, pode ser obtido a energia E do gás interagente, referente apenas a parcela de energia que envolve interação entre os átomos do condensado.

$$\frac{\partial E}{\partial N} = \mu - T \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right). \quad (2.77)$$

Substituindo a equação 2.72 na relação termodinâmica, temos:

$$E = \left[\frac{1}{7} \eta (1 - t^3)^\alpha (5 + 15\alpha t^3) \right] (N k_B T_0). \quad (2.78)$$

A energia de um gás bosônico armadilhado é a energia do gás ideal armadilhado, porém quando se leva em consideração a interação entre os átomos, tem à ser considerado a parcela de energia devido a interação ¹⁷. Dessa forma a energia total E_T do gás interagente em CA, será expressa por:

$$E_T = \left(\frac{3k_B T_0 N}{\zeta(3)} \right) t^4 g_4(z) + 2\gamma k_B T_0 \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{2/3} t^3 g_3(z) + N E_0 + \left[\frac{1}{7} \eta (1 - t^3)^\alpha (5 + 15\alpha t^3) \right] (N k_B T_0). \quad (2.79)$$

Em seguida, podemos obter a capacidade térmica C_V à partir da energia. No entanto, será expresso a parte do C_V que tem apenas a parte da energia com interação, pois a parte do gás ideal armadilhado já foi expressa pela equação 2.35.

$$C_V^{Int} = N k_B \left(\frac{\eta}{7} \right) [(\alpha (1 - t^3)^{\alpha-1}) (-3t^2) (5 + 15\alpha t^3)] + N k_B \left(\frac{\eta}{7} \right) [(1 - t^3)^\alpha (45\alpha t^2)]. \quad (2.80)$$

Para obter a capacidade térmica total, temos que somar a parte da capacidade térmica do gás ideal armadilhado com a parte da capacidade térmica que tem interação.

Para fazer um gráfico de C_V total, foram considerados todos os valores que vão de zero até um valor máximo, no qual esse valor máximo corresponde a temperatura crítica, e depois do valor máximo, a capacidade térmica está sendo representada apenas pelo a do gás ideal armadilhado.

Na sequência, iremos para as densidades do gás interagente. Assim como no gás ideal armadilhado, no gás interagente há duas densidades: a do condensado e a dos átomos térmicos. Antes de chegar nas densidades, serão definidos os volumes que tais gases ocupam no espaço. O volume do condensado é dado pelo elipsoide, cujo os semi-eixos são os raios de Thomas-Fermi, R_x, R_y, R_z , dados pela condição de normalização, e expressos a seguir:

$$\mu = \frac{m}{2} \omega_x^2 R_x^2 = \frac{m}{2} \omega_y^2 R_y^2 = \frac{m}{2} \omega_z^2 R_z^2, \quad (2.81)$$

onde μ provém da equação 2.71. Dessa maneira, a expressão para o volume do condensado, é:

$$V_0^{TF} = \frac{4\pi}{3} a_{ho}^{12/5} (15Na)^{3/5}. \quad (2.82)$$

Para o volume dos átomos térmicos, pode ser aplicado o fator de ampliação: $\left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_i} \right)^{1/2}$, como foi feito no gás ideal e com $i = (x, y, z)$, para cada direção. O volume em questão, fica escrito da seguinte maneira:

$$V_T^{TF} = \frac{4\pi}{3} a_{ho}^{12/5} (15Na)^{3/5} \left(\frac{k_B T_0 t}{\hbar} \right)^{3/2} \frac{1}{\omega_r} \frac{1}{\omega_z^{1/2}}. \quad (2.83)$$

Conhecendo-se os volumes, o próximo passo são as densidades. Para obtermos a densidade do condensado, será utilizada a equação 2.70, em que o potencial químico da expressão

pode ser substituído pelo potencial químico dependente da temperatura, dado pela equação 2.72. Porém, se quisermos novamente integrar a densidade, temos que considerar $t = 0$, para ter o potencial químico em $T = 0$.

Em relação ao segundo termo da equação 2.70, pode ser notado que em uma dada temperatura T , fixa, a densidade do condensado varia somente em termos de coordenadas espaciais, por meio de um ponto $P = (x, y, z)$, percorrendo toda a nuvem.

Para esse segundo termo e ainda para uma temperatura fixa, pode ser tirado uma média das densidades locais, bastando dividir o número de átomos do condensado N_0 pelo volume que eles ocupam V_0^{TF} . A expressão para N_0 é dado pela equação 13.40 de Pitaevskii ⁷, cujo valor de $(2/5)$ da expressão foi substituído pelo α descrito antes.

Finalmente a densidade do condensado n_0^{TF} para o gás interagente em CA, é expresso como:

$$n_0^{TF} = \left[\frac{1}{g} \frac{\hbar \omega_{ho}}{2} \left(\frac{15Na}{a_{ho}} \right)^{2/5} (1 - t^3)^\alpha \right] - \left[\frac{[1 - t^3 - (\zeta(2)/\zeta(3)) \eta t^2 (1 - t^3)^\alpha] N}{\frac{4\pi}{3} a_{ho}^{12/5} (15Na)^{3/5}} \right], \quad (2.84)$$

válida para $t \leq 1$ e cujo o potencial químico μ , está subentendido pela equação 2.71. Para $t > 1$, temos que $n_0^{TF} = 0$.

A densidade dos átomos térmicos pode ser obtida da mesma maneira que o gás ideal armadilhado em CA, pois a interação entre os átomos é muito pequena. No caso foi considerado como número de átomos térmicos, o segundo e terceiro termos da equação de número N , dado por 2.30, e cuja a soma dividindo por V_T^{TF} , gera a densidade desejada: n_T^{TF} , para o gás interagente em CA. A expressão algébrica vem à seguir:

$$n_T^{TF} = \frac{\left(\frac{N}{\zeta(3)} \right) t^3 g_3(z) + \gamma \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{2/3} t^2 g_2(z)}{\frac{4\pi}{3} a_{ho}^{12/5} (15Na)^{3/5} \left(\frac{k_B T_0 t}{\hbar} \right)^{3/2} \left(\frac{1}{\omega_r \omega_z^{1/2}} \right)}. \quad (2.85)$$

A densidade total do sistema, n , será dada pela soma das duas densidades: $n = n_0^{TF} + n_T^{TF}$.

Uma vez que temos a densidade total n , podemos calcular a compressibilidade isotérmica κ_T , utilizando a relação termodinâmica:

$$\kappa_T = \frac{1}{n^2} \left(\frac{\partial n}{\partial \mu} \right). \quad (2.86)$$

A expressão para o κ_T do gás interagente em CA, será expressa como:

$$\kappa_T = \frac{1}{(n_0^{TF} + n_T^{TF})^2} \left[\left(\frac{1}{g} (1 - t^3)^\alpha \right) + \frac{1}{k_B T_0} \left(\frac{[(\zeta(2)/\zeta(3)) t^2 (1 - t^3)^\alpha] N}{\frac{4\pi}{3} \left(\frac{\hbar}{m \omega_{ho}} \right)^{6/5} (15Na)^{3/5}} \right) \right] + \left(\frac{1}{(n_0^{TF} + n_T^{TF})^2} \right) \left[\left(\frac{1}{k_B T_0 t} \right) (c_6 \cdot g_2(z) + c_7 \cdot g_1(z)) \right], \quad (2.87)$$

onde c_6 e c_7 são constantes dadas por:

$$c_6 = \frac{\left(\frac{N}{\zeta(3)}\right) t^3}{\frac{4\pi}{3} \left(\frac{\hbar}{m\omega_{ho}}\right)^{6/5} (15Na)^{3/5} \left(\frac{k_B T_0 t}{\hbar}\right)^{3/2} \frac{1}{\omega_r} \left(\frac{1}{\omega_z^{1/2}}\right)}. \quad (2.88)$$

$$c_7 = \frac{\gamma \left(\frac{N}{\zeta(3)}\right)^{2/3} t^2}{\frac{4\pi}{3} \left(\frac{\hbar}{m\omega_{ho}}\right)^{6/5} (15Na)^{3/5} \left(\frac{k_B T_0 t}{\hbar}\right)^{3/2} \frac{1}{\omega_r} \left(\frac{1}{\omega_z^{1/2}}\right)}. \quad (2.89)$$

2.7 O gás interagente, no modelo GV, C_V e κ_T

Nessa seção, apresentamos o parâmetro de pressão, peculiar ao modelo, e na sequência a energia total, a capacidade térmica e a compressibilidade isotérmica, todos obtidos a partir do parâmetro de pressão.

Para obter o parâmetro Π , podemos tomar como referência o Shiozaki¹⁴. O parâmetro de pressão Π é a soma dos parâmetros: da parte dos átomos térmicos e da parte do condensado, $\Pi = \Pi_T + \Pi_0$. Na parte térmica, está considerando que os átomos tem interação muito fraca entre si e por isso, como foi feito antes, serão tratados como gás ideal armadilhado. As expressões¹⁴ vem a seguir:

$$\Pi_T = \frac{N_T k_B T}{\mathcal{V}}, \quad (2.90)$$

$$\Pi_0 = \frac{mN_0}{21\mathcal{V}} (2\omega_r^2 R_r^2 + \omega_z^2 R_z^2), \quad (2.91)$$

onde R_r e R_z são os raios de Thomas-Fermi.

Porém, essas expressões podem serem reescritas utilizando a condição de normalização $2\mu = m\omega_i^2 R_i^2$, com $i = r, z$ e também a utilização da fração de partículas do condensado, do o gás ideal armadilhado: $N_0/N = 1 - t^3$. Em relação à essa última condição, está sendo considerado uma aproximação.

As expressões reescritas, são apresentadas à seguir:

$$\Pi_T = \frac{N t^4 k_B T_0}{\mathcal{V}} \quad t \leq 1, \quad (2.92)$$

$$\Pi_T = \frac{N t k_B T_0}{\mathcal{V}} \quad t > 1, \quad (2.93)$$

$$\Pi_0 = \frac{2\mu N (1 - t^3)}{7\mathcal{V}} \quad t \leq 1, \quad (2.94)$$

cujo o potencial químico μ é obtido da equação 2.71. Em relação ao condensado, $\Pi_0 = 0$ para $t > 1$.

Com o parâmetro de pressão, também podem ser obtidos a energia total E e a capacidade térmica C_V ¹⁴, como seguem abaixo:

$$E = 3\Pi_T\mathcal{V} + \frac{5}{2}\Pi_0\mathcal{V}, \quad (2.95)$$

$$E = 3Nk_B T_0 t^4 + \frac{5}{7}\mu N(1 - t^3) \quad t \leq 1, \quad (2.96)$$

$$E = 3Nk_B T_0 t \quad t > 1, \quad (2.97)$$

$$C_V = 12Nk_B t^3 - \frac{15}{7}\left(\frac{N\mu}{T_0}\right)t^2 \quad t \leq 1, \quad (2.98)$$

$$C_V = 3Nk_B \quad t > 1. \quad (2.99)$$

Em relação a compressibilidade isotérmica κ_T , foi utilizado a mesma relação termodinâmica do gás ideal armadilhado em GV, com os volumes V_0^{TF} e V_T^{TF} do gás interagente em CA e o parâmetro de pressão do gás interagente em GV.

As expressões são as seguintes:

$$\kappa_T = \frac{28\pi}{3} \left(\frac{\hbar}{m\omega_{ho}}\right)^{6/5} (15Na)^{3/5} \left(\frac{1}{7Nk_B T_0 t^4 + 2\mu N(1 - t^3)}\right) \quad t \leq 1, \quad (2.100)$$

$$\kappa_T = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\hbar}{m\omega_{ho}}\right)^{6/5} (15Na)^{3/5} \left(\frac{k_B T_0 t}{\hbar}\right)^{3/2} \frac{1}{\omega_r} \left(\frac{1}{\omega_z^{1/2}}\right) \left(\frac{1}{Nk_B T_0 t}\right) \quad t > 1. \quad (2.101)$$

Em relação aos volumes utilizados nessa seção para o gás interagente, eles também possuem constantes de normalização, em relação ao parâmetro de volume $\mathcal{V}$, em analogia ao que foi feito para o gás ideal armadilhado, em GV.

2.8 Outras quantidades relacionadas à compressibilidade isotérmica κ_T , modelos CA e GV

Para iniciar essa seção, iremos apresentar uma outra densidade para os átomos térmicos do gás ideal armadilhado, no modelo de CA, e por consequência a compressibilidade isotérmica associada.

Depois no modelo da GV, fazendo a utilização do volume associado a essa outra densidade, obteve-se a compressibilidade isotérmica.

Na sequência, será apresentada a densidade no espaço de fase, para o gás ideal armadilhado em CA e com algumas considerações.

