



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE
MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

Condensación Bose-Einstein en
estructuras multicapas periódicas

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

LICENCIADO EN FÍSICA

P R E S E N T A :

OMAR ABEL RODRÍGUEZ LÓPEZ

DIRECTOR DE TESIS:

Dr. MIGUEL ANGEL SOLÍS ATALA



Junio 2010



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Hoja de datos del jurado

- 1.- Datos del alumno
Rodríguez
López
Omar Abel
(55) 57 79 26 06
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Física
301068020
- 2.- Datos del tutor
Dr.
Miguel Ángel
Solís
Atala
- 3.- Datos del sinodal 1
Dr.
Pablo
de la Mora y Palomar
Askinasy
- 4.- Datos del sinodal 2
Dr.
Francisco
Morales
Leal
- 5.- Datos del sinodal 3
Dr.
Jacques
Soullard
Saintrais
- 6.- Datos del sinodal 4
Dr.
Gerardo Jorge
Vázquez
Fonseca
- 7.- Datos del trabajo escrito
Condensación Bose-Einstein en estructuras multicapas periódicas
141 p
2010

A mis padres

Este es un momento muy importante para mí, y quiero agradecer a todas la personas e instituciones que han hecho posible esta Tesis.

Agradezco a mis padres por haberme dado todo para llegar a donde estoy, ellos son la razón principal por la cual termino esta etapa de mi vida. Gracias por su amor, sus consejos y palabras de aliento, y por su ejemplo de superación. Les dedico este trabajo por tantas cosas buenas que me han brindado.

Agradezco a mis hermanos por su compañía y apoyo, por todos los momentos agradables y los no tan agradables que hemos vivido.

Agradezco a mis amigos por su confianza y buenos deseos.

Agradezco a la UNAM y a todos mis profesores, que me dieron los conocimientos necesarios para alcanzar este momento.

Agradezco al Dr. Miguel Ángel Solís Atala por haberme dado la oportunidad de realizar este trabajo bajo su dirección. Igualmente agradezco al Dr. Mauricio Fortes Besprosvani, al Dr. Francisco Javier Sevilla Pérez y a la M.Sc. Patricia Salas Casales por su apoyo y por las fructíferas discusiones que sostuvimos.

Agradezco el apoyo económico recibido a través del PAPIIT.

Y muchas gracias a todas aquellas personas que no aparecen en este lugar, pero que de alguna manera me ayudaron a ser quien soy.

MUCHAS GRACIAS A TODOS

Índice general

Índice general	I
Índice de figuras	III
Resumen	v
1 Introducción	1
2 Estructuras periódicas	5
2.1. Potencial de Kronig-Penney	5
2.2. Potencial de Kronig-Penney con una delta	8
2.3. Potencial de Kronig-Penney con dos deltas	13
2.4. Espectro de energías	20
Una delta por celda unidad	20
Dos deltas por celda unidad	21
3 Bosones entre capas	29
3.1. Propiedades termodinámicas	30
Temperatura crítica	33
Potencial químico	35
Energía interna por bosón	36
Calor específico	38
3.2. Métodos numéricos en el cálculo de las propiedades termodinámicas .	41
3.3. Resultados generales	44
Una delta por celda unidad	44
Dos deltas por celda unidad	52

4	Aplicaciones	61
4.1.	Películas de ^4He	61
	Temperatura crítica y calor específico	63
4.2.	Superconductores de alta temperatura crítica	71
	Temperatura crítica y calor específico	74
5	Conclusiones	83
A	Polilogaritmos	91
B	Metodos de Integración Numérica	93
B.1.	Cuadratura de Gauss-Legendre	93
B.2.	Cuadratura por transformación exponencial doble	95
C	Código fuente de aplicación	97
C.1.	Función que inicializa el sistema de bosones	97
C.2.	Función que establece los parámetros del sistema de bosones	97
C.3.	Función generadora de los pesos y abscisas para la cuadratura	98
C.4.	Funciones generadoras de la relación de dispersión y sus derivadas	99
C.5.	Función que determina los límites de cada banda permitida	100
C.6.	Función que determina energías para cada banda permitida, en función de las abscisas de la cuadratura	104
C.7.	Función que calcula la temperatura crítica del sistema	110
C.8.	Función que calcula el potencial químico del sistema	111
C.9.	Función que calcula la energía interna por bosón del sistema	114
C.10.	Función que calcula el calor específico del sistema	118
	Lista de abreviaturas	123
	Lista de parámetros	125
	Bibliografía	127

Índice de figuras

2.1. Potencial de Kronig-Penney	6
2.2. Potencial de Kronig-Penney con una Delta	9
2.3. Relación de Dispersión con una Delta	10
2.4. Bandas de energía como función de k	11
2.5. Gráfica de ε vs. k	12
2.6. Potencial de Kronig-Penney con dos Deltas	13
2.7. Relación de Dispersión con dos Deltas.	18
2.8. Relación de Dispersión con Dos Deltas	19
2.9. Espectro de energías de un sistema con una delta por celda unidad . . .	20
2.10. Bordes del espectro de bandas de energía de un sistema con dos deltas .	22
2.11. Perspectiva adicional de los bordes del espectro de bandas de energía . .	23
2.12. Niveles de energía de un sistema con dos deltas cuando $P_{10} = P_{20} \rightarrow \infty$.	24
2.13. Espectro de bandas de energía de un sistema con dos deltas	25
2.14. Niveles de energía de un sistema con dos deltas cuando $P_{10} \rightarrow \infty$ y P_{20} fija.	26
2.15. Perspectiva de los niveles de energía de un sistema con dos deltas cuando $P_{10} \rightarrow \infty$ y P_{20} fija.	27
2.16. Perspectiva de los niveles de energía de un sistema con dos deltas cuando a/λ_0 cambia y P_{10} y P_{20} están fijas.	28
3.1. Sistema tridimensional con una delta por celda unidad	30
3.2. Sistema tridimensional con dos deltas por celda unidad	31
3.3. T_c como función de a/λ_0 para sistemas con una delta por celda unidad .	44
3.4. T_c como función de a y P_0 para sistemas con una delta por celda unidad	45
3.5. Curvas de T_c/T_0 de un sistema con una delta por celda unidad.	46
3.6. C_V/Nk_B en función de T/T_0 para sistemas con una delta por celda unidad	47

3.7. $C_V(T_c/T_0)/Nk_B$ en función de a/λ_0 para sistemas con una delta por celda unidad	48
3.8. C_V/Nk_B en función de T/T_0 para sistemas con una delta por celda unidad	49
3.9. Vista tridimensional de C_V/Nk_B en función de a/λ_0 y T/T_0	50
3.10. C_V/Nk_B en función de λ/a	51
3.11. Esquema de la situación en la cual $\lambda \approx 2a$	52
3.12. T_c/T_0 en función de P_{20} para diversos valores de P_{10} de un sistema con dos deltas por celda unidad	53
3.13. T_c en función de a/λ_0 de un sistema con dos deltas.	54
3.14. T_c en función de la intensidad P_{20} para un sistema con dos deltas.	55
3.15. T_c en función de la separación β_2 de un sistema con dos deltas	56
3.16. C_V/Nk_B en función de T/T_0 para diversos parámetros de un sistema con dos deltas.	58
3.17. C_V/Nk_B en función de T/T_0 , para diversos parámetros de un sistema con dos deltas.	59
3.18. $C_V(T_c/T_0)/Nk_B$ en función de a/λ_0 de un sistema con dos deltas	60
4.1. Corte transversal de una película de ^4He	62
4.2. Curvas experimentales de calor específico de películas de helio	62
4.3. Temperatura crítica y calor específico calculado de una película de ^4He	64
4.4. Inverso de T_c/T_0 calculado en función de P_0 para una película de ^4He	65
4.5. Dependencia de la temperatura de transición T_{kink} respecto al grosor de la película de ^4He	66
4.6. Inverso de T_c calculado en función de P_0 para una película de ^4He	68
4.7. Relación entre P_0 y el número de monocapas n de una película de ^4He	69
4.8. Comparación de ecuaciones entre P_0 y el número de monocapas n de una película de ^4He	70
4.9. Estructura cristalina del YBCO	73
4.10. T_c/T_0 del YBCO en función de $P_{0(Y)}$ y $P_{0(CuO)}$	75
4.11. $C_V(T_c/T_0)/Nk_B$ del YBCO en función de $P_{0(Y)}$ y $P_{0(CuO)}$	76
4.12. $C_V(T_c/T_0)/Nk_B$ y T_c del YBCO en función de $P_{0(Y)}$ y $P_{0(CuO)}$	77
4.13. Curvas de $C_V/Nk_B T$ vs. T del YBCO para diversos pares de $P_{0(Y)}$ y $P_{0(CuO)}$	79
4.14. Calor específico de la red cristalina del YBCO	80
4.15. Calor específico total de la red cristalina del YBCO	81
4.16. Calor específico a T_c en función de $P_{0(CuO)}$	82
4.17. Calor específico experimental del YBCO	82

Resumen

En esta tesis se propone y analiza un modelo físico que consiste de un gas ideal de bosones dentro de una estructura periódica de capas planas permeables, con el que pretendemos describir las propiedades termodinámicas de sistemas reales tales como superconductores de alta temperatura crítica, películas delgadas de helio cuatro y/o excitones-polaritones en semiconductores multicapas.

El trabajo se desarrolla de la siguiente manera:

El primer capítulo consiste de una introducción al problema que abordamos aquí. Resumimos los antecedentes, describimos nuestro modelo y esbozamos los principales resultados obtenidos.

Para modelar las capas entre las cuales se mueven los bosones, usamos un potencial de deltas de Kronig-Penney en una de las direcciones mientras que en las otras dos direcciones los bosones se mueven libremente. Por lo anterior, en el segundo capítulo discutimos algunos resultados generales para estructuras periódicas y, en particular, resumimos y extendemos tanto los resultados como la discusión que comúnmente se encuentra en los libros de texto para los espectros de energía para el potencial unidimensional de Kronig-Penney con una delta por celda unidad.

Como estamos interesados en sistemas periódicos multicapas con no todas las capas iguales, a continuación resolvimos la ecuación de Schrödinger para el potencial de Kronig-Penney con $n = 1, 2$ deltas por celda unidad, no todas iguales ni igualmente espaciadas. Cuando tenemos dos deltas por celda unidad, la estructura de bandas aumenta en complejidad dado que sus características dependen de las intensidades de las deltas y la separación entre ellas.

A las expresiones para la energías de las partículas dentro del potencial de Kronig-Penney unidimensional con una y dos deltas por celda unidad, le sumamos las energías de las partículas libres en las otras dos direcciones para completar la relación de dispersión del movimiento tridimensional de las partículas. Esta relación de dispersión es

usada en el tercer capítulo de la tesis para calcular las temperaturas críticas de condensación Bose-Einstein el potencial químico, la energía interna y el calor específico a volumen constante.

En el capítulo cuatro se emplea el modelo y las ecuaciones obtenidas para calcular las propiedades termodinámicas de dos sistemas reales: uno que consiste en películas delgadas de ^4He , y otro es un cristal de superconductor cuprato YBCO. En ambos casos se determina la temperatura crítica y el calor específico empleando información experimental sobre la estructura de capas de ambos sistemas. En el caso de las películas de ^4He se encuentra que el calor específico calculado difiere sustancialmente del calor específico experimental, pues los cálculos muestran un calor específico que se incrementa casi proporcionalmente a la temperatura, pero los datos experimentales indican una tasa de incremento cúbico respecto a la temperatura. Por otra parte, se encuentra que es posible relacionar de una manera sencilla, aunque en principio sólo matemáticamente, el número de monocapas que conforman la película de ^4He con la intensidad de las deltas del modelo de Kronig-Penney empleado para representar la película. Esto es así porque la dependencia de la temperatura crítica experimental con el número de monocapas muestra un comportamiento muy similar a la relación entre la temperatura crítica calculada con el logaritmo de la intensidad de las deltas.

Al modelar el YBCO mediante el modelo de Kronig-Penney con dos deltas por celda unidad se encontró que existe toda una familia de pares P_a - P_b que reproducen la temperatura crítica experimental del YBCO. El calor específico en función de la temperatura se calculó para estos pares, y en comparación con la magnitud del calor específico experimental del YBCO resultó ser muy pequeño, lo que hizo necesario incluir la contribución de la red al calor específico, el cual se calculó mediante el modelo de Debye. Una vez incluida esta contribución la magnitud de ambos calores resultó ser muy similar. El calor específico experimental muestra una anomalía a $T_c = 88\text{K}$, la cual no se pudo reproducir a partir de los cálculos del modelo de Kronig-Penney, lo cual es un indicio de que algunas suposiciones que se han hecho no funcionan para modelar al YBCO.

Finalmente se anexan varios apéndices con información sobre funciones y conceptos matemáticos que son empleados frecuentemente en el trabajo y que no necesariamente son de dominio general. También, con el fin de mostrar cómo se obtuvieron las propiedades termodinámicas se anexa el código fuente de la aplicación empleada con tal fin.

Capítulo 1

Introducción

Dos eventos científicos a finales del siglo XX dieron la pauta para muchas de las investigaciones que actualmente se realizan en la física de la materia condensada: por un lado, el descubrimiento en 1986 de la superconductividad en el cuprato $\text{La}_{1.85}\text{Ba}_{0.15}\text{CuO}_4$ por los físicos J. Georg Bednorz y K. Alex Mueller [1] y la obtención en el laboratorio, en 1995, de la condensación Bose-Einstein por los físicos Eric A. Cornell y Carl E. Wieman [2].

Después del descubrimiento de la superconductividad en el LaBaCuO a una temperatura de 38K, muchos otros cupratos fueron estudiados hasta alcanzar la temperatura crítica de 164 K [3] en el $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$ bajo la presión de 30 GPa (atmósfera = 1.013×10^5 Pa). A la fecha se han sintetizado muchos otros superconductores cuyas temperaturas críticas superan los 30 K, tales como el diboruro de magnesio MgB_2 [4] con una temperatura crítica de 39K y donde el efecto isotópico dio indicios de que su superconductividad es tipo BCS [5]. Más recientemente se han reportado superconductores a base de hierro Fe conocidos como los pnictidos [6] cuyas temperaturas críticas pueden ser de uno o dos dígitos y están compuestos de capas alternadas de óxido de lantano ($\text{La}_{3+}\text{O}_{2-}$) y pnictido hierro ($\text{Fe}_{2+}\text{P}_{3-}$).

Una constante que se observa en todos estos materiales es la distribución de sus moléculas constituyentes, que se arreglan en planos alternados de portadores de carga y “aislantes”, apilados en una dirección preferencial. Aunque las propiedades superconductoras del diboruro de magnesio se han podido explicar en términos de la teoría BCS, la explicación de la propiedades de los cupratos sigue siendo motivo de muchas investigaciones experimentales y teóricas, y que han generado muchas nuevas ideas sobre la superconducción en los cupratos, sin embargo “el único consenso es que no

hay consenso” sobre el origen de la superconductividad de alta T_c .

Ante la imposibilidad de explicar la superconductividad de alta T_c con la teoría BCS, se ha optado por nuevas y viejas teorías. En particular, se ha revivido [7, 8, 9, 10] aquella idea en la que la superconductividad es considerada como una condensación Bose-Einstein de pares de electrones formados con la participación de las vibraciones de la red. Dicha idea fue propuesta [11, 12] antes de la teoría Estadística de la superconductividad de Bogoliubov [13] que fueron anteriores a la aparición de la teoría BCS en 1956. Pero fue tan contundente la teoría BCS para explicar la superconductividad que hoy conocemos como convencional, que todas las ideas originadas en aquel entonces para explicar la superconductividad fueron abandonadas, en particular la de una condensación Bose-Einstein de pares de electrones.

En la actualidad las teorías de la superconductividad de alta T_c que incorporan la condensación Bose-Einstein (CBE) como un elemento esencial, se han “perfeccionado” considerando no tan sólo los pares de electrones sino también los electrones desapareados. Estos modelos Estadísticos Bosón-Fermión (BF) de la superconductividad empezaron a ser estudiados seriamente a principios de los años cincuenta [14, 15]. Aunque la idea de un gap en la energía de los electrones apareados apareció con la teoría BCS, este fue considerado por primera vez en las teorías estadísticas por Eagles [16]. En 1989 Friedberg and T.D. Lee [17, 18] usaron el modelo BF para explicar la superconductividad en los cupratos. Su teoría usa la razón entre las masas paralelas y perpendicular a los planos, de las partículas, como único parámetro ajustable para reproducir bastante bien las temperaturas críticas T_c/T_F reportadas para los cupratos [9]. La razón entre las masas usada fue de 66,560 que es bastante grande pero aún menor que la razón de anisotropía de 10^5 reportado recientemente para $\text{Bi}_{2+x}\text{Sr}_{2-y}\text{CuO}_{6\pm\delta}$ [19].

Desde 1995 el grupo [20] de investigación de Física de Muchos Cuerpos de la UNAM (website: <http://manybody.fisica.unam.mx/>) ha venido desarrollando una versión de la teoría estadísticas boson-fermión de la superconductividad, donde se modela al superconductor como un gas de electrones interactuando atractivamente vía las vibraciones de la red, permitiendo que se formen parejas (pares de Cooper) que suponen se comportan como bosones y que conviven con los electrones no apareados. Han calculado las propiedades termodinámicas de esta mezcla de bosones (pares de Cooper) con fermiones (electrones desapareados) y en particular, su temperatura crítica de condensación Bose-Einstein que han comparado con las temperaturas superconductoras de los cupratos. Para ello ha sido necesario estudiar la condensación Bose-Einstein en una variedad de circunstancias. Por ejemplo, han estudiado la CBE

en d dimensiones de bosones que tienen una relación de dispersión generalizada que incluye energías como potencias del momento de la partícula [21], de donde se deduce que aún en 2D es posible tener CBE siempre y cuando los bosones tengan una relación lineal energía-momento, resultado que sustenta la hipótesis de que la superconductividad es una CBE de electrones apareados, aun en superconductores de alta T_c cuyo comportamiento es casi bidimensional. También se ha estudiado la CBE de bosones ideales permanentes atrapados [22] mediante potenciales armónicos en δ direcciones menores o iguales a la dimensión d . De esta forma es posible simular bosones dentro de un paralelepípedo cuasi-bidimensional, que podría ser útil para simular a los pares de cooper en los superconductores estratificados, pero tiene la inconveniencia de no considerar la correlación entre las capas que en los superconductores existe.

Dentro de estas líneas de investigación, y dentro del grupo de Física de Muchos Cuerpos, nace el tema de la presente tesis. Aquí nos planteamos estudiar la CBE dentro de una estructura periódica que emula la periodicidad de las capas de óxido de cobre en los cupratos. Aunque el tema nace pensando en la superconductividad de alta T_c , el modelo estudiado puede ser usado también para explicar las propiedades de películas de helio cuatro [23], o la de los excitones (parejas electrón-hueco) en semiconductores multicapas [24].

El objetivo principal de esta tesis es formular un modelo teórico para estimar las propiedades físicas de sistemas con estructura de capas periódicas en los cuales se presenta condensación de Bose-Einstein. Al ser un modelo muy general, en principio funciona para cualquier sistema con estructura de capas como los mencionados en el párrafo anterior. Aunque entre los pares de Cooper, los átomos de helio o los excitones, existe interacción entre ellos, aquí estaremos considerando que las densidades son tan bajas tal que las interacciones entre sus componentes podemos dejarlas pendientes sin perder en el cálculo las características esenciales del sistema real.

El problema se aborda proponiendo un modelo para la estructura de capas periódicas. Con tal fin, modelamos el efecto de las capas sobre los bosones como aquél ejercido por un potencial de Kronig-Penney (KP), en el límite en que el ancho de las barreras tienden a cero y su altura a infinito, en una de las direcciones de movimiento de los bosones mientras permitimos que sean libres en las otras dos direcciones.

La ecuación de Schrödinger que satisfacen los bosones entre planos es separable en cada una de sus tres direcciones de movimiento por lo que la energía por partícula es una suma de las energías en cada una de las direcciones de movimiento. En las dos direcciones paralelas a los planos los bosones se mueven libremente por lo que esa parte de su energía es la de una partícula libre. La energía en la dirección perpendicular

a los planos es aquella que resulta de resolver el problema de una partícula en un potencial de deltas de KP.

Aunque el problema de una partícula en un potencial de KP es bien conocido y reportado en los libros de texto, cuando la magnitudes de las deltas son iguales, es decir, la celda unidad consta de una delta, esto no es así cuando la celda unidad consta de dos o más deltas.

Buena parte de la tesis se dedica a resolver el problema de una partícula en un potencial de KP cuya celda unidad consta de n deltas. Para $n = 2$ se obtienen y dibujan las estructuras de bandas como función de la separación relativa de las deltas y de sus intensidades. Detallar el caso con $n = 2$ es necesario para poder modelar las estructuras periódicas de los cupratos cuyos espacios con los portadores de cargas, es decir los planos de óxido de cobre, se ven separados por planos permeables de al menos dos tipos: aquellos formados con los átomos de Itrio y aquellos formados por las cadenas de óxido de cobre, en el superconductor YBaCuO.

La relación energía-momento de las partículas así obtenidas es muy importante: a partir de las energías calculadas se pueden determinar las propiedades termodinámicas del sistema empleando la Mecánica Estadística de Bose-Einstein. No se considera que el número de bosones tenga que estar restringido, por lo que el Gran Potencial termodinámico se emplea como punto de partida para determinar las propiedades macroscópicas, el cual a su vez está relacionado con la Gran Función de partición de donde se derivan todas las demás propiedades termodinámicas.

Los resultados generales obtenidos para el sistema de bosones entre planos son usados para describir aproximadamente las propiedades de dos sistemas reales: la temperatura crítica y el calor específico del cuprato YBa₂Cu₃O₇; y el calor específico de películas delgadas de ⁴He.

Al final reproducimos los códigos del programa que usamos para calcular las propiedades reportadas en esta tesis, los cuales están escritos en el lenguaje de programación del sistema de álgebra computacional (CAS) *Mathematica*; mostramos el método de integración numérica usado; y recordamos las propiedades de la función Polilogaritmo.

Capítulo 2

Estructuras periódicas

2.1. Potencial de Kronig-Penney

Las características esenciales del comportamiento de bosones dentro de estructuras periódicas pueden ser ilustradas empleando un modelo unidimensional simple, discutido inicialmente por R. L. Kronig y W. G. Penney en 1930 [28]. En este modelo (KP) los bosones se encuentran dentro de un potencial periódico, representado por barreras de potencial de ancho b y de altura V_0 , separadas por pozos de ancho a en donde el potencial es cero (con el modelo de KP se pueden describir por igual entre fermiones o bosones, pero en este trabajo se consideran únicamente bosones). Los átomos que forman la red periódica son representados por las barreras de potencial. El periodo del potencial es $a + b$, como se muestra en Fig. (2.1). donde el potencial es cero en la región $0 < x < a$, mientras que es V_0 en la región $-b < x < 0$. El potencial se puede escribir de la siguiente manera:

$$V(x) = V_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Theta[x - (a + (n - 1)(a + b))] \Theta[-x + n(a + b)] \quad (2.1)$$

donde $\Theta(x)$ es la función escalón de Heaviside. Bajo estas condiciones, las ecuaciones de Schrödinger que representan a los bosones en cada periodo son

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon \psi = 0 \quad 0 < x < a \quad (2.2)$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon - V_0) \psi = 0 \quad -b < x < 0 \quad (2.3)$$

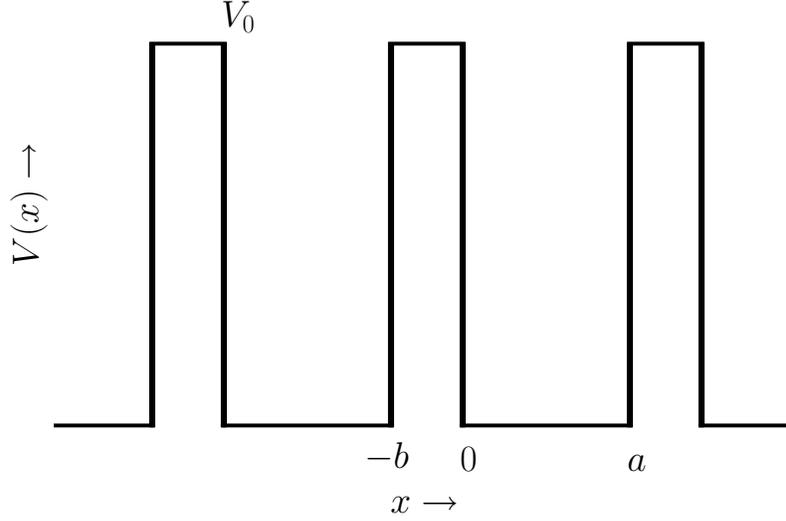


Figura 2.1: El potencial de Kronig-Penney

lo que implica una función de onda ψ_1 en $0 < x < a$ y una función ψ_2 en $-b < x < 0$. La energía ε de los bosones puede ser mayor o menor que V_0 . A partir de esto, se definen las cantidades α y β

$$\alpha^2 = \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \quad \text{y} \quad \beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - \varepsilon) \quad (2.4)$$

La solución a las ecuaciones Ec. (2.2) y Ec. (2.3) está determinada por el teorema de Bloch, el cual establece que para el potencial periódico la ecuación de onda es de la forma

$$\psi(x) = e^{ikx} u_k(x) \quad (2.5)$$

donde $u_k(x)$ es una función periódica con el mismo periodo del potencial y k es el *número de onda*. En efecto, el teorema de Bloch indica que la solución es una onda plana cuya amplitud es modulada por el factor $u_k(x)$. Por sustitución directa en Ec. (2.2) y Ec. (2.3) se obtienen las siguientes ecuaciones diferenciales para $u(x)$

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + 2ik \frac{du}{dx} + (\alpha^2 - k^2)u = 0 \quad 0 < x < a \quad (2.6)$$

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + 2ik \frac{du}{dx} - (\beta^2 + k^2)u = 0 \quad -b < x < 0 \quad (2.7)$$

Estas ecuaciones diferenciales tienen por solución general

$$u_1 = Ae^{i(\alpha-k)x} + Be^{-i(\alpha+k)x} \quad 0 < x < a \quad (2.8)$$

$$u_2 = Ce^{(\beta-ik)x} + De^{-(\beta+ik)x} \quad -b < x < 0 \quad (2.9)$$

siendo A , B , C y D constantes. La elección de las constantes depende de las condiciones de frontera de la función de onda ψ , así como de la periodicidad de u . Así, ψ debe ser continua y tener derivada continua en $x = 0$, donde se presenta una discontinuidad en el potencial. Estas condiciones se resumen en

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad \text{y} \quad \psi'_1(0) = \psi'_2(0) \quad (2.10)$$

Por otra parte, el teorema de Bloch impone la periodicidad de u , por lo que su derivada también debe ser periódica. Entonces

$$u_1(a) = u_2(-b) \quad \text{y} \quad u'_1(a) = u'_2(-b) \quad (2.11)$$

Las cuatro condiciones de frontera son suficientes para determinar las constantes A , B , C y D . Por Ec. (2.10), se obtiene la siguiente relación entre constantes:

$$A + B = C + D \quad (2.12)$$

$$i\alpha A - i\alpha B = \beta C - \beta D \quad (2.13)$$

mientras que por Ec. (2.11) se obtiene

$$Ae^{i(\alpha-k)a} + Be^{-i(\alpha+k)a} = Ce^{-(\beta-ik)b} + De^{(\beta+ik)b} \quad (2.14)$$

$$i(\alpha - k)Ae^{i(\alpha-k)a} - i(\alpha + k)Be^{-i(\alpha+k)a} = (\beta - ik)Ce^{-(\beta-ik)b} - (\beta + ik)De^{(\beta+ik)b} \quad (2.15)$$

Así, se obtiene un sistema de ecuaciones lineales homogéneo, con cuatro incógnitas. Este sistema tiene solución distinta de la trivial solamente si su determinante es cero. Esto implica que:

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ i\alpha & -i\alpha & -\beta & \beta \\ e^{i(\alpha-k)a} & e^{-i(\alpha+k)a} & -e^{-(\beta-ik)b} & -e^{(\beta+ik)b} \\ i(\alpha - k)e^{i(\alpha-k)a} & -i(\alpha + k)e^{-i(\alpha+k)a} & -(\beta - ik)e^{-(\beta-ik)b} & (\beta + ik)e^{(\beta+ik)b} \end{vmatrix} = 0 \quad (2.16)$$

Desarrollando el determinante se puede mostrar que es equivalente a

$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \sinh(\beta b) \sin(\alpha a) + \cosh(\beta b) \cos(\alpha a) = \cos[(a + b)k] \quad (2.17)$$

A la Ec. (2.17) se le denomina *relación de dispersión*, pues determina las energías que pueden tener las partículas con una k dada.

2.2. Potencial de Kronig-Penney con una delta

La Ec. (2.17) permite determinar las energías de partículas tales que $\varepsilon < V_0$ ó $\varepsilon > V_0$. La forma de la relación de dispersión cambia ligeramente en cada caso. Cuando se considera el caso límite en que el ancho de las barreras de potencial tiende a cero y el alto de la barrera de potencial tiende a infinito, es decir, $b \rightarrow 0$, $V_0 \rightarrow \infty$, pero el producto de estas permanece constante, $V_0 b = cte$. En este límite, las barreras de potencial se convierten en deltas de Dirac, con una determinada intensidad relacionada al valor de $V_0 b$. Si multiplicamos y dividimos el primer sumando del lado izquierdo de Ec. (2.17) por ab , entonces tenemos la ecuación

$$\frac{(\beta^2 - \alpha^2)ab \sinh(\beta b)}{2\alpha a} \frac{\sin(\alpha a)}{\beta b} + \cosh(\beta b) \cos(\alpha a) = \cos[(a + b)k] \quad (2.18)$$

En el límite antes mencionado se tiene que $\sinh(\beta b)/\beta b = 1$ y

$$\lim_{b \rightarrow 0} (\beta^2 - \alpha^2)ab = \lim_{b \rightarrow 0} \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 b - 2\varepsilon b)a = \frac{2mV_0 b a}{\hbar^2} \quad (2.19)$$

Por lo tanto, la Ec. (2.18) se reduce a

$$\frac{P}{\alpha a} \sin(\alpha a) + \cos(\alpha a) = \cos(ka) \quad (2.20)$$

En este límite, las barreras se encuentran ubicadas en las posiciones $0, \pm a, \pm 2a, \dots$, como se muestra en la Fig. 2.2. en donde se ha definido la constante $P = mV_0 b a / \hbar^2$. El producto $V_0 b$ es el área de la barrera de potencial rectangular. El caso complementario, $\varepsilon > V_0$, no se discute aquí, sin embargo se puede consultar en [29].

Ec. (2.20) no tiene solución analítica para ε , i.e. α^2 , pero se puede resolver gráficamente. En primer lugar, se observa que sólo el lado izquierdo de Ec. (2.20) contiene términos implícitos de energía, por lo que se puede reescribir como

$$f(P, \alpha a) = \cos(ka) \quad (2.21)$$

Como $|\cos(ka)| \leq 1$ el sistema sólo puede tomar valores de αa tales que $f(P, \alpha a)$ yace entre -1 y 1 , ya que sólo para esos valores existen soluciones para las funciones de onda. La Fig. 2.3 muestra la gráfica de $f(P, \alpha a)$, así como las energías que el sistema puede tomar. De ella se pueden sacar las siguientes conclusiones, para P y αa dadas:

1. El espectro de energía de los bosones consiste de bandas de energía permitidas, separadas por regiones prohibidas.

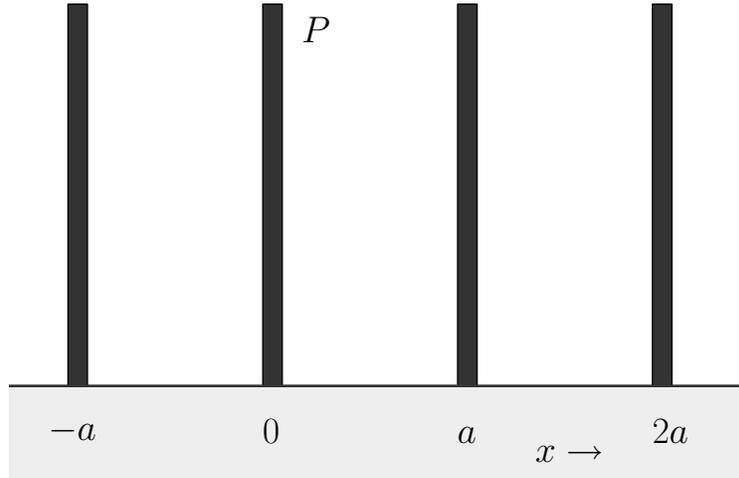


Figura 2.2: Potencial de Kronig-Penney con una delta por celda unidad.

2. El ancho de las bandas permitidas se incrementa más conforme crece αa . Esto se debe a que el término que contiene a P se hace más pequeño mientras αa se incrementa.

Además de lo anterior, el ancho de las bandas permitidas disminuye conforme P crece. En el límite cuando $P \rightarrow \infty$, las bandas permitidas se convierten en niveles de energía. En este caso, Ec. (2.20) tiene soluciones sólo si $\sin(\alpha a) = 0$, i.e., si $\alpha a = n\pi$, con n entero. De acuerdo con Ec. (2.4), el espectro, es decir, los niveles de energía de los bosones son

$$\varepsilon_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.22)$$

niveles que corresponden a los de una partícula confinada en un pozo de potencial de ancho a y de paredes infinitas. Desde el punto de vista físico esto es factible, ya que si $P \rightarrow \infty$ el tunelaje a través de las barreras de potencial se vuelve improbable, o en otras palabras los planos se vuelven impenetrables.

Una consecuencia adicional de Ec. (2.21) es que, dentro de una banda de energía particular, la energía es periódica con respecto a k , puesto que la siguiente igualdad

2. ESTRUCTURAS PERIÓDICAS

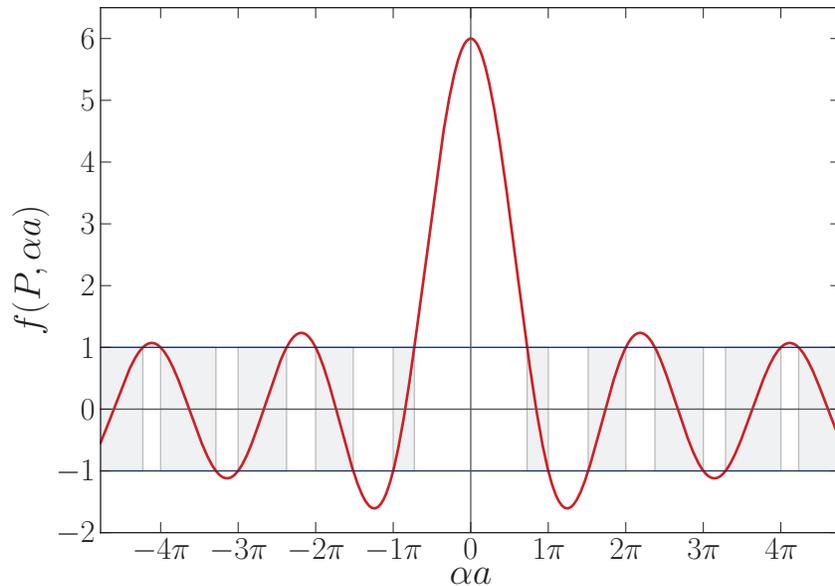


Figura 2.3: Gráfica de $f(P, \alpha a)$ vs αa , para $P = 5$. Las energías permitidas del sistema son aquellas tales que $|f(P, \alpha a)| \leq 1$, y están indicadas por las barras en color gris.

siempre se cumple:

$$f(P, \alpha a) = \cos(ka) = \cos((k + 2n\pi)a), \quad n \in \mathbb{Z} \quad (2.23)$$

La periodicidad de ε se muestra en la Fig. 2.4. Las bandas de energía están indicadas por las barras de color a la izquierda, y las energías están representadas como líneas continuas que oscilan. La curva punteada es una parábola que indica las energías de una partícula libre en función de k .

Puede observarse que la energía en función de k es una función par, lo que restringe su estudio esencialmente a valores positivos. Para toda banda de energía, los máximos y mínimos de la energía se dan a valores de $k = n\pi/a$, donde n es un entero. Esto se puede demostrar a partir de Ec. (2.21), donde ε está dada implícitamente. Derivando respecto a k e igualando a cero para encontrar los máximos y mínimos, lleva a lo

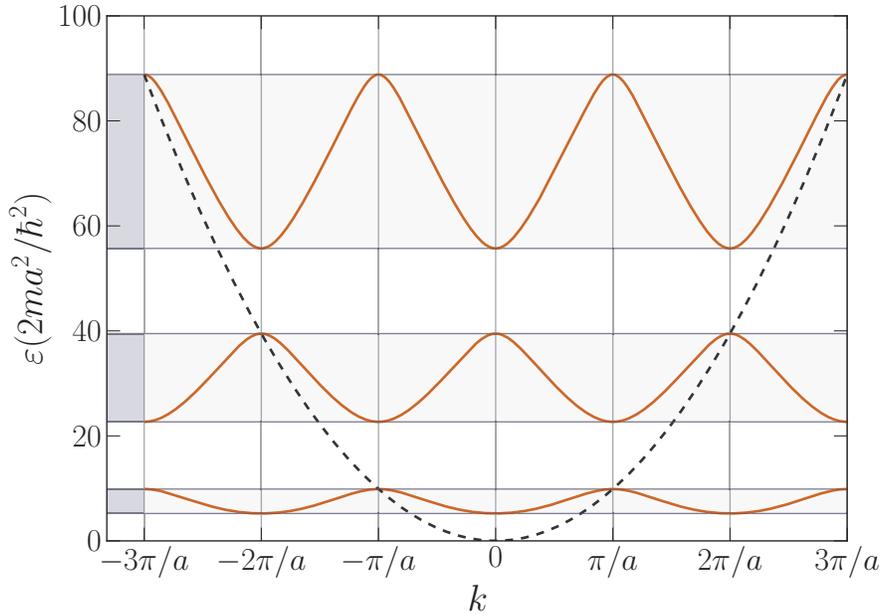


Figura 2.4: Gráfica de ε vs k , con $P = 5$. Se puede observar cómo las energías en una banda particular son periódicas con respecto al número de onda. Los máximos de cada banda coinciden con la curva de energía de la partícula libre

siguiente:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial f(P, \alpha a)}{\partial k} &= \frac{\partial(\alpha a)}{\partial k} \frac{\partial f(P, v)}{\partial v} \\
 &= C \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \frac{\partial f(P, v)}{\partial v} \\
 &= -k \sin(ka) = 0
 \end{aligned} \tag{2.24}$$

donde $v = \alpha a$ y $C = \sqrt{2ma^2/\hbar^2}/2$. En Fig. 2.3 se aprecia que $\partial f(v)/\partial v = 0$ solamente para alguna v fuera de las bandas permitidas. Entonces se sigue que los máximos y mínimos de ε se presentan cuando $ka = j\pi$, j un entero.

La energía más baja del sistema se da cuando $k = 0$. De allí que las curvas de ε vs. k de más importancia estén cerca de la curva de energía libre, un poco por arriba de ésta. Así, las bandas de energía del sistema, como función de k , son las mostradas en Fig. 2.4 y Fig. 2.5. En esta última puede observarse que la n -ésima banda se extiende sobre el intervalo de k comprendido entre $(n - 1)\pi/a$, que corresponde a

2. ESTRUCTURAS PERIÓDICAS

la energía mínima, y $n\pi/a$, que corresponde a la energía máxima. Dada la simetría de la energía respecto a k , la misma banda también se extiende sobre el intervalo comprendido entre $-(n-1)\pi/a$ y $-n\pi/a$.