Ainda nessa seção, temos uma outra grandeza peculiar apenas no modelo GV, que é a semi-compressibilidade isotérmica κ_G , tanto para o gás ideal armadilhado quanto para o gás interagente.

Vamos então iniciar com a densidade e a compressibilidade isotérmica, para átomos térmicos em CA.

Uma motivação para a obtenção dessa densidade, que permitiu extrair um outro tipo de volume, foi o livro do Pathria ⁹. Assim temos uma outra maneira de obter o volume e a compressibilidade isotérmica κ_T^{th} , quando comparado em outras seções.

O volume, como nos outros casos estudados, é sem paredes de confinamento e representa a região do espaço onde os átomos térmicos estão presentes.

Para obter tal densidade, podemos nos basear na equação 2.30, do gás ideal armadilhado em CA, somente utilizando a parte térmica e reescrevendo-a de forma a fatorar um dos seus elementos:

$$N_T = \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_{ho}} \right)^3 \left[g_3(z) + \gamma \left(\frac{\hbar \omega_{ho}}{k_B T} \right) g_2(z) \right]. \quad (2.102)$$

O termo fatorado, que é adimensional, pode ser equiparado a uma razão de volumes, de forma que: $\left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_{ho}} \right)^3 = \frac{V'_T}{\lambda_T^3}$. Nessa última expressão, precisamos do volume $V = V'_T$ no numerador para gerar a densidade n e precisamos do λ_T^3 no denominador para continuar com a grandeza de densidade do outro lado da equação. Essa densidade é útil para a compressibilidade isotérmica de átomos térmicos e também para o estudo da densidade do espaço de fase. Essa manipulação algébrica é um reflexo da densidade do gás ideal livre de Bose, vista no começo do capítulo. Dessa forma, obtemos a densidade desejada:

$$n'_T = \frac{N_T}{V'_T} = \left(\frac{1}{\lambda_T^3} \right) \left[g_3(z) + \gamma \left(\frac{\hbar \omega_{ho}}{k_B T} \right) g_2(z) \right], \quad (2.103)$$

onde λ_T é o comprimento de onda térmico.

Reconhecendo que $n'_T = n$ e fazendo o uso da relação termodinâmica para compressibilidade, temos:

$$\kappa_T^{th} = \left(\frac{1}{n'^2_T} \right) \left(\frac{1}{\lambda_T^3 k_B T} \right) \left[g_2(z) + \gamma \left(\frac{\hbar \omega_{ho}}{k_B T} \right) g_1(z) \right]. \quad (2.104)$$

Nessa compressibilidade, pode ser notado um ponto importante: Na equação 2.104 se for reservada uma das densidades n'_T , que está no denominador e juntar com λ_T^3 , pode ser notado que o produto desses dois termos, cancela com termos entre colchetes, quando $g_n(z) \approx z$ ². Esse efeito ocorre quando o sistema está numa temperatura $T \approx 1.5 T_c$ ² ou acima desse valor.

Consequentemente o termo restante $\left(\frac{V'_T}{N_T k_B T} \right)$, coincide com a compressibilidade do gás ideal clássico, que é $\kappa_T = \left(\frac{V}{N k_B T} \right)$ ^{2,9}, como esperado. Esse indicativo reforça o procedimento realizado para obter tal densidade.

Gostaríamos de fazer uma observação em relação ao que foi feito até o momento, nessa seção: a compressibilidade obtida é para ser comparada com o modelo da GV, porém, independentemente da GV poderíamos fazer a compressibilidade total do sistema, considerando o condensado.

Na próxima parte da seção, iremos falar sobre a compressibilidade isotérmica, para átomos térmicos em GV. Para se chegar em tal compressibilidade é preciso de um volume adequado a ser utilizado nas expressões. O volume considerado é o mesmo dessa seção: V'_T . É importante notar que esse mesmo volume poderia ser obtido da equação 2.46, do próprio modelo da GV. Para se chegar na expressão geral de compressibilidade isotérmica, $\kappa_T = \frac{V}{\mathcal{V}}$ do modelo GV, é importante colocar $\mathcal{V}$ de um lado e $\frac{1}{\omega_{ho}^3}$ do outro lado, na expressão 2.48. Em seguida, apresentamos a compressibilidade, para o gás ideal armadilhado em GV:

$$\kappa_T^{th} = \frac{\lambda_T^3}{k_B t T_0 \zeta(4)} \quad t \leq 1, \quad (2.105)$$

$$\kappa_T^{th} = \frac{\lambda_T^3}{k_B t T_0 g_4(z)} \quad t > 1. \quad (2.106)$$

Assim como no modelo de CA, pode ser notado que a compressibilidade isotérmica de átomos térmicos da GV coincide com o κ_T do gás ideal clássico, para temperaturas ligeiramente acima de T_c . Assim, temos um reforço extra do procedimento adotado, agora com um outro modelo de abordagem. Para verificar basta utilizar o volume envolvido no processo e a equação 2.46. Também nessa seção, temos uma abordagem sobre a densidade no espaço de fase. Tomando como referência a seção 2.1, e considerando o gás ideal livre de Bose, a densidade no espaço de fase para esse sistema pode ser expressa como:

$$n\lambda_T^3 \approx \zeta(3/2) \approx 2.6124, \quad (2.107)$$

onde à partir desse valor 2.6124 a condensação de Bose-Einstein, a nível macroscópico, se torna uma realidade. O fenômeno acontece à uma temperatura no entorno da temperatura crítica: $T \approx T_c$.

Seguindo o mesmo raciocínio da seção 2.1, para o gás ideal armadilhado, pode ser obtido a densidade no espaço de fase, utilizando a expressão 2.103:

$$n\lambda_T^3 \approx \zeta(3) + \gamma \left(\frac{\zeta(3)}{N} \right)^{1/3} \zeta(2), \quad (2.108)$$

que ao ser reescrita, nos fornece: $n\lambda_T^3 = 1,2 + \frac{1,75}{N^{1/3}}\gamma$, com $\gamma = 2,2$ em nosso projeto. Na expressão, foi considerado a aproximação de $t \approx 1$, para a saturação, em paralelo com as funções $g_n(z)$ saturadas: $g_n(1) = \zeta(n)$. Queremos salientar que em relação a essa densidade no espaço de fase, expressa por último, não se tem paralelo na literatura, considerando referências importantes que envolvem condensados de Bose-Einstein. ^{6,7,9}

Um outro comentário a ser feito, se refere a comparação de densidades, dos átomos térmicos do gás ideal armadilhado em CA, com a densidade dessa seção. Surpreendentemente as duas densidades, n_T da equação 2.40 e n'_T da equação 2.103, são equivalentes, desde que essa última densidade seja multiplicada por um fator de 2, ou seja, $n_T \approx 2 n'_T$. O resultado foi verificado para os seguintes valores de N : 10^4 , 10^5 , 10^6 . Uma consequência dessa comparação de densidades, é que os volumes são agora equivalentes: $V'_T \approx 2 V_T$, onde

$$\frac{V'_T}{2} = \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_{ho}} \right)^3 \lambda_T^3 \left(\frac{1}{2} \right), \quad (2.109)$$

$$V_T = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{k_B T}{m} \right)^{3/2} \left(\frac{1}{\omega_r^2} \right) \left(\frac{1}{\omega_z} \right) 2. \quad (2.110)$$

Por fim, gostaríamos de salientar que para o modelo da GV, os volumes podem ser auto determinados. O volume para átomos térmicos, do gás ideal armadilhado, poderia ser obtido da equação 2.46 e o volume do condensado, do mesmo gás, pode ser obtido comparando as energias $\frac{\hbar \omega_i}{2} = \frac{m \omega_r^2 r^2}{2}$, e tirar o comprimento do oscilador, em cada direção.

Para o condensado do gás interagente, o diâmetro do condensado pode ser obtido no laboratório, representando o dobro de um dos raios de Thomas-Fermi. Com o conhecimento das frequências da armadilha, se obtém o outro raio de Thomas-Fermi, com o uso de $\omega_r^2 R_r^2 = \omega_z^2 R_z^2$. No caso dos dois condensados, gás ideal armadilhado e gás interagente, podemos aplicar a fórmula do volume do elipsoide.

Agora, apresentaremos a semi-compressibilidade isotérmica, do gás ideal armadilhado e do gás interagente, ambos do modelo GV. Como mencionado antes, essa grandeza não tem dimensão de compressibilidade propriamente dita. No entanto, ela serviu de base para que obtivéssemos um esboço do comportamento de compressibilidade isotérmica, no modelo em questão. A semi-compressibilidade isotérmica passou por uma reformulação para se transformar em compressibilidade isotérmica de fato, como apresentado na seção do gás ideal armadilhado da GV. Assim, foi possível de se fazer comparações de compressibilidades isotérmicas entre modelos diferentes, como foi demonstrado ao longo do projeto. Por fim, apresentamos as expressões da semi-compressibilidade, usando a mesma notação de Fritsch²¹, para a relação geral. A análise dimensional dessa grandeza, nos fornece: $[\kappa_G] = \frac{s^3}{N.m}$. A relação geral termodinâmica, é expressa por:

$$\kappa_G = -\frac{1}{\mathcal{V}} \left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial \Pi} \right)_T. \quad (2.111)$$

As expressões para a semi-compressibilidade κ_G , para o gás ideal armadilhado em GV, são:

$$\kappa_G = \frac{\mathcal{V}}{k_B t T_0 N} \left[\frac{\zeta(3)}{\zeta(4)} \right] \quad t \leq 1, \quad (2.112)$$

$$\kappa_G = \frac{\mathcal{V}}{k_B t T_0 N} \left[\frac{g_3(z)}{g_4(z)} \right] \quad t > 1. \quad (2.113)$$

Para o gás interagente, a semi-compressibilidade κ_G , em GV, seguem como:

$$\kappa_G = \frac{7\mathcal{V}}{2\mu N(1 - t^3) + 7Nt^4 k_B T_0} \quad t \leq 1, \quad (2.114)$$

$$\kappa_G = \frac{\mathcal{V}}{N t k_B T_0} \quad t > 1. \quad (2.115)$$

onde os parâmetros de pressão utilizados foram os mesmos do modelo de gás interagente em GV. Uma observação importante a ser mencionada, se refere a relação dessa semi-compressibilidade κ_G com a compressibilidade κ_T . Tomando como base as equações 2.56 e 2.111 e os parâmetros de pressão Π do gás ideal armadilhado e do gás interagente, ambos em GV, pode ser notado que existe apenas uma constante de normalização, de uma grandeza para a outra, de forma à termos: $\kappa_T = \frac{V(\mathcal{V})}{\mathcal{V}} \kappa_G$. Caso as frequências sejam constantes, a equação de conversão de uma grandeza para outra pode ser expressa como: $\kappa_T = cte \cdot \kappa_G$. Essa última relação vale tanto para o gás ideal quanto para o gás interagente. Em resumo, tanto o κ_T quanto o κ_G tem comportamento físico semelhantes, mudando apenas a ordem de grandeza e a dimensão entre eles.

3 TERMODINÂMICA: RESULTADOS

Nesse capítulo, apresentaremos os principais resultados do desenvolvimento das expressões algébricas do capítulo 2. Mostraremos primeiro as quantidades termodinâmicas que dão origem à capacidade térmica e à compressibilidade isotérmica e, em seguida, apresentaremos as suscetibilidades. Cada grandeza termodinâmica de interesse foi analisada e comparada entre modelos e sistemas.

Os resultados apresentados graficamente serão discutidos em detalhes, procurando evidenciar alguns aspectos não óbvios. O objetivo é desvendar e mostrar as informações relevantes a respeito de cada resultado. Também, em todos os gráficos apresentados, foi adotada a notação ($t = T/T_0$), para a temperatura reduzida, sendo T a temperatura e T_0 a temperatura crítica, no limite termodinâmico, do sistema em estudo.

3.1 Capacidade térmica C_V

Iniciamos apresentando o comportamento térmico da fugacidade z e do potencial químico μ , fundamentais aos modelos termodinâmicos em questão. Em seguida, compararemos as energias do gás ideal armadilhado nos dois modelos, CA e GV. Depois, comparamos a capacidade térmica do gás ideal armadilhado entre os modelos. Na sequência, apresentamos a comparação das energias do gás interagente e então a comparação da capacidade térmica no mesmo sistema, sempre para os mesmos modelos. Na sequência de comparações e para o modelo de CA, fixou-se um tipo de gás (ideal e interagente, respectivamente) e foi feito a variação do valor do número total de átomos N , para a capacidade térmica. Por fim, apresentamos a capacidade térmica do gás ideal armadilhado em CA, no limite termodinâmico.

Antes de apresentar os resultados, faremos algumas considerações gerais pertinentes aos mesmos também válidas para as densidades de número e compressibilidade isotérmica. O regime quântico, cuja característica de discretização energética apresenta um intervalo típico de temperatura de interesse (para gases bosônicos) que se estende de $T = 0$ até $T \approx 2T_c$, onde T_c é a temperatura crítica, marco da condensação de Bose-Einstein. O fato é que as quantidades termodinâmicas mostram um comportamento característico nessa faixa de temperaturas, principalmente na região de T_c , onde tendem a mudar rapidamente o comportamento.

Na apresentação dos resultados, é importante alguns aspectos relativos aos valores de T_0 como, por exemplo, a ordem de grandeza da temperatura, dos sistemas físicos estudados. Assim, de acordo com a equação 2.19, para $10^4 \leq N \leq 10^6$, tem-se os respectivos valores: $88 \text{ nK} \leq T_0 \leq 410 \text{ nK}$. Esses valores são válidos para todos os gráficos onde: $t = T/T_0$. Com relação às frequências da armadilha, usou-se os seguintes valores fixos e típicos: $\omega_x = 2\pi \times 21 \text{ Hz}$, $\omega_y = 2\pi \times 187 \text{ Hz}$ e $\omega_z = 2\pi \times 189 \text{ Hz}$. Os resultados nesse capítulo, são específicos dos átomos

de rubídio ^{87}Rb , com a utilização de valores de N , T e ω_i ($i = x, y, z$), acessíveis em laboratório. Vale citar que os resultados aqui obtidos para as quantidades termodinâmicas investigadas podem ser diretamente aplicados à outras espécies atômicas.

A figura 1, mostra a evolução em t da fugacidade z do sistema, fundamental na determinação de várias outras quantidades termodinâmicas tais como: energia total E , capacidade térmica C_V , densidades n_0 do condensado e n_T dos átomos térmicos, além da compressibilidade isotérmica κ_T , para o gás ideal armadilhado no modelo de CA.

Na figura 1, pode-se notar que, no intervalo de temperatura entre $T = 0$ e T_c , a fugacidade tem um valor muito próximo a um, independente do número de átomos. A partir de T_c , ela decai rapidamente e o regime clássico começa a competir com o regime quântico, ganhando espaço a partir de, aproximadamente $2T_c$. O comportamento de z no regime quântico se deve a uma competição entre o potencial químico μ e a temperatura T ¹. Ainda na figura 1, pode ser notado que próximo aos pontos onde z se aproxima do valor unitário, na vizinhança de T_c , há um deslocamento vertical da fugacidade, dependendo do número total de átomos N . Isso é compatível com a equação 2.30 para o número total de átomos N , ou seja, se N aumenta, z aumenta proporcionalmente via N_0 ; além disso, quanto maior é o valor de N , maior é o valor de T_c , atrasando ligeiramente a diminuição de z . Dessa forma podemos dizer que T_c tem um deslocamento no sentido de maiores temperaturas. É importante destacar que o comportamento de z , próximo à T_c , representa uma das assinaturas da condensação de Bose-Einstein.

Figura 1 – Fugacidade z em função da temperatura reduzida t , de um gás ideal armadilhado, no modelo de aproximação contínua, CA. A fugacidade é obtida da equação 2.30. A linha pontilhada centralizada indica o limite termodinâmico T_0 , e N é o número total de átomos do sistema.

Fonte: Elaborada pelo autor.

A fugacidade z , também é presente no modelo GV, para o gás ideal armadilhado, especialmente na energia total E , na capacidade térmica C_V , na compressibilidade isotérmica κ_T e no parâmetro de pressão Π . Na figura 2 apresentamos uma outra fugacidade, que foi obtida à partir de inversão de série ²⁰, e será utilizada no modelo das variáveis globais GV, para o gás ideal armadilhado, mantendo a consistência com a literatura. Essa outra fugacidade z é obtida da equação 2.51, considerando-se apenas os três primeiros termos da série invertida. A fugacidade foi adaptada da seguinte maneira: para $T < T_c$, foi considerado $z = 1$; e para $T \geq T_c$ a fugacidade é multiplicada pelo fator exponencial: $e^{-E_0/k_B T}$, para incluir o efeito da energia de ponto zero e permitir que z , próximo à T_c , apresente um deslocamento similar a fugacidade da figura 1. Logo abaixo mostramos o gráfico de z para o modelo de GV, é apresentado pela figura 2. Na figura 2, nota-se que a fugacidade do modelo da GV, apresenta um comportamento semelhante ao da fugacidade do modelo de CA, além de os valores serem bem próximos.

Figura 2 – Fugacidade z em função da temperatura reduzida t , de um gás ideal armadilhado, para os modelos: variáveis globais GV e aproximação contínua CA. A fugacidade z de GV é obtida da equação 2.51. A linha pontilhada indica ao limite termodinâmico T_0 , e N é o número total de átomos, sendo $N = 10^5$ átomos.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Vale mencionar que antes de obtermos as duas fugacidades apresentadas acima tentou-se três outras fórmulas e cada uma delas apresentou algum problema: A primeira delas ²³ gerava descontinuidades nos resultados de quantidades de interesse, como por exemplo a densidade. A segunda delas ²⁴ apresentava um potencial químico descontínuo, próximo a T_c . A terceira ²⁵ era difícil de ser calculada e de gerar resultados próximos aos da literatura. Somente na quarta opção obtivemos valores mais compatíveis com os nossos propósitos e que está sendo representada

pela equação 2.51, que por sua vez é utilizada no modelo GV. Por fim, após insistirmos na busca, conseguimos calcular uma fugacidade de forma consistente e confiável e adequada aos nossos propósitos. Essencialmente ela é a solução da equação 2.30 para o número total de átomos N .

Na figura 3, mostramos o potencial químico, μ , para o gás ideal armadilhado, pelo modelo de CA. Também, na figura 3 e no sentido de $T = 0$, notamos que μ aumenta competindo com a energia térmica $k_B T$. Isso ocorre no sentido de popular o sistema com átomos térmicos e se o sistema esfria ainda mais, surge o condensado. Dessa forma, notamos o papel natural do potencial químico, que representa a energia necessária para colocar átomos no sistema. Outro ponto a ser notado é que μ sempre cresce e chega num momento que ele se nivela à energia de ponto zero E_0 , do gás ideal armadilhado.

Figura 3 – Potencial químico μ reduzido em função da temperatura reduzida t , de um gás ideal armadilhado, para o modelo de aproximação contínua, CA. O potencial químico μ é obtido da fugacidade z do gás ideal armadilhado em CA.

Fonte: Elaborada pelo autor.

O potencial químico μ do gás ideal armadilhado também é importante para o cálculo do potencial químico do gás interagente, no modelo de CA, que por sua vez nos permitiu calcular as quantidades termodinâmicas de interesse. A ordem de grandeza típica da temperatura que envolve μ é ≈ 100 nK, nas condições calculadas. Para o intervalo de $10^4 \leq N \leq 10^6$, temos $88 \text{ nK} \leq T_0 \leq 410 \text{ nK}$.

Na figura 4, a evolução térmica do potencial químico μ para o gás interagente em CA, é apresentado. O potencial químico é composto por duas partes: uma em $T < T_c$, onde há interação

intensa entre os átomos; e outra em $T \geq T_c$, na qual a interação atômica decai rapidamente com o aumento de T .

Figura 4 – Potencial químico μ reduzido em função da temperatura reduzida t , de um gás interagente, para o modelo de aproximação contínua, CA. O potencial químico μ é obtido da equação 2.72 e da fugacidade z do gás ideal armadilhado em CA.
Fonte: Elaborada pelo autor.

O potencial químico μ para o gás interagente é importante pelo fato de ele fazer parte da energia total E , que pode ser derivada em relação a temperatura para determinar a capacidade térmica C_V . O potencial químico μ entra também na densidade total n do sistema, usada no cálculo da compressibilidade isotérmica κ_T .

Em comparação com o gás ideal armadilhado, nota-se que para temperaturas abaixo de T_c , o μ do gás interagente tem um valor ligeiramente maior. Também notamos que, à medida que N aumenta, aumenta o valor do potencial químico. Isso se deve a interação de repulsão entre os átomos¹⁷, nessa faixa de temperatura, o que significa a necessidade de mais energia para se colocar ou retirar átomos no sistema.

Um outro ponto a ser mencionado no gás interagente em CA é que aparece em suas expressões algébricas, o comprimento de espalhamento (a), que quantifica a interação entre os átomos. Assim, nos resultados termodinâmicos que vem na sequência e que dependem de a , teve como parâmetro o rubídio ^{87}Rb e cujo o valor de $a = 5,186$ nm. Por fim temos que μ é contínuo e suave ao longo da curva.

Dando continuidade aos resultados, temos a energia total E mostrada na figura 5, para o gás ideal armadilhado, nos modelos de GV e CA. A energia E do sistema é uma grandeza

fundamental que permite o cálculo de outras quantidades de interesse como, por exemplo, a capacidade térmica C_V .

Figura 5 – Energia total E como função da temperatura reduzida t , de um gás ideal armadilhado, nos modelos de aproximação contínua CA e variáveis globais GV. Cada uma das três curvas indica à $N = 10^5$ átomos e a temperatura crítica T_c está marcada pela linha pontilhada. A energia é obtida das equações 2.33, 2.49 e 2.50 do texto.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Pela figura 5, nota-se que a energia apresenta dois comportamentos: para $T \geq T_c$, a energia é aproximadamente linear com t , devido a uma competição equilibrada entre as funções de Bose $g_n(z)$ e a temperatura t , em ambos os modelos; para $T < T_c$, a energia aumenta majoritariamente de forma polinomial com a temperatura sendo que, no modelo de CA, ainda há a contribuição das funções $g_n(z)$. No modelo da GV, a energia cresce simplesmente com t^4 . Ainda na figura 5, a energia total de um gás ideal clássico, $E = 3Nk_B T$, é mostrada e extrapolada até $T = 0$, apenas para referência e comparação.

Outro fato notório é que as energias, independente do modelo, convergem para o mesmo valor clássico quando $T \geq 2T_c$, em acordo com o que foi mencionado antes a respeito da competição e predomínio dos regimes quântico e/ou clássicos, dependendo da faixa de temperatura. O comportamento da energia do gás ideal armadilhado no regime quântico e próximo à T_c , revela mais uma das assinaturas da condensação de Bose-Einstein.

Em seguida, na figura 6, mostramos a energia total do gás interagente para os modelos GV e CA. Novamente, pela energia E , podemos estudar a taxa de variação de energia com relação à temperatura através da capacidade térmica. A energia do modelo GV foi primeiramente

calculada por Shiozaki ¹⁴, enquanto a energia do modelo CA resulta de um modelo híbrido, desenvolvido por nós durante esse mestrado, inspirado pelos resultados originais de Grossmann ¹ e Dalfovo ¹⁷, sendo que a parcela da energia originada de ¹⁷ foi ligeiramente corrigida, como explicado no capítulo anterior.

Figura 6 – Energia total E em função da temperatura reduzida t , de um gás interagente, nos modelos de aproximação contínua CA e variáveis globais GV. Cada uma das três curvas indica à $N = 5 \times 10^5$ átomos e a temperatura crítica T_c para esse valor de N está representado pela linha pontilhada. A energia é obtida das equações 2.79, 2.96 e 2.97 do texto.

Fonte: Elaborada pelo autor.

No modelo CA, uma parcela da energia vem do gás interagente e a outra parcela de energia vem do gás ideal armadilhado, a somadas resultam na energia total do sistema. No entanto, essa soma é válida somente para faixa de temperatura onde há condensado. Vale ressaltar que, além da temperatura no qual C_V é máximo, resta apenas a parcela da energia do gás ideal armadilhado, em CA. Observando a figura 6, podemos notar que a energia do gás interagente em CA, antes de T_c , não é linear com a temperatura t e depois de T_c , fica aproximadamente linear. No modelo da GV, a energia depende somente de t , sendo não-linear em $t \leq 1$ e linear para $t > 1$. Outro ponto é que as energias mínimas por ambos os modelos apresenta o valor $0,3Nk_B T$, advindo da interação entre os átomos. Também pelo gráfico, observa-se que E da GV coincide com a energia total do gás ideal clássico já em $T \geq T_0$, devido a limitação do modelo.

Na figura 7, é apresentada a primeira suscetibilidade de interesse do projeto que é a capacidade térmica C_V , cujo comportamento será comparado via dois modelos: CA e GV, para o gás ideal armadilhado. Observando-se o gráfico, nota-se a capacidade térmica aumentando em $0 \leq T \leq T_c$ e, em seguida, diminui rapidamente até o valor clássico da capacidade térmica, $C_V = 3Nk_B$ para temperaturas na faixa $T \geq T_c$, evoluindo de forma contínua ao longo de todo o intervalo estudado via modelo de CA. Para o modelo da GV a curva é semelhante, porém descontínua em T_0 . Por fim, vale citar que essa evolução rápida de C_V próximo à T_c e T_0 indica a ocorrência da transição de fase com a condensação de Bose-Einstein.