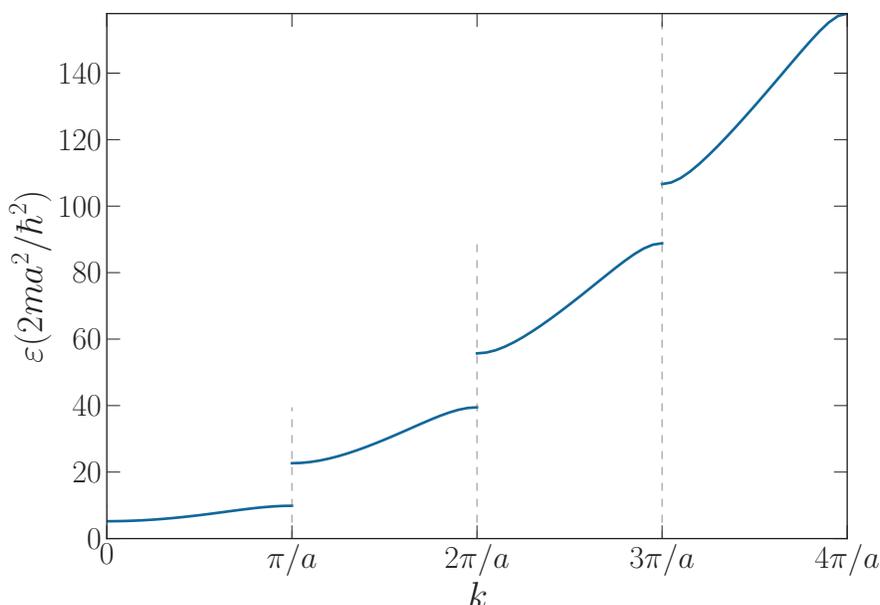


Figura 2.5: Gráfica de ε vs k , con $P = 5$. Los límites de cada banda corresponden a los valores de k donde se produce la discontinuidad del espectro, y corresponden a $k = n\pi/a$, $n = 1, 2, \dots$

Es importante notar que P tiene una dependencia directa con el ancho a de la celda unidad. Físicamente las barreras de potencial tienen un cierto grado de impenetrabilidad en función del producto V_0b y que no depende de su separación relativa. Por lo tanto es conveniente desacoplar ambos parámetros, pues están incluidos en P . Para esto se emplea la longitud de onda térmica $\lambda_0 = h/\sqrt{2\pi mk_B T_0}$ del gas ideal de bosones cuya temperatura de CBE es T_0 . Entonces reescribimos

$$P = \frac{mV_0ba}{\hbar^2} = \frac{mV_0b\lambda_0}{\hbar^2} \frac{a}{\lambda_0} = P_0 \frac{a}{\lambda_0} \quad (2.25)$$

en donde el nuevo parámetro P_0 podemos considerarlo como una medida de la impenetrabilidad de las barreras que no depende de la separación de las mismas. Con

esta definición, Ec. (2.20) se transforma en

$$\frac{P_0}{\alpha a} \frac{a}{\lambda_0} \sin(\alpha a) + \cos(\alpha a) = \cos(ka) \quad (2.26)$$

2.3. Potencial de Kronig-Penney con dos deltas

En el caso con dos deltas [30] se considera que hay dos tipos de deltas por celda unidad de la red, de intensidades P_1 y P_2 localizadas en $0, a, 2a, \dots$ y $\beta_2 a, a + \beta_2 a, \dots$, respectivamente, donde $0 \leq \beta_2 \leq 1$ es el cociente de la separación relativa entre deltas entre el tamaño de la celda unidad a , i.e., la separación relativa entre deltas es $\beta_2 a$. La Fig. 2.6 muestra la estructura del potencial periódico cuando $\beta_2 = 0.4$.

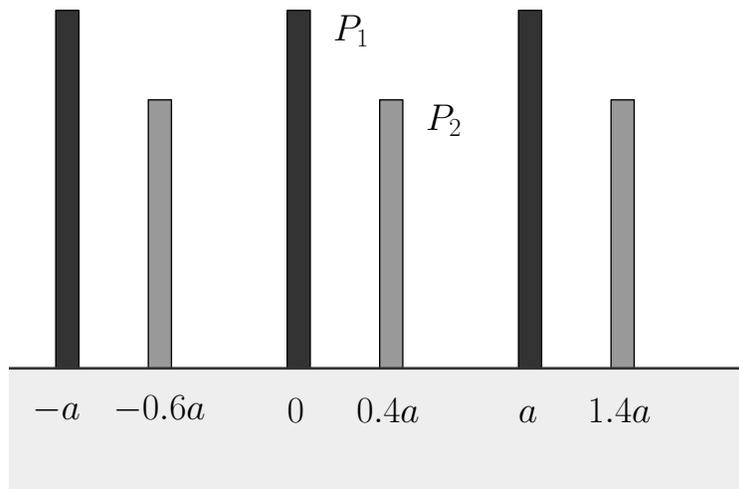


Figura 2.6: Potencial de Kronig-Penney con dos deltas por celda unidad. $\beta_2 = 0.4$

Para obtener la relación de dispersión de un sistema con dos deltas se procede de una manera un poco diferente. En esencia, el objetivo es el mismo: determinar los coeficientes que hacen que la ecuación de onda satisfaga las condiciones de frontera. Con esto en cuenta, se procede desde la ecuación de Schrödinger estacionaria:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - V(x) \right] \psi(x) = \varepsilon \psi(x) \quad (2.27)$$

2. ESTRUCTURAS PERIÓDICAS

donde $V(x)$ es el potencial que actúa sobre los bosones. Como en el caso monoatómico, el potencial es periódico: $V(x + a) = V(x)$, con periodo a . La ecuación se puede reescribir de la siguiente manera:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + 2 \frac{U(x)}{a^2} \right] \psi(x) = -\alpha^2 \psi(x) \quad (2.28)$$

en donde

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon \quad (2.29)$$

$$U(x) = \frac{ma^2}{\hbar^2} V(x) \quad (2.30)$$

Las soluciones de esta ecuación se encuentran con la ayuda del teorema de Bloch y son de la forma mostrada en Ec. (2.5), por lo que para un entero n arbitrario satisfacen la siguiente igualdad:

$$\psi(x + na) = e^{ikna} \psi(x) \quad (2.31)$$

Es inmediato entonces que la derivada también satisface la misma igualdad

$$\psi'(x + na) = e^{ikna} \psi'(x) \quad (2.32)$$

donde k es un escalar que depende de los eigenvalores de la energía ε del sistema. Para que $\psi(x)$ represente un sistema físico debe ser finita para todos los valores de x . Esto impone una condición sobre k : que debe ser Real.

Para resolver Ec. (2.28) se puede emplear el método de la transformada de Laplace [30]. Por definición, la transformada de Laplace de una función está definida como

$$\mathcal{L}\{\psi(x)\} = y(s) = \int_0^\infty \psi(x) e^{-sx} dx \quad (2.33)$$

donde $s \in \mathbb{C}$. La transformada $y(s)$ no siempre existe para toda $\psi(x)$. Como se indicó antes, sólo existe para k reales, pues de lo contrario $\psi(x)$ tomaría valores infinitos en los extremos de la recta.

La transformada $y(s)$ y la función de onda $\psi(x)$ también están relacionadas por la ecuación

$$\psi(x) = \mathcal{L}^{-1}\{y(s)\} \quad (2.34)$$

Aplicando Ec. (2.33) a Ec. (2.28), y considerando la linealidad de \mathcal{L} se obtiene lo siguiente

$$\mathcal{L} \left\{ \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} \right\} + \frac{2}{a^2} \int_0^\infty e^{-sx} U(x) \psi(x) dx = -\alpha^2 y(s) \quad (2.35)$$

Reordenando términos y desarrollando la transformada de la derivada segunda de ψ , se llega a:

$$y(s) = \frac{s}{s^2 + \alpha^2} \psi(0) + \frac{1}{s^2 + \alpha^2} \psi'(0) - \frac{2}{a^2} \frac{\mathcal{L}\{U(x)\psi(x)\}}{s^2 + \alpha^2} \quad (2.36)$$

Se toma la transformada inversa de Laplace de $y(s)$, lo cual lleva a la forma general de la función de onda:

$$\psi(x) = \psi(0) \cos(\alpha x) + \psi'(0) \frac{\sin(\alpha x)}{\alpha} - \frac{2}{a^2} \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{\mathcal{L}\{U(x)\psi(x)\}}{s^2 + \alpha^2} \right] \quad (2.37)$$

La función de onda depende de su valor y el de su derivada en el origen. Adicionalmente, debe satisfacer las condiciones de frontera establecidas en Ec. (2.6) y Ec. (2.7). En particular, para $0 \leq x \leq a$, las condiciones de frontera son

$$\psi(a) = e^{ika} \psi(0) \quad (2.38)$$

$$\psi'(a) = e^{ika} \psi'(0) \quad (2.39)$$

Antes de aplicar las condiciones de frontera es necesario desarrollar la transformada del potencial $U(x)$. Dada la disposición de las deltas, el potencial se puede representar como

$$U(x) = a \sum_{n=-\infty}^{\infty} P_1 \delta(x - na) + a \sum_{n=-\infty}^{\infty} P_2 \delta(x - (n + \beta_2)a) \quad (2.40)$$

$$= a \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{i=1}^2 P_i \delta(x - (n + \beta_i)a) \quad (2.41)$$

donde $\beta_1 = 0$ y $0 \leq \beta_2 \leq 1$, y se definen $P_1 = mV_1 b_1 a / \hbar^2$ y $P_2 = mV_2 b_2 a / \hbar^2$, en forma similar al caso con una delta. Dada esta expresión para el potencial se tiene que

$$\mathcal{L}\{U(x)\psi(x)\} = a \int_0^{\infty} e^{-sx} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{i=1}^2 P_i \delta(x - (n + \beta_i)a) \psi(x) dx \quad (2.42)$$

$$= a \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i=1}^2 P_i \int_0^{\infty} e^{-sx} \delta(x - (n + \beta_i)a) \psi(x) dx \quad (2.43)$$

$$= a \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i=1}^2 P_i e^{-s(n+\beta_i)a} \psi((n + \beta_i)a) \quad (2.44)$$

2. ESTRUCTURAS PERIÓDICAS

En la Ec. (2.37) aparece la Ec. (2.42) como parte del argumento de una transformada inversa. Esta transformada inversa lleva a lo siguiente:

$$\begin{aligned}
& \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\mathcal{L}\{U(x)V(x)\}}{s^2 + \alpha^2} \right\} \\
&= \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{a \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i=1}^2 P_i e^{-s(n+\beta_i)a} \psi((n+\beta_i)a)}{s^2 + \alpha^2} \right\} \\
&= aP_1 \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{e^{-sna}}{s^2 + \alpha^2} \right\} \\
&+ aP_2 \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{e^{-s(n+\beta_2)a}}{s^2 + \alpha^2} \right\} \\
&= a \sum_{n=0}^{\infty} P_1 \psi(na) \frac{\sin(\alpha(x-na))}{\alpha} u(x-na) \\
&+ a \sum_{n=0}^{\infty} P_2 \psi((n+\beta_2)a) \frac{\sin(\alpha(x-(n+\beta_2)a))}{\alpha} u(x-(n+\beta_2)a) \tag{2.45}
\end{aligned}$$

donde $u(x)$ es la función escalón de Heaviside. Un resultado interesante se obtiene cuando $P_2 = 0$, es decir, sólo hay una delta por celda unidad. En esencia esto representa un sistema monoatómico, y la manera en que se obtiene la transformada inversa anterior es la misma, sólo que sin todos los términos donde aparece P_2 , por supuesto. En este caso, de acuerdo a Ec. (2.37), la función de onda está dada por

$$\begin{aligned}
\psi_1(x) &= \psi(0) \cos(\alpha x) + \psi'(0) \frac{\sin(\alpha x)}{\alpha} \\
&- \frac{2}{\alpha a} \sum_{n=0}^{\infty} P_1 \psi(na) \sin(\alpha(x-na)) u(x-na) \tag{2.46}
\end{aligned}$$

La función de onda para un sistema con dos deltas contiene todos los términos obtenidos en Ec. (2.45), por lo tanto es

$$\begin{aligned}
\psi_2(x) &= \psi(0) \cos(\alpha x) + \psi'(0) \frac{\sin(\alpha x)}{\alpha} \\
&- \frac{2}{\alpha a} \sum_{n=0}^{\infty} P_1 \psi(na) \sin(\alpha(x-na)) u(x-na) \\
&- \frac{2}{\alpha a} \sum_{n=0}^{\infty} P_2 \psi((n+\beta_2)a) \sin(\alpha(x-(n+\beta_2)a)) u(x-(n+\beta_2)a) \tag{2.47}
\end{aligned}$$

Si se restringe x a valores tales que $0 \leq x \leq a$, se puede observar que la única contribución a las sumas en la Ec. (2.47) corresponde a $n = 0$, debido a la definición de la función escalón. Bajo esta restricción, comparando Ec. (2.47) y Ec. (2.46), se llega a que ambas están relacionadas:

$$\psi_2(x) = \psi_1(x) - \frac{2}{\alpha a} P_2 \psi_2(\beta_2 a) \sin((x - \beta_2)\alpha a) u((x - \beta_2)a) \quad (2.48)$$

De acuerdo a esta ecuación, $\psi_2 \neq \psi_1$ sólo para puntos tales que $x \geq \beta_2 a$. Esto se debe a que el alcance de las barreras de potencial tipo delta es cero. Finalmente, Ec. (2.48), en combinación con las condiciones de frontera Ec. (2.31) y Ec. (2.32), genera dos ecuaciones lineales en términos de $\psi(0)$ y $\psi'(0)$. Al igual que en el caso monoatómico, este sistema es homogéneo, y únicamente tiene solución si su determinante es cero:

$$\Delta = \begin{vmatrix} \cos(\alpha a) - e^{ika} + \phi_1 & \sin(\alpha a)/\alpha + \phi_2 \\ -e^{ika} (\alpha \sin(\alpha a) + \phi_3) & -1 + e^{-ika} \cos(\alpha a) + e^{-ika} \phi_4 \end{vmatrix} = 0 \quad (2.49)$$

donde

$$\phi_1 = \frac{2P_1}{\alpha a} \sin(\alpha a) - \frac{2P_2}{\alpha a} \cos(\alpha \beta_2 a) \sin((1 - \beta_2)\alpha a) \quad (2.50)$$

$$+ \frac{4P_1 P_2}{\alpha^2 a^2} \sin(\beta_2 \alpha a) \sin((1 - \beta_2)\alpha a)$$

$$\phi_2 = -\frac{2P_2}{\alpha a} \frac{\sin(\beta_2 \alpha a)}{\alpha} \sin((1 - \beta_2)\alpha a) \quad (2.51)$$

$$\phi_3 = -\frac{2P_1}{a} \cos(\alpha a) - \frac{2P_2}{\alpha a} \cos(\beta_2 \alpha a) \cos((1 - \beta_2)\alpha a) \quad (2.52)$$

$$+ \frac{4P_1 P_2}{\alpha a^2} \sin(\beta_2 \alpha a) \cos((1 - \beta_2)\alpha a)$$

$$\phi_4 = -\frac{2P_2}{\alpha a} \sin(\beta_2 \alpha a) \cos((1 - \beta_2)\alpha a) \quad (2.53)$$

Una vez desarrollado, este determinante se puede reescribir como

$$\begin{aligned} \Delta &= 2 \cos(ka) - 2 \cos(\alpha a) - (\phi_1 + \phi_4) \\ &+ e^{-ika} \left[(\phi_1 + \phi_4) \cos(\alpha a) + \phi_1 \phi_4 - \phi_3 \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha} \right] \\ &+ e^{-ika} [-\phi_2 \alpha \sin(\alpha a) + \phi_2 \phi_3] = 0 \end{aligned} \quad (2.54)$$

Como se indicó con anterioridad, las soluciones a la Ec. (2.27) son aquellas que representan ondas viajeras, las cuales sólo existen si $k \in \mathbb{R}$. La Ec. (2.54) tiene más de

2. ESTRUCTURAS PERIÓDICAS

una solución, pero las que resultan en k Real son las correspondientes a la cancelación del factor que multiplica a e^{-ika} . Bajo esta condición, la relación de dispersión es

$$\cos(ka) = \cos(\alpha a) + \frac{\phi_1 + \phi_4}{2} \quad (2.55)$$

Con los valores de ϕ_1 y ϕ_2 , la relación de dispersión es

$$\cos(ka) = \cos(\alpha a) - \frac{P_1 + P_2}{\alpha a} \sin(\alpha a) + \frac{2P_1P_2}{(\alpha a)^2} \sin(\beta_2 \alpha a) \sin((1 - \beta_2)\alpha a) \quad (2.56)$$

Para el caso particular en que $P_2 = 0$, sólo hay una delta por celda unidad, y la Ec. (2.56) se reduce a la Ec. (2.20), como es de esperarse. Si $\beta_2 = 0$ pero $P_2 \neq 0$, las dos deltas se encuentran en la misma posición superpuestas, lo que representa un sistema monoatómico con deltas de intensidad $P_1 + P_2$. Fig. 2.7 muestra la relación de dispersión para diferentes valores de β_2 , cuando $P_2 = P_1 = 2$, y Fig. 2.8 muestra la relación de dispersión en función del parámetro P_2 cuando $P_1 = 2$ y $\beta_2 = 0.3$.

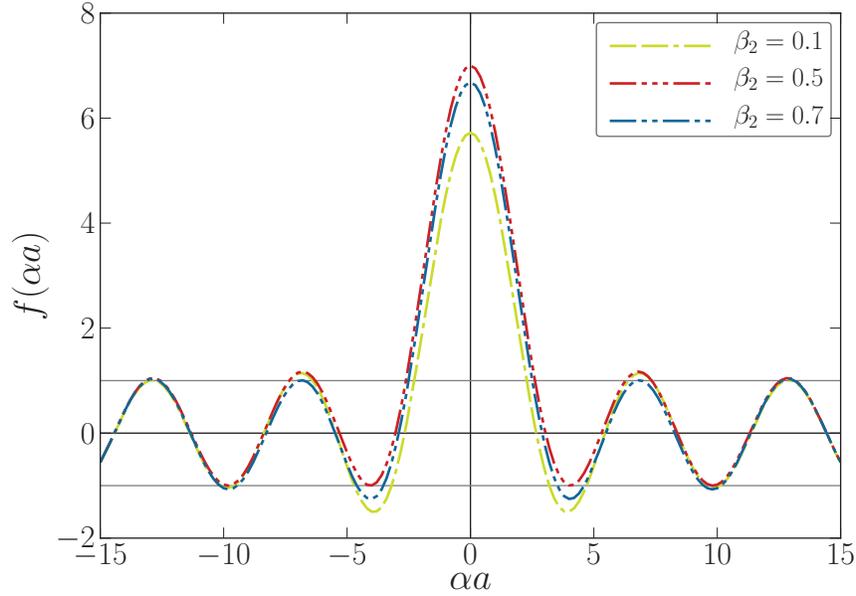


Figura 2.7: Gráfica de $f(\alpha a)$ vs αa , para $P_1 = P_2 = 2$. Cada curva corresponde a un valor distinto de β_2 .

Al igual que en el caso donde hay una delta por celda unidad, los máximos y mínimos de las bandas de energía $\varepsilon(k)$ del sistema se localizan en $k = (n - 1)\pi$,

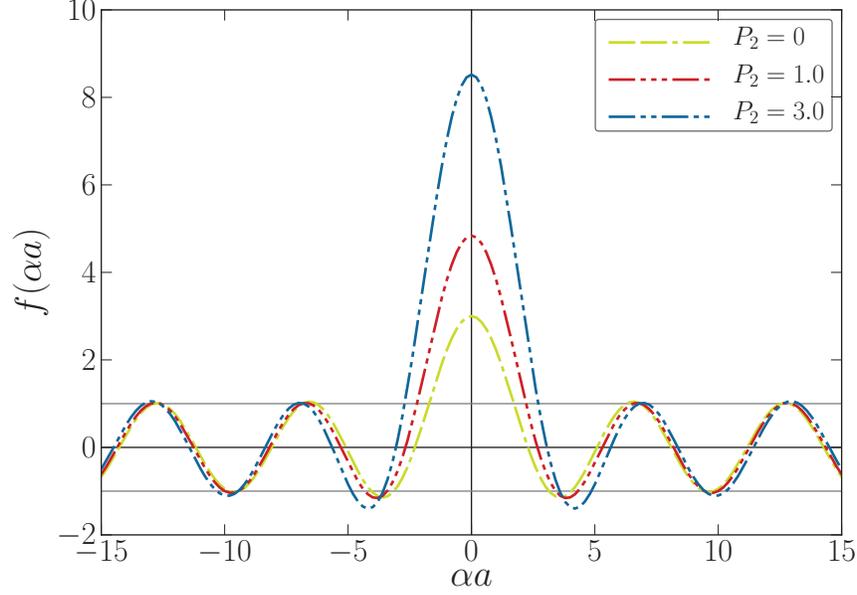


Figura 2.8: Gráfica de $f(\alpha a)$ vs αa , para $\beta_2 = 0.3$ y $P_1 = 2$. Cada curva corresponde a un valor particular de P_2 .

$n \in \mathbb{Z}$. Esto es así porque la relación de dispersión dada en Ec. (2.56) es de la forma $f(\alpha a) = \cos(ka)$, por lo que el procedimiento seguido en la Ec. (2.24) es el mismo, y los resultados también. Esto implica que la n -ésima banda se extiende sobre el intervalo de k que va desde $(n-1)\pi/a$ hasta $n\pi/a$.

Ahora bien, de las definiciones de P_1 y P_2 es claro que dependen del tamaño de la celda unidad. De igual forma como se hizo en el caso en que se tenía una delta por celda para desligar la dependencia de a , se definen $P_1 = P_{10}a/\lambda_0$ y $P_2 = P_{20}a/\lambda_0$, donde

$$P_{10} = \frac{mV_1b_1\lambda_0}{\hbar^2} \quad P_{20} = \frac{mV_2b_2\lambda_0}{\hbar^2} \quad (2.57)$$

de acuerdo con Ec. (2.25). Estas ecuaciones indican que las intensidades de las deltas P_j , $j = 1, 2$, están relacionadas sólo con las características de las barreras de potencial de ancho b_j y altura V_j como las empleadas para resolver el problema del potencial de KP en una dimensión en la Sec. 2.1. Así, la Ec. (2.56) se transforma en

$$\cos(ka) = \cos(\alpha a) - \frac{P_{10} + P_{20}}{\alpha a} \frac{a}{\lambda_0} \sin(\alpha a) + \frac{2P_{10}P_{20}}{(\alpha a)^2} \left(\frac{a}{\lambda_0}\right)^2 \sin(\beta_2 \alpha a) \sin((1-\beta_2)\alpha a) \quad (2.58)$$

la cual es más práctica pues desacopla la intensidad de las barreras delta de la separación entre ellas, tal y como sucedía en el caso con una delta.

2.4. Espectro de energías

Una delta por celda unidad

La relación de dispersión dada por la Ec. (2.20) (o en su caso por la Ec. (2.58)) determina las bandas de energía a partir de los valores de αa que satisfacen dicha igualdad. Su cuadrado, $(\alpha a)^2$, que está dado por

$$(\alpha a)^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} \varepsilon \quad (2.59)$$

es un cociente de energías, pues el factor $\hbar^2/2ma^2$ es una energía, la cual se puede emplear como unidad para adimensionalizar ε de los bosones. Así, se define

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{\hbar^2/2ma^2} = (\alpha a)^2 \quad (2.60)$$

la cual está dada en unidades $\hbar^2/2ma^2$.

La Fig. 2.5 muestra las bandas de energía de un sistema con una delta por celda unidad en función de k . Además de k , el espectro de energías depende de otros dos parámetros: la intensidad P_0 de las deltas y el factor a/λ_0 . Como se mencionó en la Sec. 2.2, si $P \rightarrow \infty$ las bandas de energía se convierten en niveles discretos, y esto sucede si $P_0 \rightarrow \infty$ ó $a/\lambda_0 \rightarrow \infty$. La Fig. 2.9 muestra la dependencia de $\bar{\varepsilon}$ con respecto a P . Las regiones oscuras corresponden a las bandas de energía. El intervalo de P se divide en dos regiones: para $P \leq 1$ se grafica la energía en función de P , y para $P > 1$ se grafica en

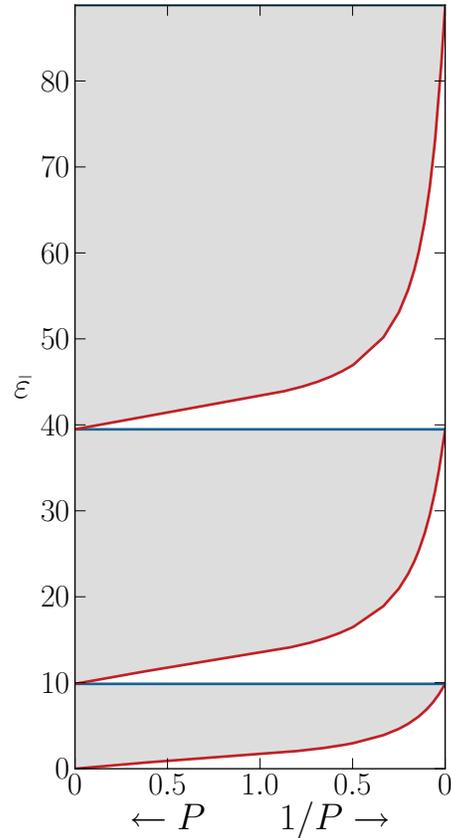


Figura 2.9: Espectro de bandas de energía de un sistema con una delta por celda unidad.

función de $1/P$, abarcándose un intervalo que va de cero a infinito. Puede notarse claramente el estrechamiento de las bandas conforme P tiende a infinito.

Como se ha visto hasta ahora, cuando $P \rightarrow \infty$ las bandas de energía se convierten en niveles que corresponden a $\bar{\varepsilon} = n^2\pi^2$, $n = 1, 2, \dots$ por lo que tienen un espaciamiento que crece cuadráticamente. Sin embargo, estas energías están dadas en unidades $\hbar^2/2ma^2$, no en unidades MKS. Este detalle cobra gran importancia porque si $a/\lambda_0 \rightarrow \infty$ también lo hace P , y las bandas se colapsan en niveles, pero físicamente se espera que si el espaciamiento entre barreras de potencial (deltas) se hace muy grande entonces la interacción de los bosones con éstas es muy débil, por lo que el sistema se parece cada vez más a un gas ideal libre. En este caso el espectro de energías debería ser un continuo, no niveles discretos. Esta aparente contradicción se subsana considerando las energías del sistema en unidades MKS, es decir, tomando

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\bar{\varepsilon} \quad (2.61)$$

De acuerdo con esta relación, si $a \rightarrow \infty$, así lo hace a/λ_0 (λ_0 es una constante a fin de cuentas), por lo que los niveles de energía $\bar{\varepsilon}$, aunque sean discretos, comienzan a juntarse en virtud de que $\hbar^2/2ma^2$ es muy pequeña. En el límite, los niveles se unen, formando un espectro continuo como físicamente se espera.

Dos deltas por celda unidad

Al tener dos barreras de potencial por celda unidad, el espectro de energías de los bosones depende tanto de la separación relativa entre deltas, $\beta_2 a$, así como de la relación entre las intensidades de las mismas, P_{10} y P_{20} . Así mismo, depende del ancho de la celda unidad a . Por supuesto que la energía también depende de k .

La Fig. 2.10 muestra el espectro de energías en función de P_{10} y β_2 , cuando $P_{10} = P_{20}$ y $a/\lambda_0 = 0.892$. En la Fig. 2.10, el borde superior de las primeras dos bandas está indicado en color rojo, mientras que los bordes inferiores aparecen en color gris claro. La región comprendida entre ambos bordes representa todas las energías permitidas para cada banda. Al igual que en el caso con una delta, el intervalo de valores de P_{10} está dividido en dos regiones: $P_{10} \leq 1$, donde se grafica la energía en función de P_{10} , y $P_{10} > 1$, donde se grafica $\bar{\varepsilon}$ en función de $1/P_{10}$. Esto permite abarcar un intervalo de intensidades que va desde cero hasta infinito.

La Fig. 2.10 permite analizar nítidamente el espectro para $\beta_2 = 0$, es decir, para el caso en que ambas barreras están en la misma posición, lo que, en efecto, representa un sistema monoatómico. En este caso, para $P_{10} = 0$, el mínimo y máximo de la

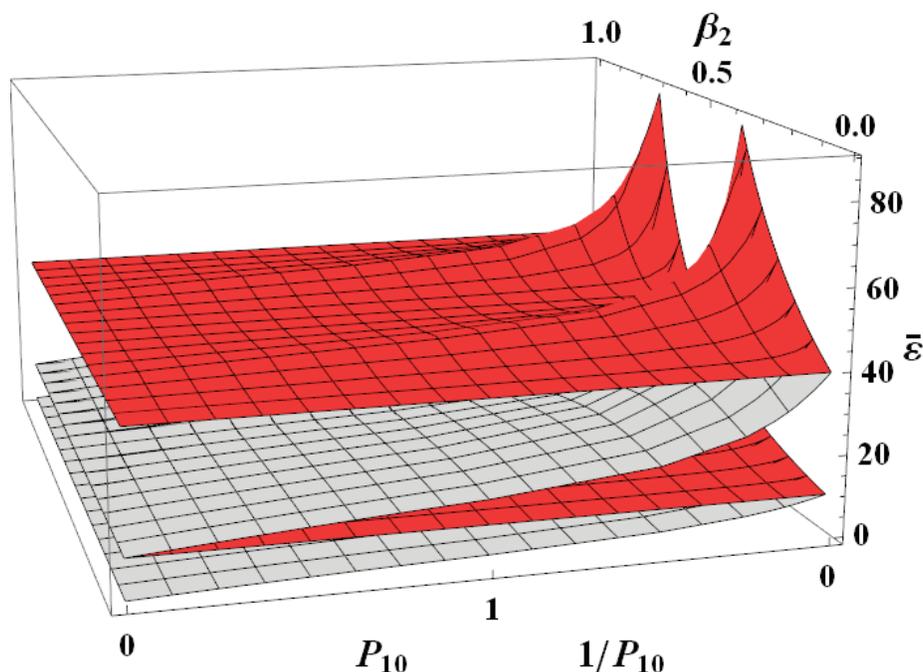


Figura 2.10: Bordes del espectro de bandas de energía de un sistema con dos deltas. La perspectiva muestra los límites superior e inferior, en azul y rojo, respectivamente, de la primera y segunda banda de energía del espectro.

primera banda son $\bar{\varepsilon} = 0$ y $\bar{\varepsilon} = \pi^2$, respectivamente, y los de la segunda banda son $\bar{\varepsilon} = \pi^2$ y $\bar{\varepsilon} = 4\pi^2$. Dado que el máximo de la primera banda y el mínimo de la segunda son iguales, lo que se tiene es un espectro continuo de energía. Esto se debe a que, para $P_{10} = P_{20} = 0$, los bosones son partículas libres. A medida de que P_{10} crece, las bandas comienzan a separarse, lo cual es de esperarse pues los bosones ya no son libres de moverse en la dirección z . Sin embargo, los máximos de ambas bandas no cambian, correspondiendo siempre a $\bar{\varepsilon}_{n-suplim} = n^2\pi^2$. Los mínimos aumentan de magnitud, lo que hace a las bandas cada vez más estrechas. En el caso límite en que $1/P_{10} \rightarrow 0$, i.e, $P_{10} \rightarrow \infty$, las bandas se han convertido en niveles discretos de energía dados por $\bar{\varepsilon}_n = n^2\pi^2$, que corresponde a los niveles de energía de una partícula confinada en una caja de paredes infinitas y de ancho a .

Todo este análisis corresponde al realizado anteriormente para un sistema con una sola delta, es decir, $\beta_2 = 0$. Más aún, los resultados obtenidos son los mismos para el caso en que $\beta_2 = 1$. Para los casos en que $0 < \beta_2 < 1$, el espectro puede volverse realmente complejo. La dependencia de $\bar{\varepsilon}$ respecto a β_2 se puede apreciar

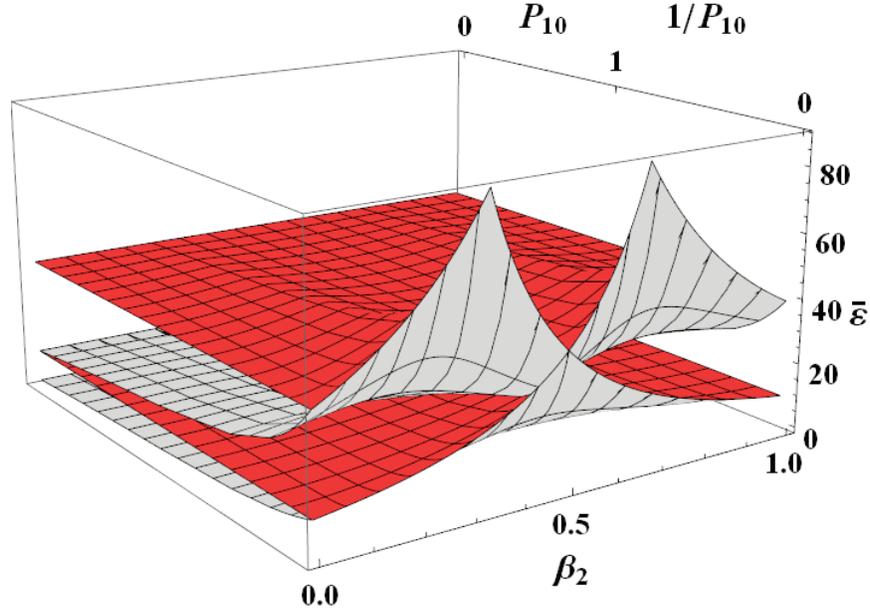


Figura 2.11: Bordes del espectro de bandas de energía de un sistema con dos deltas. La perspectiva muestra el cambio en la estructura del espectro en función de la separación relativa entre barreras de potencial.

con claridad en Fig. 2.11, en especial para valores grandes de P_{10} . Existe una simetría respecto a $\beta_2 = 1/2$, lo cual se entiende ya que P_{10} y P_{20} son iguales, lo que hace a las barreras indistinguibles. Por lo tanto, un sistema con separación relativa $\beta_2 a > a/2$ es físicamente idéntico a otro con separación relativa $(1 - \beta_2)a < a/2$. Se tiene la presencia de picos de energía para ciertos valores de β_2 , los cuales se dan prácticamente para todo $P_{10} > 0$, aunque son especialmente relevantes para P_{10} muy grandes.