Figura 7 – Capacidade térmica em função da temperatura reduzida t , de um gás ideal armadilhado, nos modelos de aproximação contínua CA e variáveis globais GV. Cada uma das duas curvas indica à $N = 5 \times 10^5$ átomos e a temperatura crítica T_c para esse valor de N está representado pela linha pontilhada. A capacidade térmica é obtida das equações 2.35, 2.52 e 2.53 do texto. Fonte: Elaborada pelo autor.

Na sequência, na figura 8 mostramos a capacidade térmica C_V para o gás interagente nos modelos CA e GV. Pode-se notar a taxa de variação das energias E , da figura 6. No trajeto das curvas, pode ser notado que nas vizinhanças de T_c , as duas curvas tem uma variação acentuada para cima, indicando a transição de fase quântica e para $T \geq T_c$, ambas tendem para o valor da capacidade térmica do gás ideal clássico, $C_V = 3Nk_B$. Note ainda que C_V de CA é contínuo ao longo ao longo de todo o intervalo de t , enquanto o C_V da GV é descontínuo em T_0 . Além disso, ao contrário do C_V da GV do gás ideal armadilhado, o C_V da GV do gás interagente a fração de átomos condensados é incluída no cálculo, revelando a limitação do modelo da GV.

Figura 8 – Capacidade térmica em função da temperatura reduzida t , de um gás interagente pelos modelos de aproximação contínua CA e variáveis globais GV. Cada uma das três curvas indica à $N = 5 \times 10^5$ átomos e a temperatura crítica T_c para esse valor de N está representado pela linha pontilhada. A capacidade térmica é obtida das equações 2.80, 2.35, 2.98 e 2.99 do texto. Fonte: Elaborada pelo autor.

Na figura 9, mostramos a comparação da capacidade térmica entre os modelos CA e GV, para um mesmo valor de N tanto para um gás interagente quanto para um gás ideal armadilhado. Note que, para um número relativamente baixo de N , os gases da GV apresentam um pico mais acentuado quando comparados aos gases de CA e também o C_V com menor valor máximo é o do gás interagente, em CA. Também nota-se que o pico das curvas CA são deslocados em relação ao limite termodinâmico. No modelo da GV, os ramos das curvas fazem interface na temperatura do limite termodinâmico, T_0 .

Figura 9 – Capacidade térmica como função da temperatura reduzida t . O modelo de aproximação contínua CA, indica as curvas contínuas (azul e verde), e no modelo de variáveis globais GV as curvas que a representa são as lacunadas (preta e vermelha). O gás ideal armadilhado está representado pelas curvas: contínua-verde e traço-ponto-vermelha. Já o gás interagente está representado pelas curvas: contínua-azul e tracejado-preta. A linha pontilhada ao centro indica ao limite termodinâmico T_0 , para $N = 10^4$ átomos.

Fonte: Elaborada pelo autor.

No gráfico da figura 10, pode ser notado que o gás ideal armadilhado de CA se aproxima do gás ideal armadilhado e do gás interagente, ambas da GV e as três curvas juntas, estão distantes do gás interagente em CA. Além disso percebe-se que todas elas se aproximam do limite termodinâmico, quando comparado ao caso da figura 9.

Figura 10 – Capacidade térmica como função da temperatura reduzida t . O modelo de aproximação contínua CA, indica as curvas contínuas (azul e verde) e no modelo de variáveis globais GV as curvas que a representa são as lacunadas (preta e vermelha). O gás ideal armadilhado está representado pelas curvas: contínua-verde e traço-ponto-vermelha. Já o gás interagente está representado pelas curvas: contínua-azul e tracejado-preta. Cada uma das curvas indica a $N = 10^6$ átomos. Por fim, a linha pontilhada ao centro indica ao limite termodinâmico.
Fonte: Elaborada pelo autor.

Tanto na figura 9 quanto na figura 10, notamos que o efeito das interações entre os átomos alteram consideravelmente o comportamento de C_V , pelas curvas azuis, no modelo de CA. Também verificou-se que todas as curvas tendem à zero em $T = 0$, e que tendem ao mesmo valor gás ideal clássico, $3Nk_B$, quando se aproximam de $T \approx 2T_0$.

Na figura 11, mostramos o C_V para o gás ideal armadilhado do modelo CA variando-se o valor de N . Observe que o topo do C_V aumenta com o aumento de N e ainda se aproxima do limite termodinâmico. Isso se deve a fugacidade z e ao aumento no valor de N .

Figura 11 – Capacidade térmica como função da temperatura reduzida t . No modelo de aproximação contínua CA, para o gás ideal armadilhado. A linha pontilhada no centro indica ao limite termodinâmico.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na sequência na figura 12 mostramos o C_V do gás interagente em CA variando N . Nesse caso, o pico de C_V diminui a medida que N aumenta e se aproxima do limite termodinâmico. Esse comportamento se deve ao valor de N , que domina a energia por partícula, e a fugacidade z advinda do gás ideal armadilhado. Também observa-se uma diferença entre os C_V máximos de: $\Delta C_V = 0,1246 N k_B$.

Figura 12 – Capacidade térmica como função da temperatura reduzida t . A figura indica ao modelo de aproximação contínua CA e as duas curvas são do gás interagente, sendo azul claro $N = 10^4$ e azul escuro $N = 10^6$. A linha pontilhada no centro indica ao limite termodinâmico.
Fonte: Elaborada pelo autor.

Da série de resultados de C_V , iremos apresentar o último deles na figura 13, referente ao limite termodinâmico para o gás ideal armadilhado em CA, indicado pelas curvas sólidas. Conforme os cálculos da literatura¹, o valor máximo da capacidade térmica é $C_V \approx 10,805$, o que significa que todas as capacidades térmicas tem que ter valores abaixo desse limite. Ainda¹, o valor da descontinuidade do C_V do gás ideal armadilhado em CA, no limite termodinâmico, vale $\Delta C_V/Nk_B \approx 6,577$, como pode ser notado na figura 13. E ainda, observa-se o C_V do gás ideal livre de Bose, no limite termodinâmico, representado pela curva tracejada. No limite termodinâmico, temos dois valores extremos: $C_V \approx 10,805$ para T_0^- e $C_V \approx 4,228$ para T_0^+ , o que gera uma descontinuidade entre as duas regiões de temperatura¹.

Complementando essa parte envolvendo capacidade térmica, no apêndice C é apresentada a capacidade térmica do gás ideal livre de Bose, de forma genérica para um dado valor de N , pelo fato de ter sido a primeira capacidade térmica obtida para gases bosônicos², e ela serve apenas como uma aproximação para os casos reais. Um ponto interessante à ser notado, pela figura 13, é a capacidade térmica do gás ideal livre de Bose no limite termodinâmico ser contínua², ao contrário do gás ideal armadilhado.

Figura 13 – Capacidade térmica como função da temperatura, no limite termodinâmico, em que N é muito grande, tanto para o gás ideal armadilhado, curva sólida, quanto para o gás ideal livre de Bose, curva tracejada. Ambas as curvas são para o modelo de aproximação contínua original.

Fonte: GROSSMANN, S. ; HOLTHAUS, M. ¹

3.2 Compressibilidade Isotérmica κ_T

Nessa seção apresentamos os resultados das grandezas envolvidas no cálculo da compressibilidade isotérmica κ_T e depois a suscetibilidade propriamente dita. Iniciamos com a densidade do gás ideal armadilhado em CA e o parâmetro de pressão na GV, para o mesmo gás. Depois, faremos a comparação da compressibilidade do gás ideal entre os modelos CA e GV. Em seguida, a compressibilidade é apresentada somente no modelo CA, para o gás ideal e variando N . Na sequência, mostramos o caso do gás interagente com a densidade no modelo de CA e a respectiva compressibilidade, variando N . Depois será o parâmetro de pressão para o gás interagente e comparação da compressibilidade entre ambos os modelos, para cada sistema. Na sequência, apresentamos a compressibilidade, somente para átomos térmicos do gás ideal armadilhado, em ambos os modelos, utilizando dois volumes diferentes. Finalmente, é apresentada a semi-compressibilidade isotérmica, tanto para o gás ideal quanto para o gás interagente, no modelo de GV. Com os resultados prévios, apresentamos as densidades do condensado n_0 e dos átomos térmicos n_T , ambas do gás ideal armadilhado, no modelo de CA. Também é apresentado o parâmetro de pressão Π do modelo GV, para o mesmo gás.

Figura 14 – Densidades para um gás ideal armadilhado como função da temperatura reduzida t , no modelo de aproximação contínua CA. A curva azul do gráfico indica a densidade do condensado n_0 , com escala a esquerda e a curva vermelha indica a densidade dos átomos térmicos n_T , com escala a direita, ambas expressas em unidades Do SI, átomos/m³. A linha pontilhada, no centro, refere-se a temperatura crítica T_c . Cada uma das duas curvas foi obtida para $N = 10^5$ através das expressões 2.39 e 2.40 do texto.

Fonte: Elaborada pelo autor.

A figura 14, representa tais densidades. A densidade é importante porque nos permite calcular a compressibilidade isotérmica κ_T , ao derivarmos a mesma em relação ao potencial químico μ , como discutido no capítulo anterior. Ainda na figura 14, na região entre $0 \leq t \leq 1$, observa-se que o estado fundamental de energia vai sendo populado a medida que a amostra é resfriada e, conseqüentemente, n_0 aumenta. Isso se deve a fugacidade z , que vai aumentando conforme a temperatura diminui. Também nessa faixa de temperatura, observe que a fração térmica é fonte de átomos para o condensado, o que implica na diminuição de n_T conforme t tende a zero. Na faixa de temperatura acima de $t = 1$, N_0 é praticamente inexistente e isso significa que $N_T \approx N$. O volume V_T , que depende da temperatura, aumenta conforme t aumenta, fazendo com que n_T diminua. A novidade está no comportamento das densidades próximo à temperatura crítica T_c , que sinaliza claramente a ocorrência da condensação de Bose-Einstein.

Na figura 15, é apresentado o parâmetro de pressão Π do gás ideal armadilhado do modelo GV, que permite a obtenção da compressibilidade isotérmica κ_T . O gráfico de Π é composto pelos parâmetros do condensado e dos átomos térmicos. Um ponto a ser notado no gráfico é o comportamento similar ao gráfico da energia total E , do mesmo gás e no mesmo modelo. De fato, a expressão do parâmetro de pressão é aproximadamente equivalente a expressão da energia ¹², com uma constante multiplicativa: $\Pi \approx \frac{E}{3\mathcal{V}}$, fato verificado graficamente e onde $\mathcal{V}$ é o volume harmônico do modelo GV. Mencionamos que o parâmetro de pressão é aproximadamente a energia pelo fato da inclusão da fração condensada, mas se for considerado apenas a fração térmica, as expressões tornam-se equivalentes ¹²: $\Pi = \frac{E}{3\mathcal{V}}$.

Figura 15 – Parâmetro de pressão como função da temperatura reduzida t , para um gás ideal armadilhado, no modelo das variáveis globais. A unidade de medida de Π é: $(\text{J} \cdot \text{rad}^3)/\text{s}^3$. A linha pontilhada, no centro, indica ao limite termodinâmico e a curva é obtida das expressões 2.63, 2.64, 2.65, 2.66 do texto.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 16 – Compressibilidade isotérmica total κ_T em função da temperatura reduzida t , de um gás ideal armadilhado, nos modelos: de variáveis globais GV, curva rosa e aproximação contínua CA, curva azul marinho. Cada uma das duas curvas indica a $N = 10^5$ e as curvas são obtidas das expressões 2.42, 2.67 e 2.68 do texto. A linha pontilhada no centro indica ao limite termodinâmico.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na figura 16, o gráfico da compressibilidade isotérmica κ_T , para o gás ideal armadilhado, compara os resultados dos modelos GV e CA. Nesse caso, o cálculo inclui os átomos do condensado N_0 e os átomos térmicos N_T na compressibilidade. No modelo da GV, se observa uma descontinuidade em $t = 1$, ao contrário de CA que é contínua em toda a faixa de temperatura. Ainda no modelo de GV, o mesmo comportamento da curva de κ_T foi observado para qualquer valor de N na faixa: $N = 10^4$ e 10^6 . Novamente, a variação rápida observada no comportamento da compressibilidade, em regiões próximas à temperatura crítica T_c , emerge como mais uma grandeza termodinâmica indicando a ocorrência da transição de fase quântica. Para a compressibilidade isotérmica, foi considerada aquela que envolve a densidade total n , ou seja $n = n_0 + n_T$, e o potencial químico μ , conforme a relação algébrica: $\kappa_T = \frac{1}{n^2} \left(\frac{\partial n}{\partial \mu} \right)$.

Em relação a figura 16, gostaríamos de fazer alguns comentários. Pela figura, notamos que com a diminuição da temperatura κ_T apresenta um salto para cima, pelo modelo CA. Por outro lado, pelo modelo GV, o salto ocorre para baixo, próximo à T_0 . Notamos também que, pelo modelo GV, abaixo de $t = 1$, a compressibilidade aumenta consideravelmente mostrando um comportamento notório que necessita de mais pesquisa para sua completa compreensão.

Na figura 17, é apresentada a compressibilidade isotérmica κ_T em função da temperatura reduzida t , para o gás ideal armadilhado no modelo CA. A densidade utilizada é a total $n = n_0 + n_T$, onde n_0 é a densidade do condensado e n_T é a densidade dos átomos térmicos. A interpretação física a partir das expressões algébricas é bastante complexa e, assim, faremos algumas observações qualitativas: quando o valor de N aumenta κ_T diminui ao longo de toda curva e a transição de fase quântica se aproxima do limite termodinâmico. Além disso, a compressibilidade apresenta uma variação grande e rápida, próximo a T_c . Uma possível explicação para o fenômeno está relacionada à dependência direta de κ_T com o inverso do quadrado da densidade, que também varia rápida e intensamente na mesma região de temperatura. E ainda, observa-se que quanto maior o número de átomos condensados maior será a variação (o "salto") observado na compressibilidade.

Figura 17 – Compressibilidade isotérmica total κ_T em função da temperatura reduzida t , de um gás ideal armadilhado, no modelo de aproximação contínua CA. A linha pontilhada no centro indica ao limite termodinâmico e as curvas são obtidas da expressão 2.42 do texto.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para completar análise de κ_T , apresentamos na figura 18, a compressibilidade na forma reduzida (adimensional), para facilitar as comparações. Notamos que tanto para baixo N quanto para N alto, os valores de κ_T convergem para o valor clássico de κ_T do gás ideal, quando $T \rightarrow 2T_c$. A expressão, para o κ_T do gás ideal clássico normalizado torna-se: $\kappa_T \cdot nk_B T_0 = 1/t$, $n = N/V$ é a densidade e V é um volume fixo em $t = 2$. Pela expressão, pode ser notado que o κ_T normalizado para o gás ideal clássico independe de N .

Figura 18 – Compressibilidade isotérmica total como função da temperatura reduzida t , de um gás ideal armadilhado, no modelo de aproximação contínua CA. A linha tracejada do gás ideal clássico serve como uma referência e a linha pontilhada no centro indica ao limite termodinâmico. As curvas são obtidas da expressão 2.42 do texto.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na sequência, mostraremos os resultados para o gás interagente começando com as densidades de número em CA, do condensado n_0^{TF} e dos átomos térmicos n_T^{TF} , apresentados na figura 19. Inicialmente, observa-se uma invariância nas ordens de grandeza das densidades do condensado n_0^{TF} para a seguinte faixa de número de átomos: $N = 10^4$ a 10^6 . O mesmo é observado para a densidade dos átomos térmicos n_T^{TF} na mesma faixa de valores de N . De fato, a densidade do condensado, obtida algebricamente, coincide com a densidade obtida no laboratório ^{4,21}, que tipicamente é da ordem de 10^{14} átomos/cm³, para o condensado.

Figura 19 – Densidades, do condensado n_0^{TF} , curva azul marinho e dos átomos térmicos n_T^{TF} , curva vermelha, do gás interagente em CA, em função da temperatura reduzida t . Cada uma das duas curvas foi obtida para $N = 10^5$ e as expressões são 2.84 e 2.85 do texto.

Fonte: Elaborada pelo autor.

A densidade do gás interagente é similar a do gás ideal armadilhado, em termos de comportamento: a densidade dos átomos térmicos aumenta a medida que a amostra esfria e na região de T_0 a T_c a tendência se inverte e ela passa a diminuir pelo fato de ser fonte de átomos para o estado de menor energia. Assim o condensado vai rapidamente ganhando átomos e densidade a medida que a amostra é resfriada.

Um ponto a ser observado é em relação a densidade do gás interagente que é menor que do gás ideal armadilhado, cerca de duas ordens de grandeza, devido ao maior volume ocupado pelo gás interagente se comparado ao volume do gás ideal armadilhado nas mesmas condições. Esse volume maior do gás interagente se deve à (fraca) interação de repulsão entre os átomos aprisionados. O volume maior do gás interagente vale para n_0^{TF} e n_T^{TF} , e qualquer N .

Na figura 20, mostramos a compressibilidade isotérmica para o gás interagente em CA. A curva tem um comportamento típico também para $N = 10^4$ e $N = 10^6$, e as curvas são contínuas em toda a faixa de temperatura. A figura 20 foi gerada para $N = 10^5$ e observa-se que, na transição de fase $T = T_c$, elas tendem ao limite termodinâmico a medida que o valor de N aumenta, ou seja, há um deslocamento para a direita. Podemos também comparar κ_T do gás interagente com κ_T do gás ideal armadilhado, ambos em CA, e observar que, para $T \leq T_c$, a curva do gás ideal armadilhado cresce, enquanto que a curva do gás interagente decresce. Essa diminuição de κ_T do gás interagente, em $T \leq T_c$, deve-se à repulsão dos átomos condensados aprisionados, aumentando um pouco a pressão do sistema. Como a compressibilidade é inversamente proporcional à pressão, que está indiretamente relacionada a densidade, o κ_T deve diminuir. Finalmente, os valores da compressibilidade isotérmica tendem naturalmente à valor de compressibilidade do gás ideal clássico com o aumento da temperatura do sistema.

Figura 20 – Compressibilidade isotérmica em SI para o gás interagente em CA, em função da temperatura reduzida t . A curva foi obtida para $N = 10^5$ e a expressão do texto utilizada é a 2.87.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na figura 21, temos a compressibilidade isotérmica normalizada como função da temperatura. Na normalização mencionada, n é a densidade de número: $n = N/V$, onde V é o volume fixo determinado em $t = 2$ e $V = V_T^{TF}$. Em relação ao gás ideal clássico, sua expressão normalizada é $(1/t)$, similar ao do gás ideal armadilhado e independente de N . Também na figura, se observa duas características gerais do regime quântico: *i*) a manifestação do regime, indicado pelo comportamento de κ_T se afastando da curva do gás ideal clássico; e *ii*) a transição de fase, ocorrendo em torno da temperatura crítica T_c , indicando o início da condensação.

Figura 21 – Compressibilidade isotérmica normalizada do gás interagente em CA, em função da temperatura reduzida t . A expressão indica a equação 2.87 do texto. A linha pontilhada no centro indica ao limite termodinâmico.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na figura 22, temos o parâmetro de pressão Π , do gás interagente no modelo GV, que permite obter a compressibilidade isotérmica κ_T . Comparando o parâmetro de pressão do gás ideal armadilhado, apresentado anteriormente, com a do gás interagente note que esse último tem um valor inicial diferente de zero, ao contrário do gás ideal. Isso se deve as interações de repulsão entre os átomos condensados, com uma energia mínima não nula em $t = 0$. Um ponto à ser notado também, é a relação do parâmetro de pressão com a energia total E , ambos do gás interagente em GV.

Figura 22 – Parâmetro de pressão para o gás interagente na GV em função da temperatura reduzida t . A curva foi obtida para $N = 5 \times 10^5$ e as expressões são 2.92, 2.93 e 2.94 do texto. A linha pontilhada no centro indica ao limite termodinâmico.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Conforme a expressão da energia obtida do capítulo dois: $\frac{E}{3\mathcal{V}} = \Pi_T + 0.834\Pi_0$, pode ser notado a semelhança com o parâmetro de pressão total, $\Pi = \Pi_T + \Pi_0$. Assim, podemos tirar uma relação direta entre as duas grandezas, com o auxílio de uma constante multiplicativa: $\frac{E}{3\mathcal{V}} \approx \Pi$, onde $\mathcal{V}$ é o volume harmônico. Essa relação é similar àquela obtida para o gás ideal armadilhado no modelo GV. A figura 23 mostra a compressibilidade isotérmica do gás interagente, comparada entre os modelos de CA e GV. No gráfico, nota-se uma descontinuidade do κ_T , no modelo da GV, em $t = 1$. Essa descontinuidade na GV, também se observa para N alto ou baixo. Em comparação com o modelo CA, κ_T da GV na região do condensado tem um comportamento brusco, por conta da limitação do modelo.

Figura 23 – Compressibilidade isotérmica para o gás interagente em CA e GV, em função da temperatura reduzida t . As curvas foram geradas a partir de $N = 5 \times 10^5$ e as expressões são 2.100, 2.101 e 2.87 do texto. A linha pontilhada ao centro é o limite termodinâmico.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na figura 24, apresentamos a compressibilidade isotérmica somente para os átomos térmicos do gás ideal armadilhado, nos modelos CA e GV. O símbolo adotado nesse contexto é κ_T^{th} , com *th* abreviatura da palavra inglesa *thermal* (térmico). Nesses resultados, é considerado o volume expresso pela equação: 2.38 (multiplicada por um fator dois). A compressibilidade isotérmica dos átomos térmicos apenas é característica do modelo GV original ¹², que não incluiu os átomos condensados. O estudo original tem importância pelo fato que, na faixa de temperatura de 0 à $2T_c$, existe um gás quântico, representado pelos átomos não condensados. Ou seja, nessa faixa de temperaturas o sub-sistema de átomos térmicos pode mostrar comportamento distinto para grandezas termodinâmicas interessantes tais como C_V quando comparado aos resultados do gás ideal clássico de alta temperatura. Ambas as curvas, foram geradas com $N = 10^5$ e a unidade de medida dessa grandeza é $[\kappa_T^{th}] = [\text{m}^2/\text{N}]$. A linha pontilhada central da figura representa o limite termodinâmico. Note que κ_T^{th} varia pouco quando $t \rightarrow 0$ e quando se aproxima de $t \approx 1$ há um certo desvio das curvas para cima, observado nos resultados de ambos os modelos. Essa mudança de inclinação súbita das curvas, para cima, pode ter como origem a diminuição do momento dos átomos, devido a diminuição da temperatura, que por sua vez diminui a pressão, aumentando a compressibilidade κ_T^{th} . Uma outra explicação possível indica que a compressibilidade nesse caso, é proporcional ao inverso do quadrado da densidade, que como sabemos ela diminui em temperaturas $T \leq T_c$. Para $t > 1$, a compressibilidade κ_T^{th} se assemelha à compressibilidade κ_T , do gás ideal armadilhado discutido previamente e $\kappa_T^{th} \approx \kappa_T$.

Figura 24 – Compressibilidade isotérmica κ_T^{th} em função da temperatura reduzida t . As curvas são obtidas das expressões 2.42 ($n_0 = 0$), 2.59 e 2.60 do texto.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na figura 25, foi graficada a compressibilidade pelos dois modelos, considerando uma escala maior de temperatura t e também para valores limites de N .

Figura 25 – Compressibilidade isotérmica de átomos térmicos, em função da temperatura reduzida t , de um gás ideal armadilhado, nos modelos: variáveis globais, curvas lacunadas e aproximação contínua, curvas contínuas. A linha pontilhada no centro indica ao limite termodinâmico e as curvas são obtidas das expressões 2.42 ($n_0 = 0$), 2.59 e 2.60 do texto.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Também, na figura 25 notamos que o número de átomos influencia na magnitude da compressibilidade, sendo maior para número mais baixo de N . Notamos também que para um mesmo valor de N as curvas são bem próximas nos dois modelos. Como na figura anterior, notamos que a compressibilidade é suave no intervalo de $1 \leq t \leq 2$ de temperatura e para $t \leq 1$ há um salto acentuado das curvas, indicando uma forte diminuição de momento dos átomos que por sua vez diminui a pressão e por consequência aumenta o κ_T^{th} . Nota-se também, que na faixa $0 \leq t \leq 1$ de temperatura mesmo não tendo a presença do condensado propriamente dito e somente com os átomos térmicos, há uma revelação da existência do gás quântico, lembrando que tanto o condensado quanto os átomos térmicos, ambos são gases quânticos.

Figura 26 – Compressibilidade isotérmica como função da temperatura reduzida t , para átomos térmicos, de um gás ideal armadilhado, nos modelos CA e GV. Cada uma das três curvas indica a $N = 10^5$. A linha pontilhada no centro indica ao limite termodinâmico e as curvas são obtidas das expressões 2.104, 2.105 e 2.106 do texto.
Fonte: Elaborada pelo autor.