La Fig. 2.11 muestra con detalle cómo las bandas de energía se hacen más angostas a medida de que crece P_{10} , hasta colapsarse en un nivel discreto de energía. Este comportamiento es el mismo para cualquier valor de β_2 . Para $\beta_2 = 0.5$ en particular, los dos primeros niveles de energía se unen. La razón de que las bandas se conviertan en niveles cuando $P_{10} \rightarrow \infty$ es porque el sistema consiste de dos cajas de paredes impenetrables por celda unidad: una caja con ancho $\beta_2 a$ y otra de ancho $(1 - \beta_2)a$. El espectro de energía de estas cajas son niveles discretos cuya energía está dada por

$$\bar{\varepsilon}_n = \frac{n^2 \pi^2}{\beta_2^2}, \quad \bar{\varepsilon}_m = \frac{m^2 \pi^2}{(1 - \beta_2)^2}, \quad n, m = 1, 2, \dots \quad (2.62)$$

respectivamente. Para poner en perspectiva qué significa todo esto, la Fig. 2.12 mues-

2. ESTRUCTURAS PERIÓDICAS

tra los primeros tres niveles de energía de cada caja. La forma funcional de los niveles son hipérbolas que divergen en $\beta_2 = 0$ y $\beta_2 = 1$, lo cual puede generar la idea de que la energía del sistema, para estas separaciones relativas, diverge. Esto no es así, simplemente las energías muy altas corresponden a niveles más altos del espectro de las partículas. En comparación con Fig. 2.12, la Fig. 2.13 muestra una perspectiva del

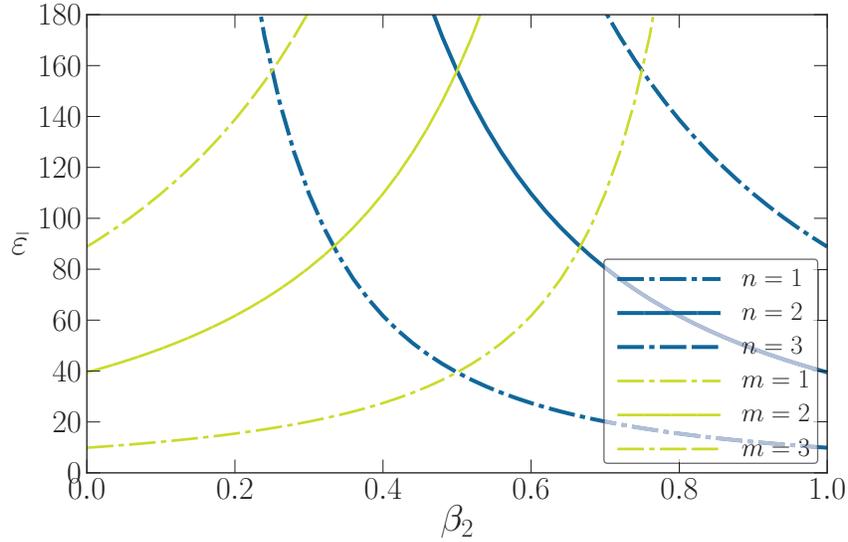


Figura 2.12: Niveles de energía para un sistema con dos deltas cuando $P_{10} \rightarrow \infty$. Las curvas rojas indican los niveles dados por Ec. (2.62), y las azules los niveles dados por Ec. (2.62).

espectro de energías del sistema, específicamente de las tres primeras bandas, y como cambia para P_{10} extremadamente grandes. Se pueden observar los niveles de energía y cómo dependen de β_2 . La dependencia es igual a la mostrada en Fig. 2.11: las curvas donde se intersectan los bordes superior e inferior de cada banda son hipérbolas. Esta similitud demuestra que, en el caso límite cuando las barreras de potencial son impenetrables, el espectro de energía consiste de una mezcla de energías discretas dadas por las ecuaciones Ec. (2.62), i.e., de las energías de las partículas contenidas en las cajas. Los picos de cada banda, que corresponden a los puntos donde se intersectan ambas curvas, se presentan a una separación relativa

$$\beta_2 = \frac{n}{m+n} \quad (2.63)$$

La energía del sistema que corresponde a esta separación es

$$\bar{\epsilon}_{mn} = (m+n)^2 \pi^2 \quad (2.64)$$

La mezcla de niveles de energía se puede apreciar más claramente si se emplean más bandas, como en la Fig. 2.13. Por lo que se muestra en ella, aparecen n picos en la n ésima banda. Hay que resaltar que las figuras hasta ahora presentadas muestran

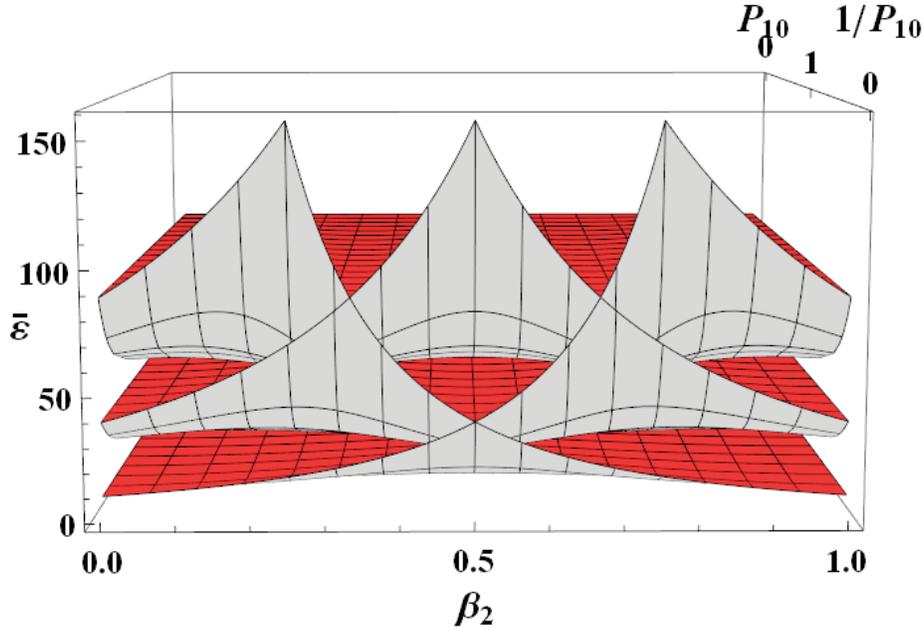


Figura 2.13: Espectro de bandas de energía de un sistema con dos deltas. Se aprecian los niveles discretos de energía, correspondientes a $P_{10} \rightarrow \infty$.

cómo el espectro puede volverse muy complejo incluso cuando se mantiene cierta simetría en el sistema, ya que la estructura de bandas hasta ahora descrita corresponde al caso en que $P_{10} = P_{20}$. La estructura de bandas cuando una delta se mantiene con una intensidad finita mientras que la otra se hace crecer sin límite no tiene por qué ser igual, puesto que aun así los bosones pueden presentar tunelaje a través de una de las barreras, pero como la otra barrera es infinita entonces no hay tunelaje a través de ésta, los bosones están efectivamente confinados a una caja de paredes infinitas de ancho a , así que el espectro debe ser discreto. A partir de Ec. (2.58) se puede aproximar la forma del espectro de bandas cuando $P_{10} \rightarrow \infty$ y P_{20} se mantiene fija. Cuando esto se cumple, entonces $P_{10} \gg P_{20}$, por lo que $P_{10} + P_{20} \approx P_{10}$. La relación de dispersión, luego de algunos pasos algebraicos, se reduce a

$$\frac{2P_{20}}{\alpha a} \sin(\beta_2 \alpha a) \sin((1 - \beta_2) \alpha a) + \sin(\alpha a) = 0 \quad (2.65)$$

2. ESTRUCTURAS PERIÓDICAS

La relación de dispersión esta vez no da las energías de dos cajas de paredes infinitas e independientes, ya que el término $\sin(\alpha a)$ no puede ser despreciado porque si P_{20} es pequeña los dos sumandos de la ecuación pueden ser del mismo orden de magnitud. Por lo tanto, aunque el espectro es discreto, no existe una relación funcional explícita entre $\bar{\varepsilon}$ y β_2 . En cambio, los niveles de energía son curvas complejas las cuales conservan la simetría respecto a $\beta_2 = 0.5$. La Fig. 2.14 muestra estos niveles de energía. A diferencia del caso anterior, aquí dos niveles nunca se intersectan, aunque mantienen un comportamiento similar: hay puntos donde $\bar{\varepsilon}$ alcanza máximos y mínimos. Sin embargo, estos máximos y mínimos son suaves, pues en ese punto $(\partial\bar{\varepsilon}/\partial\beta_2) = 0$. Como referencia, la figura Fig. 2.15 muestra las tres primeras bandas para el interva-

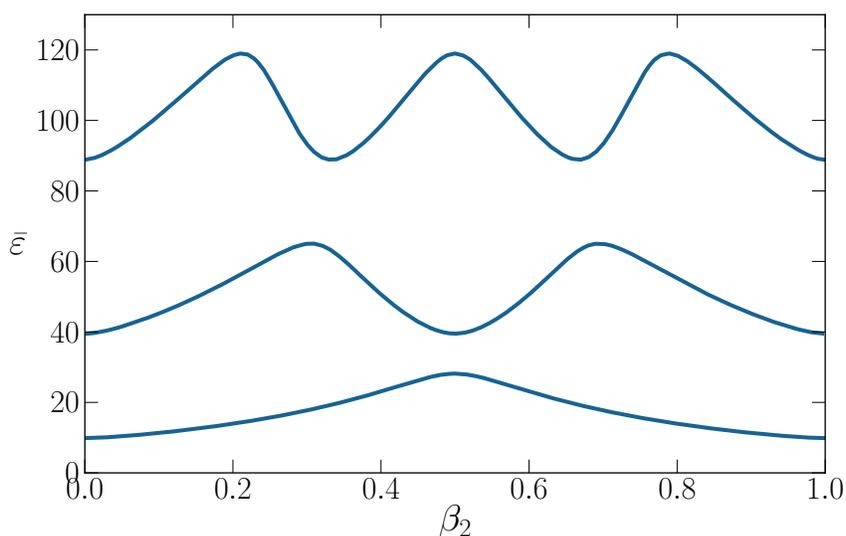


Figura 2.14: Niveles de energía de un sistema con dos deltas. $P_{20} = 10$, $a/\lambda_0 = 0.892$, $P_{10} \rightarrow \infty$.

lo de valores posibles para P_{10} . Cuando se mantiene fija la intensidad de las deltas, no necesariamente iguales pero constante, y se varía el ancho de la celda unidad, el espectro de energía corresponde al mostrado en la Fig. 2.16. El espectro muestra que las bandas de energía se transforman en niveles discretos cuando $a/\lambda_0 \rightarrow \infty$, lo cual a primera vista parece contradecir el hecho de que entre más grande es la celda unidad los bosones interactúan más débilmente con las barreras, por lo que en este caso el espectro debería ser continuo. No hay tal contradicción, pues Fig. 2.16, así como el resto de las figuras, muestran la energía $\bar{\varepsilon}$, la cual está dada en unidades $\hbar^2/2ma^2$ de

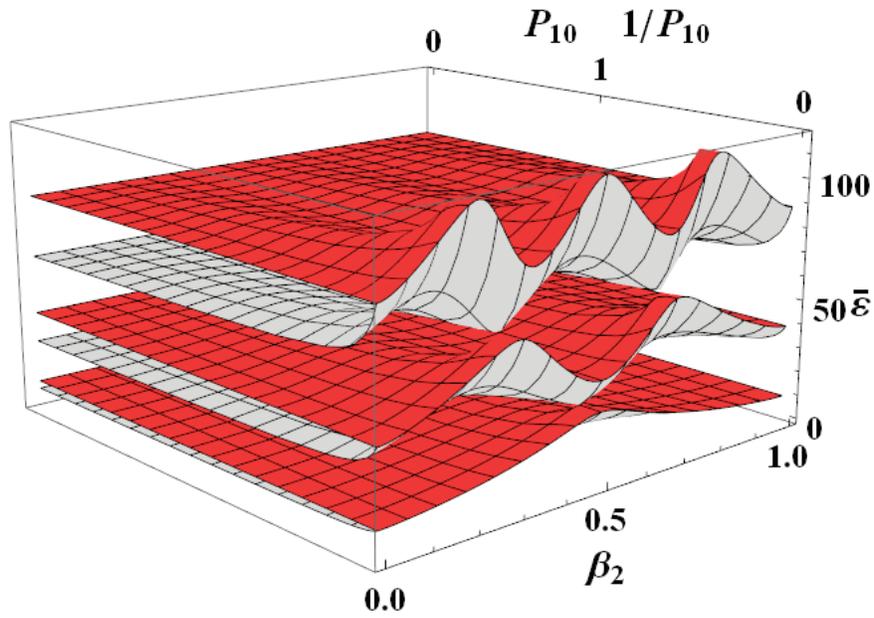


Figura 2.15: Perspectiva de los niveles de energía de un sistema con dos deltas. $P_{20} = 10$, $a/\lambda_0 = 0.892$

acuerdo con la Ec. (2.60). La energía en unidades MKS es ε , y dada la relación entre ambas variables, se puede notar que los niveles de energía en unidades MKS tienden a juntarse hasta convertirse en un continuo.

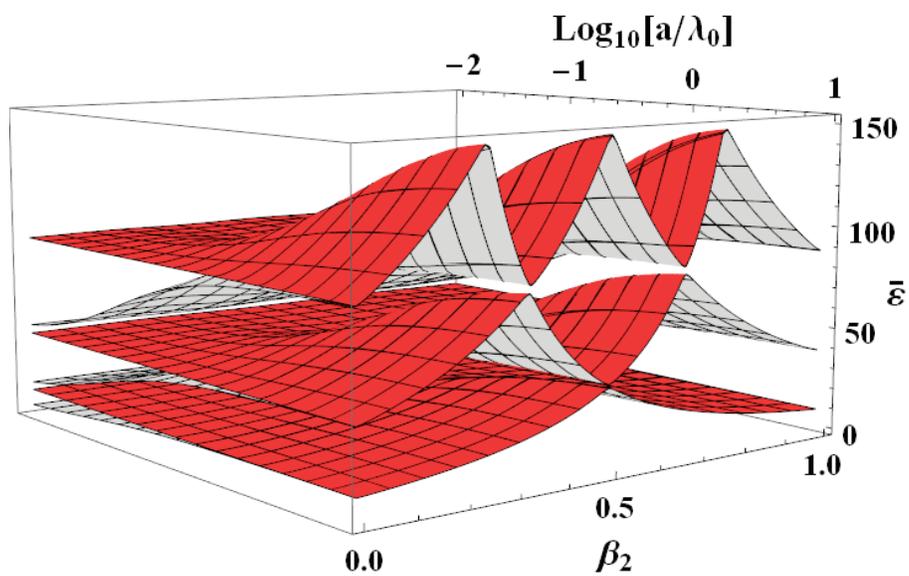


Figura 2.16: Perspectiva de los niveles de energía de un sistema con dos deltas. $P_{10} = 100$, $P_{20} = 10$.

Capítulo 3

Bosones entre capas

Aquí nos proponemos modelar los sistemas reales (películas de ^4He , excitones en semiconductores multicapas, o en superconductores de alta temperatura como los cupratos) como gases de bosones que se mueven entre planos permeables. Para modelar la estructura de planos permeables se usa un potencial de Kronig-Penney, con una o dos deltas por celda unidad, en una de las direcciones de movimiento de los bosones, mientras se permite que sean libres en las otras dos direcciones.

El modelo de Kronig-Penney unidimensional puede ser extendido para describir un modelo tridimensional en el cual las barreras de potencial están representadas por planos. Si los planos son paralelos al plano XY, entonces el movimiento de los bosones está restringido únicamente en la dirección Z, tal como se muestra en la Fig. 3.1. En las direcciones restantes, X y Y, los bosones se comportan como partículas libres. Un sistema con dos deltas por celda unidad se muestra en la Fig. 3.2. La ecuación de Schrödinger que satisface cada uno de los bosones puede separarse en cada una de las direcciones de movimiento, es decir

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} - V(z) \right] \psi(z) = \varepsilon_z \psi(z) \quad (3.1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \varepsilon_x \psi(x) \quad (3.2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} \psi(y) = \varepsilon_y \psi(y) \quad (3.3)$$

La energía, por lo tanto, puede descomponerse en tres partes, una para cada dirección:

$$\varepsilon = \varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z \quad (3.4)$$

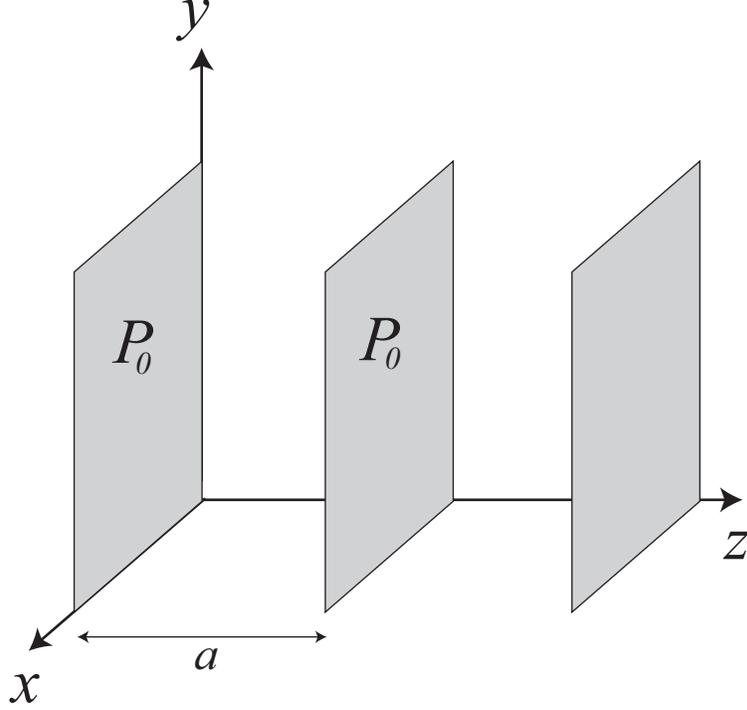


Figura 3.1: Sistema periódico tridimensional de capas representando deltas de Dirac. Los bosones entre planos son libres de moverse en las direcciones X y Y, mientras que en la dirección Z interactúan con las deltas de KP.

donde ε_x y ε_y están dadas por

$$\varepsilon_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} \quad \varepsilon_y = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} \quad (3.5)$$

y donde k_x y k_y pueden tomar todo valor real posible, lo cual al final representa un espectro continuo de energías en tales direcciones. ε_z son las energías previamente evaluadas para el potencial de KP con una o dos deltas por celda unidad. Toda la dinámica del sistema está en función de estas energías.

3.1. Propiedades termodinámicas

Para poder calcular las propiedades termodinámicas del sistema, tales como la temperatura crítica y la entropía, hay que calcular las energías accesibles a cada una

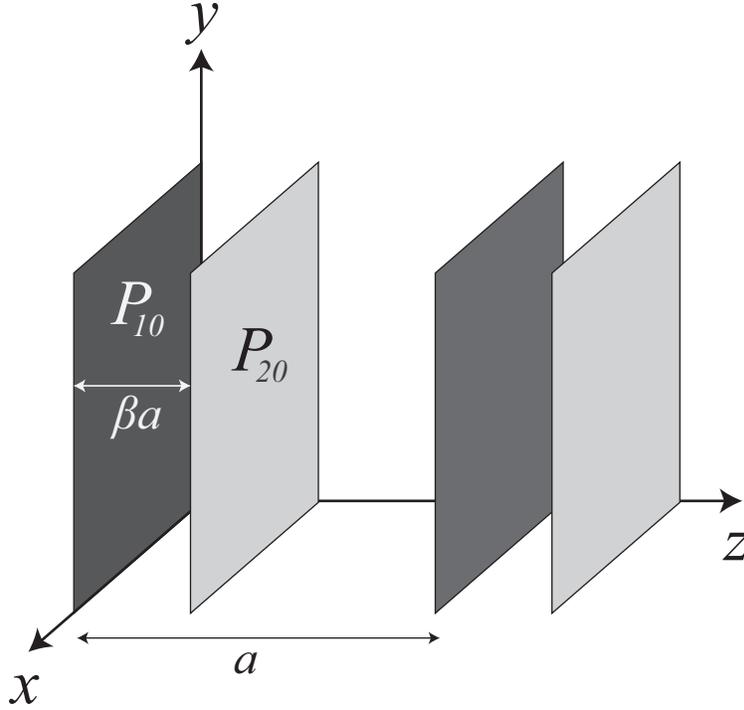


Figura 3.2: Sistema periódico de bicapas planas entre las que se mueven los bosones. Los bosones son libres de moverse en las direcciones x y y , mientras que en la dirección z son afectadas por el potencial de KP con dos deltas por celda unidad.

de las partículas.

La Gran Función de Partición es la base para calcular las propiedades, y está dada por

$$\Omega(T, V, \mu) = U - TS - \mu N = \Omega_0 + k_B T \sum_{k_i \neq 0} \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_{k_i} - \mu)}) \quad (3.6)$$

donde k_i corresponde al conjunto de todos los momentos k disponibles para los bosones y donde la contribución del estado base del sistema, Ω_0 , correspondiente a $k_i = 0$ ha sido separada del resto. U es la energía interna del sistema, T su temperatura, N el número de partículas, S es la entropía, μ el potencial químico y $\beta = 1/k_B T$. Explícitamente $\Omega_0 = k_B T \ln[1 - e^{-\beta(\varepsilon_0 - \mu)}]$ es la contribución del estado base.

Como se indicó previamente, la energía de los bosones en las direcciones X y Y está dada por Ec. (3.5). Adicionalmente, empleando la expansión de $\ln(1 - x)$ en serie

3. BOSONES ENTRE CAPAS

de potencias, $\ln(1-x) = -\sum_{l=1}^{\infty} x^l/l$, $|x| < 1$, Ec. (3.6) se transforma en

$$\begin{aligned}\Omega(T, V, \mu) &= \Omega_0 - k_B T \sum_{k_i \neq 0} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(e^{-\beta(\varepsilon_{k_i} - \mu)})^l}{l} \\ &= \Omega_0 + k_B T \sum_{l=1}^{\infty} \frac{e^{\beta\mu l}}{l} \sum_{k_i \neq 0} e^{-\beta l [(\hbar^2/2m)(k_{i,x}^2 + k_{i,y}^2) + \varepsilon_{k_{i,z}}]} \end{aligned} \quad (3.7)$$

En el límite cuando $\hbar^2/mL^2 \ll k_B T$, el espaciamiento entre niveles de energía del sistema es despreciable comparado con el energía térmica. Así, las sumas sobre k_i pueden ser aproximadas por integrales, lo que lleva a

$$\begin{aligned}\Omega(T, V, \mu) &= k_B T \ln[1 - e^{-\beta(\varepsilon_0 - \mu)}] - k_B T \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{e^{\beta\mu l}}{l} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x e^{-\beta l (\hbar^2/2m) k_x^2} \times \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dk_y e^{-\beta l (\hbar^2/2m) k_y^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z e^{-\beta l \varepsilon_{k_z}} \end{aligned} \quad (3.8)$$

Las primeras dos integrales son integrales gaussianas, las cuales equivalen a

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk_x e^{-\beta l (\hbar^2/2m) k_x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dk_y e^{-\beta l (\hbar^2/2m) k_y^2} = \left(\frac{2\pi m}{\beta \hbar^2 l}\right)^{1/2} \quad (3.9)$$

quedando sólo la tercera, que involucra la energía en la dirección z . Así, el Gran Potencial se reduce a

$$\Omega(T, V, \mu) = k_B T \ln[1 - e^{-\beta(\varepsilon_0 - \mu)}] - \frac{1}{\beta^2} \frac{mL^3}{(2\pi)^2 \hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \sum_{l=1}^{\infty} \frac{e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)l}}{l^2} \quad (3.10)$$

La suma infinita dentro de la integral puede expresarse en términos de la función de Bose [31] $g_s(z)$ (ver Apéndice A), pues

$$g_s(z) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^s} \quad (3.11)$$

Así, el Gran Potencial es

$$\Omega = k_B T \ln[1 - e^{-\beta(\varepsilon_0 - \mu)}] - \frac{1}{\beta^2} \frac{mL^3}{(2\pi)^2 \hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z g_2(e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)}) \quad (3.12)$$

Para determinar las propiedades termodinámicas de un gas monoatómico se emplea la relación

$$d\Omega = -SdT - PdV - Nd\mu \quad (3.13)$$

lo cual lleva a que las propiedades termodinámicas están determinadas por

$$N = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T,V}, \quad S = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{V,\mu}, \quad P = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial V} \right)_{T,\mu} = - \frac{\Omega}{V}, \quad (3.14)$$

$$U(T, V) = -k_B T^2 \left(\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\partial \Omega}{k_B T} \right) \right)_{V,z=e^{\beta\mu}} \quad C_V = - \left(\frac{\partial}{\partial T} U(T, V) \right)_{N,V} \quad (3.15)$$

Temperatura crítica

La temperatura crítica se determina a partir de la expresión para el número de partículas N , de acuerdo con Ec. (3.14)

$$N = \frac{e^{-\beta(\varepsilon_0 - \mu)}}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_0 - \mu)}} + \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z g'_2(e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)}) \beta e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \quad (3.16)$$

En virtud de que el sistema es infinito resulta que N también lo es. Sin embargo, se considera que el sistema está en el límite termodinámico, es decir, que $N \rightarrow \infty$ y $V \rightarrow \infty$, pero $N/V = \text{cte}$. Usando relación Ec. (A.3), $u g'_2(u) = g_1(u) = -\ln(1 - u)$ y definiendo $u = e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)}$, entonces el número de partículas queda como

$$N = \frac{e^{-\beta(\varepsilon_0 - \mu)}}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_0 - \mu)}} - \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)}) \quad (3.17)$$

Se aprecia que el primer término de Ec. (3.17) es el número de partículas en el estado condensado, $N_0(T) = 1/(e^{\beta(\varepsilon_0 - \mu)} - 1)$, que corresponde al estado base del sistema y cuya energía es ε_0 . Por lo tanto el segundo término corresponde al número de partículas en estados excitados, N_e .

Por conveniencia se define la constante $\gamma = \hbar^2/2ma^2 k_B T_0$, con T_0 la temperatura crítica del gas ideal de bosones en el límite termodinámico, que está dada por

$$T_0 = \frac{2\pi \hbar^2}{mk_B} \left(\frac{n_B}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3} \quad (3.18)$$

donde se cumple que $n_B \lambda_0^3 = \zeta(3/2) = 2.6 \dots$, donde $\zeta(s)$ es la función Zeta de Riemann (ver Apéndice A).

La temperatura crítica T_c del sistema de bosones entre planos está definida como aquella temperatura a la cual los bosones comienzan a poblar el estado de más baja

3. BOSONES ENTRE CAPAS

energía del sistema. A temperaturas más altas que T_c , la cantidad de partículas en el estado base es despreciable, por lo que $N_0(T) \approx 0$, y la mayor parte de los bosones se encuentran en estados excitados, así que $N_e \approx N$. A T_c $N_e = N$ y $\mu = \epsilon_0 = \mu_0$, entonces

$$N = -\frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{\beta} \int_0^\infty dk_z \ln(1 - e^{-\beta_c(\epsilon_{k_z} - \mu_0)}) \quad (3.19)$$

donde μ_0 es el potencial químico a la temperatura crítica $T = T_c$. El factor 2 aparece porque la energía en función de k es una función par. A esta temperatura, μ_0 corresponde a la energía del estado base del sistema, ϵ_0 .

Dividiendo Ec. (3.19) entre N se obtiene

$$-1 = \frac{L^3 m}{N(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{\beta_c} \int_0^\infty dk_z \ln(1 - e^{-\beta_c(\epsilon_{k_z} - \mu_0)}) \quad (3.20)$$

Aquí se reconoce a la densidad de partículas n_B es N/L^3 , la cual, a partir de la definición de γ y de T_0 está dada por

$$n_B = \frac{\zeta(3/2)}{(4\pi\gamma)^{3/2} a^3} \quad (3.21)$$

Por lo tanto, el factor $L^3 m/N(2\pi)^2 \hbar^2$ se puede reescribir en términos de γ luego de algunos pasos algebraicos, quedando como

$$\frac{L^3 m}{N(2\pi)^2 \hbar^2} = \frac{a\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)k_B T_0} \quad (3.22)$$

Luego entonces, la Ec. (3.19) se convierte en

$$-1 = \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\tilde{\beta}_c} \int_0^\infty adk_z \ln(1 - e^{-\beta_c(\epsilon_{k_z} - \mu_0)}) \quad (3.23)$$

en donde se ha definido $\tilde{\beta}_c = \beta_c k_B T_0$ como una manera conveniente de adimensionalizar la temperatura crítica. Para cualquier otra temperatura que no sea T_c simplemente se tiene $\tilde{\beta} = \beta k_B T_0$.

Se vio en el Cap. 2 que el espectro de energías del sistema consiste en una estructura de bandas de energía permitidas separadas por bandas prohibidas. Se dedujo que la n -ésima banda comienza en $k = (n-1)\pi/a$, y tiene su borde superior en $k = n\pi/a$. Por otra parte, la relación de dispersión permite determinar las energías del sistema en unidades $\hbar^2/2ma^2$, de acuerdo con la Ec. (2.59). Para calcular las propiedades termodinámicas con base en estas energías se considera el hecho de que

$$\beta(\epsilon_{k_z} - \mu_0) = \tilde{\beta}\gamma(\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu}_0) \quad (3.24)$$

donde $\bar{\varepsilon} = \varepsilon/(\hbar^2/2ma^2)$ y $\bar{\mu} = \mu/(\hbar^2/2ma^2)$.

Con estos dos puntos en cuenta, la integral en la Ec. (3.20) se puede separar en una suma infinita de integrales sobre cada una de las bandas de energía:

$$-1 = \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\tilde{\beta}_c \zeta(3/2)} \sum_{j=1}^{\infty} \int_{(j-1)\pi/a}^{j\pi/a} adk_z \ln \left(1 - e^{-\tilde{\beta}_c \gamma (\bar{\varepsilon}_{k_z, j} - \bar{\mu}_0)} \right) \quad (3.25)$$

donde $\bar{\varepsilon}_{z,j}$ corresponde a las energías de la j -ésima banda. Como lo que se busca es la temperatura crítica, se puede definir $\tilde{T}_c = T_c/T_0$ para reescribir la Ec. (3.25) como

$$-1 = \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \tilde{T}_c \sum_{j=1}^{\infty} \int_{(j-1)\pi/a}^{j\pi/a} adk_z \ln \left(1 - e^{-\gamma (\bar{\varepsilon}_{k_z, j} - \bar{\mu}_0)/\tilde{T}_c} \right) \quad (3.26)$$

Se puede apreciar que la Ec. (3.26) determina implícitamente la temperatura crítica del sistema.

Potencial químico

El potencial químico μ del gas de bosones es constante para toda $T \leq T_c$. En este caso es igual a la energía base del sistema, μ_0 . Sin embargo, para temperaturas mayores esto ya no se cumple, pues la mayor parte de los bosones se encuentran en estados excitados y no se produce condensación. Por lo tanto, se debe encontrar μ para todo valor de T mayor que T_c . Para esto empleamos la ecuación para número de bosones, Ec. (3.16),

$$N = N_0 - \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{\beta} \int_0^{\infty} dk_z \ln \left(1 - e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \quad (3.27)$$

la cual se convierte en

$$1 = N_0/N - \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\tilde{\beta}} \int_0^{\infty} adk_z \ln \left(1 - e^{-\tilde{\beta} \gamma (\bar{\varepsilon}_{k_z} - \bar{\mu})} \right) \quad (3.28)$$

Dado que para $T > T_c$ se tiene que $N_0/N \approx 0$, entonces el potencial químico está dado implícitamente por la ecuación

$$-1 = \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\tilde{\beta}} \int_0^{\infty} adk_z \ln \left(1 - e^{-\tilde{\beta} \gamma (\bar{\varepsilon}_{k_z} - \bar{\mu})} \right) \quad (3.29)$$

Esta ecuación es idéntica a la que determina a la T_c en su forma matemática, donde μ_0 se ha reemplazado por $\mu(T)$. El potencial químico adimensionalizado $\bar{\mu}$ está

determinado implícitamente por esta ecuación, dada una $T > T_c$. Esta relación, al igual que aquella que determina T_c , también puede separarse en una suma infinita de integrales

$$-1 = \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\tilde{\beta}} \sum_{j=1}^{\infty} \int_{(j-1)\pi/a}^{j\pi/a} adk_z \ln \left(1 - e^{-\tilde{\beta}\gamma(\tilde{\varepsilon}_{k_z,j} - \tilde{\mu})} \right) \quad (3.30)$$

Energía interna por bosón

La energía interna se determina a partir de Ec. (3.12) y Ec. (3.15). Con $z = e^{\beta\mu}$ la fugacidad, entonces

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial(\Omega/k_B T)}{\partial T} \right)_{V, e^{\beta\mu}} &= \frac{\varepsilon_0 z e^{-\beta\varepsilon_0}}{1 - z e^{-\beta\varepsilon_0}} \frac{\partial\beta}{\partial T} \\ &\quad - \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \varepsilon_{k_z} \ln(1 - z e^{-\beta\varepsilon_{k_z}}) \frac{\partial\beta}{\partial T} \\ &\quad + \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z g_2(z e^{-\beta\varepsilon_{k_z}}) \frac{\partial\beta}{\partial T} \end{aligned} \quad (3.31)$$

donde se ha empleado la relación $u g_2'(u) = g_1(u) = -\ln(1-u)$, con $u = z e^{-\beta\varepsilon}$. Ya que $\partial\beta/\partial T = -\beta/T$ se sigue que

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial(\Omega/k_B T)}{\partial T} \right)_{V, e^{\beta\mu}} &= -\frac{\beta}{T} \frac{\varepsilon_0 z e^{-\beta\varepsilon_0}}{1 - z e^{-\beta\varepsilon_0}} \\ &\quad + \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{T} \int_0^{\infty} dk_z \varepsilon_{k_z} \ln(1 - z e^{-\beta\varepsilon_{k_z}}) \\ &\quad - \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{\beta T} \int_0^{\infty} dk_z g_2(z e^{-\beta\varepsilon_{k_z}}) \end{aligned} \quad (3.32)$$

De acuerdo a la Ec. (3.15), para obtener $U(T, V)$ hay que multiplicar la Ec. (3.32) por $-k_B T^2 = -T/\beta$. Por lo tanto, la energía interna es

$$\begin{aligned} U(V, T) &= \frac{\varepsilon_0}{z^{-1} e^{-\beta\varepsilon_0} - 1} \\ &\quad - \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{\beta} \int_0^{\infty} dk_z \varepsilon_{k_z} \ln(1 - z e^{-\beta\varepsilon_{k_z}}) \\ &\quad + \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{\beta^2} \int_0^{\infty} dk_z g_2(z e^{-\beta\varepsilon_{k_z}}) \end{aligned} \quad (3.33)$$

Ahora bien, se puede reescribir esta ecuación de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
 U(V, T) &= \frac{\varepsilon_0}{z^{-1}e^{-\beta\varepsilon_0} - 1} \\
 &\quad - \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{\beta} \varepsilon_0 \int_0^\infty dk_z \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon_{k_z}}) \\
 &\quad - \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{\beta} \int_0^\infty dk_z (\varepsilon_{k_z} - \varepsilon_0) \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon_{k_z}}) \\
 &\quad + \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{\beta^2} \int_0^\infty dk_z g_2(ze^{-\beta\varepsilon_{k_z}})
 \end{aligned} \tag{3.34}$$

Si se revisa cuidadosamente esta ecuación se observa que el primer término corresponde a $N_0(T)\varepsilon_0$, y el segundo término a $N(T)\varepsilon_0$. Por lo tanto, los primeros dos términos corresponden al número de partículas multiplicado por la energía del estado base. Entonces

$$\begin{aligned}
 U(V, T) &= N\varepsilon_0 \\
 &\quad - \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{\beta} \int_0^\infty dk_z (\varepsilon_{k_z} - \varepsilon_0) \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon_{k_z}}) \\
 &\quad + \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{\beta^2} \int_0^\infty dk_z g_2(ze^{-\beta\varepsilon_{k_z}})
 \end{aligned} \tag{3.35}$$

Dividiendo entre $Nk_B T$ se obtiene

$$\begin{aligned}
 \frac{U(V, T)}{Nk_B T} &= \beta\varepsilon_0 \\
 &\quad - \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{N} \int_0^\infty dk_z (\varepsilon_{k_z} - \varepsilon_0) \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon_{k_z}}) \\
 &\quad + \frac{L^3 m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{N\beta} \int_0^\infty dk_z g_2(ze^{-\beta\varepsilon_{k_z}})
 \end{aligned} \tag{3.36}$$

De acuerdo con Ec. (3.22), la ecuación anterior puede reescribirse como

$$\begin{aligned}
 \frac{U(V, T)}{Nk_B T} &= \beta\varepsilon_0 \\
 &\quad - \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{k_B T_0} \int_0^\infty adk_z (\varepsilon_{k_z} - \varepsilon_0) \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon_{k_z}}) \\
 &\quad + \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\beta k_B T_0} \int_0^\infty adk_z g_2(ze^{-\beta\varepsilon_{k_z}})
 \end{aligned} \tag{3.37}$$

3. BOSONES ENTRE CAPAS

Si se emplea Ec. (3.24) para poner las energías en unidades $\hbar^2/2ma^2$, se llega a

$$\begin{aligned} \frac{U(V, T)}{Nk_B T} &= \tilde{\beta}\gamma\bar{\varepsilon}_0 \\ &\quad - \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \int_0^\infty adk_z (\bar{\varepsilon}_{k_z} - \bar{\varepsilon}_0) \ln \left(1 - ze^{-\tilde{\beta}\gamma\bar{\varepsilon}_{k_z}} \right) \\ &\quad + \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\tilde{\beta}} \int_0^\infty adk_z g_2 \left(ze^{-\tilde{\beta}\gamma\bar{\varepsilon}_{k_z}} \right) \end{aligned} \quad (3.38)$$

donde $z = e^{\tilde{\beta}\gamma\bar{\mu}}$.

Bajo el mismo argumento empleado para determinar T_c estas integrales pueden separarse en una suma infinita de integrales sobre las bandas permitidas.

$$\begin{aligned} \frac{U(V, T)}{Nk_B T} &= \tilde{\beta}\gamma\bar{\varepsilon}_0 \\ &\quad - \frac{2\gamma\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \sum_{j=1}^\infty \int_{(j-1)\pi/a}^{j\pi/a} adk_z (\bar{\varepsilon}_{k_{z,j}} - \bar{\varepsilon}_0) \ln \left(1 - ze^{-\tilde{\beta}\gamma\bar{\varepsilon}_{k_{z,j}}} \right) \\ &\quad + \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\tilde{\beta}} \sum_{j=1}^\infty \int_{(j-1)\pi/a}^{j\pi/a} adk_z g_2 \left(ze^{-\tilde{\beta}\gamma\bar{\varepsilon}_{k_{z,j}}} \right) \end{aligned} \quad (3.39)$$

Restando $\tilde{\beta}\gamma\bar{\varepsilon}_0$ de ambos lados se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{U(V, T) - N\varepsilon_0}{Nk_B T} &= - \frac{2\gamma\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \sum_{j=1}^\infty \int_{(j-1)\pi/a}^{j\pi/a} adk_z (\bar{\varepsilon}_{k_{z,j}} - \bar{\varepsilon}_0) \ln \left(1 - e^{-\tilde{\beta}(\bar{\varepsilon}_{k_{z,j}} - \bar{\mu})} \right) \\ &\quad + \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\tilde{\beta}} \sum_{j=1}^\infty \int_{(j-1)\pi/a}^{j\pi/a} adk_z g_2 \left(e^{-\tilde{\beta}(\bar{\varepsilon}_{k_{z,j}} - \bar{\mu})} \right) \end{aligned} \quad (3.40)$$

Calor específico

El calor específico está dado por la Ec. (3.15). Para esto, se multiplica la Ec. (3.38) por T , y se deriva respecto a T . De esta manera C_V queda determinado en términos de la energía interna por bosón:

$$\frac{C_V}{Nk_B} = \frac{1}{Nk_B} \frac{dU}{dT} = \frac{U}{Nk_B T} + T \frac{d}{dT} \left(\frac{U}{Nk_B T} \right) \quad (3.41)$$

De acuerdo a la Ec. (3.38) se tiene que

$$\begin{aligned}
 T \frac{d}{dT} \left(\frac{U}{Nk_B T} \right) &= T \left[-\frac{\tilde{\beta}}{T} \gamma \bar{\epsilon}_0 \right. \\
 &+ \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \int_0^\infty adk_z \frac{(\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\epsilon}_0) \left(\frac{\tilde{\beta}}{T} \gamma (\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu}) + \tilde{\beta} \gamma \frac{d\bar{\mu}}{dT} \right)}{z^{-1} e^{\tilde{\beta} \gamma \bar{\epsilon}_{k_z}} - 1} \\
 &+ \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\tilde{\beta} T} \int_0^\infty adk_z g_2 \left(z e^{-\tilde{\beta} \gamma \bar{\epsilon}_{k_z}} \right) \\
 &\left. + \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\tilde{\beta}} \int_0^\infty adk_z g'_2 \left(z e^{-\tilde{\beta} \gamma \bar{\epsilon}_{k_z}} \right) z e^{-\tilde{\beta} \gamma \bar{\epsilon}_{k_z}} \left(\frac{\tilde{\beta}}{T} \gamma (\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu}) + \tilde{\beta} \gamma \frac{d\bar{\mu}}{dT} \right) \right] \quad (3.42)
 \end{aligned}$$

Empleando la relación $u g'_2(u) = g_1(u) = -\ln(1-u)$ se tiene que

$$\begin{aligned}
 T \frac{d}{dT} \left(\frac{U}{Nk_B T} \right) &= -\tilde{\beta} \gamma \bar{\epsilon}_0 \\
 &+ \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \int_0^\infty adk_z \frac{(\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\epsilon}_0) \left(\tilde{\beta} \gamma (\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu}) + \tilde{\beta} \gamma T \frac{d\bar{\mu}}{dT} \right)}{z^{-1} e^{\tilde{\beta} \gamma \bar{\epsilon}_{k_z}} - 1} \\
 &+ \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\tilde{\beta}} \int_0^\infty adk_z g_2 \left(z e^{-\tilde{\beta} \gamma \bar{\epsilon}_{k_z}} \right) \\
 &- \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\tilde{\beta}} \int_0^\infty adk_z \ln \left(1 - z e^{-\tilde{\beta} \gamma \bar{\epsilon}_{k_z}} \right) \left(\tilde{\beta} \gamma (\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu}) + \tilde{\beta} \gamma T \frac{d\bar{\mu}}{dT} \right) \quad (3.43)
 \end{aligned}$$

Entonces el calor específico por bosón está dado por

$$\begin{aligned}
 \frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{U}{Nk_B T} - \tilde{\beta} \gamma \bar{\epsilon}_0 \\
 &+ \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \int_0^\infty adk_z \frac{(\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\epsilon}_0) \left(\tilde{\beta} \gamma (\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu}) + \tilde{\beta} \gamma T \frac{d\bar{\mu}}{dT} \right)}{z^{-1} e^{\tilde{\beta} \gamma \bar{\epsilon}_{k_z}} - 1} \\
 &+ \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\tilde{\beta}} \int_0^\infty adk_z g_2 \left(z e^{-\tilde{\beta} \gamma \bar{\epsilon}_{k_z}} \right) \\
 &- \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\tilde{\beta}} \int_0^\infty adk_z \ln \left(1 - z e^{-\tilde{\beta} \gamma \bar{\epsilon}_{k_z}} \right) \left(\tilde{\beta} \gamma (\bar{\epsilon}_{k_z} - \bar{\mu}) + \tilde{\beta} \gamma T \frac{d\bar{\mu}}{dT} \right) \quad (3.44)
 \end{aligned}$$

3. BOSONES ENTRE CAPAS

Pero, de acuerdo con Ec. (3.40), $U/(Nk_B T) - \tilde{\beta}\gamma\bar{\varepsilon}_0 = (U - N\varepsilon)/Nk_B T$. Por lo tanto