Na figura 26, é apresentada a compressibilidade isotérmica κ_T^{th} , para o gás ideal armadilhado e somente de átomos térmicos, dos modelos de aproximação contínua CA e variáveis globais GV. O principal objetivo aqui é estudar o comportamento da compressibilidade utilizando-se uma expressão distinta para o volume térmico, que depende do comprimento de onda térmico λ_T . Na figura 26, mostramos também a extrapolação do gás ideal clássico até o regime quântico de temperaturas, que serve de referência para a comparação entre as outras curvas. Para o κ_T do gás ideal clássico, cuja a expressão é: $\kappa_T = \frac{V}{Nk_B T}$, foi utilizado o volume V fixo, o mesmo de CA em $t = 2$, com N sendo o número total de átomos, k_B a constante de Boltzmann e T a temperatura. Assim, κ_T do gás ideal clássico depende somente do inverso da temperatura e do inverso da pressão. Também estudamos o comportamento de κ_T para $N = 10^4$ e $N = 10^6$, para as três curvas apresentadas na figura 26 e os comportamentos são equivalentes, diferindo apenas na ordem de grandeza.

Comparando-se então a compressibilidade dos átomos térmicos, mostrada nas figuras 25 e 26, com a compressibilidade total da figura 18, observa-se que a compressibilidade total apresenta um salto em κ_T para cima, na região mais fria. Acredita-se que isso seja devido à parte dos átomos no estado fundamental, com momento nulo, enquanto que a compressibilidade somente de átomos térmicos tem valores menores, pois a parcela dos átomos térmicos que deveria ser convertida em átomos condensados tem maior momento, sugerindo consistência nos

resultados.

Agora, apresentamos e discutimos a semi-compressibilidade isotérmica, denominada por nós κ_G , tanto para o gás ideal armadilhado quanto para o gás interagente, ambos para o modelo GV. O parâmetro de pressão total Π , está sendo representando somente pelos átomos térmicos no caso do gás ideal armadilhado, ou seja: $\Pi = \Pi_T$.

Figura 27 – Compressibilidade isotérmica κ_T^{th} em função da temperatura reduzida t , de um gás ideal armadilhado, no modelo de variáveis globais GV, curva preta. A curva verde-lacunada indica a semi-compressibilidade κ_G em GV, para o gás ideal armadilhado. Cada uma das curvas indica a $N = 10^4$ e as curvas são obtidas das expressões 2.59, 2.60, 2.112 e 2.113 do texto. Fonte: Elaborada pelo autor.

Pela figura 27, tem-se a compressibilidade isotérmica para átomos térmicos do gás ideal no modelo GV com a semi-compressibilidade do mesmo gás e modelo, sendo essa última grandeza exclusiva do modelo GV. De fato, κ_G é uma suscetibilidade com um significado físico distinto. Isso foi feito para compararmos os comportamentos em termos da ordem de grandeza. Também, a figura 27, foi gerada para N baixo, cujo comportamento geral idêntico também é observado para $N = 10^6$. De modo geral, independentemente de N , nota-se uma separação relativamente grande entre as curvas, κ_T^{th} e κ_G . O resultado gráfico da figura 27 é importante pelo fato que, no modelo das variáveis globais, é necessário comparar-se a compressibilidade com a semi-compressibilidade. Essa semi-compressibilidade, indicada pela curva verde-lacunada, da figura 27, está presente em diversas teses e artigos do grupo^{12,21}. Por último, o volume utilizado para o κ_T^{th} , indica ao V_T da seção 2.5.

Figura 28 – Semi-Compressibilidade isotérmica do gás interagente em GV, em função da temperatura reduzida t . A curva foi gerada com $N = 5 \times 10^5$ e as expressões são 2.114 e 2.115 do texto. Fonte: Elaborada pelo autor.

Finalmente, a semi-compressibilidade para o gás interagente em GV, da seção 2.8, e assim como no caso do gás ideal, nos auxiliou na obtenção da compressibilidade isotérmica. No apêndice C, mostramos a compressibilidade isotérmica do gás ideal livre de Bose, complementando essa série de resultados.

4 CONCLUSÃO

De modo geral, entendemos que os principais objetivos do projeto foram alcançados e que foram basicamente estudar a capacidade térmica e a compressibilidade isotérmica dos gases bosônicos, ideais e interagentes. Cada suscetibilidade foi investigada para cada espécie de gás por dois modelos diferentes denominados aproximação contínua e variáveis globais.

A pesquisa bibliográfica realizada, no início do projeto, sobre os resultados disponíveis de capacidade térmica e compressibilidade isotérmica revelou publicações para apenas três, das oito possíveis. As três encontradas foram: capacidade térmica do gás ideal armadilhado ¹, no modelo CA; capacidade térmica do gás ideal armadilhado ¹², no modelo GV; e capacidade térmica do gás intergente ¹⁴, no modelo GV.

Uma série de considerações e manipulações foram necessárias para conseguirmos investigar as outras suscetibilidades de interesse. A primeira delas foi obter uma fugacidade adequada para o gás ideal armadilhado, nos modelos CA e GV, pois a fugacidade é uma grandeza fundamental, da qual dependem diversas outras quantidades termodinâmicas. Apesar de ela ser mencionada amplamente na literatura, a fugacidade não estava prontamente disponível para ser utilizada. Assim, terminamos utilizando duas formas: a) uma expressão algébrica fechada que foi adaptada; b) a solução da equação de número total de átomos, N do modelo CA. Então, com a fugacidade, foi possível evoluir e validar a capacidade térmica do gás ideal armadilhado em CA e estender o estudo para sistemas com maior número de átomos. Depois, seguiu-se com o potencial químico, que influencia diretamente várias quantidades termodinâmicas. Para o potencial químico tinha-se um resultado gráfico na literatura para o gás intergente, porém não se dispunha de expressões algébricas analíticas para tal grandeza. Novamente, foi preciso estudar com profundidade a questão para só então encontrar um caminho para determinar os valores da dessa energia fundamental.

A densidade de número considerado foi a densidade média dos sistemas estudados, obtida simplesmente pela divisão do número de átomos do sistema pelo volume ocupado pelos átomos no espaço disponível. O objetivo de utilizar densidade média do sistema é devido o fato que existem implicações técnicas de se trabalhar com densidade local e que foi discutida detalhadamente no início do capítulo 2. Por vez, a densidade média do sistema é uma excelente aproximação, pois no final se deseja determinar a compressibilidade relativa a todo o sistema e não em regiões específicas. A densidade média do sistema é a média de das densidades locais. A densidade média foi utilizada tanto para o gás ideal armadilhado quanto para o gás intergente, ambos em CA. Uma vez que determinamos a densidade do sistema, pudemos calcular a compressibilidade isotérmica, pois pela densidade é uma das alternativas viáveis para a determinação dessa suscetibilidade.

No decorrer do projeto, desenvolvemos uma segunda maneira de calcular um volume efetivo ocupado pelos átomos térmicos do gás ideal armadilhado, partindo da densidade em ambos os modelos. E assim, dispondo então de duas densidades distintas e válidas para átomos térmicos do gás ideal armadilhado, comparamos os resultados obtidos pelas duas vias e observamos que ambas as densidades são equivalentes, exceto por um fator de 2. Além disso, a segunda densidade permitiu a determinação simples e direta da densidade do espaço de fase para o gás térmico ideal armadilhado, que não é muito discutido na literatura.

Ao compararmos os resultados da capacidade térmica do gás ideal armadilhado observamos que, no modelo CA, ela é contínua em todo o intervalo de temperaturas estudado, inclusive na região de transição de fase quântica, próximo da temperatura crítica T_c . No modelo da GV, a capacidade térmica apresenta descontinuidade na região de transição de fase quântica. Além disso, há algumas diferenças de magnitudes entre os resultados obtidos através dos dois modelos, para o gás ideal armadilhado, especialmente na região de transição de fase e para baixo N . Quando N aumenta os valores das capacidades térmicas convergem. Ambas as capacidades térmicas do gás ideal armadilhado coincidem quando $T \rightarrow 0$ e também para $T \geq 2T_0$, quando tendem para o valor da capacidade térmica do gás ideal clássico.

Observamos que a capacidade térmica do gás interagente, pelo modelo de CA, também é contínua em todo o intervalo de temperaturas, inclusive na região da temperatura crítica T_c . Novamente, pelo modelo da GV ela é descontínua e com contornos acentuados nas regiões próximas à T_c . Com relação às magnitudes das capacidades térmicas nos dois modelos, nota-se uma diferença considerável entre elas. Por fim, assim como no gás ideal, a capacidade térmica no gás interagente e nos dois modelos, apresentam um mesmo valor em $T = 0$ e também próximo a $T \approx 2T_c$, elas coincidem num outro valor convergindo para a capacidade térmica do gás ideal clássico. E ainda, observamos que as magnitudes das capacidades térmicas do modelo CA apresentam diferenças consideráveis entre o gás ideal armadilhado e o gás interagente, na região próxima à T_c . Elas são, no mínimo, uma unidade e meia na escala adimensional para N baixo e chegam a três unidades para alto N .

Agora apresentamos as conclusões para o estudo da compressibilidade isotérmica. Primeiramente, para a compressibilidade isotérmica total, contendo átomos térmicos e condensados, observou-se que, para o gás ideal armadilhado, em CA, os resultados obtidos foram bastante satisfatórios, pois a compressibilidade isotérmica obtida revelou claramente a manifestação da transição quântica comparado à extrapolação do resultado do gás ideal clássico até $T \rightarrow 0$, além de apresentar curvas contínuas ao longo de todo o intervalo de temperatura estudado. Por outro lado, o modelo da GV aplicado ao gás ideal armadilhado revela uma descontinuidade na região da temperatura crítica e magnitude diferente em relação ao modelo de CA, especialmente na região abaixo de T_c . Acima de T_c , ambas as compressibilidades para o gás ideal armadilhado se aproximam e tendem ao valor da compressibilidade isotérmica do gás ideal clássico.

Em relação à compressibilidade isotérmica total do gás interagente, nota-se o seguinte:

o modelo de CA apresentou a manifestação do regime quântico comparado à extrapolação do resultado do gás ideal clássico até baixas temperaturas ($T \rightarrow 0$). Nota-se também que as curvas são contínuas no intervalo de temperatura considerado. Para o modelo da GV a curva se apresentou descontínua na região de temperatura crítica e, ao se considerar temperaturas abaixo de T_c , observa-se um comportamento bem diferente daquele proposto pelo modelo de CA. Não obstante, as compressibilidades oriundas dos modelos CA e GV convergem para o valor de compressibilidade isotérmica do gás ideal clássico em $T \approx 2T_c$.

Na investigação da compressibilidade isotérmica através do modelo GV, inicialmente foi preciso rededuzir a semi-compressibilidade proposta pelo modelo, tanto para o gás ideal armadilhado quanto para o gás interagente, para se chegar enfim na suscetibilidade desejada. A semi-compressibilidade é uma grandeza diferente da compressibilidade isotérmica e nesse processo de transformação de uma grandeza para outra, a novidade surgiu em considerar um volume que depende de outros parâmetros, tais como: frequências da armadilha, temperatura, e número de átomos. Na sequência, tem-se o caso envolvendo somente os átomos térmicos do gás ideal armadilhado, nos dois modelos. Foi possível notar que a compressibilidade tem magnitudes e comportamentos similares e também as mesmas características, quando altera o tipo de volume. Assim sendo, conclui-se que o modelo da GV necessita de uma reformulação geral para poder representar melhor as quantidades termodinâmicas em condensados de Bose-Einstein, no que diz respeito a compressibilidade isotérmica e capacidade térmica, tanto para o gás ideal armadilhado quanto para o gás interagente. Isso mesmo que o modelo da GV já tenha uma certa importância na área.

E ainda, comparando as compressibilidades isotérmicas do modelo de CA, abaixo de T_c , é possível notar que enquanto no gás ideal armadilhado a compressibilidade se distancia para cima da extrapolação do gás ideal clássico, a do gás interagente se distancia para baixo da mesma referência. Em relação ao modelo de CA conseguiu-se resultados bastante satisfatórios, como foi o caso da compressibilidade isotérmica para o gás ideal armadilhado, a compressibilidade isotérmica e a capacidade térmica, sendo as duas últimas para o gás interagente. Em consideração a esses resultados satisfatórios ainda não divulgados na literatura, possibilita a publicação de artigos.

Concluindo, acreditamos que a maneira geral de abordar o problema aqui exposto, de desenvolver, para gerar resultados e interpretar quantidades termodinâmicas de gases bosônicos no regime quântico, pode servir como base para que outros estudos e pesquisas sejam realizados para se estudar outras propriedades interessantes desses sistemas físicos, como por exemplo: a equação de estado, pressão, entropia, compressibilidade adiabática e capacidade térmica a pressão constante, entre outras. Assim, acreditamos que o modelo baseado na aproximação contínua, desenvolvido no projeto, fornece uma base sólida e realistas da termodinâmica no regime quântico para a investigação de condensados de Bose-Einstein. Também acreditamos que ele pode ser aplicado a estudos relacionados à: velocidade do som, o coeficiente de expansão

térmica, os expoentes críticos, entre outros.