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} \\
&+ \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \int_0^\infty adk_z (\bar{\varepsilon}_{k_z} - \bar{\varepsilon}_0) \frac{\tilde{\beta}\gamma(\bar{\varepsilon}_{k_z} - \bar{\mu}) + \tilde{\beta}\gamma T \frac{d\bar{\mu}}{dT}}{z^{-1}e^{\tilde{\beta}\gamma\bar{\varepsilon}_{k_z}} - 1} \\
&+ \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\tilde{\beta}} \int_0^\infty adk_z g_2 \left(ze^{-\tilde{\beta}\gamma\bar{\varepsilon}_{k_z}} \right) \\
&- \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\tilde{\beta}} \int_0^\infty adk_z \ln \left(1 - ze^{-\tilde{\beta}\gamma\bar{\varepsilon}_{k_z}} \right) \left(\tilde{\beta}\gamma(\bar{\varepsilon}_{k_z} - \bar{\mu}) + \tilde{\beta}\gamma T \frac{d\bar{\mu}}{dT} \right) \quad (3.45)
\end{aligned}$$

Al igual que en los casos anteriores, se puede dividir la integral en una serie de integrales sobre las bandas de energía. Así

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} \\
&+ \frac{2\gamma\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \tilde{\beta} \sum_{j=1}^{\infty} \int_{(j-1)\pi/a}^{j\pi/a} adk_z (\bar{\varepsilon}_{k_{z,j}} - \bar{\varepsilon}_0) \frac{(\bar{\varepsilon}_{k_{z,j}} - \bar{\mu}) + T \frac{d\bar{\mu}}{dT}}{e^{\tilde{\beta}\gamma(\bar{\varepsilon}_{k_{z,j}} - \bar{\mu})} - 1} \\
&+ \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\tilde{\beta}} \sum_{j=1}^{\infty} \int_{(j-1)\pi/a}^{j\pi/a} adk_z g_2 \left(e^{-\tilde{\beta}\gamma(\bar{\varepsilon}_{k_{z,j}} - \bar{\mu})} \right) \\
&- \frac{2\gamma\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \sum_{j=1}^{\infty} \int_{(j-1)\pi/a}^{j\pi/a} adk_z \ln \left(1 - e^{-\tilde{\beta}\gamma(\bar{\varepsilon}_{k_{z,j}} - \bar{\mu})} \right) \left((\bar{\varepsilon}_{k_{z,j}} - \bar{\mu}) + T \frac{d\bar{\mu}}{dT} \right) \quad (3.46)
\end{aligned}$$

Como se observa en esta ecuación, para calcular $C_V/Nk_B T$ se requiere conocer la derivada del potencial químico respecto a la temperatura. Para $T \leq T_c$, el potencial químico es constante y es $\mu = \mu_0$, por lo que $d\mu/dT = 0$. Para $T > T_c$, se puede derivar implícitamente la Ec. (3.30) respecto a T , lo que lleva lo siguiente

$$\begin{aligned}
-\frac{d\tilde{\beta}}{dT} &= \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \sum_{j=1}^{\infty} \int_{(j-1)\pi/a}^{j\pi/a} adk_z \frac{-e^{-\tilde{\beta}\gamma(\bar{\varepsilon}_{k_{z,j}} - \bar{\mu})} \left[-\frac{d\tilde{\beta}}{dT}\gamma(\bar{\varepsilon}_{k_{z,j}} - \bar{\mu}) + \tilde{\beta}\gamma \frac{d\bar{\mu}}{dT} \right]}{1 - e^{-\tilde{\beta}\gamma(\bar{\varepsilon}_{k_{z,j}} - \bar{\mu})}} \\
&= \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \sum_{j=1}^{\infty} \int_{(j-1)\pi/a}^{j\pi/a} adk_z \frac{- \left[-\frac{d\tilde{\beta}}{dT}\gamma(\bar{\varepsilon}_{k_{z,j}} - \bar{\mu}) + \tilde{\beta}\gamma \frac{d\bar{\mu}}{dT} \right]}{e^{\tilde{\beta}\gamma(\bar{\varepsilon}_{k_{z,j}} - \bar{\mu})} - 1} \quad (3.47)
\end{aligned}$$

Ya se ha visto que $d\tilde{\beta}/dT = -\tilde{\beta}/T$, por lo que si se multiplican ambos lados por $\tilde{\beta}/T$, se llega a lo siguiente

$$1 = \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \sum_{j=1}^{\infty} \int_{(j-1)\pi/a}^{j\pi/a} adk_z \frac{-[\gamma(\bar{\epsilon}_{k_z,j} - \bar{\mu}) + \gamma T \frac{d\bar{\mu}}{dT}]}{e^{\tilde{\beta}\gamma(\bar{\epsilon}_{k_z,j} - \bar{\mu})} - 1}$$

Distribuyendo la integral sobre los dos sumandos se obtiene

$$\begin{aligned} & \frac{2\gamma\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \sum_{j=1}^{\infty} \int_{(j-1)\pi/a}^{j\pi/a} adk_z \frac{-T \frac{d\bar{\mu}}{dT}}{e^{\tilde{\beta}\gamma(\bar{\epsilon}_{k_z,j} - \bar{\mu})} - 1} \\ & = 1 + \frac{2\gamma\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \sum_{j=1}^{\infty} \int_{(j-1)\pi/a}^{j\pi/a} adk_z \frac{(\bar{\epsilon}_{k_z,j} - \bar{\mu})}{e^{\tilde{\beta}\gamma(\bar{\epsilon}_{k_z,j} - \bar{\mu})} - 1} \end{aligned} \quad (3.48)$$

Luego entonces, se saca $Td\bar{\mu}/dT$ de la integral pues no depende de k . Finalmente se despeja, y se llega a la forma implícita de la derivada del potencial químico:

$$T \frac{d\bar{\mu}}{dT} = - \frac{1 + \frac{2\gamma\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \sum_{j=1}^{\infty} \int_{(j-1)\pi/a}^{j\pi/a} adk_z \frac{(\bar{\epsilon}_{k_z,j} - \bar{\mu})}{e^{\tilde{\beta}\gamma(\bar{\epsilon}_{k_z,j} - \bar{\mu})} - 1}}{\frac{2\gamma\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \sum_{j=1}^{\infty} \int_{(j-1)\pi/a}^{j\pi/a} \frac{adk_z}{e^{\tilde{\beta}\gamma(\bar{\epsilon}_{k_z,j} - \bar{\mu})} - 1}} \quad (3.49)$$

Una vez determinada la temperatura crítica, el potencial químico y la derivada de este respecto a T , la energía interna por bosón y el calor específico se pueden determinar sin mayor dificultad.

3.2. Métodos numéricos en el cálculo de las propiedades termodinámicas

Para calcular las energías del sistema de bosones se emplea la relación de dispersión, ya sea la Ec. (2.20) para sistemas con una delta o la Ec. (2.56) para aquellos con dos deltas por celda unidad. En ambos casos la energía está dada implícitamente, y tiene que determinarse por algún método para encontrar las raíces de una función unidimensional. Para esto, los métodos de la Secante, Brent y Newton usualmente son suficiente. Si se define la función $g(v, k_z) = f(v_{k_z}) - \cos(k_z a)$, donde $v_{k_z} = \alpha a$, entonces el cuadrado de las raíces de esta función son precisamente las energías $\bar{\epsilon}_{k_z}$, dada Ec. (2.60).

3. BOSONES ENTRE CAPAS

Como se vio en la Sec. 2.2, se pueden obtener las energías en función de k , tomando en cuenta dónde empiezan y dónde terminan las bandas. Así como las fórmulas para calcular las propiedades termodinámicas se dividen en función de los valores de k correspondientes a cada banda, se puede aprovechar la periodicidad de la energía respecto a k para simplificar aún más la forma de las propiedades termodinámicas.

Considérese primero la temperatura crítica T_c dada implícitamente por la Ec. (3.26). Se toma el cambio de variable $\eta = k_z a - (j - 1)\pi$, donde es claro que $\eta = \eta(k_z, j)$. Bajo este cambio, cuando $k_z = (j - 1)\pi/a$, $\eta = 0$, y si $k_z = j\pi/a$, $\eta = \pi$. Así, T_c queda determinada por

$$-1 = \frac{2\sqrt{\gamma/\pi}}{\zeta(3/2)} \tilde{T}_c \sum_{j=1}^{\infty} \int_0^{\pi} d\eta \ln \left(1 - e^{-\gamma(\bar{\epsilon}_\eta - \bar{\mu}_0)/\tilde{T}_c} \right) \quad (3.50)$$

Los cambios más significativos en esta ecuación es que $0 < \eta \leq \pi$ y que la energía ahora depende de η . Por lo tanto, el cambio de variable debe tener algún efecto sobre la forma de la relación de dispersión. En efecto, dado que $k_z = (\eta + (j - 1)\pi)/a$, entonces la relación de dispersión cambia de la siguiente manera

$$\begin{aligned} f(v_{k_z}) &= \cos(k_z a) \\ &= \cos(\eta + (j - 1)\pi) \\ &= (-1)^{j-1} \cos(\eta) = f(v_\eta) \end{aligned} \quad (3.51)$$

Por supuesto, $v_\eta = \alpha a$ no ha cambiado en su forma, el subíndice simplemente sirve para indicar que ahora sus valores dependen de η . Esta es la relación de dispersión a usarse bajo el cambio de variable antes mencionado.

Cualquiera de las ecuaciones que determinan las propiedades termodinámicas dependen de un parámetro que no está determinado analíticamente: $\bar{\epsilon}_\eta$. La única manera de aproximar las propiedades es empleando algún método de integración numérica, de tal forma que las integrales se calculen a partir de un conjunto pequeño de valores de η y sus correspondientes energías $\bar{\epsilon}_\eta$. Con este fin se emplean los métodos de Cuadratura de Gauss-Legendre y Cuadratura Tanh-Sinh (ver Apéndice B).

Considérese nuevamente la ecuación que determina T_c . Bajo el cambio de variable $\eta = \pi(t + 1)/2$, el intervalo de integración de la ecuación cambia, quedando como

$$-1 = \frac{\sqrt{\gamma\pi}}{\zeta(3/2)} \tilde{T}_c \sum_{j=1}^{\infty} \int_{-1}^1 dt \ln \left(1 - e^{-\gamma(\bar{\epsilon}_t - \bar{\mu}_0)/\tilde{T}_c} \right) \quad (3.52)$$

que no es más que el resultado de aplicar los cambios de variable indicados en Apéndice B.1. De esta manera, los valores de t corresponden a las abscisas empleadas para

realizar la cuadratura. Dado el cambio de variable, la relación de dispersión cambia nuevamente, quedando como

$$\begin{aligned}
 f(v_\eta) &= (-1)^{j+1} \cos(\eta) \\
 &= (-1)^{j+1} \cos\left(\frac{\pi}{2}(t+1)\right) \\
 &= (-1)^j \sin\left(\frac{\pi t}{2}\right) = f(v_t)
 \end{aligned} \tag{3.53}$$

donde $v_t = \alpha a$. Entonces $\bar{\varepsilon}_t = v^2$ son las energías empleadas en la cuadratura. Entonces, bajo una cuadratura de M puntos, la ecuación que determina T_c es

$$-1 = \frac{\sqrt{\gamma\pi}}{\zeta(3/2)} \tilde{T}_c \sum_{j=1}^J \sum_{i=1}^M \omega_i \ln\left(1 - e^{-\gamma(\bar{\varepsilon}_{t_i} - \bar{\mu}_0)/\tilde{T}_c}\right) \tag{3.54}$$

en donde se limita el cálculo numérico a un número finito J de bandas cuyo valor depende de la precisión requerida en la propiedad calculada. El resto de las propiedades termodinámicas se transforman de manera similar bajo cuadratura.

Se debe tener especial cuidado con la primera banda de energía ($j = 1$), porque las funciones a integrar dentro de las expresiones de las propiedades termodinámicas pueden tener una singularidad en $k_z = 0$, i.e. $t = -1$. Esto es así porque para $k_z = 0$ se tiene que $\varepsilon_{k_z} = \mu_0$. Por ejemplo, el integrando dentro de la ecuación que determina \tilde{T}_c tiene una singularidad en este punto.

En principio, las singularidades en los extremos de las funciones a integrar, como pasa en este caso, no producen problemas sobre los esquemas de cuadratura. Sin embargo las aproximaciones de las integrales pueden resultar inexactos y poco precisos dependiendo del esquema usado. Por esto es necesario emplear algún esquema que pueda atacar el efecto de las singularidades. Por las razones dadas en el Apéndice B se emplea la cuadratura Tanh-Sinh para aproximar las integrales sobre la primera banda. Para el resto de las bandas se emplea la cuadratura de Gauss-Legendre.

Dado que se empleará intensivamente la computadora para calcular las propiedades termodinámicas, se usa el parámetro *Machine Epsilon*, ó ϵ , para limitar el número de pares abscisa-peso para la cuadratura Tanh-Sinh. Esto se hace definiendo $h = 2^{-r}$, donde $r > 1$ es el orden de la cuadratura, y $t = nh$, donde en principio n es un entero que va de $-\infty$ hasta ∞ según Ec. (B.6). Al no ser esto factible se toma n desde 0 hasta $20 \cdot 2^r$, y se calculan los pares abscisas-peso (t_n, ω_n) según Ec. (B.7) y Ec. (B.8). La función que determina las abscisas es impar y la que determina los pesos es par. Luego entonces el par $(-t_n, \omega_n)$ que corresponde a $t = -nh$ también debe emplearse

en la cuadratura. Los pares se calculan siempre que $n \leq 20 * 2^r$ ó $|1 - t_n| > \epsilon$, la cual es típicamente igual a 2.2×10^{-16} . Así, dado un n_0 que no satisfaga alguno de los criterios anteriores, se tiene que la cuadratura de la primera banda tiene un total de $M = 2n_0 + 1$ pares abscisa-peso. Para el resto de las bandas es suficiente emplear la Cuadratura de Gauss-Legendre con doce pares abscisa-peso.

3.3. Resultados generales

Una delta por celda unidad

Temperatura crítica

La Fig. 3.3 muestra cómo depende \tilde{T}_c con la separación a/λ_0 entre planos, en una escala semilogarítmica para $P_0 = 100$. La temperatura crítica muestra un mínimo en $a/\lambda_0 = 0.58$, que corresponde a $\tilde{T}_c = 0.549373$.

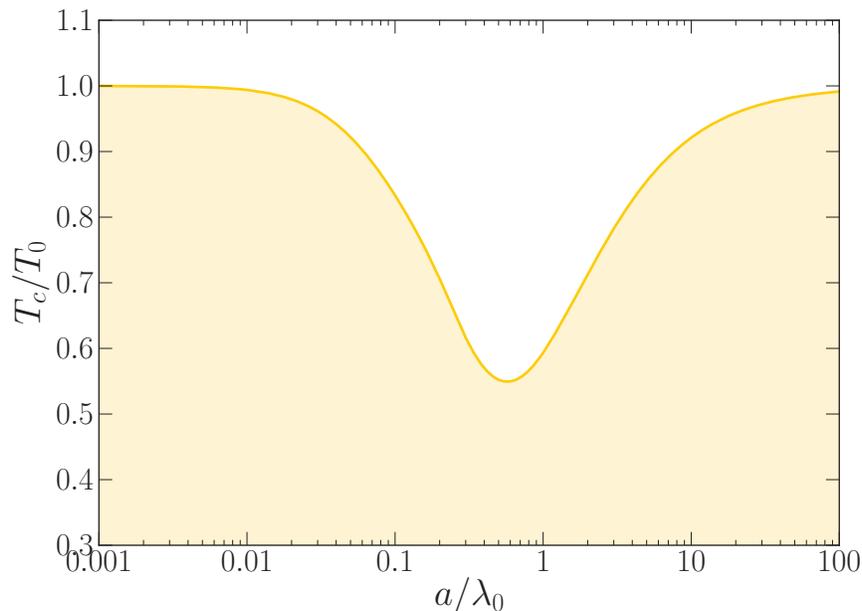


Figura 3.3: T_c como función de la separación a/λ_0 entre planos con $P_0 = 100$.

Como puede apreciarse, $T_c \rightarrow T_0$ en dos límites: cuando $a/\lambda_0 \rightarrow 0$ y cuando $a/\lambda_0 \rightarrow \infty$. Físicamente si las separación entre deltas se hace muy grande, i.e. a/λ_0 ,

el efecto de los potenciales deltas sobre los bosones es pequeño, asemejándose cada vez más a un gas ideal libre cuya T_c es T_0 . En efecto, como λ , la longitud de onda térmica, es un parámetro que cuantifica el alcance de las interacciones de los bosones con las barreras, y en virtud de que a la temperatura de transición T_c se satisface que $\lambda_c \geq \lambda_0$ (donde λ_c la longitud de onda térmica a esa temperatura), entonces si $a \gg \lambda_c \geq \lambda_0$ los bosones no interactúan intensamente con las deltas, asemejándose a un gas ideal de bosones infinito cuya $T_c = T_0$.

También cuando $a/\lambda_0 \rightarrow 0$ se tiene que $T_c \rightarrow T_0$, lo cual se presenta cuando la longitud de onda térmica es muy grande en comparación con el ancho de la celda unidad.

Cuando se estudia la evolución de T_c/T_0 no sólo en función de la separación entre deltas, sino también en términos de la intensidad de las deltas, la temperatura crítica se comporta como se muestra en Fig. 3.4, en forma de una superficie tridimensional. En esta figura el ancho de la celda unidad está dado en Angstroms y va desde $a =$

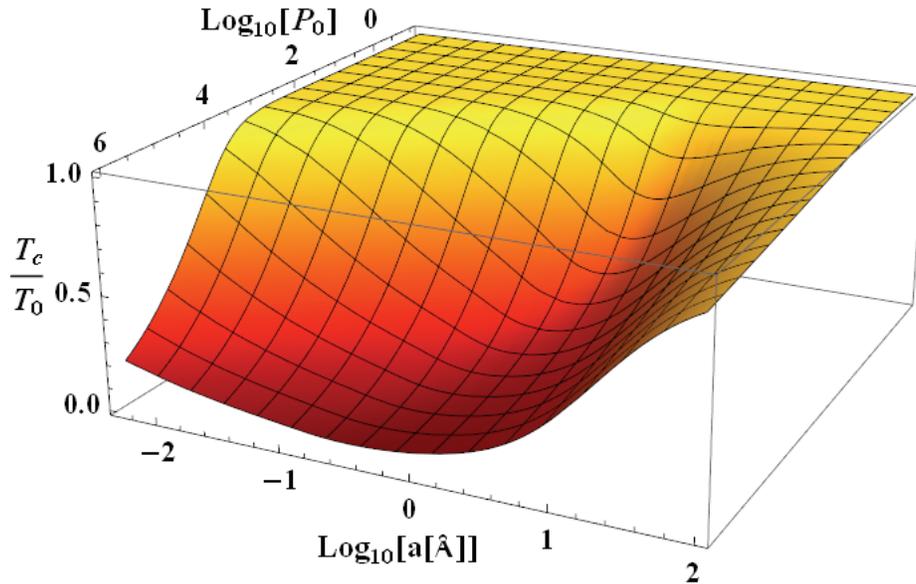


Figura 3.4: T_c como función de a y P_0 .

0.005\AA hasta 100\AA . Se considera una longitud de onda térmica $\lambda_0 = 4.93013\text{\AA}$, que es la longitud de onda térmica del ${}^4\text{He}$. Por lo tanto, el rango abarcado va desde $a/\lambda_0 = 0.001$ hasta $a/\lambda_0 = 20.283$. La intensidad de las deltas se toma desde $P_0 = 0.1$ hasta $P_0 = 1 \times 10^6$. Se observa que T_c/T_0 disminuye con el incremento de P_0 , lo que

3. BOSONES ENTRE CAPAS

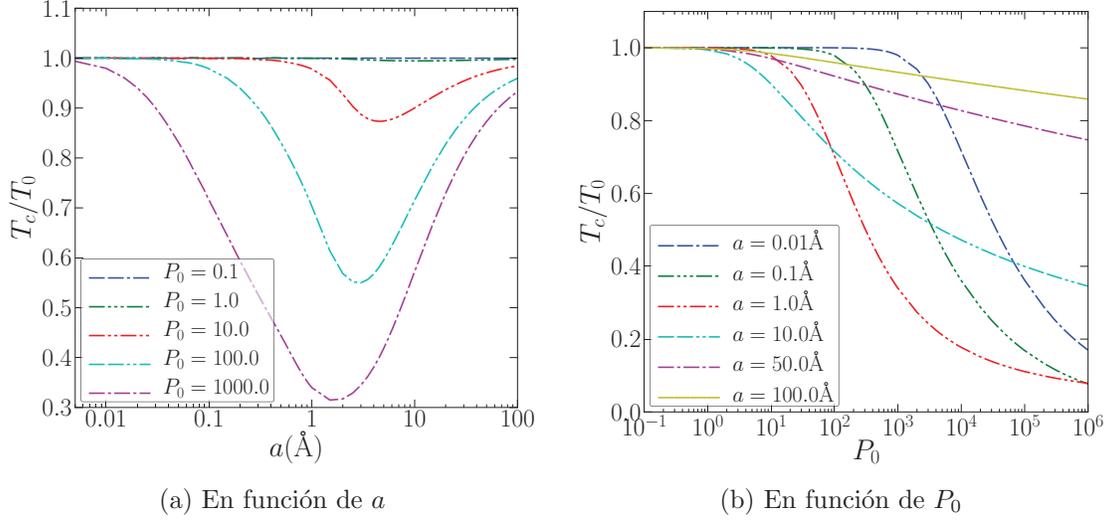


Figura 3.5: Curvas de T_c/T_0 de un sistema con una delta por celda unidad. $\lambda_0 = 4.93013\text{\AA}$.

físicamente significa que a mayor impenetrabilidad de las interfases la temperatura de transición se hace más baja. En el límite cuando $P_0 \rightarrow \infty$ las barreras delta son impenetrables, los bosones solo se desplazan en las direcciones x y y , por lo que el sistema es bidimensional, y por lo tanto su temperatura crítica es cero [21].

En la Fig. 3.5a se observa la dependencia de T_c/T_0 en función de a , de manera similar a como se muestra en la Fig. 3.3. Sin embargo, para diferentes valores de P_0 el mínimo de la temperatura crítica cambia: a medida que se incrementa P_0 el mínimo de T_c/T_0 disminuye y se desplaza hacia un valor inferior de a . Como se indicó con anterioridad, esto es porque el sistema se asemeja cada vez más a uno bidimensional. En Fig. 3.5b la temperatura crítica disminuye monótonamente en función de P_0 , y sólo varía la tasa de cambio en función de la separación a entre deltas. En particular, cuando $a \rightarrow \infty$ disminuye muy lentamente, mucho más lento que para cualquier otra de las separaciones indicadas, lo cual parece indicar que el efecto de las deltas sobre los bosones disminuye drásticamente a medida de que la separación entre deltas aumenta.

Calor específico

El calor específico para diversos valores a/λ_0 , en función de la temperatura, se muestra en Fig. 3.6. La intensidad de las deltas es $P_0 = 100$ y, salvo que se indique lo

contrario, de aquí en adelante se manejará este valor como la intensidad de las deltas. De inmediato se nota que la estructura del calor específico es mucho más compleja que la del gas ideal de bosones. En principio todas las curvas de C_V/Nk_B muestran un pico en el calor específico a la temperatura crítica T_c/T_0 debido a la CBE. Sin embargo, para temperaturas mayores que T_c , las curvas muestran otros máximos y mínimos locales que están directamente relacionados con la estructura periódica del modelo de KP.

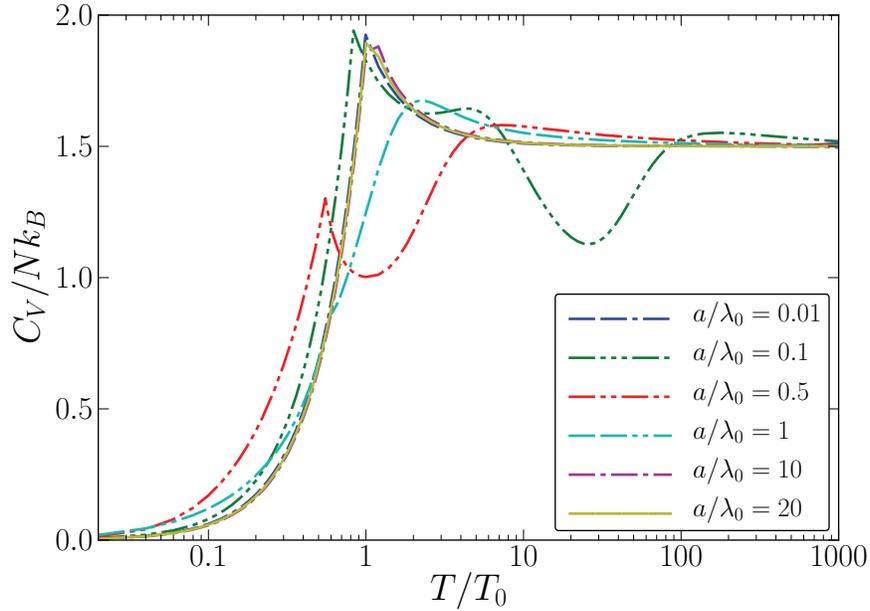


Figura 3.6: Calor específico para diversos valores a/λ_0 , con $P_0 = 100$.

En la Fig. 3.6 se muestra C_V/Nk_B para un amplio rango de separaciones: desde $a/\lambda_0 = 0.01$ hasta 20. En ambos casos extremos la temperatura crítica está muy próxima a la del gas ideal libre, i.e., $T_c/T_0 \approx 1$. En estos casos, para $T < T_c$ el calor específico se incrementa proporcionalmente a $(T/T_0)^{3/2}$ [31]. El valor máximo de C_V/Nk_B alcanzado corresponde a $T = T_c$, y el calor específico a dicha temperatura es aproximadamente

$$\frac{C_V(T_c)}{Nk_B} \approx \frac{15g_{5/2}(1)}{4g_{3/2}(1)} = 1.926 \quad (3.55)$$

Para el resto de las separaciones el calor específico a la temperatura crítica es, a primera vista, menor. Sin embargo, en la misma Fig. 3.6 se aprecia que el calor

3. BOSONES ENTRE CAPAS

específico para $a/\lambda_0 = 0.1$ es ligeramente mayor a 1.926, lo cual indica que existen separaciones para las cuales C_V/Nk_B es mayor que el límite teórico de 1.926 para el gas ideal de bosones libre. Con el fin de despejar esta duda, la Fig. 3.7 muestra el calor específico a $T = T_c$ en función de a/λ_0 . Se puede apreciar que $C_V(T_c/T_0)/Nk_B \approx 1.926$ para un intervalo de separaciones que va desde 0.001 hasta 0.1, donde comienza a subir, alcanzando un máximo local en $a/\lambda_0 = 0.22$, que corresponde a $T_c/T_0 = 0.684933$ y $C_V(T_c/T_0)/Nk_B = 2.14443$. Para separaciones mayores el calor específico disminuye hasta un mínimo de $C_V(T_c/T_0)/Nk_B = 0.85798$, con $T_c/T_0 = 0.590514$ y $a/\lambda_0 = 0.98$.

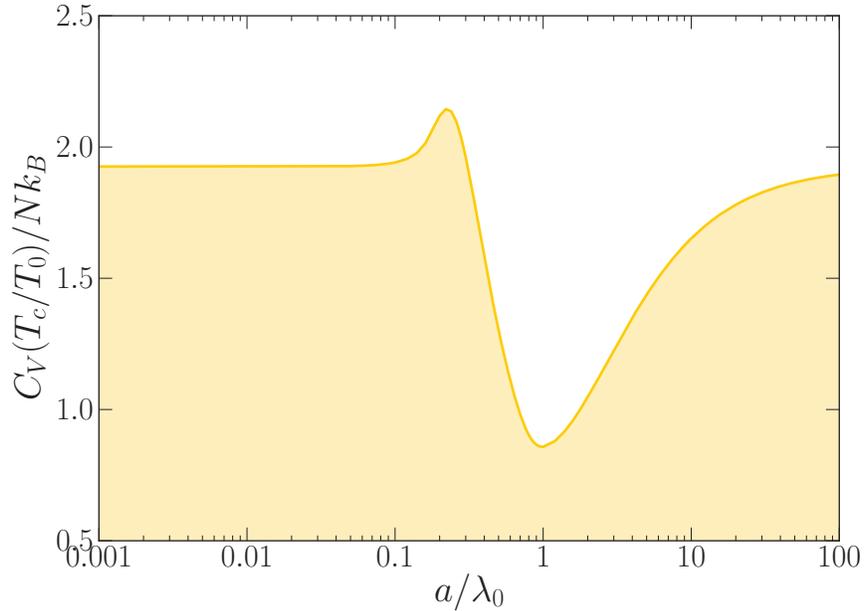


Figura 3.7: $C_V(T_c/T_0)/Nk_B$ en función de a/λ_0 , con $P_0 = 100$.

Es interesante que el mínimo de $C_V(T_c/T_0)/Nk_B$ se presenta cuando a y λ_0 son del mismo orden de magnitud, aunque esta relación puede cambiar para otro valor de P_0 . Más allá de este mínimo $C_V(T_c/T_0)/Nk_B$ crece monótonamente hacia el valor correspondiente al gas ideal libre dado por la Ec. (3.55), aunque se incrementa a una tasa menor con respecto a la que se presenta a anchos pequeños.

Anteriormente se hizo énfasis en que, para temperaturas mayores que T_c , el calor específico no decrece monótonamente hacia el valor clásico de $3/2$, como sucede con en el caso ideal del gas libre, al menos no para todo valor de a/λ_0 . Al contrario,

para ciertos valores se presentan máximos y mínimos locales, los cuales se deben al hecho de que los bosones están confinados en una estructura multicapas (como se menciona un poco más adelante). Estos máximos y mínimos locales se muestran con mayor énfasis en la Fig. 3.8 para $a/\lambda_0 = 0.05, 0.1$ y 0.5 . En esta figura se puede ver la presencia de un máximo local que sigue al pico producto de la CBE para $a/\lambda_0 = 0.05$ y 0.1 , seguido por un mínimo local a temperaturas del orden de 100 y 10, respectivamente, para después mostrar un segundo máximo local a partir del cual C_V comienza a disminuir hacia el valor clásico. Para el caso $a/\lambda_0 = 0.5$ al pico debido a la CBE sólo le sigue un mínimo para después a temperaturas mayores mostrar un máximo local, y luego entonces decrecer monótonamente a $3/2$ dado que el efecto de las barreras deltas se diluye para temperaturas extremadamente grandes.

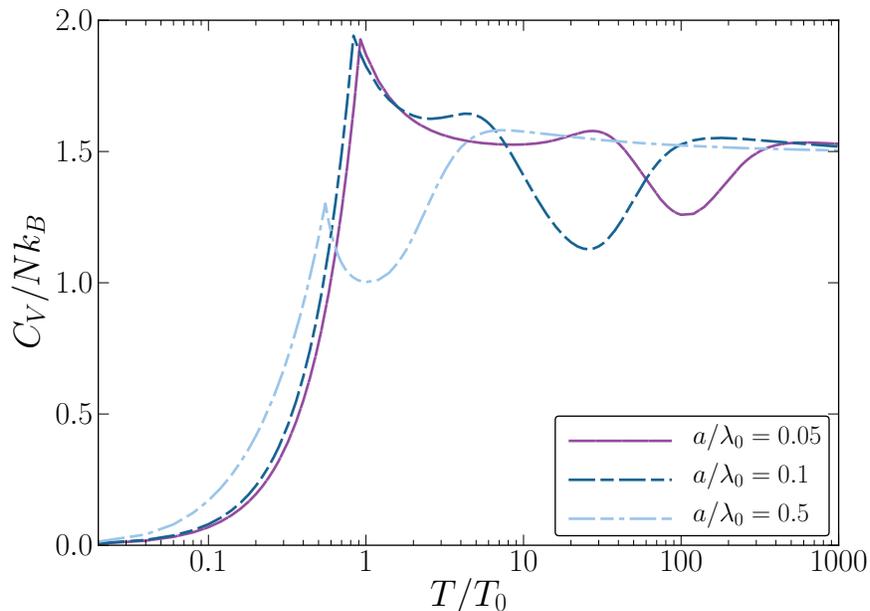


Figura 3.8: Calor específico para $a/\lambda_0 = 0.05, 0.1$ y 0.5 , con $P_0 = 100$.

Dada la evolución de las tres curvas en la Fig. 3.8, se deduce que las posiciones de los máximos y mínimos locales se recorren a temperaturas más bajas conforme se incrementa la separación entre las barreras delta. La magnitud del mínimo se reduce también. Esto lleva a que se reduzca el número de máximos locales de dos a uno, para posteriormente desaparecer tanto el máximo como el mínimo. La dependencia de $C_V / N k_B$ respecto a la separación entre deltas y la temperatura se muestra con gran

3. BOSONES ENTRE CAPAS

detalle en la Fig. 3.9. Esta figura muestra C_V/Nk_B como una superficie tridimensional que abarca la región $0.001 \leq a/\lambda_0 \leq 20$ y $0.02 \leq T/T_0 \leq 1000$. Dado el amplio rango de a/λ_0 y T/T_0 , estos parámetros se muestran en términos de sus logaritmos.

La que quizá es la característica más interesante de la Fig. 3.9 es la presencia de un valle que se produce sobre un amplio rango de separaciones, que van desde $a/\lambda_0 = 0.01$ hasta $a/\lambda_0 = 1.0$. En la región próxima a este último valor la profundidad del valle es mayor. En torno al valle se aprecian dos elevaciones que corren a lo largo de éste; más allá de la segunda elevación el calor específico se mantiene prácticamente constante o disminuyendo lentamente hacia su valor clásico: $3/2$, tanto para $a \gg \lambda_0$ y $a \ll \lambda_0$. Como es de suponerse, la presencia del valle y las elevaciones se reflejan directamente en los máximos y mínimos de las curvas mostradas en la Fig. 3.6 y la Fig. 3.8.

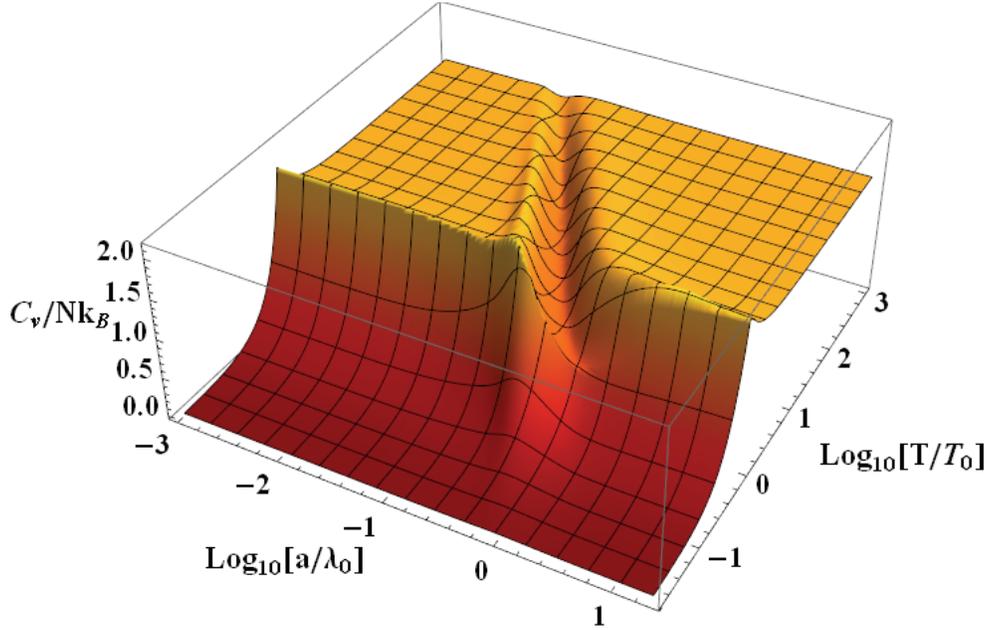


Figura 3.9: Vista tridimensional de C_V/Nk_B como función de a/λ_0 y T/T_0 .

Anteriormente se indicó que los máximos y mínimos se deben a que los bosones están confinados. La razón de la aparición de máximos aún está a discusión. Sin embargo la aparición de los mínimos se explica comparando la longitud de onda térmica de los bosones λ con el ancho de la celda unidad a , lo cual se hace en la Fig. 3.10, donde se grafica el calor específico en función de λ/a a partir de los datos mostrados en Fig. 3.9, dado que $\lambda/a = \lambda_0/a\sqrt{T/T_0}$.

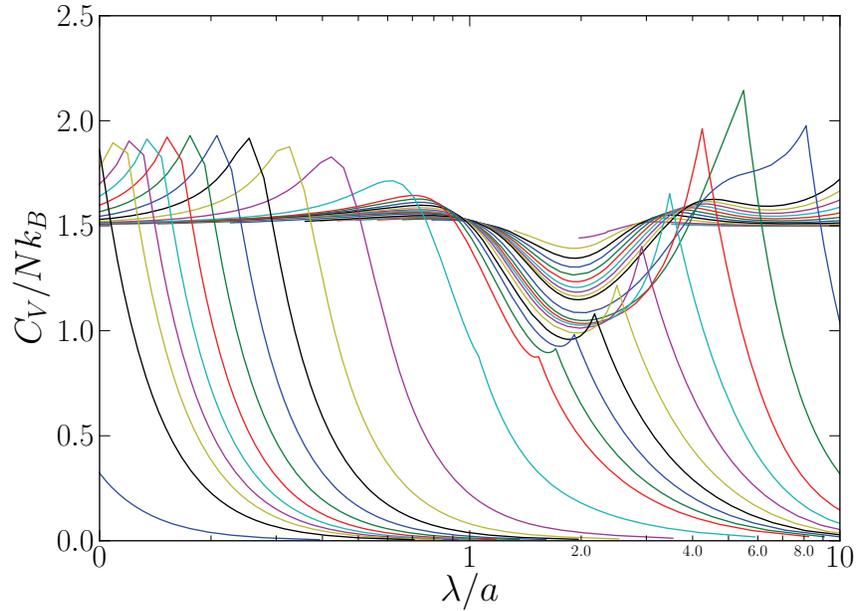


Figura 3.10: Calor específico como función de λ/a . Cada curva corresponde a una separación a/λ_0 diferente.

En estas curvas se aprecia que el mínimo ocurre cuando $\lambda \approx 2a$, es decir, cuando media longitud de onda térmica encaja en la celda unidad. En esta situación los nodos de estas ondas de de Broglie coinciden con las posiciones de las deltas, como se muestra Fig. 3.11, situación que se asemeja a la aparición de ondas estacionarias en una cuerda. Ahora bien, en el caso límite cuando $P_0 \rightarrow \infty$ los nodos de la función de onda $\psi(z)$ se ubican en la posición de las deltas, así que los bosones no pueden tunelar a través de éstas. En esta situación el sistema es bidimensional y $T_c \rightarrow 0$. Por lo tanto, cuando $\lambda \approx 2a$ el sistema se asemeja mucho a uno bidimensional, ya que los bosones en efecto no estarían presentando tunelaje ya que la amplitud de la onda de de Broglie se anularía justo en la posición de las deltas, por lo que se presenta una caída en el calor específico, el cual tiende a uno, que es el valor clásico de los sistemas bidimensionales. La magnitud de la caída en el calor específico depende la separación relativa entre deltas, así como de su intensidad P_0 , y tiende a desaparecer cuando $a \ll \lambda_0$ y $a \gg \lambda_0$, o bien cuando $P \rightarrow 0$.