REFERÊNCIAS

- 1 GROSSMANN S ; HOLTHAUS, M. λ -transition to the Bose-Einstein condensate. **Zeitschrift Für Naturforschung A**, v. 50, n. 10, p. 921–930, 1995. Disponível em: <https://doi.org/10.1515/zna-1995-1003>. Acesso em: 05 nov. 2020.
- 2 GREINER, W.; NEISE, L.; STOCKER, H. **Thermodynamics and statistical mechanics**. New York: Springer-Verlag, 1995. Disponível em: <https://www.springer.com/gp/book/9780387942995> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 3 FOOT, C. J. **Atomic physics**. New York: Oxford: Oxford University Press, 2004. Disponível em: <https://global.oup.com/ukhe/product/atomic-physics-9780198506966?cc=br&lang=en&> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 4 TAVARES, P. E. S. **Consequências das excitações oscilatórias em condensados de Bose-Einstein**. 2012. 103 p. Tese (Mestrado) — Instituto de Física de São Carlos , Universidade de São Paulo, São Carlos-SP, 2012.
- 5 CASTILHO, P. C. M. **Termodinâmica de condensados aprisionados em armadilhas óptico-magnéticas**. 2012. 109 p. Tese (Mestrado) — Instituto de Física de São Carlos , Universidade de São Paulo, São Carlos-SP, 2012.
- 6 PETHICK, C. J.; SMITH, H. **Bose-Einstein condensation in dilute gases**. 2nd ed: Cambridge: Cambridge University Press, 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1017/CBO9780511802850> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 7 PITAEVSKII, L.; STRINGARI, S. **Bose-Einstein condensation and superfluidity**. New York: Oxford University Press, 2016. Disponível em: <https://global.oup.com/academic/product/bose-einstein-condensation-and-superfluidity-9780198824435?cc=br&lang=en&> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 8 LONDON, F. The lamda-phenomenon of liquid helium and the Bose-Einstein degeneracy. **Nature**, v. 141, n. 3571, p. 646, 1938. Disponível em: <https://doi.org/10.1038/141643a0> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 9 PATHRIA, R. K.; BEALE, P. D. **Statistical mechanics**. 3th ed: New York: Elsevier, 2011. Disponível em: <https://www.elsevier.com/books/statistical-mechanics/pathria/978-0-12-382188-1> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 10 HUANG, K. **Statistical mechanics**. 2nd ed: New York: John Wiley & Sons, 1987. Disponível em: <https://www.wiley.com/en-us/Statistical+Mechanics%2C+2nd+Edition-p-9780471815181> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 11 GIORGINI, S.; PITAEVSKII, L. P.; STRINGARI, S. Thermodynamics of a trapped Bose condensed gas. **Journal of Low Temperature Physics**, v. 109, p. 309–355, 1997. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/BF02396737> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 12 ROCHÍN, V. R.; BAGNATO, V. S. Thermodynamics of an ideal gas of bosons harmonically trapped: equation of state and susceptibilities. **Brazilian Journal of Physics**, v. 35, n. 3A, p. 607–613, 2005. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1590/S0103-97332005000400004> Acesso em: 05 nov. 2020.

- 13 ROCHÍN, V. R. Equation of state of an interacting Bose gas confined by a harmonic trap: The role of the “harmonic” pressure. **Physical Review Letters**, v. 94, n. 13, p. 130601, 2005. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.94.130601> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 14 SHIOZAKI, R. F. **Quantum turbulence and thermodynamics on a trapped Bose-Einstein condensate**. 2013. 139 p. Tese (Doutorado em Ciências) — Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo ; São Carlos - SP, 2013.
- 15 AYALA, I. R. **Transiciones de fase y fenómenos críticos en gases de Bose ultrafríos**. 2019. 144 p. Tese (Doctor) — Universidad Nacional Autónoma de México ; Ciudad de México - México, 2019.
- 16 REYES-AYALA, I.; POVEDA-CUEVAS, F. J.; SEMAN, J. A.; ROMERO-ROCHÍN, V. Critical properties of weakly interacting Bose gases as modified by a harmonic confinement. **Journal of Statistical Mechanics: theory and experiments**, v. 2017, n. 7, p. 073101, 2017.
- 17 DALFOVO, F.; GIORGINI, S.; PITAEVSKII, L. P.; STRINGARI, S. Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases. **Reviews of Modern Physics**, v. 71, n. 3, p. 463–512, 1999. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.71.463> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 18 GUANG-XI, H. U.; PING, Y. E. J.; XIAN-XI, D. A. I.; JI-XIN, D. A. I.; EVENSON, W. E. Quantitative and qualitative analysis of Bose-Einstein condensation in harmonic traps. **Communications Theoretical Physics**, v. 39, n. 1, p. 49–53, 2003.
- 19 EGOROV, M.; OPANCHUK, B.; DRUMMOND, P.; HALL, B. V.; HANNAFORD, P.; SIDOROV, A. I. Measurement of s-wave scattering lengths in a two-component Bose-Einstein condensate. **Physical Review A**, v. 87, n. 5, p. 053614, 2013. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.87.053614> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 20 BAGNATO, V. S. Simple calculation of the spatial evolution of atoms in a trap during occurrence of Bose-Einstein condensation. **Physical Review A**, v. 54, n. 2, p. 1726–1728, 1996. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.54.1726> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 21 FRITSCH, A. R. **Thermodynamics of a Bose gas: sound velocity from global variables and equivalence with other approaches**. 2016. 108 p. Tese (Doutorado em Ciências) — Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos-SP, 2016.
- 22 CUEVAS, F. J. P. **Aspects of hybrid confinement for a Bose-Einstein condensate: global pressure and compressibility**. 2013. 115 p. Tese (Doutorado em Ciências) — Instituto de Física de São Carlos , Universidade de São Paulo, São Carlos-SP, 2013.
- 23 HAUGERUD, H.; HAUGSET, T.; RAVNDAL, F. A more accurate analysis of Bose-Einstein condensation in harmonic traps. **Physics Letters A**, v. 225, n. 1-3, p. 18–22, 1997. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0375-9601\(96\)08842-1](https://doi.org/10.1016/S0375-9601(96)08842-1) Acesso em: 05 nov. 2020.
- 24 BISWAS S.; JANA, D. Thermodynamics of quantum gases for the entire range of temperature. **European Journal of Physics**, v. 33, n. 6, p. 1527–1535, 2012.
- 25 SOTNIKOV, A. G.; SEREDA, K. V.; SLYUSARENKO, Y. V. Chemical potentials and thermodynamic characteristics of ideal Bose and Fermi gases in the region of quantum degeneracy. **Low Temperature Physics**, v. 43, n. 1, 2017. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4975807> Acesso em: 05 nov. 2020.

- 26 CASTIN, Y.; DUM, R. Bose-Einstein condensates in time dependent traps. **Physical Review Letters**, France, v. 77, n. 27, p. 5315, 1996. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.77.5315> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 27 METCALF, H. J.; STRATEN, P. V. **Laser cooling and trapping**. New York: Springer, 1999. Disponível em: <https://www.springer.com/gp/book/9780387987286> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 28 ANDERSEN, J. O. Theory of the weakly interacting Bose gas. **Review Modern Physics**, v. 76, n. 2, p. 599, 2004. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.76.599> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 29 BAIERLEIN, R. The elusive chemical potential. **American Journal Physics**, v. 69, n. 4, p. 423, 2001. Disponível em: <https://doi.org/10.1119/1.1336839> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 30 BISWAS, S.; MITRA, J.; BHATTACHARYYA, S. Energy fluctuation and discontinuity of specific heat. **Journal of Statistical Mechanics: theory and experiments**, v. 2015, n. 3, p. P03013, 2015. Disponível em: <http://doi.org/10.1088/1742-5468/2015/03/P03013> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 31 BRAATEN, E.; HAMMER, H. W.; HERMANS, S. Nonuniversal effects in the homogeneous Bose gas. **Physical Review A**, v. 63, n. 6, p. 063609, 2001. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.63.063609> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 32 COWAN, B. On the chemical potential of ideal Fermi and Bose gases. **Journal of Low Temperature Physics**, v. 197, n. 5-6, p. 412-444, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s10909-019-02228-0> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 33 FARUK, M. M. Thermodynamics of ideal Bose gas under generic power law potential in d-dimensions. **Acta Physica Polonica B**, v. 46, n. 12, p. 2435, 2015. Disponível em: <http://doi.org/10.5506/APhysPolB.46.2435> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 34 GERBIER, F.; THYWISSEN, J. H.; RICHARD, S.; HUGBART, M.; BOUYER, P.; ASPECT, A. Experimental study of the thermodynamics of an interacting trapped Bose-Einstein condensed gas. **Physical Review A**, v. 70, p. 013607, 2004. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.70.013607> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 35 GÓRAL, K.; GAJDA, M.; RZAŻEWSKI, K. Thermodynamics of an interacting trapped Bose-Einstein gas in the classical field approximation. **Physical Review A**, v. 66, p. 051602(R), 2002. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.66.051602> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 36 GROSSMANN, S.; HOLTHAUS, M. On Bose-Einstein condensation in harmonic traps. **Physics Letters A**, v. 208, n. 3, p. 188, 1995. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(95\)00766-V](https://doi.org/10.1016/0375-9601(95)00766-V) Acesso em: 05 nov. 2020.
- 37 HO, T. L. Universal thermodynamics of degenerate quantum gases in the unitarity limit. **Physical Review Letters**, v. 92, n. 9, p. 090402, 2004. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.090402> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 38 HO, T. L.; ZHOU, Q. Obtaining the phase diagram and thermodynamic quantities of bulk systems from the densities of trapped gases. **Nature Physics**, v. 6, p. 131, 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1038/nphys1477> Acesso em: 05 nov. 2020.

- 39 HOLZMANN, M.; FUCHS, J. N.; BAYM, G. A.; BLAIZOT, J. P.; LALOË, F. Bose-Einstein transition temperature in a dilute repulsive gas. **Comptes Rendus Physique**, v. 5, n. 1, p. 21, 2004. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.crhy.2004.01.003> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 40 KETTERLE, W.; DRUTEN, N. J. V. Bose-Einstein condensation of a finite number of particles trapped in one or three dimensions. **Physical Review A**, v. 54, p. 656, 1996. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.54.656> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 41 KIRSTEN, K.; TOMS, D. J. Bose-Einstein condensation of atomic gases in a general harmonic-oscillator confining potential trap. **Physical Review A**, v. 54, p. 4188, 1996. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.54.4188> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 42 LEE, T.; HUANG, K.; YANG, C. Eigenvalues and eigenfunctions of a Bose system of hard spheres and its low-temperature properties. **Physics Review**, v. 106, n. 6, p. 1135, 1957. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.106.1135> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 43 LI, J.; FOGARTY, T.; CAMPBELL, S.; CHEN, X.; BUSCH, T. An efficient nonlinear feshbach engine. **New Journal of Physics**, v. 20, n. 1, p. 015005, 2018.
- 44 LIGARE, M. Numerical analysis of Bose–Einstein condensation in a three-dimensional harmonic oscillator potential. **American Journal of Physics**, v. 66, n. 3, p. 185, 1998. Disponível em: <https://doi.org/10.1119/1.18843> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 45 LOVAS, I.; FORTÁGH, J.; DEMLER, E.; ZARÁND, G. Entanglement and entropy production in coupled single-mode Bose-Einstein condensates. **Physical Review A**, v. 96, n. 2, p. 023615, 2017. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.96.023615> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 46 MERCADO-GUTIERREZ, E. D.; POVEDA-CUEVAS, F. J.; BAGNATO, V. S. **Scaling properties for a harmonic trapped gas near Bose-Einstein condensation using thermal global expansion coefficient measurement**. 2018 Disponível em: <https://arxiv.org/abs/1604.02729> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 47 MINGUZZI, A.; CHIOFALO, M. L.; TOSI, M. P. Accurate results on Bose-Einstein condensation in axially symmetric harmonic traps. **Il Nuovo Cimento D**, v. 18, n. 11, p. 1357, 1996. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/BF02453269> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 48 MINGUZZI, A.; CONTI, S.; TOSI, M. P. The internal energy and condensate fraction of a trapped interacting Bose gas. **Journal of Physics: condensed matter**, v. 9, n. 5, p. L33, 1997.
- 49 MULLIN, W. J. Bose-Einstein condensation in a harmonic potential. **Journal Low Temperature Physics**, v. 106, n. 5/6, p. 615, 1997. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/BF02395928> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 50 MULLIN, W. J.; FERNÁNDEZ, J. P. Bose–Einstein condensation, fluctuations, and recurrence relations in statistical mechanics. **American Journal Physics**, v. 71, p. 661, 2003. Disponível em: <https://doi.org/10.1119/1.1544520> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 51 NARASCHEWSKI, M.; STAMPER-KURN, D. M. Analytical description of a trapped semi-ideal Bose gas at finite temperature. **Physical Review A**, v. 58, p. 2423, 1998. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.58.2423> Acesso em: 05 nov. 2020.