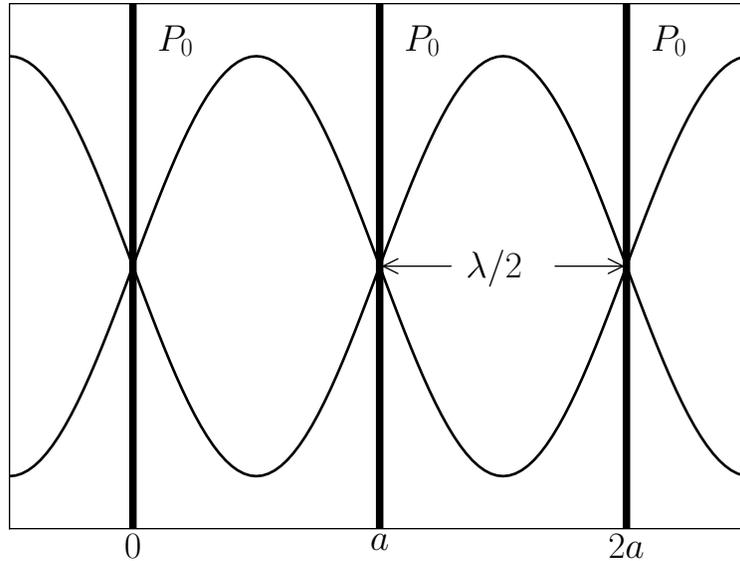


Figura 3.11: Esquema de la situación en la cual $\lambda \approx 2a$.

Dos deltas por celda unidad

Temperatura crítica

Un sistema con dos deltas por celda unidad cuenta con cuatro parámetros libres en su relación de dispersión, así que un análisis de sus propiedades termodinámicas es en principio un trabajo muy complejo. Dado el brusco cambio en el calor específico que sufren los sistemas bosónicos a su temperatura crítica, lo cual se mostró para sistemas con una delta por celda unidad, es preferible también estudiar primero la temperatura crítica y posteriormente el calor específico.

Las intensidades de las deltas P_{10} y P_{20} determinan que tan probable es el tunelaje a través de éstas, indicando de alguna manera que tan cerca de un gas tridimensional libre o de un sistema cuasi-bidimensional se comporta el sistema. Físicamente, si las barreras de potencial que representan son muy intensas los bosones están restringidos a moverse, esencialmente, en las direcciones x y y , así que lo que se tiene en este caso es un sistema casi bidimensional. Los sistemas bidimensionales tienen la característica de sus bosones no se condensan [21], lo cual puede verse como si su T_c fuera igual a cero. Por otra parte, si la intensidad de las barreras es muy pequeña los bosones pueden moverse en las tres direcciones espaciales, por lo que se tiene un gas de bosones

tridimensional, cuya T_c está dada por Ec. (3.18).

La Fig. 3.12 muestra la dependencia de T_c con respecto a dos parámetros libres: P_{10} y P_{20} mientras se mantienen dos parámetros fijos: $a/\lambda_0 = 0.1$ y $\beta_2 = 0.3$. Esto se hace con el único fin de mantener las gráficas en dos dimensiones. La separación relativa entre las deltas no es uniforme, lo cual acentúa el hecho de que el modelo, bajo estos parámetros, sólo puede estudiarse como uno con dos deltas por celda unidad y no puede simplificarse a uno equivalente con una sola delta. Lo primero que se aprecia es que $T_c \rightarrow 0$ conforme crecen P_{10} y P_{20} , lo cual indica que en efecto el modelo predice que el gas se comporta cada vez más como un gas bidimensional. Para $P_{10} \rightarrow 0$ y $P_{20} \rightarrow 0$ la temperatura crítica tiende a T_0 , lo cual se esperaba. No tiende a T_0 para todo valor de P_{20} , lo cual tiene sentido porque si una delta siempre se mantiene diferente de cero, o al menos mucho más grande, entonces los bosones siempre encontrarán alguna resistencia a moverse en la dirección z , con la correspondiente caída de la temperatura crítica. Hasta aquí, cualitativamente, el modelo reproduce lo que físicamente sucede. Sin pérdida de generalidad, cuando se estudia cómo depende T_c en función de la intensidad y otros parámetros, sólo una de las intensidades es necesaria para entender su comportamiento. Esto significa que si se estudia alguna propiedad en función de P_{20} y algún otro parámetro, los resultados serán los mismos, cualitativamente, que cuando se estudia esa misma propiedad en función de P_{10} . Cuantitativamente pueden no ser idénticos, más cualitativamente lo serán.

La Fig. 3.13a muestra la dependencia de T_c respecto a a/λ_0 y P_{20} para $P_{10} = 100$ y $\beta_2 = 0.3$. $T_c \rightarrow T_0$ en dos casos: $a \ll \lambda_0$ y $a \gg \lambda_0$, y muestra un mínimo para alguna a/λ_0 que depende fuertemente de las intensidades de las deltas. No es simétrica respecto al mínimo; además la tasa a la que se incrementa es menor para deltas con intensidades grandes.

El hecho de que $T_c \rightarrow T_0$ cuando $a \gg \lambda_0$ concuerda con que, físicamente, si la separación entre barreras es muy grande los bosones pueden moverse prácticamente en

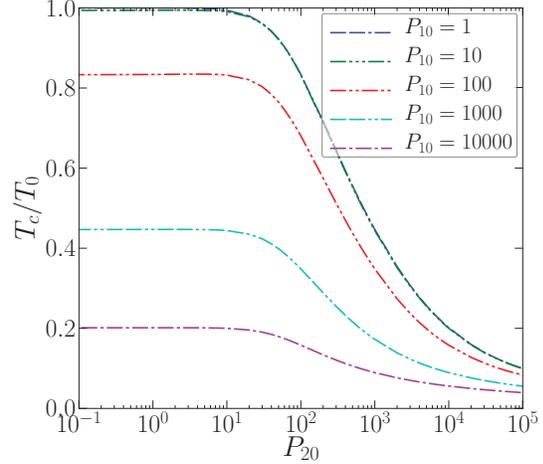


Figura 3.12: T_c en función de P_{20} para diversos valores de P_{10} . $a/\lambda_0 = 0.1$, $\beta_2 = 0.3$

3. BOSONES ENTRE CAPAS

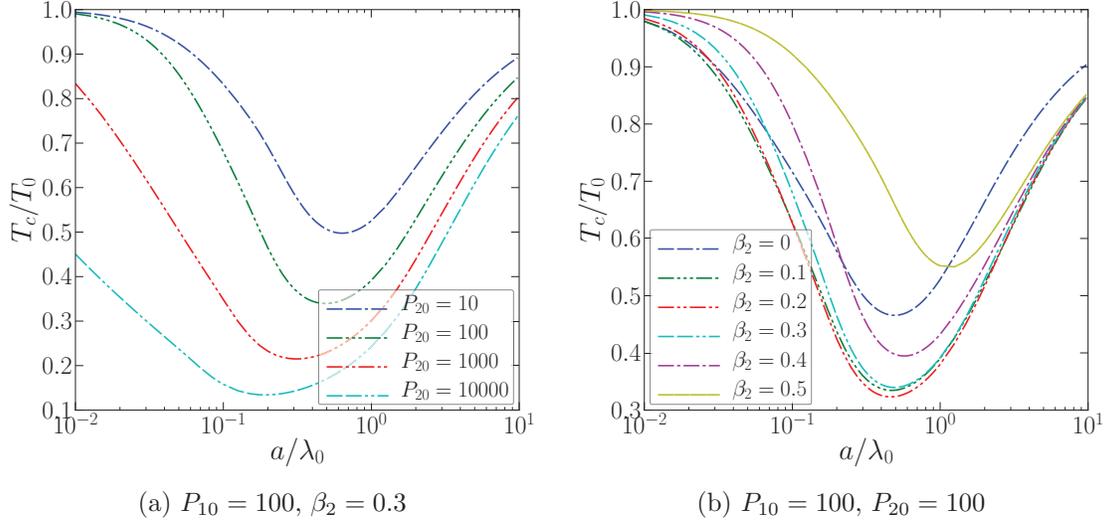


Figura 3.13: T_c en función de a/λ_0 para un sistema con dos deltas.

las tres dimensiones, por lo que se asemejan a gas libre. Para deltas de una intensidad dada la temperatura crítica es menor en comparación con deltas de menor intensidad, debido a que el efecto restrictivo de las primeras sobre el movimiento de los bosones es mayor. El que $T_c \rightarrow T_0$ cuando $a \ll \lambda_0$ es debatible, y hasta cierto grado choca con algo físicamente obvio: la separación entre planos no puede hacerse tan pequeña como se quiera. Las dimensiones atómicas reales imponen un límite inferior a la separación entre planos, i.e., entre deltas. En el modelo empleado los bosones son puntuales, en el sentido en que no interactúan entre ellos, pero el tamaño de influencia de los bosones es el de la longitud de onda térmica de éstos, λ ; λ_0 es un parámetro conveniente, porque relaciona nuestro modelo con el gas ideal de bosones de tamaño infinito, aunque para la dinámica del sistema es más importante la relación de a con λ . Sin embargo el que $a \ll \lambda_0$ no es algo físicamente imposible en principio: si se trabaja con un sistema real cuya densidad es mucho muy pequeña entonces T_0 también lo es de acuerdo a la Ec. (3.18), y como $\lambda_0 \sim 1/\sqrt{T_0}$ entonces es factible que $a \ll \lambda_0$. En contraste, $a \ll \lambda$ si la temperatura del sistema se hace lo suficientemente baja. .

Complementaria a la Fig. 3.13a es la Fig. 3.13b, que muestra como depende T_c en función de a/λ_0 también, para diversos valores de β_2 , con $P_{10} = P_{20} = 100$. El comportamiento de T_c es similar al anteriormente descrito: $T_c \rightarrow T_0$ cuando $a \ll \lambda_0$ y $a \gg \lambda_0$, y existe un mínimo para alguna a/λ_0 que, además de depender de

las intensidades, también depende de la separación relativa entre deltas (en el caso anterior también el mínimo dependía de β_2 , aunque no se notaba dado que este parámetro se mantuvo fijo). La Fig. 3.13b muestra que T_c alcanza un valor mínimo para una separación relativa $\beta_2 \approx 0.2$, y alcanza sus valores máximos cuando $\beta_2 = 0$, para $a \gg \lambda_0$ y $\beta_2 = 0.5$, para $a \ll \lambda_0$. Estos dos casos son muy interesantes ya que en éstos el sistema puede reducirse a otro con una delta por celda unidad. Sus curvas de T_c no coinciden, pues cuando $\beta_2 = 0$ se tiene que el tamaño de la celda unidad es dos veces el ancho de la celda cuando $\beta_2 = 0.5$.

Las Fig. 3.14b y Fig. 3.14a muestran como depende T_c en función de la intensidad de una de las deltas, P_{20} . La primera figura muestra curvas de T_c para algunos valores de β_2 , $P_{10} = 100$ y $a/\lambda_0 = 0.1$, mientras que la segunda contiene curvas para diferentes valores de a/λ_0 , $P_{10} = 100$ y $\beta_2 = 0.3$. En ambas figuras, al igual que en Fig. 3.12, $T_c \rightarrow 0$ cuando la intensidad de una de las deltas se hace extremadamente grande. Esto ya se ha discutido con anterioridad. Sin embargo, la disminución de T_c es realmente lenta para $a \gg \lambda_0$, como puede notarse en Fig. 3.14a. Esta lenta disminución indica que cualquier cambio de P_{20} no altera a T_c de manera considerable, por lo que la magnitud de la separación entre deltas tiene un mayor peso en la evolución de las propiedades termodinámicas. A menores valores de a/λ_0 el efecto de las barreras es mayor, y se refleja en una caída de T_c más rápida.

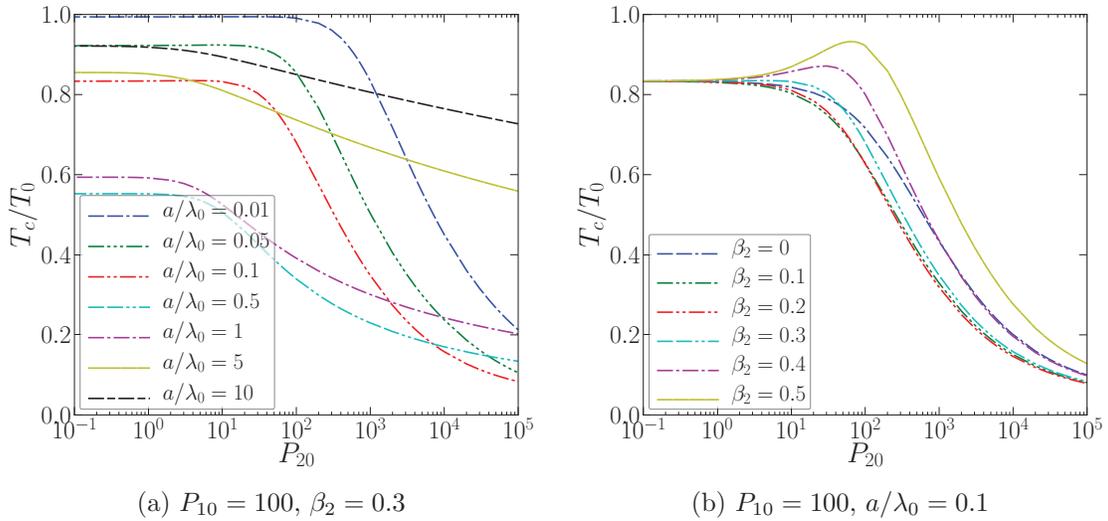


Figura 3.14: T_c en función de la intensidad P_{20} de un sistema con dos deltas.

3. BOSONES ENTRE CAPAS

Es interesante ver que la dependencia de T_c respecto a P_{20} no es monótonamente decreciente para todo parámetro del sistema. De acuerdo a Fig. 3.14b el modelo predice que existen valores de β_2 que llevan a un incremento de T_c para algún valor de P_{20} , que podría considerarse el óptimo. El mayor incremento se da cuando $\beta_2 = 0.5$, es decir, cuando se tiene un sistema con ambas deltas igualmente espaciadas (que no debe confundirse con otro que tiene una delta por celda unidad). Naturalmente, este comportamiento bien puede no existir para otros valores de P_{10} y a/λ_0 .

Las Fig. 3.15a y Fig. 3.15b muestran la dependencia de T_c respecto a β_2 , la primera para algunos valores de a/λ_0 , $P_{10} = 100$, $P_{20} = 100$ y la segunda para diversos valores de P_{20} , $P_{10} = 100$ y $a/\lambda_0 = 0.1$. Ambas figuras muestran un máximo local para $\beta_2 = 0.5$. En la Fig. 3.15a esta separación relativa hace que el sistema sea, en efecto, idéntico a uno con una delta por celda unidad en virtud de que $P_{10} = P_{20}$. Dependiendo del ancho de la celda unidad, este máximo local puede o no corresponder al máximo global de la temperatura crítica. Así, por ejemplo, para $a/\lambda_0 = 0.1$ hasta 1.0 el máximo a $\beta_2 = 0.5$ es un máximo global, mientras que para $a/\lambda_0 = 5.0$ y 10.0 no lo es. El incremento de P_{20} sobre T_c/T_0 , de acuerdo a la Fig. 3.15b, no se refleja en una disminución monótona de la magnitud del máximo local: para $P_{20} = 100$ el máximo se encuentra por encima respecto al máximo para $P_{20} = 10$.

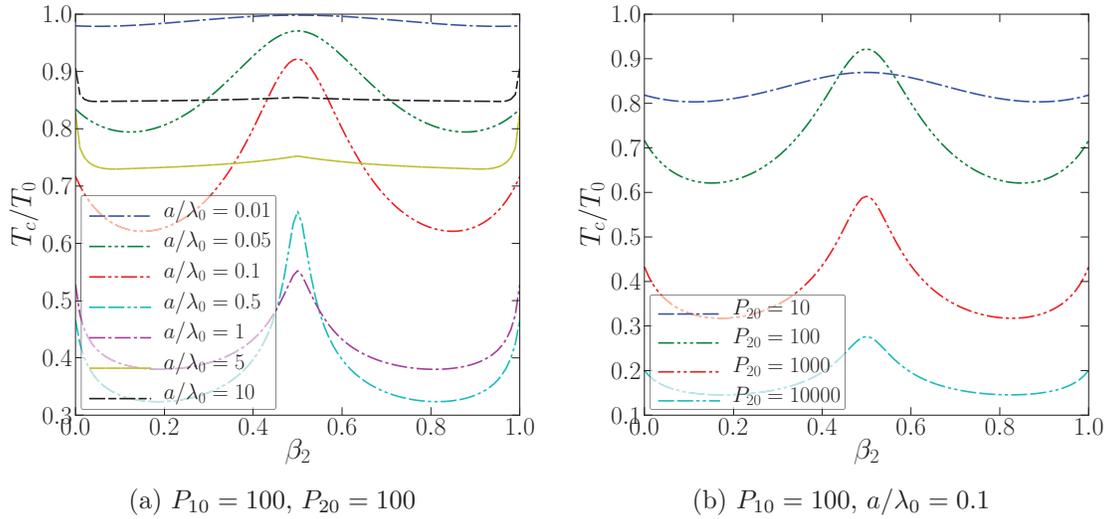


Figura 3.15: T_c en función de la separación relativa β_2 de un sistema con dos deltas.

Calor específico

El análisis del calor específico agrega un grado de libertad más al sistema: la temperatura. Sin embargo, dado que lo más relevante es estudiar como depende esta propiedad en términos de la temperatura y el cambio que sufre a la temperatura crítica, se puede poner énfasis en un análisis de su dependencia de la temperatura mientras que el resto de los parámetros del sistema se mantienen constantes.

Las figuras Fig. 3.16a y Fig. 3.16b muestran la dependencia del calor específico en función de la temperatura para diferentes valores de a/λ_0 y β_2 , respectivamente. Los valores que se han mantenido fijos son $P_{10} = 100$, $P_{20} = 1000$, $\beta_2 = 0.3$ y $P_{10} = 100$, $P_{20} = 1000$ y $a/\lambda_0 = 0.1$, respectivamente. A primera vista se deduce que la estructura del calor específico es más compleja que la del calor específico para un sistema con una delta por celda unidad, especialmente para separaciones del orden de $a/\lambda_0 = 0.5$. Esta separación es particularmente interesante, pues en este caso las deltas están igualmente espaciadas, lo que hace que el sistema se asemeje a un sistema con una delta por celda unidad, sin embargo el hecho de que las intensidades de las deltas sean diferentes basta para darle una estructura compleja al calor específico. De manera similar al caso con una delta, aquí el calor específico también muestra máximos y mínimos locales, sin contar el pico debido a la CBE, y de la misma manera estos mínimos y máximos se desplazan hacia temperaturas mas bajas conforme se incrementa el ancho de la celda unidad, hasta desaparecer por completo. Para temperaturas muy grandes C_V/Nk_B tiende a su valor clásico, $3/2$.

Además de lo anterior, el calor específico muestra un comportamiento que no se da en sistemas con una delta: puede aparecer más de un mínimo local para temperaturas mayores que T_c . La curva correspondiente a $\beta_2 = 0.5$ en la Fig. 3.16b así lo demuestra. Además se tiene un cambio bastante significativo entre la curva $\beta_2 = 0.4$ y la curva $\beta_2 = 0.5$, pues en la primera, aunque hay un indicio de un segundo mínimo local, este es muy pequeño, lo cual significa de que el cambio en la estructura del calor específico es muy rápido, y se da cuando las deltas están aproximadamente igualmente espaciadas. El resto de las curvas son muy similares en el rango de temperaturas donde se presenta el mínimo local; a temperaturas mayores comienzan a variar: para $\beta_2 = 0.3$ aparece un máximo local cerca de $T/T_0 = 200$; ocurre algo similar para $\beta_2 = 0.2$ cerca de $T/T_0 = 400$. La magnitud de $C_V(T_c/T_0)/Nk_B$ puede crecer más allá de 1.926; la razón por la cual sucede esto aún es desconocida.

La dependencia de C_V/Nk_B respecto a la temperatura para varios valores de P_{20} se muestra en la Fig. 3.17. Esta figura muestra curvas de calor específico con un solo

3. BOSONES ENTRE CAPAS

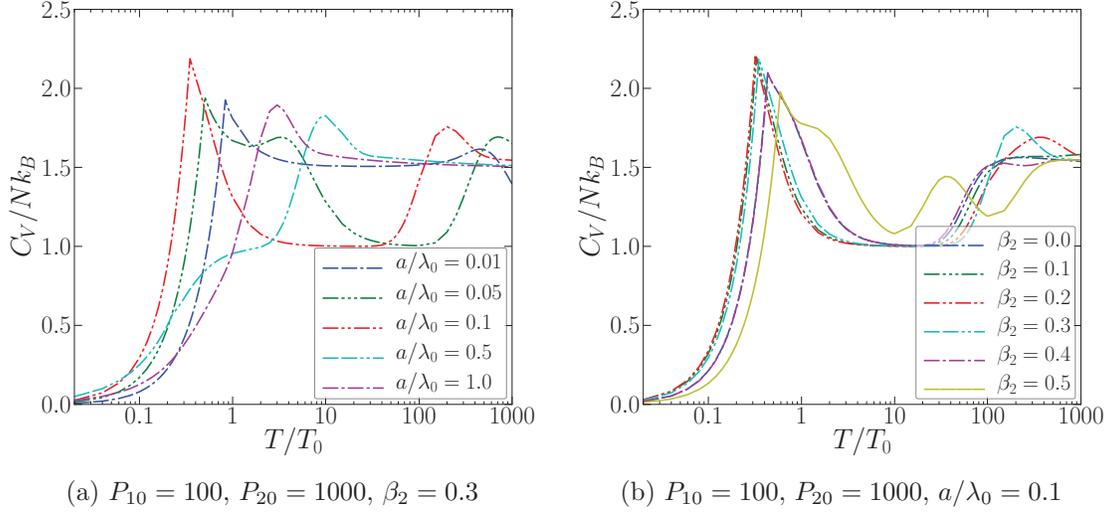


Figura 3.16: C_V/Nk_B en función de T/T_0 para diversos parámetros

mínimo local, el cual no muestra alguna tendencia a desaparecer a medida que se varía la intensidad de una de las deltas. En cambio, muestra que el mínimo se extiende sobre un rango más amplio de temperaturas, y su magnitud tiende hacia la unidad. La razón de esto es la misma por la que aparece el mínimo en el calor específico para sistemas con una delta: el sistema se encuentra en una condición de “máxima bidimensionalidad”, es decir, que la dinámica de los bosones se asemeja mucho a la de un sistema bidimensional debido a la relación entre la longitud de onda térmica λ de los bosones y el tamaño de la celda unidad, que satisface que $\lambda \approx 2a$. Precisamente el valor del calor específico en esta región de temperaturas se acerca a uno porque éste es el valor clásico de C_V/Nk_B para un gas bidimensional. El intervalo de temperatura por el cual se extiende el mínimo crece a medida que se incrementa la intensidad de las deltas, ya que esto hace que el sistema se asemeje aún más a uno bidimensional. La forma de las curvas de C_V/Nk_B no cambia sustancialmente para $P_{20} = 0.1, 1.0$ y 10.0 , pero a partir de estos valores el máximo local que sigue al pico de C_V/Nk_B tiende a desaparecer a medida que se extiende el mínimo. El calor específico a T_c/T_0 tiende a crecer primero y luego a disminuir con el incremento de P_{20} . Así, para $P_{20} = 1000$ se tiene que $C_V(T_c)/Nk_B = 2.192$, mientras que para $P_{20} = 10000$ se obtiene $C_V(T_c)/Nk_B = 1.706$, aproximadamente. Esta figura también muestra el efecto sobre la temperatura crítica de incrementar la intensidad de las deltas: el calor específico disminuye, por lo que los picos de C_V por CBE se desplazan hacia la izquierda. Existe otro

detalle muy interesante: la temperatura a la cual comienza a incrementarse el calor específico a partir de mínimo es prácticamente constante para valores grandes de P_{20} .

De la misma manera que se hizo para un sistema con una delta por celda unidad, el calor específico a la temperatura crítica del sistema con dos deltas en función del ancho de la celda unidad se muestra en la Fig. 3.18. En esencia, el comportamiento es el mismo: cuando $a/\lambda_0 \ll 1$ la magnitud de $C_V(T_c)/Nk_B$ tiende a un valor constante, que es 1.926 como en el caso del gas ideal libre. De acuerdo con esto se puede asegurar que $a \ll \lambda_0$ las barreras delta no afectan significativamente a los bosones en su interior. Para valores a/λ_0 alrededor de 0.1 alcanza un máximo cercano a 2.192, valor a partir del cual disminuye hasta alcanzar un mínimo entorno a $a/\lambda_0 = 1$. Sin embargo, en comparación con el sistema con una delta, aquí la magnitud del calor específico es menor, pues cae debajo de 0.5. Para valores mayores de a/λ_0 el calor específico también crece hacia el valor clásico de 1.926, dado que el efecto de las deltas tiende a desaparecer cuando el ancho de la celda unidad se hace muy grande.

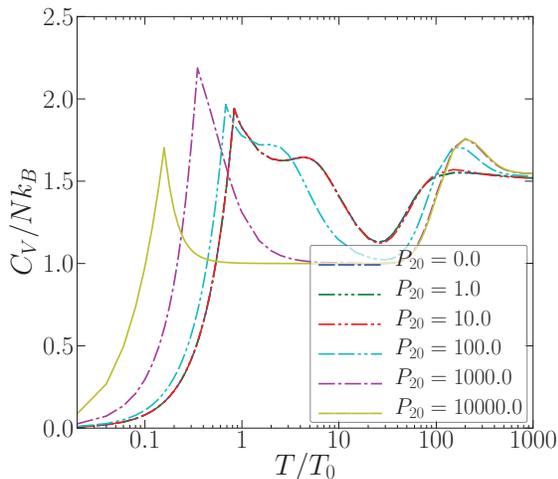


Figura 3.17: C_V/Nk_B en función de T/T_0 . $P_{10} = 100$, $\beta_2 = 0.3$, $a/\lambda_0 = 0.1$

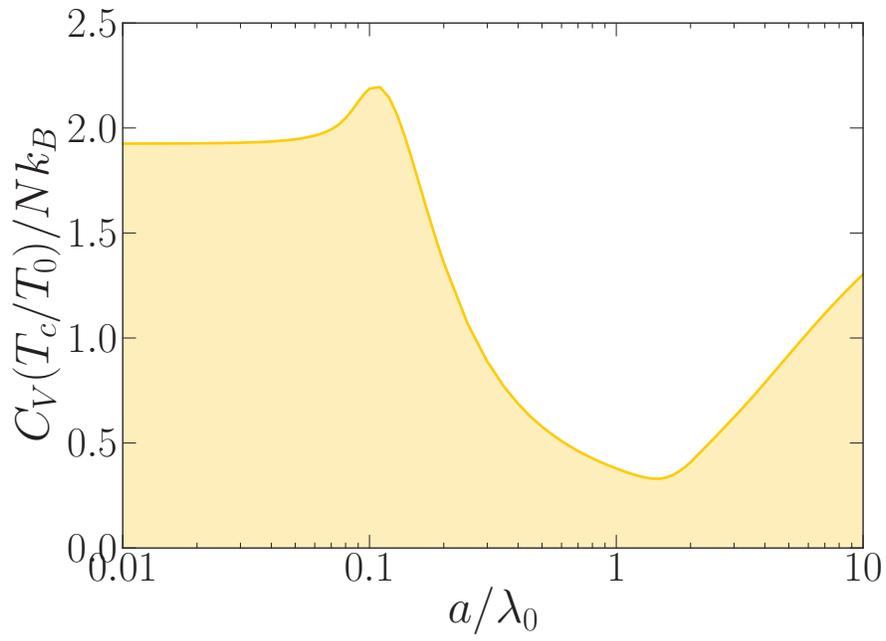


Figura 3.18: $C_V(T_c/T_0)/Nk_B$ en función de a/λ_0 . $P_{10} = 100$, $P_{20} = 1000$, $\beta_2 = 0.3$

Capítulo 4

Aplicaciones

4.1. Películas de ^4He

El helio cuatro (^4He) ha generado un gran interés debido a las propiedades inusuales que muestra, específicamente el fenómeno de la superfluidez. Este mismo fenómeno también se presenta en películas delgadas de ^4He . Dicho fenómeno consiste en la ausencia total de viscosidad en el fluido, por lo que un superfluido moviéndose en un circuito circula indefinidamente al no haber pérdidas de energía. El ^4He , en efecto, muestra tales propiedades. Sin embargo la superfluidez en éste sólo se presenta a temperaturas apenas encima del cero absoluto: la temperatura tiene que descender por debajo de los 2.17K, temperatura que se conoce como punto de transición lambda, o T_λ , después de haberse convertido en líquido a los 4.2K. A T_λ el calor específico del helio sufre un cambio abrupto. Fue el físico Fritz London en 1938 el primero en asociar el cambio en las propiedades del helio con fenómenos solamente explicados por la mecánica cuántica, proponiendo que la superfluidez era una manifestación de la condensación Bose-Einstein de los átomos de ^4He .

Cuando el ^4He se encuentra en un arreglo geométrico finito muestra propiedades muy diferentes a las que muestra cuando se encuentra en bulto. Este es el caso de películas delgadas compuestas de una, dos o hasta varias decenas de monocapas atómicas [23]. En estos arreglos la presencia del sustrato es muy importante, de acuerdo a los experimentos realizados por Bretz [23], lo que da lugar a que el calor específico muestre una estructura más compleja y diferente del punto- λ , que desaparece cuando la película está compuesta de unas pocas capas.

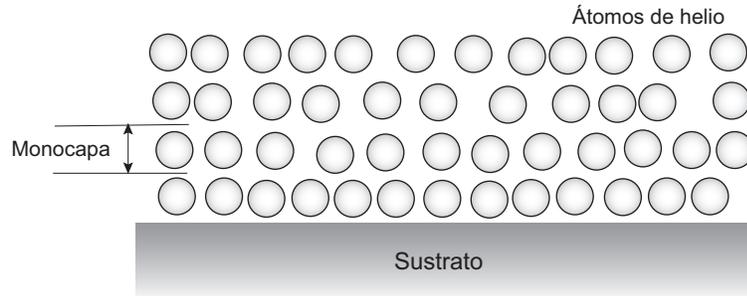


Figura 4.1: Corte transversal de una película de ^4He

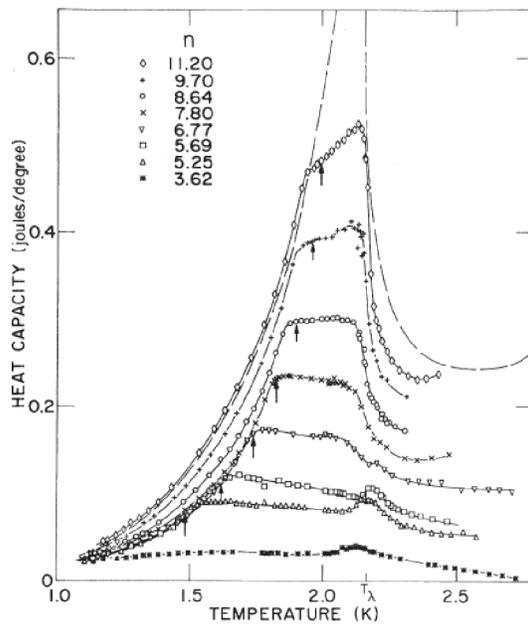


Figura 4.2: Datos del calor específico de películas de helio con diferente número de monocapas de espesor [23].

Una película delgada de ^4He es un sistema finito compuesto de varias monocapas atómicas. El número de monocapas puede ser de unas pocas hasta varias decenas. Para modelar este sistema con nuestro modelo, el cual es infinito, primero hay que considerar a partir de cuantas monocapas atómicas éste se comporta esencialmente como uno infinito; de acuerdo a la Fig. 4.2, once monocapas no son suficientes para considerar válido este argumento, ya que el calor específico no muestra un pico a 2.17K. Por otra parte, se sabe que existe una longitud de correlación [32] en el ^4He que es del orden de 70\AA , tal que cuando la película tiene un grosor mayor que esta distancia se comporta como un sistema 3D infinito. Dado que el grosor de las monocapas es aproximadamente 3.7\AA [33], la longitud de correlación corresponde aproximadamente a veinte monocapas, aunque en la práctica el ancho de las películas tenga que ser poco mayor que este número.

Para modelar la película delgada se debe considerar cual es la celda unidad, o

más explícitamente, cual es la estructura geométrica que es periódica. Claro está que es la monocapa atómica en este caso. Esta monocapa tiene un grosor a que debe ser del mismo orden de magnitud que las dimensiones atómicas, es decir, unos pocos Å. Se puede emplear este valor como el ancho de celda unidad a que nuestro modelo requiere para poder obtener resultados, que en principio podrían ser más importantes cualitativamente que cuantitativamente. Los átomos en estas monocapas se considera que pueden moverse libremente en las direcciones x y y . Sin embargo, en la dirección z los bosones pueden pasar de una monocapa a otra, aunque con cierta resistencia, es decir, que las monocapas son permeables y su grado de permeabilidad estaría modelado por la intensidad de las deltas, las cuales representarían la interfase entre capas. Al final se está despreciando cualquier interacción entre los bosones de ^4He . Al consistir todas las capas del mismo tipo de átomos entonces se usa el modelo con una delta por celda unidad.

El ^4He tiene una densidad de $\rho_{^4\text{He}} = 0.0218$ partículas por Å^3 a $T = 0$. Cuando se desprecian las interacciones entre los átomos de ^4He , considerando que es un gas ideal, su temperatura crítica es $T_0 = 3.13275\text{K}$, y tiene una longitud de onda térmica $\lambda_0 = 4.93013\text{Å}$. Así, nuestro modelo se fija el ancho a de la celda unidad como 3.7Å , mientras que la intensidad P_0 se deja como un parámetro libre que se determina para reproducir la temperatura crítica T_c conocida de las películas.

Temperatura crítica y calor específico

Se puede obtener la variación de la temperatura crítica del gas ideal de bosones entre planos como función de la intensidad de la delta. De esta manera se obtiene la intensidad P_0 que reproduce la temperatura crítica T_c experimental. Para el ^4He superfluido en bulto ésta es la temperatura del punto- λ $T_{c_{3D}} = 2.17\text{K}$, mientras que para películas de ^4He es una temperatura menor que depende del número de monocapas de acuerdo a la Fig. 4.2. La Fig. 4.3a muestra la dependencia de la temperatura crítica como función de P_0 . La línea punteada indica la temperatura adimensionalizada $\tilde{T}_{c_{3D}} = T_{c_{3D}}/T_0 = 0.692$, la cual se intersecta con la curva de temperatura crítica aproximadamente en $P_0 = 36.34$. Con este parámetro determinado se puede calcular el calor específico en función de la temperatura. La separación entre planos, también adimensionalizada, es $a/\lambda_0 = 0.75$. La temperatura crítica desciende lentamente cuando la P_0 es pequeña, y aproximadamente a partir de $P_0 = 5$ comienza a descender más rápidamente, tendiendo hacia cero en el límite en que $P_0 \rightarrow \infty$. En el terreno cualitativo, hay similitudes entre la curva de calor específico C_V calculada

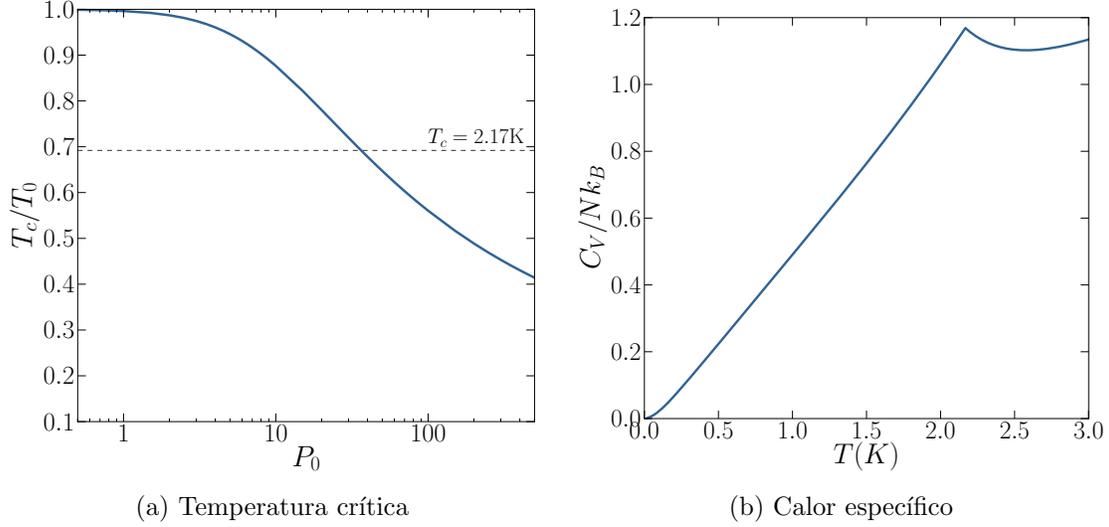


Figura 4.3: Temperatura crítica y calor específico de una película de ${}^4\text{He}$. $P_0 = 36.34$ y $a/\lambda_0 = 0.75$

y las curvas experimentales. De acuerdo a Fig. 4.3b, el calor específico calculado para películas muestra un cambio abrupto a T_λ , ya que el valor de P_0 empleado es el adecuado. Luego del pico a T_λ el calor específico alcanza un mínimo y se incrementa nuevamente. Esto mismo se puede apreciar en la curva discontinua mostrada en Fig. 4.2, la cual corresponde al calor específico experimental de ${}^4\text{He}$ líquido en bulto, cuya T_c es T_λ . Aunque esta última curva está dada en unidades MKS mientras que la primera está adimensionalizada, la comparación es válida en el aspecto cualitativo pues el calor específico por bosón C_V/Nk_B sólo difiere en una constante del calor específico en unidades MKS. Sin embargo hay diferencias sustanciales entre ambas curvas. La primera es que el calor específico calculado como función de T tiende hacia cero a una tasa lineal, a diferencia de los datos experimentales, que decaen a una tasa cúbica [31]. La segunda es que la magnitud de la caída de C_V a partir de T_λ calculado mediante el modelo, en relación a su máximo valor, es notablemente menor que la mostrada por los datos experimentales. Finalmente, los datos muestran que el calor experimental alrededor de $T = 1\text{K}$ es prácticamente cero; los datos calculados no muestran eso. Entonces hay claramente una discrepancia entre lo que el modelo reproduce y los datos empíricos, al menos en lo que respecta al calor específico.

En lo que respecta a la temperatura crítica, un primer vistazo a la Fig. 4.3a no

parece indicar que exista alguna relación simple entre la temperatura crítica y la intensidad de las deltas, simple en el sentido de que T_c este expresada explícita y brevemente por funciones elementales. Sin embargo, si se extiende el intervalo de variación de P_0 y se grafica el inverso de T_c/T_0 se observa una clara relación entre ambos datos. La Fig. 4.4 muestra que para un amplio rango el inverso de la temperatura crítica calculada prácticamente es directamente proporcional al logaritmo de P_0 . El intervalo es muy grande, pues va aproximadamente desde $P_0 = 50$ hasta 5×10^8 .