- 52 NASCIMBÈNE, S.; NAVON, N.; CHEVY, F.; SALOMON, C. The equation of state of ultracold Bose and Fermi gases: a few examples. **New Journal of Physics**, v. 12, n. 10, p. 103026, 2010.
- 53 ORENES, D. B.; KOWALCZYK, A. U.; WITKOWSKA, E.; BARONTINI, G. Exploring the thermodynamics of spin-1 Bose gases with synthetic magnetization. **New Journal of Physics**, v. 21, n. 4, p. 043024, 2019.
- 54 PATHRIA, R. K. Bose-Einstein condensation of a finite number of particles confined to harmonic traps. **Physical Review A**, v. 58, p. 1490, 1998. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.58.1490> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 55 PENROSE, O.; ONSAGER, L. Bose-Einstein condensation and liquid helium. **Physics Review**, v. 104, n. 3, p. 576, 1956. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.104.576> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 56 POVEDA-CUEVAS, F. J.; REYES-AYALA, I.; SEMAN, J. A.; ROMERO-ROCHÍN, V. Global thermodynamics of confined inhomogeneous dilute gases: a semi-classical approach. **AIP Conference Proceedings**, v. 1950, n. 1, p. 030006, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.5031698> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 57 SCHMALJOHANN, H.; ERHARD, M.; KRONJÄGER, J.; SENGSTOCK, K.; BONGS, K. Dynamics and thermodynamics in spinor quantum gases. **Applied Physics B**, v. 79, n. 8, p. 1001, 2004. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s00340-004-1664-6> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 58 SHIOZAKI, R. F.; TELLES, G. D.; CASTILHO, P.; POVEDA-CUEVAS, F. J.; MUNIZ, S. R.; ROATI, G.; ROMERO-ROCHIN, V.; BAGNATO, V. S. Measuring the heat capacity in a Bose-Einstein condensation using global variables. **Physical Review A**, v. 90, n. 4, p. 043640, Oct 2014. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.90.043640> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 59 SMITH, R. P.; CAMPBELL, R. L.; TAMMUZ, N.; HADZIBABIC, Z. Effects of interactions on the critical temperature of a trapped Bose gas. **Physical Review Letters**, v. 106, p. 250403, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.250403> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 60 SMITH, R. P.; TAMMUZ, N.; CAMPBELL, L. D.; HOLZAMANN, M.; HADZIBABIO, Z. Condensed fraction of an atomic Bose gas induced by critical correlations. **Physical Review Letters**, v. 107, p. 190403, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.107.190403> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 61 YANG, C. N.; YANG, C. P. Thermodynamics of a one-dimensional system of bosons with repulsive delta-function interaction. **Journal Mathematical Physics**, v. 10, n. 7, p. 1115, 1969. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1664947> Acesso em: 05 nov. 2020.
- 62 YUKALOV, V. I.; YUKALOVA, E. P. Bose-Einstein condensation temperature of weakly interacting atoms. **Laser Physics Letters**, v. 14, n. 7, p. 073001, 2017.

Apêndices

APÊNDICE A – FOTO DE UM CONDENSADO DE BOSE-EINSTEIN EXPERIMENTAL E ALGUNS DADOS

Com a foto de um condensado, como mostrado abaixo, apresentamos alguns dados relacionados à ela, obtidos do laboratório.

Figura 29 – Imagem de um condensado de Bose-Einstein, obtido com átomos de rubídio ^{87}Rb . A foto, nos revela: os átomos do condensado, mancha oval cor de vinho ao centro da imagem, os átomos térmicos "coroa" cor azul médio que circunda a mancha oval vinho e ao redor da coroa de azul médio, tem-se a parte azul escuro, onde se encontra alguns átomos, do gás ideal clássico.

Fonte: Cortesia do Laboratório de Condensado de Bose-Einstein, BEC-1, ^{87}Rb , IFSC-USP, 2018.

Acompanhando a figura 29, alguns dados experimentais foram fornecidos: $N = 3,445 \cdot 10^5$ é o número total de átomos, $N_0 = 2,529 \cdot 10^5$ é o número de átomos do condensado, $N_T = 9,16 \cdot 10^4$ é o número de átomos térmicos, $T = 174 \text{ nk}$ é a temperatura da amostra, $\omega_z = 2\pi \cdot 21 \text{ rad/s}$ e $\omega_r = 2\pi \cdot 189 \text{ rad/s}$ são as frequências da armadilha. Também temos as medidas dos semi-eixos do condensado, mancha oval cor de vinho, no centro da imagem: $r_x = 113 \mu\text{m}$ e $r_y = 147 \mu\text{m}$. Esses semi-eixos são medidos depois de um certo tempo de vôo da nuvem, quando desliga a armadilha, pois o condensado é muito pequeno quando armadilhado e a câmera não detecta a imagem. Porém, se quisermos sabermos as dimensões do condensado, na armadilha, e que possui a forma de um charuto, temos que fazer a regressão linear dada por ²⁶.

Outras referências relacionadas ao experimento são: [3-5,27](#), tanto numa abordagem prática, quanto num nível teórico.

Por fim, queremos mencionar que existem outras geometrias de condensado além do charuto, como por exemplo condensados esféricos ou em forma de panqueca.

APÊNDICE B – SOMA DAS DENSIDADES LOCAIS, LDA, PARA OBTENÇÃO DO NÚMERO TOTAL DE ÁTOMOS N , DE UM GÁS IDEAL ARMADILHADO EM CA

Como foi visto no início do capítulo 2, um gás ideal livre de bose pode ser submetido à um potencial externo, permitindo confinar átomos numa certa região do espaço, eliminando a necessidade de paredes para o confinamento. Nesse novo sistema, surge porções de densidades locais e que preenche todo o gás. Por consequência, tem-se uma expressão algébrica que representa cada porção de átomos com densidade local. Se essa densidade local for integrada no espaço, obtemos o número total de átomos térmicos do sistema, $N_T = N$.

$$N = \int_0^\infty \frac{g_{3/2}(z')}{\lambda_T^3} d^3r, \quad (\text{B.1})$$

onde a função de Bose é expressa por:

$$g_{3/2}(z') = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{e^{\left(\frac{\mu - V_{ext}}{k_B T}\right)l}}{l^{3/2}}, \quad (\text{B.2})$$

e λ_T é o comprimento de onda térmico.

CASO ISOTRÓPICO DE FREQUÊNCIAS

Nesse caso, o potencial externo toma a forma: $V_{ext}(r) = \frac{m\omega^2 r^2}{2}$, com $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$, e a integral pode ser expressa como:

$$N = \left[4\pi \left(\frac{1}{\lambda_T^3} \right) \left(\sum_{l=1}^{\infty} \frac{e^{\frac{\mu l}{k_B T}}}{l^{3/2}} \right) \right] \int_0^\infty r^2 e^{\frac{-m\omega^2 r^2 l}{2k_B T}} dr, \quad (\text{B.3})$$

$$N = [] \int_0^\infty -\frac{d}{d\alpha} e^{-\alpha r^2} dr, \quad (\text{B.4})$$

$$N = [] \left(\frac{1}{2} \right) - \frac{d}{d\alpha} \int_{-\infty}^\infty e^{-\alpha r^2} dr = [] \left(\frac{1}{2} \right) - \frac{d}{d\alpha} \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{1/2}, \quad (\text{B.5})$$

Fazendo derivada da última expressão e com um pouco de álgebra, temos:

$$N = \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega} \right)^3 g_3(z), \quad (\text{B.6})$$

onde $z = e^{\frac{\mu}{k_B T}}$.

CASO ANISOTRÓPICO DE FREQUÊNCIAS

Para esse caso, o potencial externo é expresso como:

$$V_{ext}(x, y, z) = \left(\frac{m}{2}\right) (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2), \quad (\text{B.7})$$

e a integral torna-se:

$$N = \left[\left(\frac{1}{\lambda_T^3} \right) \left(\sum_{l=1}^{\infty} \frac{e^{\frac{\mu l}{k_B T}}}{l^{3/2}} \right) \right] \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)l}{2k_B T}} dx dy dz, \quad (\text{B.8})$$

$$N = [\] \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha_x x^2} dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha_y y^2} dy \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha_z z^2} dz, \quad (\text{B.9})$$

$$N = [\] \left(\frac{\pi}{\alpha_x} \right)^{1/2} \left(\frac{\pi}{\alpha_y} \right)^{1/2} \left(\frac{\pi}{\alpha_z} \right)^{1/2}, \quad (\text{B.10})$$

onde $\alpha_i = \frac{m\omega_i^2 l}{2k_B T}$, com $i=(x,y,z)$.

Novamente, com um pouco de álgebra, temos:

$$N = \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_{ho}} \right)^3 g_3(z), \quad (\text{B.11})$$

em que a frequência ω_{ho} , é a média geométrica das frequências.

Gostaríamos de fazer uma observação, em relação as três integrais. Se fizermos as três, de 0 à ∞ , estamos pegando apenas um octeto do potencial externo $V(r)$. Se fizermos uma integral de $-\infty$ à ∞ , estamos pegando dois octetos do potencial, se fizermos a integral como está, os oito octetos são considerados, no espaço 3D.

APÊNDICE C – CAPACIDADE TÉRMICA E COMPRESSIBILIDADE ISOTÉRMICA, AMBAS DO GÁS IDEAL LIVRE DE BOSE

CAPACIDADE TÉRMICA

Figura 30 – Capacidade Térmica reduzida, em função da Temperatura reduzida T/T_c , para um Gás ideal livre de Bose.

Fonte: GREINER, W.; NEISE, L.; STOCKER, H.²

Na Figura 30 acima, a capacidade térmica do gás ideal livre tem um comportamento similar as capacidades térmicas citadas anteriormente, como foi o caso do gás ideal armadilhado e do gás interagente, ou seja, o C_V "nasce" em $C_V = 0$, vai crescendo até chegar em um valor máximo e depois começa a cair um pouco e satura num certo valor. Pela figura, notamos que o C_V máximo está em torno de $2Nk_B$ e depois satura em torno de $C_V = 1.5Nk_B$. Esse valor de saturação, se deve a densidade de estados $\rho(\epsilon) \sim \epsilon^{1/2}$, empregada na construção do modelo. Essa capacidade térmica é obtida das equações 13.47 e 13.53, de ².

COMPRESSIBILIDADE ISOTÉRMICA

Nessa outra parte do apêndice, a suscetibilidade em questão, foi obtida do livro do Pathria ⁹, do capítulo 7.

A expressão algébrica, é expressa por:

$$\kappa_T = \frac{1}{n k_B T} \left(\frac{g_{1/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \right), \quad (\text{C.1})$$

referente apenas aos átomos térmicos e com $n = N/V$ sendo a densidade de número. A equação C.1, pode também ser escrita como:

$$\kappa_T \cdot nk_B T_c = \frac{1}{t} \left(\frac{g_{1/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \right). \quad (C.2)$$

Em relação a equação C.2, o fator $nk_B T_c$ é uma constante, $t = T/T_c$ é temperatura reduzida, escolhido por nós na faixa de 0 à 2, e a temperatura crítica T_c ⁹ é expressa por:

$$T_c = \frac{h^2}{2\pi m k_B} \left(\frac{N}{V \zeta(3/2)} \right)^{2/3}. \quad (C.3)$$

A fugacidade z , é obtida da solução da equação:

$$N = \frac{V}{\lambda_T^3} g_{3/2}(z) + \frac{z}{1-z}, \quad (C.4)$$

sendo λ_T , o comprimento de onda térmico. Por fim, a fugacidade z , só depende de dois parâmetros: $z = z(t, N)$.

O gráfico de tal suscetibilidade vem à seguir:

Figura 31 – Semilog da compressibilidade isotérmica reduzida em função da temperatura reduzida, do gás ideal livre de Bose.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Em relação a figura 31, notamos duas características típicas: a) a manifestação do regime quântico e b) a transição de fase no regime quântico. Também devemos mencionar que as curvas são contínuas, observadas durante a confecção dos mesmos.

Por fim, iremos citar outras referências bibliográficas, que complementam aquelas citadas ao longo de todo o texto.

São elas: [8, 16, 28–62](#).