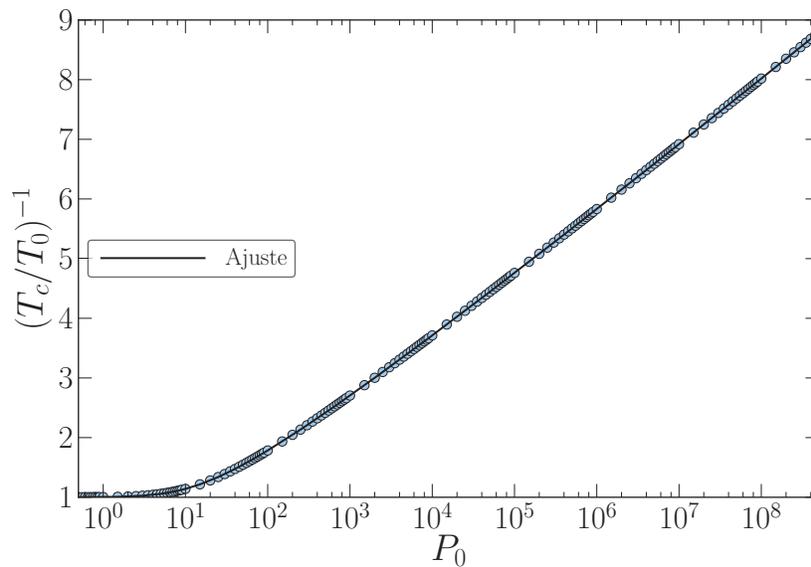


Figura 4.4: Inverso de la temperatura crítica T_c/T_0 en función de la intensidad de las deltas P_0 .

Así, para dicho intervalo la relación entre temperatura crítica e intensidad de las deltas es $[T_c/T_0]^{-1} = A \ln(P_0 + B) + C$ donde A , B y C son constantes por determinar. En el caso particular en que $P_0 = 0$ se tiene que $T_{c_{3D}}/T_0 = 1$, que corresponde a la temperatura crítica de un gas ideal de ^4He en el límite termodinámico, por lo que $A \ln(B) + C = 1$. Ajustando estos datos empleando del programa de cálculo simbólico *Mathematica* se obtiene la relación

$$[T_c/T_0]^{-1} = 0.46 \ln(25.72 + P_0) - 0.50 \quad (4.1)$$

Este ajuste se muestra en la Fig. 4.4 como una línea continua junto a los datos calculados (círculos). Naturalmente, si se cambia el ancho de la celda unidad también cambian las constantes de la ecuación.

En la Fig. 4.2 se muestran unas pequeñas flechas que resaltan la temperatura a la cual se produce un cambio notable del calor específico respecto al comportamiento del punto lambda para películas de diferentes grosores (tres a once monocapas). Posteriormente a los experimentos realizados por Bretz [23], S. Doniach sugiere que este cambio corresponde a una transición de fase termodinámica a helio superfluido [34]. Aquí se acepta esta interpretación de dicho cambio, y se denomina a la temperatura transición superfluida de las películas T_{kink} , al igual que lo hace Doniach, quien también encuentra una relación entre las temperaturas de transición y el número de monocapas de la película. Esta relación se muestra en Fig. 4.5, donde los puntos con barras de error corresponden a los puntos indicados por las flechas en Fig. 4.2, y la recta es el ajuste lineal a los datos experimentales [34]. El inverso de la temperatura está dado en términos del inverso del número de capas menos dos, $(n - 2)^{-1}$, con el fin de descartar el efecto que tiene el sustrato sobre las primeras dos capas.

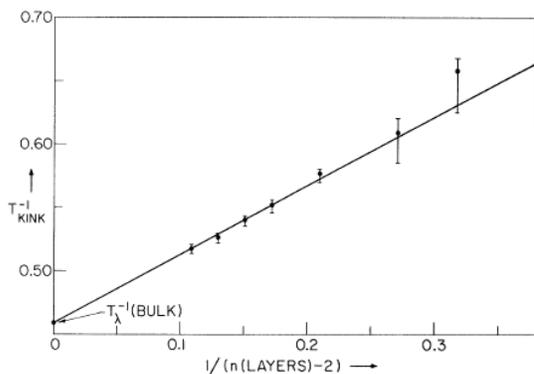


Figura 4.5: Dependencia de la temperatura de transición T_{kink} con respecto al grosor, en capas atómicas, de la película de ^4He [34]

Comparando ambas figuras se observa un comportamiento bastante similar: inverso de temperatura que es proporcional a algún parámetro. Se puede ir un paso más allá y relacionar los parámetros del sistema experimental y de nuestro modelo empleando el siguiente razonamiento: en nuestro modelo, cuando $P_0 \rightarrow \infty$, cualquier celda (o bien monocapa en este contexto) se ve completamente aislada del resto. Esto quiere decir que el sistema está compuesto esencialmente por una sola celda. Conforme disminuye P_0 los bosones de la celda actual tienen una probabilidad no nula de atravesar las barreras e interactuar con los de las celdas contiguas, cambiando las propiedades termodinámicas del conjunto. Sin embargo este alcance es finito, porque cada vez que un bosón atraviesa una barrera la amplitud de su función de onda se ve disminuida. Entonces los bosones en una celda interactúan sólo con un número finito de otras celdas. Si P_0 se hace más pequeña el número de celdas contiguas afectadas por cualquiera de ellas se incrementa, hasta que, en $P_0 = 0$, no hay barreras, y los bosones son libres.

Para las películas de ^4He , entre más monocapas atómicas la compongan los bo-

sones interactúan con más bosones en la dirección normal a las capas, asemejándose cada vez más al bulto. Como al aplicar nuestro modelo a las películas resulta que la celda unidad es la monocapa, entonces más monocapas significan más celdas que son afectadas por los bosones de otra celda, lo que en el modelo, por el argumento previamente esgrimido, no es más que una intensidad P_0 más pequeña, lo que a su vez se refleja en un incremento en el valor de T_c/T_0 predicho por el modelo, lo cual sucede también experimentalmente. Entonces, es razonable suponer que el número de monocapas que forman la película de ^4He está directamente relacionado con la intensidad P_0 de la delta. En principio, esta relación sería de la forma $1/(n-2) \propto \log(P_0 + B)$, donde n es el número de capas. El desarrollo de esta hipótesis es interesante, ya que permite relacionar a P_0 con un parámetro físico como el número de capas atómicas, que puede y ha sido determinado en los experimentos de Bretz y Finotello [35]. Aunque en la estructura geométrica de nuestro P_0 tiende a asociarse físicamente con algún tipo de interfase entre bloques de bosones, esta interfase no existe entre las monocapas de ^4He , pues las capas están compuestas sólo por átomos de helio. Sin embargo, la presencia del sustrato propicia un orden entre los bosones que se acomodan en capas en la dirección perpendicular al sustrato. Semejante orden se reproduce en nuestro modelo con los planos permeables.

Los datos de Fig. 4.4 están adimensionalizados en términos de T_0 . Para dejarlos en unidades MKS hay que dividirlos entre T_0 . Luego entonces, dado que $1/T_{kink}$ obtenido a partir de los datos experimentales es menor que 0.7, y que el número mínimo de monocapas que se toman es cinco, es recomendable reducir el intervalo de P_0 en la Fig. 4.4, para comparar ambos resultados. Reduciendo el intervalo desde $P_0 = 36.34$, que corresponde a $T_c = T_\lambda$, hasta $P_0 = 200$ se reproduce el mismo intervalo de T_{kink}^{-1} mostrado en Fig. 4.5. Además esta reducción altera la ecuación de ajuste, que se transforma en

$$T_c^{-1} = -0.059 + 0.133 \ln(14.107 + P_0) \quad (4.2)$$

La Fig. 4.6 muestra los datos calculados (círculos llenos), así como el ajuste aplicado a los mismos (línea continua), sobre el intervalo reducido de P_0 . Es inmediato que en ese intervalo T_c^{-1} tiene un comportamiento lineal respecto a P_0 .

Dado que se busca relacionar P_0 con $(n-2)^{-1}$, entonces en principio las temperaturas críticas producidas por ambos parámetros deben ser iguales, es decir, $T_c^{-1} = T_{kink}^{-1}$. La ecuación experimental para T_{kink}^{-1} es

$$T_{kink}^{-1} = m(n-2)^{-1} + T_\lambda^{-1} \quad (4.3)$$

donde m es la pendiente de la recta de ajuste y T_λ^{-1} es la ordenada al origen. Por lo

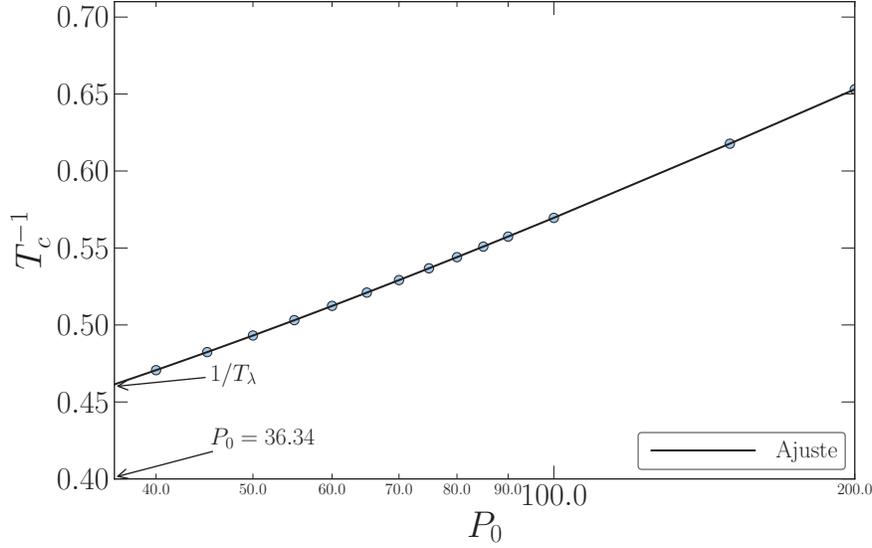


Figura 4.6: Inverso de la temperatura crítica T_c en función de la intensidad de las deltas P_0 para el intervalo reducido [36.34, 200]

tanto, una vez que se igualan T_c^{-1} y T_{kink}^{-1} , y realizan los pasos algebraicos correspondientes, se llega a que la relación entre P_0 y $(n - 2)^{-1}$ es

$$P_0 = 50.25e^{A/(n-2)} - 14.11 \quad (4.4)$$

donde $A = 7.55m$ es una constante que hay que calcular. Para el caso en que $n \rightarrow \infty$, es decir, cuando $T_{kink}^{-1} = T_\lambda^{-1}$, el valor de P_0 dado por esta ecuación es $P_0 = 36.14$. La constante m , según Fig. 4.5, es aproximadamente $m = 0.54$. Entonces la relación concreta entre P_0 y $(n - 2)^{-1}$ es

$$P_0 = 50.25e^{4.08/(n-2)} - 14.11 \quad (4.5)$$

Se puede relacionar P_0 con el número de monocapas desde otra dirección: a partir de la Ec. (4.2) se puede determinar, para una T_c dada, la P_0 que le corresponde. Dados los datos experimentales de T_{kink}^{-1} se pueden determinar las P_0 del ajuste tal que nuestro modelo reproduce una $T_c^{-1} = T_{kink}^{-1}$, y dado que se sabe a cuantas monocapas corresponde cada temperatura entonces es posible encontrar la relación entre P_0 y $(n - 2)^{-1}$. La Fig. 4.7 muestra que existe una relación lineal entre ambos parámetros, con una ligera desviación para los datos correspondientes a $n = 5.25$ y $n = 5.69$.

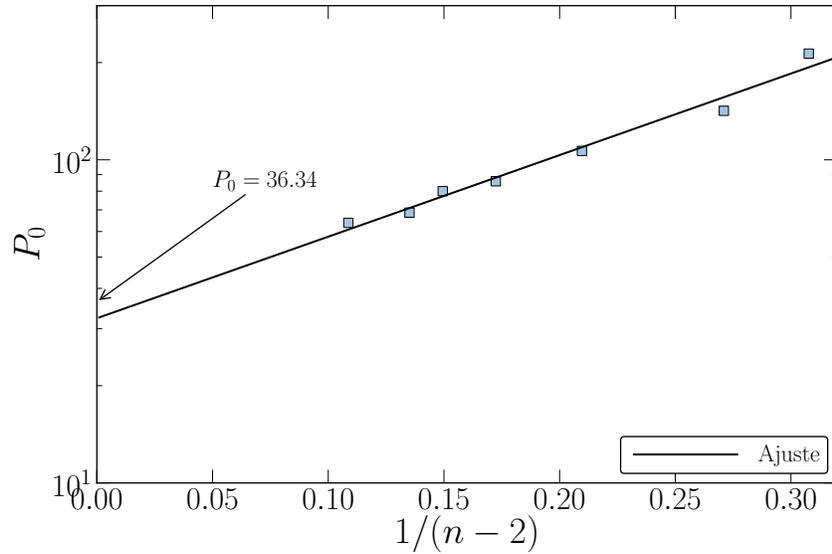


Figura 4.7: Relación entre P_0 y el número de monocapas de la película de ^4He a partir de los valores experimentales T_{kink} .

Luego entonces la relación entre P_0 y $(n - 2)^{-1}$ está dada por la ecuación

$$\ln(P_0) = 3.48 + 5.81(n - 2)^{-1} \quad (4.6)$$

por lo que

$$P_0 = 32.46e^{5.81/(n-2)} \quad (4.7)$$

Se puede apreciar que, aunque la Ec. (4.7) es proporcional a una exponencial al igual que la Ec. (4.5), ambas difieren en las constantes que las definen. Por lo tanto, el valor inicial de P_0 también varía, pues para esta última relación se tiene que $P_0 = 32.46$ cuando $(n - 2)^{-1} \rightarrow \infty$, ligeramente más alejado del valor esperado $P_0 = 36.34$ que el valor dado por la Ec. (4.5) que es $P_0 = 36.14$. La razón de esta discrepancia yace en la forma en como se calculan ambas relaciones, pues para la Ec. (4.5) se procedió a igualar la relación Ec. (4.2) con el ajuste experimental Ec. (4.3), mientras que para obtener la Ec. (4.7) se calcularon los valores P_0 correspondientes a los datos experimentales. Dado que el ajuste experimental no pasa por todos los puntos experimentales, como se aprecia en la Fig. 4.5, entonces las ecuaciones obtenidas difieren. La Fig. 4.8 muestra la diferencia entre ambas ecuaciones para el mismo intervalo de $(n - 2)^{-1}$.

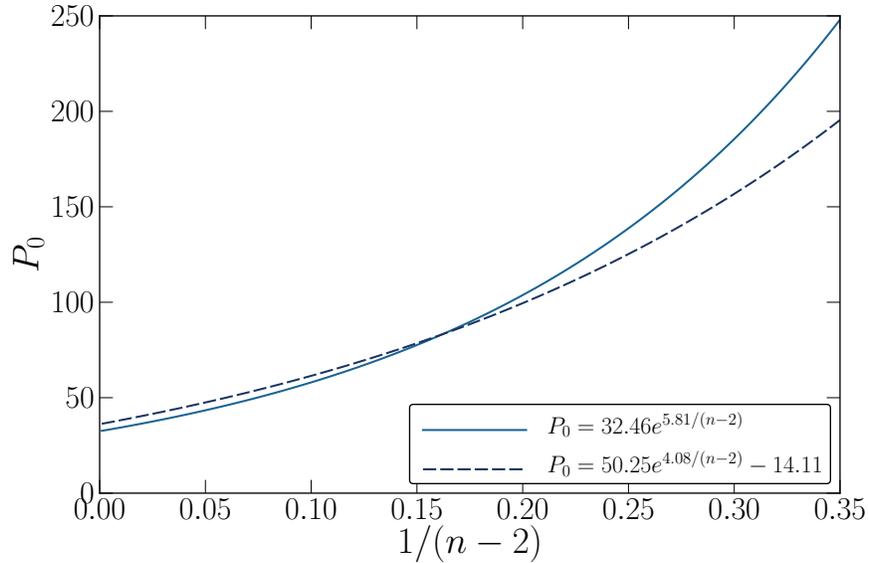


Figura 4.8: Comparación de las ecuaciones entre P_0 y el número de monocapas de la película de ^4He .

De acuerdo a esta figura, la Ec. (4.7) primero es menor que la Ec. (4.5), luego se interseca con ésta para finalmente crecer a una tasa mayor, dado que la constante en el argumento de la exponencial es mayor.

Hasta ahora se ha demostrado que puede relacionarse el parámetro P_0 del nuestro modelo con un parámetro de un sistema físico, que es el número de capas n en películas de ^4He . Sin embargo, la relación tiene implicaciones más fuertes: se está relacionando un sistema físico cuyos componentes (los bosones de ^4He) tienen interacciones entre ellos, con un modelo teórico en el cual los bosones no interactúan entre sí, y que además es infinito. También es cierto que los bosones sí interactúan con las barreras de potencial delta en nuestro modelo, así como el que entre las capas de ^4He que conforman una película delgada superfluida no existen barreras de ningún tipo: sólo espacio vacío. Los bosones de ^4He pueden interactuar con sus vecinos en una misma capa o con otros de capas adyacentes. Entonces se puede concluir, a partir de los resultados, lo siguiente: un sistema físico compuesto de bosones en un arreglo geométrico de capas, como lo son las películas delgadas de ^4He , y cuyos componentes interactúan entre ellos, y en el que no existe ninguna barrera física entre capas, es equivalente a un sistema infinito de bosones sin interacción entre ellos, entre pla-

nos permeables, en cuanto podemos reproducir su T_c como función del número de monocapas, variando la impenetrabilidad P_0 en nuestro modelo.

4.2. Superconductores de alta temperatura crítica

Los superconductores de alta temperatura (HTS por sus siglas en inglés), en particular los conocidos como cupratos, son materiales que han despertado un gran interés por sus altas temperaturas críticas y por sus estructuras ordenadas en capas entre las que se conducen los portadores de carga.

Los cupratos son básicamente tetragonales, y todos ellos tienen uno o más planos de CuO_2 . La superconductividad se produce en estos planos. Las capas de CuO_2 están siempre separadas por capas de otros átomos como Y, Ba, O, Bi, La, etc., los cuales proveen con portadores de carga a los planos CuO_2 . Por esta razón estas capas son llamadas *portadoras de carga*. En los planos CuO_2 cada ión de cobre está fuertemente ligado a cuatro iones de oxígeno, cada uno a una distancia de aproximadamente 1.0Å . Se ha sintetizado una gran cantidad de compuestos con N_l capas de CuO_2 , los cuales se muestran en Tabla 4.1. En general, la temperatura crítica T_c se correlaciona con el número N_l de planos: a un nivel de dopaje fijo, T_c se incrementa primero, alcanzando su máximo en $N_l = 3$, para luego decrecer.

El cuprato más conocido y más estudiado es el YBCO, cuya fórmula es $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$, donde x es el grado de dopaje que tiene el cuprato. La máxima T_c se alcanza cuando $x = 0.89$. La abreviación YBCO por lo general se emplea para designar al compuesto cuya fórmula es $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, y a partir de ahora se usará para hacer referencia a éste.

La estructura del YBCO se muestra en la Fig. 4.9. Se observa que la celda unidad es ortorrómbica, y tiene los parámetros de malla $a \approx 3.82\text{Å}$, $b \approx 3.89\text{Å}$ y $c \approx 11.68\text{Å}$. Las dos capas de CuO_2 están separadas por un solo átomo de Y justo a la mitad de la celda. El rol de este último elemento es muy pequeño, y puede ser reemplazado por muchos elementos lantánidos o por tierras raras sin un cambio apreciable en las propiedades superconductoras. Fuera del “emparedado” $\text{CuO}_2\text{-Y-CuO}_2$ existen planos de BaO y cadenas Cu-O. La distancia entre los átomos de cobre u oxígeno en las cadenas Cu-O es aproximadamente 1.9Å , igual a la distancia entre los mismos elementos en los planos CuO_2 .

La temperatura crítica experimental del YBCO es $T_c = 88\text{K}$. El ancho de la celda unidad es $a = 11.68\text{Å}$. Dada su estructura de capas los electrones en las capas CuO_2 se mueven fácilmente, mientras que en la dirección perpendicular a los planos lo hacen con dificultad. Así, la anisotropía de la estructura afecta las propiedades

4. APLICACIONES

Cuprato	Planos CuO ₂	T_c (K)	Abreviación
La _{2-x} Sr _x CuO ₄	1	38	LSCO
Nd _{2-x} Ce _x CuO ₄	1	24	NCCO
YBa ₂ Cu ₃ O _{6+x}	2	93	YBCO
Bi ₂ Sr ₂ CuO ₆	1	~ 12	Bi2201
Bi ₂ Sr ₂ CaCu ₂ O ₈	2	95	Bi2212
Bi ₂ Sr ₂ Ca ₂ Cu ₃ O ₁₀	3	110	Bi2223
Tl ₂ Ba ₂ CuO ₆	1	95	Tl2201
Tl ₂ B ₂ CaCu ₂ O ₈	2	105	Tl2212
Tl ₂ B ₂ Ca ₂ Cu ₃ O ₁₀	3	125	Tl2223
TlBa ₂ Ca ₂ Cu ₄ O ₁₁	3	128	Tl1224
HgBa ₂ CuO ₂	1	98	Hg1201
HgBa ₂ CaCu ₂ O ₈	2	128	Hg1212
HgBa ₂ Ca ₂ Cu ₃ O ₁₀	3	135	Hg1223

Cuadro 4.1: Abreviaciones y temperaturas críticas para algunos superconductores cupratos [36]

de transporte, y los electrones apenas pueden moverse en la dirección dada por el eje c . Aunque se desconoce el mecanismo de la formación de pares de Cooper, estos existen y participan en la superconductividad de alta T_c . Los modelos bosón-fermión de la superconductividad parten del hecho de la existencia de pares de Cooper que son considerados como bosones, coexistiendo con los electrones desapareados. Aquí es importante resaltar que, a diferencia de lo que sucede en los superconductores convencionales, donde la longitud de coherencia ξ (es decir, la distancia entre dos electrones que forman un par de Cooper) es del orden de $400\text{-}10^4 \text{ \AA}$, en los HTS la longitud de coherencia es mucho menor: es del orden de $1\text{-}5 \text{ \AA}$ en la dirección c del cristal, y de $10\text{-}80 \text{ \AA}$ sobre los planos de CuO₂. En el YBCO óptimamente dopado $\xi_{ab} = 13 \text{ \AA}$ y $\xi_c = 2 \text{ \AA}$ [36]. Una longitud de coherencia tan corta es una característica muy importante en los cupratos, y hace razonable suponer que los pares de Cooper se comportan como bosones. Con esto en consideración, se propone modelar, aunque de manera algo burda, la estructura del YBCO como una serie periódica de bicapas planas apiladas en la dirección c , con una celda unidad formada por dos zonas de conducción de ancho 5.84 \AA (zonas donde se sitúan los planos CuO₂) separadas por planos de diferente permeabilidad que simulan los planos formados por los átomos de Y, de intensidad $P_{0(Y)}$ en las posiciones $x = (n + 0.5)a$, y los formados por las

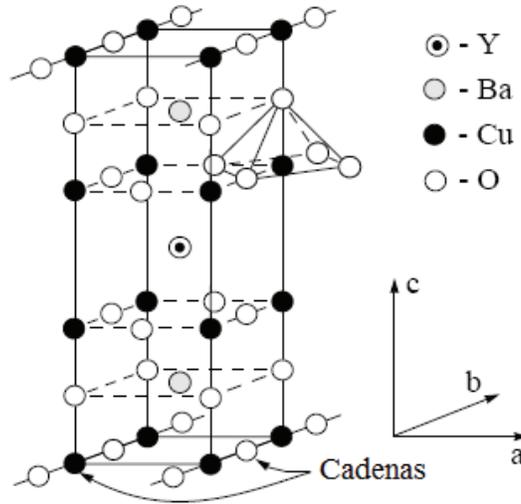


Figura 4.9: Estructura cristalino del YBCO [36]

cadenas de Cu-O, de intensidad $P_{0(CuO)}$, en $x = na$, con n entero. Luego entonces la separación relativa entre planos es $\beta_Y = 0.5$. El modelo es burdo ya que en realidad no hay conducción en toda la región comprendida entre los planos-delta, sino sólo una pequeña región en torno a los planos CuO_2 .

La temperatura de Fermi del YBCO ha sido determinada experimentalmente en $T_{F(YBCO)} = 2290K$ [37]. Si se considera que un gas de electrones libres cuya temperatura de Fermi es igual a temperatura de Fermi del YBCO experimental, cuyos electrones se aparean para formar un gas de pares de Cooper con espín cero y momento del centro de masa del par diferente de cero, y se calcula su temperatura crítica T_0 como si fuera un gas de bosones ideal, entonces se satisface la relación

$$\frac{T_0}{T_F} = 0.218 \quad (4.8)$$

Esta relación es válida sólo cuando la relación de dispersión de los portadores de carga es cuadrática, es decir, es de la forma $\varepsilon = (\hbar^2/2m)k^2$ [38], y el gas está en una región tridimensional. Desde el comienzo de este trabajo se ha hecho la suposición de que la energía de los bosones depende del cuadrado del momento k en las direcciones X y Y y forma un estructura de bandas en la dirección Z, de acuerdo con la Ec. (3.4), la Ec. (3.5) y la relación de dispersión adecuada en la dirección Z. Por lo

tanto, la Ec. (4.8) es completamente aplicable en este caso. Entonces al YBCO le corresponde una $T_0 = 499.22\text{K}$. Como la masa de los bosones, i.e., los pares de Cooper, es $m = 2m_e$, donde m_e es la masa de los electrones, entonces la longitud de onda térmica a T_0 del YBCO es $\lambda_0 = 23.5891\text{\AA}$. Luego entonces, $a/\lambda_0 = 0.495$. La temperatura crítica experimental en términos de T_0 es $T_c/T_0 = 0.176$. Así, $P_{0(Y)}$ y $P_{0(CuO)}$ son los parámetros libres del sistema.

Temperatura crítica y calor específico

Con el modelo propuesto de pares de Cooper bosónicos entre bicapas y usando los parámetros antes indicados se puede calcular T_c/T_0 para un intervalo grande de valores de $P_{0(Y)}$ y $P_{0(CuO)}$. La Fig. 4.10 muestra las curvas de nivel de T_c/T_0 para $500 \leq P_{0(CuO)} \leq 10\,000$ y $3000 \leq P_{0(Y)} \leq 150\,000$. Cada curva corresponde a una temperatura crítica particular indicado por la barra de color lateral. Así, la temperatura crítica del YBCO, que es $T_c/T_0 = 0.176$, se indica con una línea negra. A medida de que la intensidad de las deltas se incrementa el modelo predice una disminución de la temperatura crítica, algo visto con anterioridad en Sec. 3.3. En la Fig. 4.10 esto se refleja en un cambio de tonalidad de claro a oscuro.

La Fig. 4.10 muestra la infinidad de pares $P_{0(Y)}-P_{0(CuO)}$ que al sustituirlos en el modelo reproducen el valor experimental de T_c . Este resultado es consecuencia de que T_c es una superficie en el espacio tridimensional, con las intensidades de las deltas como ejes. Por lo tanto, para un plano dado $T_c = cte$ existen infinidad de puntos donde se intersecta con la superficie de temperaturas críticas. Aunque el intervalo de intensidades no permite visualizarlo ya que el intervalo de $P_{0(Y)}$ es dos órdenes de magnitud mayor que el intervalo de $P_{0(CuO)}$, se puede deducir que el perfil es simétrico respecto a la línea $P_{0(Y)} = P_{0(YCuO)}$, lo que implica que al par $(P_{0(Y)}, P_{0(CuO)}) = (p0, p1)$ le corresponde la misma T_c que al par $(P_{0(Y)}, P_{0(CuO)}) = (p1, p0)$. Esto es así porque la relación de dispersión Ec. (2.58) permanece invariante en ambos casos. Físicamente es sencillo de entender: el que la celda unidad comience donde está el átomo de Y es indistinguible a que si la celda iniciara en donde están las cadenas de CuO, puesto que el modelo consta de un sistema de longitud infinita. Por lo tanto, las curvas de nivel son simétricas.

Más allá de lo anterior, lo que se busca es analizar si el modelo es adecuado, en principio, para reproducir las propiedades termodinámicas del cuprato. Esto incluye otras propiedades como el potencial químico, la energía interna o el calor específico. Es claro que no todos los pares de intensidad tienen por qué satisfacer todas esas pro-

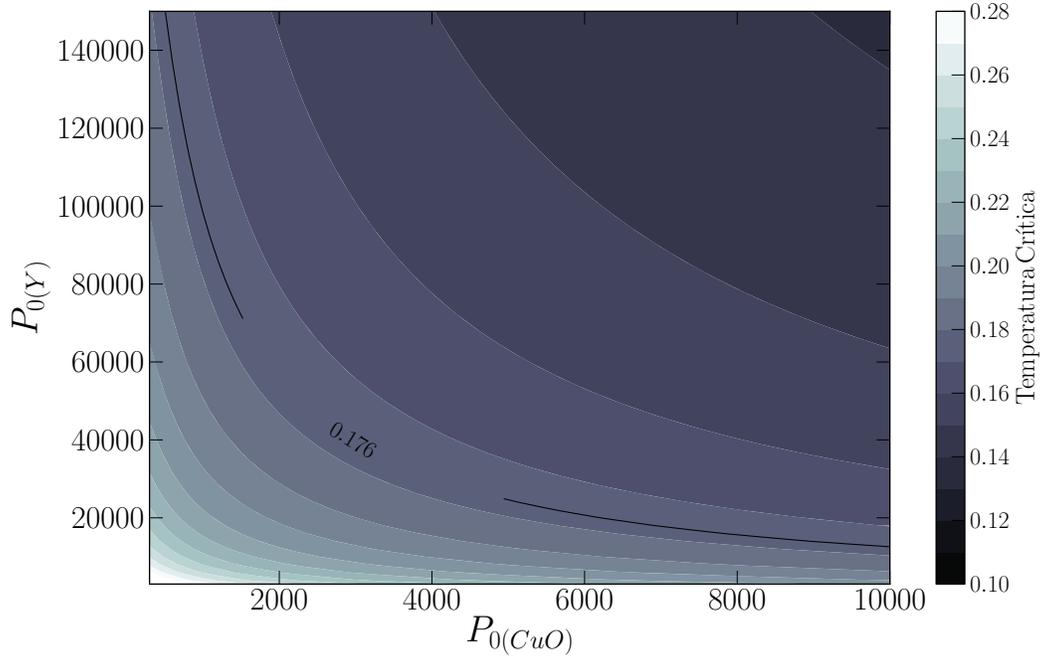


Figura 4.10: Temperatura crítica calculada del YBCO para diferentes valores de $P_{0(Y)}$ y $P_{0(CuO)}$. La curva correspondiente a $T_c/T_0 = 0.176$ está resaltada

propiedades. Además, físicamente las intensidades de las deltas, que representan el grado de impenetrabilidad de las regiones entre las capas superconductoras de CuO_2 , deben tener una intensidad fija (salvo factores externos que el modelo no toma en cuenta, como la presión externa, campos magnéticos o eléctricos externos, el espín), por lo que sólo un par $P_{0(Y)}-P_{0(CuO)}$ debe satisfacer esas propiedades. El modelo no permite deducir cuales son esas intensidades a partir del estudio exclusivo de la temperatura crítica. Así que se debe recurrir al análisis de otra propiedad termodinámica.

Otra propiedad ampliamente estudiada de los cupratos es su calor específico C_V , y existen un gran número de tablas y gráficas que muestran el comportamiento de este en función de diversos parámetros: temperatura, campos magnéticos externos, dopaje del cuprato, etc. Así como el modelo predice un perfil de la temperatura crítica como el mostrado en Fig. 4.10, también el calor específico puede ser estudiado de la misma manera. La Fig. 4.11 muestra el perfil de $C_V(T_c/T_0)/Nk_B$ para el mismo intervalo de intensidades empleado con anterioridad. Es importante notar que lo que se grafica es el calor específico a la temperatura crítica.

4. APLICACIONES

La Fig. 4.11 muestra que el calor específico del cristal disminuye para valores grandes de $P_{0(Y)}$ y $P_{0(CuO)}$. Aunque la figura no lo muestra, el calor específico también es simétrico respecto a la línea $P_{0(Y)} = P_{0(CuO)}$, por las mismas razones que lo es la temperatura crítica. Los valores más altos de $C_V(T_c/T_0)/Nk_B$ se hallan en el intervalo de $2000 \leq P_{0(CuO)}, P_{0(Y)} \leq 30000$, comprendiendo la región que la figura se muestra en color claro.

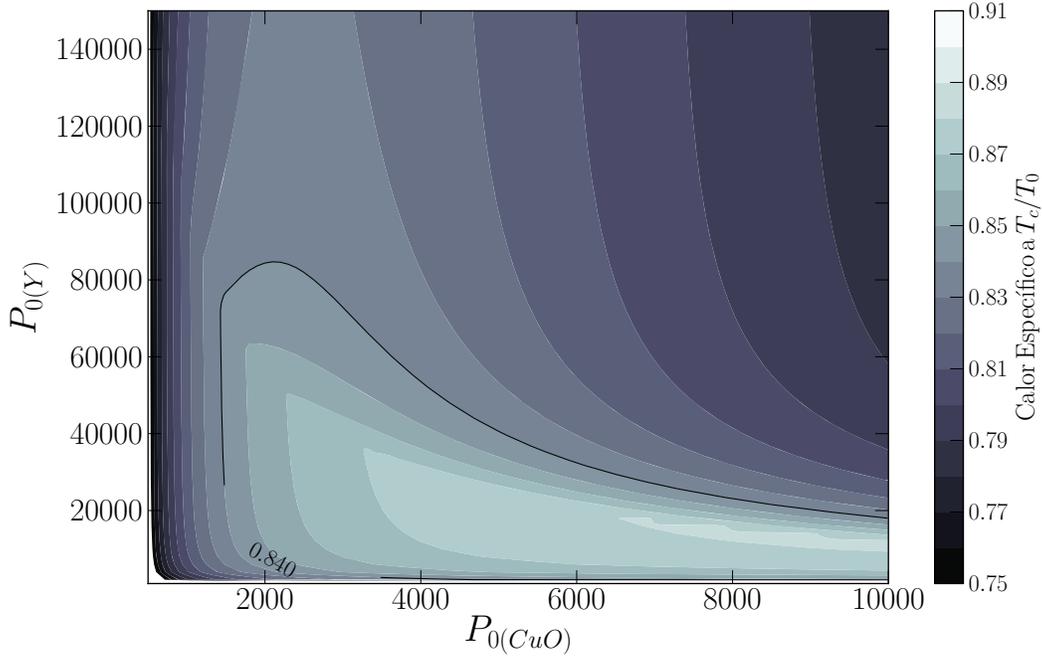


Figura 4.11: Calor específico calculado a T_c/T_0 del YBCO para diferentes valores de $P_{0(Y)}$ y $P_{0(CuO)}$. La curva correspondiente a $C_V(T_c/T_0)/Nk_B = 0.840$ está resaltada como referencia

Ahora bien, dependiendo del valor de T_c/T_0 experimental y $C_V(T_c/T_0)/Nk_B$ del cuprato pueden existir dos pares de valores $P_{0(Y)}-P_{0(CuO)}$ que al sustituirlas en el modelo reproducen los valores de las propiedades termodinámicas antes mencionados. Gráficamente el punto en donde la curva $T_c/T_0 = 0.176$ y alguna curva $C_V(T_c/T_0)/Nk_B$ se intersecan satisface ambas propiedades simultáneamente, por lo que el par $P_{0(Y)}-P_{0(CuO)}$ correspondiente es la información de interés. La Fig. 4.12 muestra la intersección entre la curva de $T_c/T_0 = 0.176$ y diversas curvas de calor específico. Sólo uno de los pares se muestra en la figura, debido a que el intervalo de valores tomados no es simétrico, sin embargo únicamente es necesario conocer uno.

Esta figura muestra además que las curvas de calor específico sufren un cambio brusco en su curvatura justo en el punto de intersección con la curva de temperatura crítica. Estos picos son el reflejo de la condensación de Bose-Einstein que se presenta a T_c . Si se visualizara la superficie de C_V/Nk_B en tres dimensiones, con el calor específico sobre el eje Z, saliendo del papel, lo que se apreciaría es una superficie con un pico que se extiende desde pequeños valores a lo largo de la curva de $T_c/T_0 = 0.176$, hasta alcanzar su máximo.

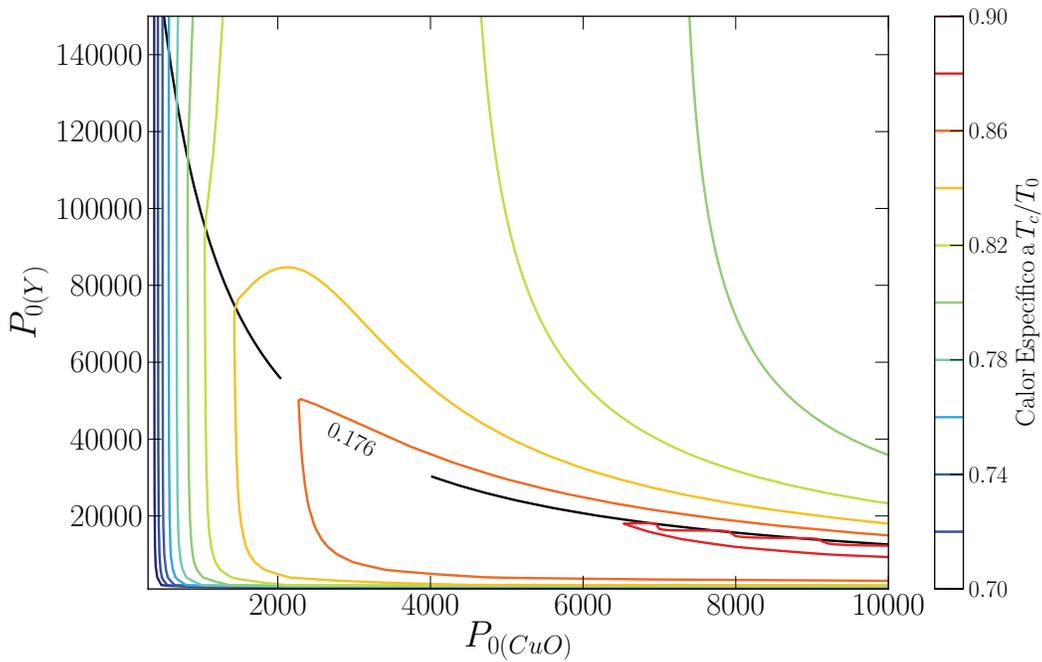


Figura 4.12: Curvas de calor específico calculado del YBCO para diferentes valores de $P_0(Y)$ y $P_0(CuO)$. Se muestra la curva correspondiente a la temperatura crítica del cuprato, $T_c/T_0 = 0.176$

Encontrar una solución analítica de los pares de intensidad es difícil. Sin embargo, gráficamente el problema se resuelve muy fácil: la información necesaria está en la Fig. 4.12. En esta figura se tienen varios niveles, y la información relativa a cada uno se encuentra en la Tabla 4.2. Esta información es aproximada, dadas las limitaciones de la solución gráfica. Una vez determinados los pares de intensidad que satisfacen tanto la temperatura crítica como el calor específico se puede proceder a graficar el calor específico en función de la temperatura, para poder comparar cualitativamente

4. APLICACIONES

C_V/Nk_B	$P_{0(CuO)}$	$P_{0(Y)}$
0.88	6533.01	18039.7
0.86	2278.61	50625.9
0.84	1443.98	74306.0
0.82	1050.22	94987.1
0.80	820.90	112909
0.78	674.622	128007.0
0.76	570.51	141087.0
0.74	489.406	152698.0

Cuadro 4.2: Pares de intensidad $P_{0(CuO)}$ - $P_{0(Y)}$ que corresponden a $T_c/T_0 = 0.176$ y diversos valores de C_V/Nk_B .

los resultados del modelo con los resultados experimentales. A partir de esta comparación se puede determinar con más certeza si el modelo es adecuado para estudiar el YBCO. Una diferencia importante entre los resultados indicará que el modelo no puede reproducir correctamente lo que experimentalmente sucede; si los resultados son equiparables dentro de cierto margen de error entonces el modelo funciona, se podrían introducir otros resultados experimentales en él y aplicarlo inclusive a otros cupratos.

A partir de los datos en Tabla 4.2 se obtienen las curvas de $C_V/Nk_B T$ en función de T que aparecen en Fig. 4.13. La temperatura está dada en Kelvin. Se reconoce de inmediato el pico en el calor específico producto de la CBE, el cual se produce alrededor de $T_c = 88K$ (no se produce exactamente debido a los errores al obtener las soluciones gráficamente).

Se ha graficado C_V/T porque las curvas experimentales generalmente están dadas en calor específico entre temperatura. Todas las curvas muestran un pico que se produce a $T_c = 88K$ es pequeño en comparación con la magnitud del calor específico. La tasa de incremento, en la mayoría de ellas, no es lineal, pero tampoco es mayor que la unidad, porque si éste fuera el caso entonces la curvas serían cóncavas, ya que el intervalo de temperaturas satisface que $T/T_0 < 1$. En cambio sí son convexas, por lo que se sigue que la tasa de incremento del calor específico respecto a la temperatura es menor que uno. Para temperaturas mayores que T_c C_V/T disminuye continuamente hasta cero sin mostrar algún cambio considerable, como volver a incrementarse.

Hasta este punto se ha obtenido el calor específico de los bosones, que en el cristal estarían representando a los electrones que se encuentran apareados con otros,

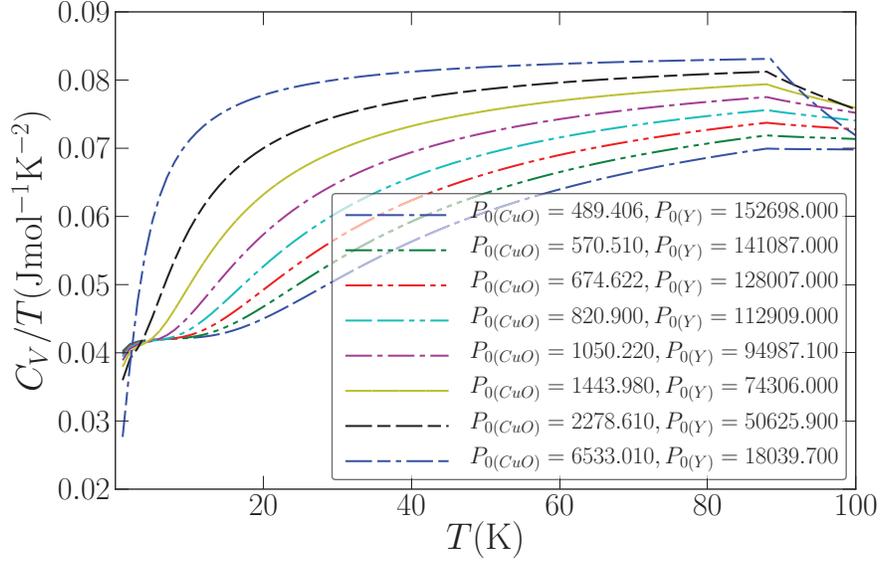


Figura 4.13: Curvas de calor $C_V/Nk_B T$ calculado del YBCO para diferentes valores de $P_0(Y)$ y $P_0(CuO)$

formando pares de Cooper, y que se asume como los responsables de la superconductividad. Esta contribución, aunque propiciada por electrones, es diferente al calor específico electrónico C_e , que es una de las cuatro partes que conforman el calor específico total del cuprato. Las otras tres partes las conforman el calor específico de la red C_{lat} , también llamada contribución fonónica, el calor específico magnético C_m , debido a centros paramagnéticos y el calor específico hiperfino C_{hyp} , debido a momentos nucleares, es decir

$$C = C_{lat} + C_e + C_{mag} + C_{hyp} \quad (4.9)$$

Nuestro modelo no considera ninguna interacción magnética ni nuclear, así que se consideran como nulos en esta tesis. Sin embargo, se tiene que considerar la contribución fonónica dado que es la mayor de todas, y en un cuprato es especialmente importante dadas las altas temperaturas de superconductividad, por lo que $C_{lat} \gg C_e$. La contribución fonónica se puede determinar a partir del modelo de Debye para los sólidos, es decir, que

$$C_V = 3Nk_B s f_D(\Theta_D/T) \quad (4.10)$$

donde Θ_D es la temperatura de Debye, f_D es la función de Debye, dada por

$$f_D(y) = \frac{3}{y^3} \int_0^y \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx \quad (4.11)$$

y s es el número de átomos en la celda unitaria. Para el YBCO $s = 13$ y su temperatura de Debye es $\Theta_D = 410\text{K}$ [37]. El calor específico de la red C_{lat} se muestra en la Fig. 4.14

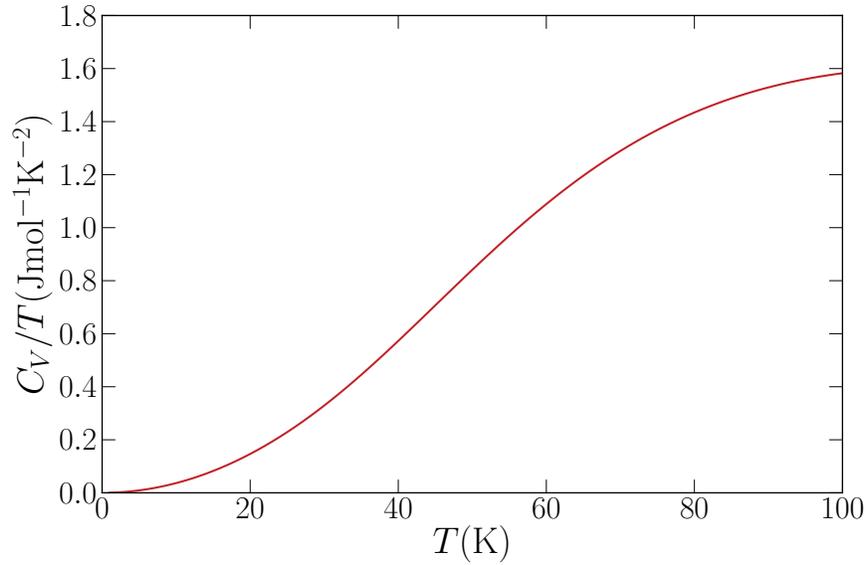


Figura 4.14: Calor específico de la red cristalina C_{lat} del YBCO.

Una vez que el calor específico de la red C_{lat} ha sido calculado entonces se puede hacer una estimación del calor específico total al sumar el calor específico bosónico de nuestro modelo, más el calor específico fonónico C_{lat} del modelo de Debye. Esto se hace con el fin de poder comparar los resultados con el calor específico real del YBCO, el cual se muestra en la Fig. 4.17. Esta figura muestra que existe una anomalía en C en una región cercana a $T_c = 88\text{K}$, cuya magnitud es bastante pequeña en comparación con la magnitud total del calor específico, pues es de aproximadamente $40\text{mJ mol}^{-1}\text{K}^{-2}$. Los resultados de nuestro modelo muestran un calor específico bosónico del mismo orden de magnitud, como se ve en Fig. 4.13, así que en principio la adición de la componente bosónica y la fonónica del calor específico podría producir una anomalía del mismo orden de magnitud. Sin embargo, en la Fig. 4.15, la cual muestra

el calor específico total, no se aprecia alguna anomalía cerca de $T_c = 88\text{K}$; sólo se aprecia un incremento con respecto a C_{lat} .

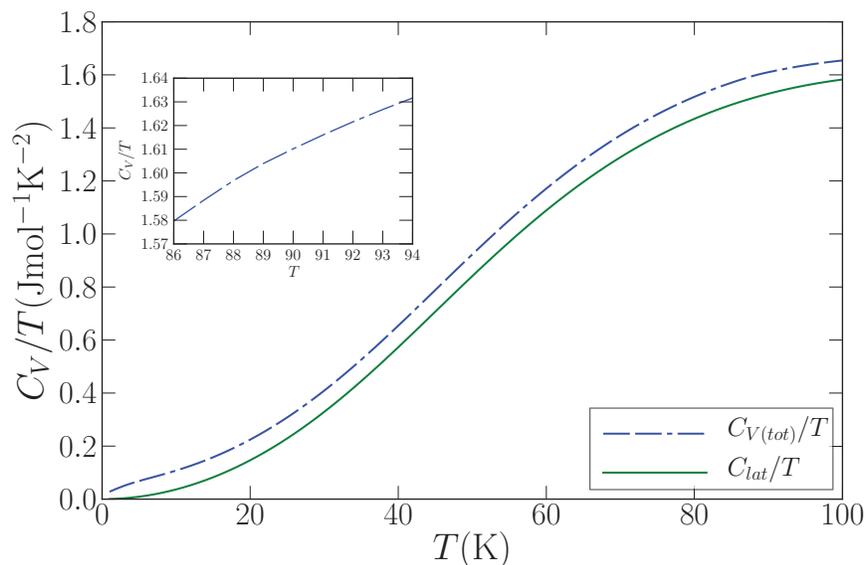


Figura 4.15: Calor específico total calculado para el YBCO. La línea punteada es el calor específico total, mientras que la línea sólida es el de la red cristalina C_{lat} . La gráfica interna muestra el calor específico total en la región cercana a $T_c = 88\text{K}$, donde no se observa el efecto de la anomalía que está presente en el calor específico bosónico, ya que tiene una magnitud mucho menor a la comprendida por la escala mostrada. $P_{0(\text{CuO})} = 6533.010$, $P_{0(\text{Y})} = 18039.700$.

La razón por la que no se aprecia anomalía alguna es porque la magnitud de C_V/T bosónico se incrementa lentamente, a partir de temperaturas que van desde pocos Kelvin aproximadamente 20K, dependiendo de la magnitud de las deltas, y a que la magnitud del pico resultado de la CBE es de una magnitud muy pequeña. La magnitud de la anomalía en los datos experimentales, así como el intervalo de temperaturas a la que se produce, sólo podría reproducirse con el modelo de KP si C_V/T creciera rápidamente y la magnitud del pico fuera mucho más grande que los mostrados en Fig. 4.13.

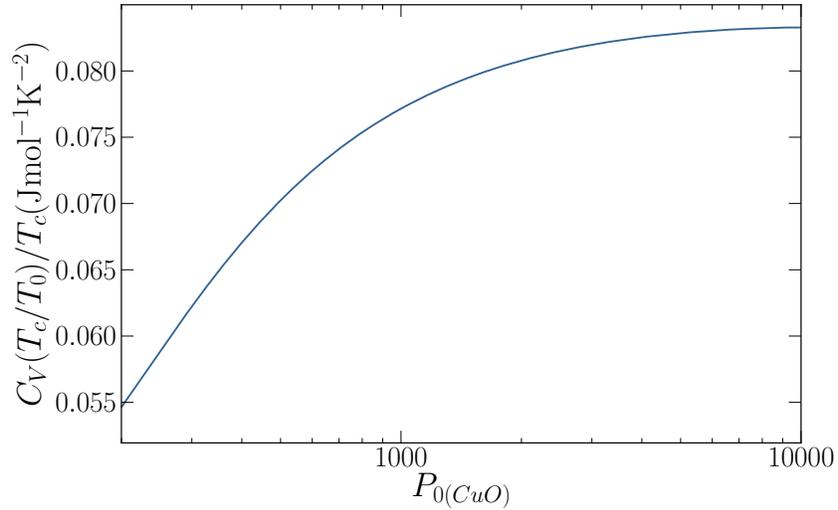


Figura 4.16: Calor específico calculado a $T_c = 88\text{K}$ en función de $P_0(\text{CuO})$, tal que la temperatura crítica del modelo de KP, para el par $P_0(\text{CuO})-P_0(\text{Y})$ es igual a T_c , i.e. los pares corresponden a la curva $T_c/T_0 = 0.176$ mostrada en Fig. 4.10.

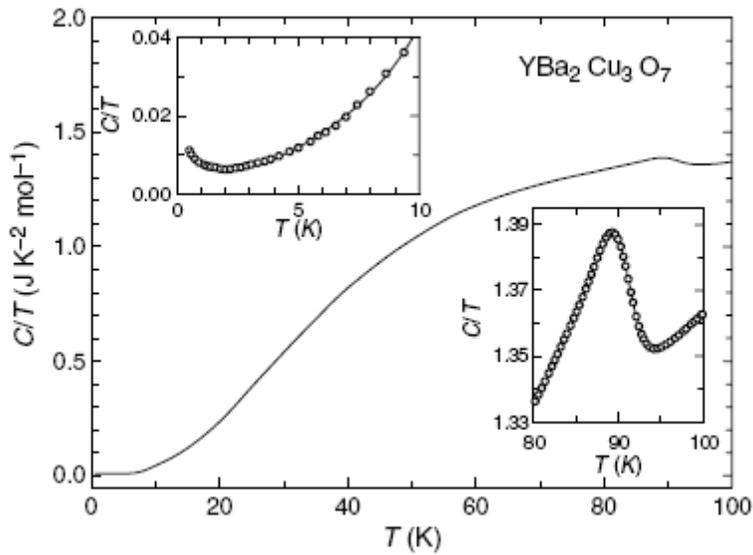


Figura 4.17: Calor específico de una muestra policristalina de YBCO con baja concentración de impurezas paramagnéticas. La figura interna inferior muestra la anomalía en el calor específico a T_c [39] [40]

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo se ha hecho un análisis del espectro de energías de partículas cuánticas ideales dentro de un potencial periódico unidimensional del tipo de deltas de Kronig-Penney, con una o dos deltas por celda unidad. Los espectros consisten de series de bandas permitidas, que son energías que el sistema puede tomar, alternadas con bandas de energía prohibidas. Para el caso de una delta por celda unidad, la estructura es relativamente simple y ampliamente discutida en la literatura científica; la estructura de las bandas es la mostrada en la Fig. 2.9. Para una separación dada entre las deltas, el ancho de las bandas permitidas y la separación relativa entre ellas, depende enteramente de un parámetro: la intensidad P_0 de las deltas. Cuando $P_0 \rightarrow 0$ el espectro se vuelve continuo ya que las bandas permitidas se acercan y se recupera el espectro de una partícula en una caja infinita. Cuando $P_0 \rightarrow \infty$ las bandas se adelgazan hasta convertirse en líneas del espectro discreto de una partícula en una caja de ancho finito.

Para sistemas con dos deltas, discutido en detalle por primera vez aquí, la estructura de bandas se vuelve más compleja dado que depende de cuatro parámetros libres: las intensidades de las deltas, la separación relativa entre ellas y el ancho de la celda unidad. La variación únicamente de la intensidad de las deltas P_{10} y P_{20} influye directamente en la separación relativa entre las bandas de energía permitidas consecutivas, así como en el ancho de las mismas. La distribución de las bandas es la siguiente: a mayor intensidad de las deltas las bandas se hacen más angostas y se separan más una respecto a la otra, mientras que a menor intensidad se ensanchan y tienden a juntarse. La complejidad de la estructura se debe principalmente a la separación relativa β_2 entre deltas y al ancho a de la celda unidad. La separación

5. CONCLUSIONES

relativa β_2 altera la estructura de tal forma que produce una simetría sobre ésta con respecto a $\beta_2 = 0.5$; es decir, que toda energía permitida satisface $\bar{\varepsilon}(\beta_2) = \bar{\varepsilon}(1 - \beta_2)$, con $\beta_2 \leq 0.5$ y el resto de los parámetros fijos. Las superficies de energía muestran además máximos locales, en un número igual al número de la banda en la que se encuentran: la primera banda tiene un máximo local, la segunda dos y la tercera tres, como se puede ver en las Fig. 2.11 y Fig. 2.15. La aparición de máximos locales es una consecuencia de la forma matemática de la relación de dispersión. Sin embargo, también están fuertemente relacionados con la estructura de bandas del sistema en los casos límites.

Al ser las deltas las que dan la estructura de capas al sistema, la forma de las bandas depende de las intensidades relativas entre las deltas en la celda unidad. En particular la forma de los máximos de cada banda cambia. Cuando la relación entre intensidades es constante, los máximos de las bandas son más pronunciados conforme la intensidad de las deltas crecen, hasta formar un espectro discreto donde los máximos son picos cuando P_{10} y P_{20} tienden a infinito, i.e., las bandas se convierten en niveles. Bajo estas condiciones los máximos corresponden a la intersección de los niveles de energía de una caja con ancho $\beta_2 a$ y otra con ancho $(1 - \beta_2)a$, tal como lo muestra la Fig. 2.12. Para valores finitos de P_{10} y P_{20} , los máximos de cada banda se producen en torno a los mismos valores de β_2 correspondientes al caso con deltas de intensidad infinita. Por otra parte, si una de las deltas se mantiene finita y la otra crece indefinidamente el espectro es también discreto, pero aún así los máximos son suaves, en el sentido de que allí $(\partial\bar{\varepsilon}/\partial\beta_2) = 0$ para la banda donde se haya el máximo; además los niveles de energía nunca se intersectan. En el caso anterior ni siquiera existe esta derivada, porque los puntos donde se intersectan dos niveles de energía consecutivos, puntos dados por la Ec. (2.63), corresponden a la intersección de dos hipérbolas; los máximos se producen en dichos puntos, así que se sigue que no existe la derivada parcial de la energía respecto a β_2 .

Además de la estructura de bandas de los potenciales unidimensionales de KP con una y dos deltas por celda unidad, también se han estudiado las propiedades termodinámicas de sistemas de bosones entre capas simuladas con potenciales de KP con una y dos deltas por celda unidad en una dirección mientras que son libres en las otras dos direcciones, en especial la temperatura crítica y el calor específico. Para sistemas con una delta por celda unidad la temperatura crítica T_c/T_0 sólo depende de dos parámetros libres: el ancho de la celda unidad y la intensidad de las deltas. Los resultados obtenidos indican que, para un ancho de celda unidad a/λ_0 dado, T_c/T_0 es una función monótonamente decreciente de P_0 , hasta que en el límite $P_0 \rightarrow \infty$ se

hace cero. Esto es así porque en este límite las barreras se hacen impenetrables y el sistema pierde la tridimensionalidad que se recupera sólo en el límite de separación infinita entre las barreras. Este comportamiento se muestra en la Fig. 3.5b. Si se mantiene la intensidad P_0 de las deltas fija, y se varía el ancho de la celda unidad, la temperatura crítica tiende a T_0 en dos límites: $a \ll \lambda_0$ y $a \gg \lambda_0$. El primer límite corresponde al caso en que la longitud de onda térmica del bosón es mucho muy grande en comparación con el ancho de la celda unidad; el segundo corresponde a barreras de potencial tan separadas que dejan de tener efectos apreciables sobre la dinámica de los bosones, por lo que el sistema se parece a un gas ideal de bosones libres. Sin embargo, para valores intermedios de a/λ_0 la temperatura crítica muestra un mínimo dependiente de la intensidad de las deltas: a mayor P_0 la magnitud del mínimo disminuye y se desplaza a un valor menor de a/λ_0 .

Por otra parte, se encontró que el calor específico de bosones entre planos de igual penetrabilidad e igualmente espaciados muestra una estructura no monótona para temperaturas T mayores que T_c . Como en el caso del gas ideal libre de bosones, C_V muestra un pico a la temperatura crítica, cambio abrupto que es atribuible a la CBE. Para $T < T_c$, y cuando $a \ll \lambda_0$ y $a \gg \lambda_0$, C_V/Nk_B es proporcional a $T^{3/2}$. El efecto de la estructura de capas se refleja en que C_V no decrece monótonamente a su valor clásico de $3/2$ cuando T se hace muy grande. En cambio puede mostrar algunos máximos y/o un mínimo locales; la temperatura a la cual se producen estos máximos y mínimos depende del ancho de la celda unidad: a mayor ancho, la temperatura se reduce y la magnitud del mínimo decrece, tal como se aprecia con gran detalle en Fig. 3.9.

El calor específico y la temperatura crítica de bosones entre bicapas periódicas son más complejos que en sistemas con una delta. Esto es así porque ahora se tienen cuatro parámetros libres en el caso de la temperatura crítica, y cinco para el calor específico. No obstante, ciertos comportamientos de T_c y C_V se conservan, bajo ciertas restricciones. Así, cuando la separación relativa β_2 y el ancho de la celda unidad se mantienen fijos, T_c/T_0 puede ser una función monótonamente decreciente de P_{10} y P_{20} , o quizá no: esto depende de la separación relativa entre deltas, como se aprecia en las Fig. 3.14a y Fig. 3.14b. Esta última figura muestra que el máximo de las curvas T_c/T_0 se incrementa a medida que las barreras tienden a estar igualmente espaciadas, i.e., $\beta_2 = 0.5$, y cuando P_{20} tiende a P_{10} , lo que indica que el máximo es resultado de que el sistema tiende a aquel con una delta por celda unidad bajo estas condiciones específicas. En los casos en que el T_c/T_0 es una función monótonamente decreciente de P_{10} y P_{20} , si sólo una de ellas se mantiene constante y la otra se hace

5. CONCLUSIONES

crecer indefinidamente es irrelevante: la celda unidad se convierte en una caja de paredes infinitas y los bosones son forzados a desplazarse sobre un plano, así que no se condensan, por lo tanto el modelo predice que $T_c \rightarrow 0$, como se ve en Fig. 3.12. Si se mantiene constante P_{10} (o bien P_{20}) y β_2 , dejando T_c/T_0 en función del ancho de celda unidad a/λ_0 , la curva muestra un mínimo para algún valor de a/λ_0 que depende tanto de $P_{10}(P_{20})$ como de β_2 , y se desplaza a valores inferiores de T_c/T_0 y a/λ_0 cuando se incrementa la intensidad de las deltas. En el caso en que se fijan P_{10} y P_{20} , entonces T_c/T_0 , también en función de a/λ_0 , muestra un mínimo cuyo comportamiento es similar al caso anterior, sin embargo este mínimo disminuye primero a partir de $\beta_2 = 0$ y después, a partir de cierto valor β_2 , se incrementa. Por otra parte, para T_c/T_0 en función de β_2 , se observa que la temperatura crítica muestra un máximo local a $\beta_2 = 0.5$ para cualquier combinación de P_{10} , P_{20} y a/λ_0 , o bien se puede decir que se producen dos mínimos locales: uno entre $\beta_2 = 0$ y $\beta_2 = 0.5$ y otro entre $\beta_2 = 0.5$ y $\beta_2 = 1.0$, todos estos puntos correspondiendo a casos en que las deltas están igualmente espaciadas, tal como se muestra en Fig. 3.15a y Fig. 3.15b. El efecto de a/λ_0 , cuando P_{10} y P_{20} se mantienen fijas, es el de alterar la diferencia relativa entre los máximos y mínimos: cuando $a/\lambda_0 \rightarrow 0$ la diferencia es pequeña, se incrementa a medida que la separación aumenta, y después de alguna a/λ_0 comienza a disminuir nuevamente. Esto es debido a que en los casos límite $a/\lambda_0 \rightarrow 0$ y $a/\lambda_0 \rightarrow \infty$ se tiene que T_c/T_0 tiende a la unidad, lo que hace que el efecto de la separación relativa entre barreras sea mínimo. En el caso en que se mantiene constante a/λ_0 y $P_{10}(P_{20})$ se obtienen los mismos máximos y mínimos locales, se comportan de manera similar, aunque la magnitud del máximo siempre disminuye debido a que el incremento de $P_{10}(P_{20})$ hace que la temperatura crítica tienda a cero.

En lo que respecta al calor específico de sistema con dos deltas por celda unidad, la evolución de este como función de la temperatura es aún más compleja que en sistemas con una delta. El pico en el calor específico a la temperatura de transición T_c se sigue presentando, y para temperaturas muy grandes C_V/Nk_B tiende al valor clásico $3/2$. Sin embargo, para valores dados de P_{10} , P_{20} y a/λ_0 pueden aparecer uno o dos mínimos locales en el calor específico para temperaturas mayores a T_c . La presencia de más de un mínimo depende especialmente de la separación relativa, y se produce cuando las deltas tienden a estar igualmente espaciadas, i.e., $\beta_2 = 0.5$, cuando el sistema se asemeja más a uno con una delta por celda unidad. Este es el comportamiento más distintivo del calor específico cuando se tienen dos deltas por celda unidad. Si se varían los parámetros del sistema, el calor específico puede variar de manera similar al del sistema con una delta: cuando se aumenta la separación

a/λ_0 , la temperatura a la que se producen los mínimos disminuye; si se incrementa la magnitud de $P_{10}(P_{20})$, los mínimos se extienden sobre un intervalo más grande de temperaturas.

Se ha aplicado nuestro modelo a dos sistemas físicos cuya estructura geométrica consiste de un arreglo de capas: películas de ^4He y al cuprato YBCO, que es un tipo de superconductores de alta temperatura crítica. El ^4He es un bosón por lo que la dinámica de las películas, así como sus propiedades termodinámicas están dadas por la estadística de Bose-Einstein. Los cupratos son compuestos cerámicos cuya transición al estado superconductor se debe al apareamiento entre electrones, lo cual lleva a la producción de pares de Cooper, que suponemos se comportan como bosones.

Las películas de ^4He están compuestas por varias monocapas atómicas, que pueden ir desde una o dos capas hasta varios cientos. El número de capas es importante ya que las propiedades termodinámicas están directamente relacionadas con este parámetro. En particular, la temperatura crítica de superfluidez en bulto $T_\lambda = 2.17\text{K}$ cambia. Para modelar las películas se emplea nuestro modelo con una delta por celda unidad. La celda unidad consiste de una monocapa, pues es la estructura que se repite periódicamente, las cuales tienen un grosor de aproximadamente $a = 3.75\text{\AA}$. El parámetro libre de nuestro modelo es la intensidad P_0 de las deltas. Al calcular la temperatura crítica del modelo con el ancho de la celda unidad dado, en función de P_0 , se determinó una $P_0 = 36.34$ que reproduce la temperatura crítica T_λ . Una vez determinada P_0 se calculó el calor específico. Los resultados calculados muestran que el pico en C_V debido a la CBE está presente, pero la magnitud del pico, así como la tasa a la que cambia C_V es muy diferente a la que muestra la información experimental.

En lo que respecta a la temperatura crítica, se puede establecer una relación entre la intensidad de las deltas con el número de capas atómicas en una película de ^4He . Esta relación parte del hecho de que T_c^{-1} depende linealmente de $\log(P_0 + a)$, donde a es una constante, y de que los datos experimentales [34] muestran una relación lineal entre las temperaturas de transición T_{kink}^{-1} y $(n - 2)^{-1}$, donde n es el número de monocapas de ^4He . Estas relaciones se muestran en Fig. 4.5 y en Fig. 4.6, respectivamente. Dado que, cuando $n \rightarrow \infty$ se tiene que $T_{kink}^{-1} = T_\lambda^{-1}$, y cuando $P_0 = 36.34$, $T_c = T_\lambda$, la relación debe satisfacer que $P_0(n \rightarrow \infty) = 36.34$. La relación que se obtuvo entre ambos parámetros es $P_0(n) = 50.25e^{4.08/(n-2)} - 14.11$. Desde otra perspectiva, para cada T_{kink} se puede determinar una P_0 a partir de la relación entre P_0 y T_c^{-1} . Dado que para cada T_{kink} se conoce el correspondiente número de monocapas, entonces se puede determinar la relación entre P_0 y n mediante un ajuste

5. CONCLUSIONES

numérico. La relación obtenida por este método es $P_0 = 32.34e^{5.81/(n-2)}$.

El establecer una relación entre P_0 y el número de capas de ^4He implica, hasta cierto punto, relacionar un sistema ideal e infinito, como lo es nuestro modelo, con un sistema real, finito y en el cual existen interacciones entre partículas. Es una propuesta interesante, además, porque las interacciones en el sistema real se sustituyen por interacciones con barreras de potencial en nuestro modelo.

También se ha modelado un HTS tomando como base las características físicas de un cuprato muy importante: el YBCO. El modelo usado es el que tiene dos potenciales delta por celda unidad, uno para al átomo de itrio, $P_{0(Y)}$ y otro para representar a las cadenas de CuO, $P_{0(\text{CuO})}$, estando ambos planos igualmente espaciados, ya que la distancia entre el itrio y las cadenas de CuO es la mitad del ancho de la celda unidad. Estos dos parámetros son los únicos libres para el cuprato: la separación relativa β_Y y el ancho de la celda unidad a están determinados por el cuprato: $\beta_Y = 0.5$, $a = 11.68\text{\AA}$. Asimismo, se han calculado las propiedades termodinámicas de interés: temperatura crítica y el calor específico. A partir de los resultados numéricos se puede constatar que las propiedades termodinámicas del sistema presentan cierta simetría respecto a los valores de $P_{0(Y)}$ y $P_{0(\text{CuO})}$. Esto es así debido a la longitud infinita del sistema que se estudia con el modelo de capas de KP, lo cual se refleja en una relación de dispersión que permanece invariante si se permutan las intensidades de las deltas. La simetría se da a lo largo de la recta $P_{0(Y)} = P_{0(\text{CuO})}$. Las curvas de calor específico revelan que, efectivamente, la CBE se produce para las parejas de intensidades que satisfacen que $T_c/T_0 = 0.176$, es decir, la temperatura crítica experimental del YBCO. El fenómeno se refleja como picos en las curvas de calor específico, algo característico de los sistemas de bosones. Los mayores valores de C_V/Nk_B corresponden a intensidades en el intervalo de $2000 \leq P_{0(\text{CuO})}, P_{0(Y)} \leq 30000$.

Cuando se graficó el calor específico bosónico por unidad de temperatura, C_V/T en función de la temperatura, para algunas de las parejas de $P_{0(Y)}-P_{0(\text{CuO})}$, se notó que la magnitud de éste resultó ser mucho menor en comparación con el valor experimental, que es aproximadamente $C_{V_{exp}}/T_{c_{exp}} = 1.39\text{JK}^{-2}\text{mol}^{-1}$, pues el valor calculado es del orden de $0.1\text{JK}^{-2}\text{mol}^{-1}$. Por lo tanto se hizo evidente la necesidad de incluir la contribución de la red cristalina al calor específico total, el cual se calculó mediante el modelo de Debye. Aunque después de sumar los calores específicos de la red más la parte de los pares de electrones pudimos identificar la transición superconductor con una transición por CBE de los pares de Cooper, con una magnitud de un 20% de error respecto al valor experimental, las formas de las curvas calculadas y experimental

sugieren que se necesita una mejora a nuestro modelo para que sus resultados sean más representativos de la información experimental.

Para entender las diferencias entre los cálculos de nuestro modelo y los experimentales, es importante reconocer las limitaciones que tiene el mismo. Nuestro modelo, en primer lugar, no considera las interacciones entre los bosones. Esto es importante ya que la aplicación del modelo a las películas delgadas de ^4He despreja interacciones que existen entre los bosones de dichas películas. En cuanto a la aplicación a superconductores cupratos, el modelo considera las interacciones electrón-electrón sólo para la formación de pares de Cooper y que nos conduce a hacer la suposición importante: la existencia previa de pares de Cooper en el cuprato a la temperatura $T_0 = 499.22\text{K}$. A decir verdad, esta suposición es poco realista ya que los pares de Cooper pueden romperse, o no formarse, a esta temperatura tan alta; el cálculo se debió hacer considerando que sólo una fracción de electrones participa en la superconductividad, i.e, se aparéa formando pares de Cooper. Una menor fracción implica una temperatura de Fermi menor, y al mismo tiempo una T_0 más pequeña y más realista. El modelo merece ser mejorado en este aspecto. El cálculo del calor específico total considera únicamente la aproximación armónica usando la expresión de Debye, la cual es inexacta ya que existe una contribución anarmónica [41] que lo modifica. El uso de una relación de dispersión lineal para las energías de los bosones se puede tomar como una posible mejora, ya que un gas de bosones bidimensional puede condensarse siempre y cuando tenga una relación lineal energía-momento. Por último, no discutimos mecanismo alguno por el cual se formen pares de Cooper dentro del cuprato, es decir, partimos de la existencia de los pares de Cooper independientemente del mecanismo microscópico que los genere.

La aplicación de nuestros resultados para el gas de bosones entre capas, para modelar sistemas reales como películas de helio 4 y cupratos, nos lleva a concluir que es más adecuado para modelar películas de ^4He que para modelar cupratos: pudimos reproducir la temperatura crítica experimental de las películas en función del número de monocapas, variando la impenetrabilidad P_0 de nuestro modelo. Además, es interesante la manera en que se relacionó un sistema finito y con interacciones como son las películas de ^4He con un sistema infinito sin interacciones, pero bajo la influencia de un potencial delta periódico. Es un buen modelo para representar cualitativamente la dinámica de un sistema de bosones periódico con pocos parámetros, pero requiere mejoras si se pretende emplear para modelar sistemas más complejos y, por supuesto, para análisis cuantitativos.

Apéndice A

Polilogaritmos

La función polilogaritmo es una función especial definida por la suma

$$g_s(z) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^s} \quad (\text{A.1})$$

Esta definición es válida para todos los números complejos s y z tal que $|z| < 1$. Fuera de este rango puede ser definida a través del método de *extensión analítica* [42]. Para el caso en que $s = 1$, el polilogaritmo se reduce al logaritmo natural, pues $g_1(z) = -\ln(1 - z)$

Los polilogaritmos tienen la propiedad de generar otros polilogaritmos al integrarlos o derivarlos, de acuerdo a la fórmula

$$g_{s+1}(z) = \int_0^z \frac{g_s(u)}{u} du \quad (\text{A.2})$$

lo cual tiene como consecuencia que

$$z \frac{d}{dz} g_{s+1}(z) = g_s(z) \quad (\text{A.3})$$

Los polilogaritmos aparecen en el campo de la Física Estadística en forma integral a partir de la integración de la ecuación del número de partículas de un gas ideal de bosones. Bajo esta forma son conocidos como las *Funciones de Bose-Einstein* [31], y están definidas como

$$g_v(z) = \frac{1}{\Gamma(v)} \int_0^{\infty} \frac{x^{v-1}}{z^{-1}e^x - 1} dx \quad (\text{A.4})$$

donde $\Gamma(v)$ es la función Gamma de Euler. Estas funciones sólo convergen para $\text{Re}(v) > 0$ y $|z| < 1$. Cuando $z = 1$ la función polilogaritmo se reduce a la función Zeta de Riemann, cuya definición es

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s} \quad (\text{A.5})$$

Esta definición es válida para $\text{Re}(s) > 1$ de acuerdo con definición de $g_s(z)$, y también se puede extender fuera de ese rango por extensión analítica.

Apéndice B

Metodos de Integración Numérica

En cursos de Cálculo el concepto de integral se enseña a través de las sumas de Riemann, de tal manera que el concepto geométrico de la integral queda claramente establecido. Posteriormente, se pide aplicar esta formulación para calcular una aproximación numérica de una integral mediante un programa, con el fin de comparar resultados. Los algoritmos para implementar estas sumas tienen algo en común: exigen dividir el intervalo de integración en subintervalos igualmente espaciados, i.e. emplear puntos igualmente espaciados. La regla del Trapecio y la regla de Simpson siguen esta pauta.

Aunque estos métodos son muy fáciles de implementar no son usados como una herramienta de trabajo por los investigadores. Esto es así porque existen mejores técnicas para calcular integrales que ofrecen una mayor precisión y exactitud por menos esfuerzo. Dos de particular interés son la Cuadratura de Gauss-Legendre y la Cuadratura Tanh-Sinh.

B.1. Cuadratura de Gauss-Legendre

La cuadratura de Gauss-Legendre [43] pertenece a una clase de técnicas de integración numérica, llamada *Cuadratura Gaussiana*. Este tipo de técnicas se caracterizan porque aproximan la integral definida de una función mediante una suma ponderada de valores de la misma función evaluados en puntos específicos dentro del intervalo

de integración. Es decir,

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i) \quad (\text{B.1})$$

donde los valores ω_i son los factores de peso y x_i son las abscisas dentro del intervalo de integración. La elección de los pesos y abscisas depende enteramente del tipo de regla de cuadratura empleada y, a diferencia de otros métodos de integración, las abscisas no están igualmente espaciadas.

Por definición, Ec. (B.1) solo es aplicable para integrales sobre el intervalo $(-1, 1)$. Para integrales sobre intervalos arbitrarios se emplea el cambio de variable

$$x = \frac{(b+a)t + (b-a)}{2} \quad (\text{B.2})$$

mediante el cual $\int_a^b f(x)dx$ se convierte en

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{(b+a)t + (b-a)}{2}\right) dt \quad (\text{B.3})$$

Por lo tanto, para evaluar una integral sobre un intervalo arbitrario se emplea la siguiente fórmula:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^n \omega_i f\left(\frac{(b+a)t_i + (b-a)}{2}\right) dt \quad (\text{B.4})$$

Como se ve, bajo el cambio de variable los factores de peso sufren un rescalamiento igual a $(b-a)/2$, mientras que los valores t_i son las abscisas que yacen en el intervalo $(-1, 1)$.

La Cuadratura de Gauss-Legendre de n puntos aproxima la integral de una función tomando como abscisas a las n raíces del Polinomio de Legendre de grado n , $P_n(x)$, y una serie de pesos dados por

$$\omega_i = \frac{2(1-x_i^2)}{(n+1)^2 P_{n+1}'(x_i)} \quad (\text{B.5})$$

Esta técnica es muy efectiva para calcular integrales de funciones acotadas y continuas, y requiere de muy pocos pares abscisa-peso para garantizar una gran precisión. Sin embargo, no es un método recomendable para funciones con singularidades en los extremos del intervalo de integración o que oscilen continuamente; si se aplica este esquema a este tipo de funciones, un incremento en el número de pares abscisa-peso no implica a una mejor aproximación [44]. Para este tipo de integrales, se emplean otro tipo de técnicas, especialmente la Cuadratura Tanh-Sinh.

B.2. Cuadratura por transformación exponencial doble

La Cuadratura por transformación doble exponencial [45], comúnmente conocida como Cuadratura Tanh–Sinh, aproxima la integral definida de $f(x)$ de la siguiente manera

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \sum_{n=-\infty}^{\infty} \omega_n f(x_n) \quad (\text{B.6})$$

Las abscisas y pesos que se emplean para calcular la Ec. (B.6) están dados por

$$x_n = \tanh\left(\frac{1}{2}\pi \sinh(nh)\right) \quad (\text{B.7})$$

$$\omega_n = \frac{\frac{1}{2}h\pi \cosh(kh)}{\cosh^2\left(\frac{1}{2}\pi \sinh(nh)\right)} \quad (\text{B.8})$$

donde h es un factor arbitrario en principio, pero que debe ser muy pequeño para asegurar que la aproximación de la integral sea lo suficientemente precisa. Si el intervalo de integración se extiende más allá de $(-1, 1)$ se aplica el cambio de variable $x = [(b+a)t + (b-a)]/2$, señalado en Ec. (B.3), lo que aproxima a $\int_a^b f(x)dx$ por

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \omega_n f\left(\frac{(b-a)t_n + (b-a)}{2}\right) \quad (\text{B.9})$$

donde, a diferencia de la Cuadratura de Gauss–Legendre, el número de pesos y abscisas es infinito. Por supuesto que no es posible calcular un número infinito de abscisas y pesos, así que el número de estos se tiene que limitar en función de la precisión y exactitud de la aproximación de la integral, o bien simplemente escogiendo un número máximo.

La razón por la que la cuadratura Tanh-Sinh puede dar resultados exactos para funciones con singularidades en los extremos del intervalo de integración y la cuadratura de Gauss-Legendre no, es que la primera tiende a concentrar los pares abscisa-peso sobre los extremos del intervalo, lo que garantiza que hay muchos puntos cerca de la singularidad para cuantificar correctamente el efecto de estas sobre la integral. Esto se debe a la rápida convergencia de la ecuación Ec. (B.7). En cambio la cuadratura Gauss-Legendre, aunque tampoco genera abscisas uniformemente distribuidas en el intervalo de integración, no concentra las abscisas sobre algún punto en particular. Luego entonces su capacidad para aproximar este tipo de integrales es muy pobre. Sin embargo, para funciones acotadas generalmente ofrece una mayor precisión y exactitud empleando menos pares abscisa-peso que la cuadratura Tanh-Sinh.

Apéndice C

Código fuente de aplicación

C.1. Función que inicializa el sistema de bosones

```
1 newBosonSystemDP [] := Module[
2   {BosonSystem, digitsPrec, systemEnergies, CriticalTemp},
3
4   BosonSystem["PrecisionFirstBand"] = 80;
5   BosonSystem["QuadNodes"] = getQuadNodesDP[80];
6   BosonSystem["ExpMaxArgument"] = 10000;
7
8   Return[BosonSystem];
9 ];
```

C.2. Función que establece los parámetros del sistema de bosones

```
1 Attributes[setParamsBosonSystemDP] = {HoldFirst};
2 setParamsBosonSystemDP[BosonSystem_, Perm_, Pos_, ra_, maximumBands_,
3   verbose_: False, warnings_: True] := Module[
4   {numberOfAtoms, \[Gamma]},
5   numberOfAtoms = Length[Perm];
6   BosonSystem["numAtoms"] = numberOfAtoms;
7   \[Gamma] = 1/(4 \[Pi]) (1/ra)^2;
8   BosonSystem["\[Gamma]"] = SetPrecision[\[Gamma], Infinity];
9   BosonSystem["maxBands"] = maximumBands;
10  BosonSystem["dsrel"][s_, t_, j_] :=
11    makeDsrFuncDP[SetPrecision[Perm, Infinity],
12    SetPrecision[Pos, Infinity], SetPrecision[ra, Infinity], s, t,
```

```

13     j, numberOfAtoms];
14     BosonSystem["FirstBandRescaled"] = False;
15     BosonSystem["RescalingFactor"] = 1;
16     BosonSystem["EnergyBandsCalculated"] = 1;
17     BosonSystem["BandLimitsCalculated"] = False;
18     BosonSystem["ShowMessages"] = verbose;
19     BosonSystem["ShowInternalWarnings"] = warnings;
20
21     BosonSystem["Energies"]["BandMinimals"] = {};
22     BosonSystem["Energies"]["BandMaximums"] = {};
23     BosonSystem["Energies"]["Base"] = 0;
24
25     BosonSystem["Energies"]["FirstBand"] = {};
26     BosonSystem["Energies"]["FirstBandGL"] = {};
27     BosonSystem["Energies"]["RestBands"] = {};
28
29     BosonSystem["DeltaEnergies"]["FirstBand"] = {};
30     BosonSystem["DeltaEnergies"]["FirstBandGL"] = {};
31     BosonSystem["DeltaEnergies"]["RestBands"] = {};
32
33 ];

```

C.3. Función generadora de los pesos y abscisas para la cuadratura

```

1  getQuadNodesDP[prec_] := Module[
2    {quadDigitsPrec, quadPrec, quadGLinitPrec, m, h, \[Delta],
3    nodesTS, nodesGL,
4    k, t, x, xk, wk, tanhRoots, tanhWeigths, legPolyDegree, n,
5    gaussRoots,
6    gaussWeigths, quadNodes, quadRoots, quadWeigths,
7    totalNodesGL, \[Delta]limit },
8
9    (* Aquí calculamos los
10   puntos y pesos de cuadratura de la primera banda,
11   por cuadratura Tanh-Sinh*)
12   m = 4;
13   h = 2^(-m);
14   \[Delta] = $MachineEpsilon;
15   quadDigitsPrec = Round[prec];
16   nodesTS = {};
17   totalNodesGL = 12;
18
19   For[k = 0, k <= 20*2^m, k++,
20     t = h*k;
21     xk = N[Tanh[\[Pi]/2 * Sinh[t]], quadDigitsPrec];
22     If[Abs[xk - 1] <= \[Delta], Break []];
23

```

C.4. Funciones generadoras de la relación de dispersión y sus derivadas

```

24 wk = N[\[Pi]/2 Cosh[t]/Cosh[\[Pi]/2 Sinh[t]]^2, quadDigitsPrec];
25
26 nodesTS = Append[nodesTS, {xk, wk}];
27 nodesTS = Append[nodesTS, {-xk, wk}];
28 ];
29
30 nodesTS = Drop[nodesTS, 1];
31 (* tanhRoots=Map[#[[1]]&, nodesTS];
32 tanhWeights = Map[#[[2]]&, nodesTS];*)
33
34 (* Ahora calculamos los pesos de cuadratura para el resto de las \
35 bandas, por
36 cuadratura Gauss-Legendre*)
37 (* legPolyDegree = 3*2^m;*)
38 legPolyDegree = totalNodesGL;
39 n = legPolyDegree;
40 quadGLinitPrec = quadDigitsPrec + 30;
41 gaussRoots =
42 x /. NSolve[LegendreP[n, x] == 0, x,
43 WorkingPrecision -> MachinePrecision];
44 (* gaussWeights =Map[(2(1-#^2))/((n+1)LegendreP[n+1,#])^2&,
45 gaussRoots];*)
46
47 nodesGL =
48 Map[{#, (2 (1 - #^2))/((n + 1) LegendreP[n + 1, #])^2} &,
49 gaussRoots];
50
51 quadNodes["TS"] = Sort[nodesTS];
52 quadNodes["GL"] = Sort[nodesGL];
53 quadNodes["Step"] = h;
54 Return[quadNodes];
55 ];

```

C.4. Funciones generadoras de la relación de dispersión y sus derivadas

```

1 makeDsrDiffSetFuncDP[BosonSystem_, v_] :=
2 Module[{dsrel, dsrel0, dsrelSet, na},
3 dsrel = BosonSystem["dsrel"];
4 dsrel0 = dsrel[v, 0, 0];
5 na = BosonSystem["numAtoms"];
6 dsrelSet = Map[D[dsrel0, {v, #}] &, Range[na - 1]];
7 Return[dsrelSet];
8 ];
9
10
11 makeDsrFuncDP[perm_, pos_, ra_, v_, t_, m_, natoms_] := Module[
12 {dsrel, FCR, rt, combsSet, ncomb, indexSet, indexLen,

```

C. CÓDIGO FUENTE DE APLICACIÓN

```

13     i, k, i1, irt, ik, ik1, rtTerm, irtTerm, indx},
14
15     dsrel = Cos[v];
16     FCR = ra ;
17
18     For[rt = 1, rt <= natoms, rt += 1,
19         combsSet = Subsets[Range[natoms], {rt}];
20         ncomb = Length[combsSet];
21         rtTerm = 0;
22
23         For[i = 1, i <= ncomb, i++,
24             indexSet = combsSet[[i]];
25             indexLen = Length[indexSet];
26             i1 = indexSet[[1]];
27             irt = indexSet[[rt]];
28             irtTerm = perm[[irt]]*FCR*Sin[(1 - pos[[irt]] + pos[[i1]])*v];
29             indx[k_] := indexSet[[k]];
30
31             For[k = 1, k < indexLen, k += 1,
32                 ik = indx[k];
33                 ik1 = indx[k + 1];
34                 irtTerm *= perm[[ik]]*FCR*Sin[(pos[[ik1]] - pos[[ik]])*v] ;
35                 ];
36
37             rtTerm += irtTerm;
38             ];
39         rtTerm *= (-1)^rt (2^(rt - 1)) /v^rt ;
40         dsrel += rtTerm;
41         ];
42
43     dsrel += (-1)^(m + 1) Sin[(\[Pi] t)/2];
44     Return[dsrel];
45
46 ];

```

C.5. Función que determina los límites de cada banda permitida

```

1 Attributes[getBandLimitsDP] = {HoldFirst};
2 getBandLimitsDP[BosonSystem_] := Module[
3     {h, s, v, i, j, k, maxBands, numAtoms, dsr0, dsr0diff, dsr0diffSet,
4     dsrel, dsr0last, zero, zerosOut, zerosIn, actualZeros, actualDsr0,
5     zerosDsr0, digitsPrecFirstBand, zk, zk1,
6     systemFindEnergy, energyFirstBand, energyFirstBandGL, findEnergy,
7     bandMinimums, bandMaximums, findBandMinimums, findBandMaximums,
8     findEnergyInBand, systemEnergies, energyBase, \[Alpha],
9     solver, \[Gamma]0,
10    minimumFirstBand, maximumFirstBand, defaultPrec},

```

C.5. Función que determina los límites de cada banda permitida

```

11 dsrel = BosonSystem["dsrel"];
12 maxBands = BosonSystem["maxBands"];
13 numAtoms = BosonSystem["numAtoms"];
14 digitsPrecFirstBand = BosonSystem["PrecisionFirstBand"];
15  $\Gamma_0$  = BosonSystem[" $\Gamma$ "];
16 defaultPrec = $MachinePrecision*3;
17
18
19 systemFindEnergy[t_, m_, x0_, method_, workingPrec_: defaultPrec] :=
20   If[VectorQ[x0] && Length[x0] == 2,
21     If[StringLength[method] != 0, solver = method, solver = "Brent"];
22     Return[( $\Gamma$  /. FindRoot[dsrel[ $\Gamma$ ], t, m],
23             { $\Gamma$ , x0[[1]], x0[[2]]},
24             WorkingPrecision -> workingPrec, MaxIterations -> 200)];
25   ,
26   Return[( $\Gamma$  /. FindRoot[dsrel[ $\Gamma$ ], t, m],
27           { $\Gamma$ , x0}, WorkingPrecision -> workingPrec,
28           MaxIterations -> 200)];
29 ];
30
31 If[BosonSystem["ShowMessages"] == True,
32   Print["-----"];
33   Print["Calculating Energy Bands Limits..."];
34 ];
35
36 If[numAtoms > 1,
37   dsr0 = dsrel[s, 0, 0];
38   dsr0diff[u_] := makeDsrDiffSetFuncDP[BosonSystem, u];
39   dsr0diffSet = dsr0diff[s];
40
41   dsr0last = dsr0diffSet[[numAtoms - 1]];
42
43   h = 0.5;
44   v = h;
45   j = 1;
46   zerosOut = {};
47   zerosIn = {};
48
49   While[j <= (maxBands + numAtoms - 1),
50     If[(dsr0last /. s -> v)*(dsr0last /. s -> (v + h)) < 0,
51       zero =
52         s /. FindRoot[dsr0last, {s, v, v + h}, Method -> "Brent",
53                     WorkingPrecision -> defaultPrec];
54       zerosIn = Append[zerosIn, zero];
55       j += 1;
56     ];
57     v += h;
58   ];
59   (* La k-1 derivada de la relación de dispersión siempre tiene un \
60   cero en s = 0
61   si el número k-1 es impar.
62   Al ser así agregamos s = h al conjunto de ceros. *)

```

C. CÓDIGO FUENTE DE APLICACIÓN

```

63   If[(-1)^(numAtoms - 1) < 0, zerosIn = Prepend[zerosIn, h]];
64   zerosOut = Append[zerosOut, zerosIn];
65   zerosIn = Drop[zerosIn, Length[zerosIn]];
66
67   (*Aquí comenzamos a buscar los ceros de las derivadas de la \
68 relacion
69 de Dispersion, empleando los ceros de la (k-1)-esima derivada.*)
70
71   For[i = 1, i < numAtoms - 1, i++,
72     actualZeros = zerosOut[[i]];
73     actualDsr0 = dsr0diffSet[[numAtoms - 1 - i]];
74
75     For[k = 1, k <= Length[actualZeros] - 1, k++,
76       zk = actualZeros[[k]];
77       zk1 = actualZeros[[k + 1]];
78       zero =
79         s /. FindRoot[actualDsr0, {s, zk, zk1}, Method -> "Brent",
80           WorkingPrecision -> defaultPrec];
81       zerosIn = Append[zerosIn, zero];
82     ];
83
84     (*Si la k-1-i-
85 esima derivada de la relación de dispersión es impar,
86 entonces tiene un cero en s=h.
87 Por lo tanto se agrega*)
88     If[(-1)^(numAtoms - 1 - i) < 0, zerosIn = Prepend[zerosIn, h]];
89     zerosOut = Append[zerosOut, zerosIn];
90     zerosIn = Drop[zerosIn, Length[zerosIn]];
91   ];
92   zerosOut;
93
94   (*=====
95   =*)
96   (* Aquí comenzamos a buscar los ceros de la relacion de \
97 Dispersion,
98 empleando los ceros de la (k-1)-esima derivada. *)
99   (*=====
100  \
101
102
103   actualZeros = zerosOut[[Length[zerosOut]]];
104   actualDsr0 = dsr0;
105   For[k = 1, k <= Length[actualZeros] - 1, k++,
106     zk = actualZeros[[k]];
107     zk1 = actualZeros[[k + 1]];
108     zero =
109       s /. FindRoot[actualDsr0, {s, zk, zk1}, Method -> "Brent",
110         WorkingPrecision -> $MachinePrecision*3];
111     zerosIn = Append[zerosIn, zero];
112   ];
113   zerosDsr0 = zerosIn;
114

```

C.5. Función que determina los límites de cada banda permitida

```

115 (* =====
116 En este punto ya se han encontrado los ceros de la relacion de \
117 Dispersion =====*)
118 BosonSystem["ZerosDSR0"] = zerosDsr0; (*
119 Zeros de la Relación de Dispersión *)
120
121 minimumFirstBand =
122 systemFindEnergy[-1, 1, zerosDsr0[[1]], "Newton",
123 digitsPrecFirstBand]^2;
124 maximumFirstBand =
125 systemFindEnergy[1, 1, zerosDsr0[[1]], "Newton",
126 digitsPrecFirstBand]^2;
127
128 findBandMinimums[k_] :=
129 systemFindEnergy[-1, k, zerosDsr0[[k]], "Newton"]^2;
130 findBandMaximums[k_] :=
131 systemFindEnergy[1, k, zerosDsr0[[k]], "Newton"]^2;
132
133 bandMinimums =
134 Map[findBandMinimums, Range[2, maxBands]]; (*
135 Límites inferiores de todas las bandas *)
136 bandMaximums =
137 Map[findBandMaximums,
138 Range[2, maxBands]]; (*
139 Límites superiores de todas las bandas *)
140
141 bandMinimums = Prepend[bandMinimums, minimumFirstBand];
142 bandMaximums = Prepend[bandMaximums, maximumFirstBand];
143
144 (* =====\
145 *)
146 (* =====
147 Comienza la parte para sistemas monoatomicos ===== *)
148 (* =====\
149 *)
150
151 minimumFirstBand =
152 systemFindEnergy[-1, 1, {(1/2) \[Pi], \[Pi] }, "Newton",
153 digitsPrecFirstBand]^2;
154 maximumFirstBand =
155 systemFindEnergy[1, 1, {(1/2) \[Pi], \[Pi] }, "Newton",
156 digitsPrecFirstBand]^2;
157
158 bandMinimums =
159 Map[systemFindEnergy[-1, #, {(# - 1/2) \[Pi], # \[Pi] },
160 "Secant"]^2 &, Range[2, maxBands]];
161 bandMaximums =
162 Map[systemFindEnergy[1, #, {(# - 1/2) \[Pi], # \[Pi] },
163 "Secant"]^2 &, Range[2, maxBands]];
164 bandMinimums = Prepend[bandMinimums, minimumFirstBand];
165 bandMaximums = Prepend[bandMaximums, maximumFirstBand];
166 ];

```

C. CÓDIGO FUENTE DE APLICACIÓN

```
167 BosonSystem["Energies"]["BandMinimals"] = bandMinimums;
168 BosonSystem["Energies"]["BandMaximums"] = bandMaximums;
169 BosonSystem["Energies"]["Base"] = bandMinimums[[1]];
170 (*BosonSystem["Energies"] = systemEnergies;*)
171
172
173 If[BosonSystem["ShowMessages"] == True,
174   Print["Done. Energy Band limits have been calculated."];
175   Print["||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||"];
176 ];
177
178 ];
```

C.6. Función que determina energías para cada banda permitida, en función de las abscisas de la cuadratura

```
1 Attributes[getEnergiesDP] = {HoldFirst};
2 getEnergiesDP[BosonSystem_, Temperature_: 1, ChemPot_: Infinity,
3   ToBand_: 0] := Module[
4   {maxBands, numAtoms, dsrel, digitsPrecFirstBand,
5     systemFindEnergy, energyFirstBand, energyFirstBandGL, findEnergy,
6     bandMinimums, bandMaximums, findBandMinimums, findBandMaximums,
7     findEnergyInBand, energyNoFirstBand,
8     (*systemEnergies,*) energyBase,
9     quadNodes, tanhAbsc, gaussAbsc,
10    \[Alpha],
11    solver, \[Epsilon]0, \[Epsilon]01, \[CapitalDelta]EFirstBand,
12    diffEext, \[CapitalDelta]ERestBands, restBands,
13    \[CapitalDelta]EMinimums, \[CapitalDelta]EFirstBandGL,
14    notZeros1stBand, t0,
15    \[Gamma]0, EffectiveBands, BandsCalculated,
16    LimitBand, ArgumentMaximums, ExpArgsFirstBand, Temp},
17
18   dsrel = BosonSystem["dsrel"];
19   maxBands = BosonSystem["maxBands"];
20   numAtoms = BosonSystem["numAtoms"];
21   digitsPrecFirstBand = BosonSystem["PrecisionFirstBand"];
22   \[Gamma]0 = BosonSystem["\[Gamma]"];
23
24   systemFindEnergy[t_, m_, x0_, method_,
25     workingPrec_: MachinePrecision] :=
26   If[VectorQ[x0] && Length[x0] == 2,
27     If[StringLength[method] != 0, solver = method, solver = "Brent"];
28     Return[(\[Alpha] /. FindRoot[dsrel[\[Alpha], t, m],
29       {\[Alpha], x0[[1]], x0[[2]]}],
```

C.6. Función que determina energías para cada banda permitida, en función de las abscisas de la cuadratura

```

30     WorkingPrecision -> workingPrec, MaxIterations -> 200]]];
31
32     ,
33     Return[(\[Alpha] /. FindRoot[dsrel[\[Alpha], t, m],
34         {\[Alpha], x0}, WorkingPrecision -> workingPrec,
35         MaxIterations -> 200]);
36 ];
37 quadNodes = BosonSystem["QuadNodes"];
38 tanhAbsc = Map[#[[1]] &, quadNodes["TS"]];
39 gaussAbsc = Map[#[[1]] &, quadNodes["GL"]];
40
41 If[BosonSystem["BandLimitsCalculated"] == False,
42     getBandLimitsDP[BosonSystem];
43     BosonSystem["BandLimitsCalculated"] = True;
44 ];
45
46 (*systemEnergies = BosonSystem["Energies"];
47 bandMinimums = systemEnergies["BandMinimals"];
48 bandMaximums = systemEnergies["BandMaximums"];
49 \[Epsilon]0 = systemEnergies["Base"];*)
50
51 bandMinimums = BosonSystem["Energies"]["BandMinimals"];
52 bandMaximums = BosonSystem["Energies"]["BandMaximums"];
53 \[Epsilon]0 = BosonSystem["Energies"]["Base"];
54
55 If[ChemPot == Infinity,
56     \[Epsilon]01 = BosonSystem["Energies"]["Base"];
57     ,
58     \[Epsilon]01 = ChemPot;
59 ];
60
61
62 If[BosonSystem["ShowMessages"] == True,
63     Print["-----"];
64     Print["Calculating_Energies_for_System..."];
65 ];
66
67 Temp = If[Precision[Temperature] == Infinity,
68     Temperature,
69     SetPrecision[Temperature, Infinity]
70 ];
71
72
73 If[ToBand < 1,
74     If[maxBands == 1,
75         LimitBand = EffectiveBands = 1
76         ,
77         ArgumentMaximums =
78         Select[\[Gamma]0 (Drop[bandMaximums, 1] - \[Epsilon]01)/
79             Temp, # <= BosonSystem["ExpMaxArgument"] &];
80         EffectiveBands =
81         1 + Length[

```

C. CÓDIGO FUENTE DE APLICACIÓN

```

82     Select [Log[N[1 - Exp[-ArgumentMaximums]]], # != 0 &]];
83     LimitBand = EffectiveBands;
84     ];
85     ,
86
87     LimitBand = EffectiveBands = ToBand;
88
89     If[LimitBand > maxBands,
90     If[BosonSystem["ShowMessages"] == True,
91     Print [
92     "Cannot_calculate_energies_for_more_bands_than_the_maximum_\
93     specifiedCalculations
94     will_be_truncated_up_the_last_band."];
95     ];
96
97     LimitBand = EffectiveBands = maxBands;
98     ];
99
100    ];
101
102    If[BosonSystem["ShowMessages"] == True,
103    Print["Effective_Bands:_", EffectiveBands];
104    ];
105
106    BandsCalculated = BosonSystem["EnergyBandsCalculated"];
107
108    If[BandsCalculated == 1,
109    (*systemEnergies["RestBands"] = {};* )
110    BosonSystem["Energies"]["RestBands"] = {};
111    BosonSystem["DeltaEnergies"]["RestBands"] = {};
112    ];
113
114    If[numAtoms > 1,
115    (* Aquí comienza el cálculo de las energías en cada banda para \
116    sistemas poliatómicos *)
117    findEnergyInBand[k_] :=
118    Map[
119    systemFindEnergy[#,
120    k, {Sqrt[bandMinimums[[k]], Sqrt[bandMaximums[[k]]] },
121    "Secant"]^2 &, gaussAbsc];
122    energyNoFirstBand =
123    Map[findEnergyInBand,
124    Range[BandsCalculated + 1,
125    LimitBand]]; (*
126    Energías del resto de las bandas *)
127
128    energyFirstBand =
129    Map[
130    systemFindEnergy[#,
131    1, {Sqrt[bandMinimums[[1]], Sqrt[bandMaximums[[1]]] },
132    "Secant", digitsPrecFirstBand]^2 &, tanhAbsc]; (*
133    Energías de la primera banda *)

```

C.6. Función que determina energías para cada banda permitida, en función de las abscisas de la cuadratura

```

134 energyFirstBandGL =
135   Map[
136     systemFindEnergy[# ,
137       1, {Sqrt[bandMinimums[[1]]], Sqrt[bandMaximums[[1]] ]},
138       "Secant"^2 &, gaussAbsc]; (* Energias de la primera banda,
139   utiles en algunos casos *)
140
141   \[CapitalDelta]EFirstBand =
142   Map[(# - \[Epsilon]0) &, energyFirstBand]; (*
143   Diferencia entre energias de la primera banda y del estado base*)
144 \
145
146   \[CapitalDelta]EFirstBandGL =
147   Map[(# - \[Epsilon]0) &, energyFirstBandGL];
148
149
150   (* ExpArgsFirstBand = Select\[Gamma]0 (
151   energyFirstBand- \[Epsilon]01)/Temp, #<=BosonSystem[
152   "ExpMaxArgument" ] &];*)
153   If[Log[
154     N[1 - Exp[-\[Gamma]0 bandMaximums[[1]]/Temp ],
155     digitsPrecFirstBand]] == 0,
156
157     notZeros1stBand =
158     Length[
159     Select[Log[
160       N[1 - Exp[-((\[Gamma]0*\[CapitalDelta]EFirstBand)/Temp) ],
161       digitsPrecFirstBand]], # != 0 &]];
162
163     If[notZeros1stBand < Length[tanhAbsc],
164       t0 = tanhAbsc[[notZeros1stBand]];
165       energyFirstBand =
166       Map[
167         systemFindEnergy[((t0 + 1)*# + (t0 - 1))/2,
168           1, {Sqrt[bandMinimums[[1]]], Sqrt[bandMaximums[[1]]]} ,
169           "Secant",
170           digitsPrecFirstBand]^2 &, tanhAbsc];
171       BosonSystem["RescalingFactor"] = (t0 + 1)/2;
172       BosonSystem["FirstBandRescaled"] = True;
173     ];
174
175   ];
176
177   (* =====Termina la parte del If,
178   para sistemas de 2 o mas atomos=====*)
179   ,
180   (* =====
181   *)
182   (* =====
183   Comienza la parte para sistemas monoatomicos ===== *)
184
185   (* Rutina para cacular las energías en todas las bandas excepto \

```

C. CÓDIGO FUENTE DE APLICACIÓN

```

186 | la primera *)
187 |   findEnergyInBand[k_] :=
188 |     Map[
189 |       systemFindEnergy[#, k, {(k - 1/2) \[Pi], k \[Pi] },
190 |         "Secant"]^2 &, gaussAbsc];
191 |   energyNoFirstBand =
192 |     Map[findEnergyInBand, Range[BandsCalculated + 1, LimitBand]];
193 |
194 |   (* Rutina para cacular las energías en la primera banda *)
195 |   energyFirstBand =
196 |     Map[
197 |       systemFindEnergy[#, 1, {1/2, \[Pi] }, "Secant",
198 |         digitsPrecFirstBand]^2 &, tanhAbsc];
199 |   energyFirstBandGL =
200 |     Map[systemFindEnergy[#, 1, {1/2, \[Pi] }, "Secant"]^2 &,
201 |       gaussAbsc];
202 |
203 |   \[CapitalDelta]EFirstBand =
204 |     Map[(# - \[Epsilon]0) &, energyFirstBand];
205 |   \[CapitalDelta]EFirstBandGL =
206 |     Map[(# - \[Epsilon]0) &, energyFirstBandGL];
207 |   (* \[Gamma]0 = BosonSystem["\[Gamma]"]; *)
208 |
209 |   If[Log[
210 |     N[1 - Exp[-\[Gamma]0 bandMaximums[[1]]/Temp ],
211 |     digitsPrecFirstBand]] == 0,
212 |
213 |     notZeros1stBand =
214 |       Length[
215 |         Select[Log[
216 |           N[1 - Exp[(-\[Gamma]0*\[CapitalDelta]EFirstBand)/Temp ],
217 |           digitsPrecFirstBand]], # != 0 &]];
218 |
219 |     If[notZeros1stBand < Length[tanhAbsc],
220 |       t0 = tanhAbsc[[notZeros1stBand]];
221 |       energyFirstBand =
222 |         Map[
223 |           systemFindEnergy[((t0 + 1)*# + (t0 - 1))/2, 1, {1/2, \[Pi] },
224 |             "Secant", digitsPrecFirstBand]^2 &, tanhAbsc];
225 |         BosonSystem["RescalingFactor"] = (t0 + 1)/2;
226 |         BosonSystem["FirstBandRescaled"] = True;
227 |         ,
228 |
229 |         BosonSystem["RescalingFactor"] = 1;
230 |         BosonSystem["FirstBandRescaled"] = False;
231 |         ];
232 |         ,
233 |
234 |         BosonSystem["RescalingFactor"] = 1;
235 |         BosonSystem["FirstBandRescaled"] = False;
236 |
237 |         ];

```

C.6. Función que determina energías para cada banda permitida, en función de las abscisas de la cuadratura

```

238
239
240     ];
241
242     (* En este punto las energias de la primera banda posiblemente han \
243 sido recalculadas, así que
244 hay que volver a calcular las diferencias de energia *)
245     If[BosonSystem["FirstBandRescaled"] == True,
246       \[CapitalDelta]EFirstBand =
247       Map[(# - \[Epsilon]0) &, energyFirstBand];
248       \[CapitalDelta]EFirstBandGL =
249       Map[(# - \[Epsilon]0) &, energyFirstBandGL];
250     ];
251
252     restBands = Length[energyNoFirstBand];
253     diffEext[k_] := Map[(# - \[Epsilon]0) &, energyNoFirstBand[[k]]];
254     \[CapitalDelta]ERestBands = Map[diffEext, Range[restBands]];
255
256     (* systemEnergies["FirstBand"] = energyFirstBand;
257     systemEnergies["FirstBandGL"] = energyFirstBandGL;
258     systemEnergies["RestBands"] = Union[systemEnergies["RestBands"],
259     energyNoFirstBand]; *)
260
261     BosonSystem["Energies"]["FirstBand"] = energyFirstBand;
262     BosonSystem["Energies"]["FirstBandGL"] = energyFirstBandGL;
263     BosonSystem["Energies"]["RestBands"] = Union[
264       BosonSystem["Energies"]["RestBands"], energyNoFirstBand
265     ];
266
267     BosonSystem["DeltaEnergies"][
268       "FirstBand"] = \[CapitalDelta]EFirstBand;
269     BosonSystem["DeltaEnergies"][
270       "FirstBandGL"] = \[CapitalDelta]EFirstBandGL;
271     BosonSystem["DeltaEnergies"]["RestBands"] =
272       Union[BosonSystem["DeltaEnergies"][
273         "RestBands"], \[CapitalDelta]ERestBands];
274     (* BosonSystem["Energies"] = systemEnergies; *)
275
276     If[BandsCalculated > LimitBand,
277       BosonSystem["EnergyBandsCalculated"] = BandsCalculated;
278       ,
279       BosonSystem["EnergyBandsCalculated"] = LimitBand;
280     ];
281
282     If[BosonSystem["ShowMessages"] == True,
283       Print["Bands_Calculated:_", BosonSystem["EnergyBandsCalculated"]];
284     ];
285
286     If[BosonSystem["ShowMessages"] == True,
287       Print["Done._Band_Energies_have_been_calculated."];
288       Print["||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||"];
289     ];

```

290
291

];

C.7. Función que calcula la temperatura crítica del sistema

```

1  Attributes[getCriticalTempDP] = {HoldFirst};
2  getCriticalTempDP[BosonSystem_, ToBand_: 0] := Module[
3      {quadNodes, tanhWgs, gaussWgs,  $\backslash$ [Gamma]0, Z32,
4       $\backslash$ [CapitalDelta]EFirstBand,  $\backslash$ [CapitalDelta]ERestBands,
5      nNodesTS, nNodesGL,
6      quadTermsFirstBand, quadFirstBand,
7      quadTermsKband, quadKband,
8      quadRestBandsTotalTerms, quadRestBands,
9      quadSystem,
10     CriticalTempRelation,
11     digitsPrec, restBands, CriticalTemp,
12     STEP, Tc, RF, digitsPrecFirstBand},
13
14      $\backslash$ [Gamma]0 = BosonSystem[" $\backslash$ [Gamma]"];
15     (* digitsPrec = BosonSystem["calcDigitsPrec"]; *)
16     digitsPrecFirstBand = BosonSystem["PrecisionFirstBand"];
17     Z32 = Zeta[3/2];
18
19     quadNodes = BosonSystem["QuadNodes"];
20     tanhWgs = Map[#[[2]] &, quadNodes["TS"]];
21     gaussWgs = Map[#[[2]] &, quadNodes["GL"]];
22
23     If[BosonSystem["ShowMessages"] == True,
24         Print["-----"];
25         Print["Calculating Critical Temperature..."];
26     ];
27
28     getEnergiesDP[BosonSystem, 1, Infinity, ToBand];
29     RF = BosonSystem["RescalingFactor"];
30      $\backslash$ [CapitalDelta]EFirstBand =
31         BosonSystem["DeltaEnergies"]["FirstBand"];
32      $\backslash$ [CapitalDelta]ERestBands =
33         BosonSystem["DeltaEnergies"]["RestBands"];
34     (* restBands=Length[ $\backslash$ [CapitalDelta]ERestBands]; *)
35     restBands = BosonSystem["EnergyBandsCalculated"] - 1;
36
37     nNodesTS = Length[tanhWgs];
38     nNodesGL = Length[gaussWgs];
39     STEP = quadNodes["Step"];
40
41     quadTermsFirstBand =
42     Map[tanhWgs[[#]]*

```


C. CÓDIGO FUENTE DE APLICACIÓN

```

2 getChemicalPotentialDP [BosonSystem_, Temperature_, ToBand_: 0] :=
3   Module[
4     {quadNodes, tanhWgs, gaussWgs,
5       \[Gamma]0, \[Epsilon]0, Z32, \[Mu],
6       nNodesTS, nNodesGL,
7       EFirstBand, ERestBands, EFirstBandGL,
8       quadTermsFirstBand, quadFirstBand,
9       quadTermsKband, quadKband,
10      quadRestBandsTotalTerms, quadRestBands, quadSystem,
11      quadRestBandsTotalTermsTC, quadRestBandsTC, quadSystemTC,
12      ChemicalPotentialRelation, ChemicalPotentialRelationTC,
13      digitsPrecFirstBand, restBands, restBandsTC, CriticalTemp,
14      STEP, Tc, RF, ChemicalPotential, ChemicalPotentialTC, Temp},
15
16     \[Gamma]0 = BosonSystem["\[Gamma]"];
17     digitsPrecFirstBand = BosonSystem["PrecisionFirstBand"];
18     Z32 = Zeta[3/2];
19     Tc = BosonSystem["CriticalTemp"];
20
21     If[! NumericQ[Tc],
22       Print[
23         "Critical_Temperature_of_the_system_not_defined._Aborting_\
24 subsequent_calculations."];
25       Abort[];
26     ];
27     restBandsTC = BosonSystem["EnergyBandsCalculated"] - 1;
28
29     If[BosonSystem["ShowMessages"] == True,
30       Print["-----"];
31       Print["Calculating_Chemical_Potential_of_the_system..."];
32     ];
33
34     Temp = If[Precision[Temperature] == Infinity,
35       Temperature,
36       SetPrecision[Temperature, Infinity]
37     ];
38
39     If[Temp <= 1,
40       getEnergiesDP[BosonSystem, 1, Infinity, ToBand];
41     ,
42       getEnergiesDP[BosonSystem, Temp, Infinity, ToBand];
43     ];
44     \[Epsilon]0 = BosonSystem["Energies"]["Base"];
45
46
47     If[Temp <= Tc,
48       BosonSystem["ChemicalPotential"] = \[Epsilon]0;
49     ,
50     (* ELSE *)
51
52     quadNodes = BosonSystem["QuadNodes"];
53     tanhWgs = Map[#[[2]] &, quadNodes["TS"]];

```

```

54 gaussWgs = Map[#[[2]] &, quadNodes["GL"]];
55 RF = BosonSystem["RescalingFactor"];
56
57 EFirstBand = BosonSystem["Energies"]["FirstBand"];
58 ERestBands = BosonSystem["Energies"]["RestBands"];
59 restBands = BosonSystem["EnergyBandsCalculated"] - 1;
60
61 nNodesTS = Length[tanhWgs];
62 nNodesGL = Length[gaussWgs];
63 STEP = quadNodes["Step"];
64
65 quadTermsFirstBand =
66   Map[tanhWgs[[#]]*
67     Log[N[1 - Exp[-\[Gamma]0 (EFirstBand[[#]] - \[Mu])/Temp],
68       digitsPrecFirstBand]] &, Range[nNodesTS]];
69 quadFirstBand = STEP*RF*Apply[Plus, quadTermsFirstBand];
70
71
72 If[restBands >= 1,
73   quadTermsKband[k_] :=
74     Map[gaussWgs[[#]]*
75       Log[N[1 - Exp[-\[Gamma]0 (ERestBands[[k, #]] - \[Mu])/Temp],
76         MachinePrecision]] &, Range[nNodesGL]];
77   quadKband[k_] := Apply[Plus, quadTermsKband[k]];
78   quadRestBandsTotalTerms = Map[quadKband, Range[restBands]];
79   quadRestBands = Apply[Plus, quadRestBandsTotalTerms];
80
81   quadRestBandsTotalTermsTC = Map[quadKband, Range[restBandsTC]];
82   quadRestBandsTC = Apply[Plus, quadRestBandsTotalTermsTC];
83   ,
84   quadRestBands = 0;
85   quadRestBandsTC = 0;
86   ];
87
88 quadSystem = Apply[Plus, {quadFirstBand, quadRestBands}];
89
90 ChemicalPotentialRelation =
91   Sqrt[\[Gamma]0*\[Pi]]/Z32 Temp*quadSystem + 1;
92
93 quadSystemTC = Apply[Plus, {quadFirstBand, quadRestBandsTC}];
94 ChemicalPotentialRelationTC =
95   Sqrt[\[Gamma]0*\[Pi]]/Z32 Temp*quadSystemTC + 1;
96
97
98 ChemicalPotentialTC =
99   \[Mu] /.
100   FindRoot[ChemicalPotentialRelationTC, {\[Mu], \[Epsilon]0},
101     WorkingPrecision -> digitsPrecFirstBand,
102     PrecisionGoal -> MachinePrecision,
103     AccuracyGoal -> MachinePrecision
104   ];
105

```

C. CÓDIGO FUENTE DE APLICACIÓN

```

106   If[BosonSystem["ShowInternalWarnings"] == True,
107     ChemicalPotential =
108     \[Mu] /.
109     FindRoot[
110       ChemicalPotentialRelation, {\[Mu], ChemicalPotentialTC},
111       WorkingPrecision -> digitsPrecFirstBand,
112       PrecisionGoal -> MachinePrecision,
113       AccuracyGoal -> MachinePrecision
114     ];
115
116     ChemicalPotential = Quiet[
117     \[Mu] /.
118     FindRoot[
119       ChemicalPotentialRelation, {\[Mu], ChemicalPotentialTC},
120       WorkingPrecision -> digitsPrecFirstBand,
121       PrecisionGoal -> MachinePrecision,
122       AccuracyGoal -> MachinePrecision
123     ]
124   ];
125 ];
126 BosonSystem["ChemicalPotential"] = ChemicalPotential;
127 ];
128
129 BosonSystem["ChemPotSignature"]["Calculated"] = True;
130
131 If[BosonSystem["ShowMessages"] == True,
132   Print["Done._Chemical_Potential_has_been_calculated"];
133   Print["Chemical_Potential_—>_", BosonSystem["ChemicalPotential"]];
134   Print["|||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||"];
135 ];
136
137 ];

```

C.9. Función que calcula la energía interna por bósón del sistema

```

1  Attributes[getInternalEnergyPerBosonDP] = {HoldFirst};
2  getInternalEnergyPerBosonDP[BosonSystem_, Temperature_, ToBand_: 0] :=
3    Module[
4      {systemEnergies, quadNodes, tanhWgs, gaussWgs, \[Gamma]0, Z32,
5        EFirstBand, ERestBands, EFirstBandGL,
6        \[CapitalDelta]EFirstBandGL, \
7        \[CapitalDelta]\[Epsilon]0FirstBandGL, EFirstGL,
8        \[CapitalDelta]EFirstBand, diffEext, \[CapitalDelta]ERestBands,
9        \[CapitalDelta]\[Epsilon]0FirstBand, \
10       \[CapitalDelta]\[Epsilon]0RestBands,
11       nNodesTS, nNodesGL,
12       quadTermsFirstBandS1, quadFirstBandS1, quadTermsKbandS1,

```

C.9. Función que calcula la energía interna por bosón del sistema

```

13  quadKbandS1, quadRestBandsTotalTermsS1, quadRestBandsS1,
14  quadSystemS1,
15  quadTermsFirstBandS2, quadFirstBandS2, quadTermsKbandS2,
16  quadKbandS2, quadRestBandsTotalTermsS2, quadRestBandsS2,
17  quadSystemS2,
18  quadSystem,
19  digitsPrecFirstBand, restBands,
20  InternalEnergyPerBoson,
21  STEP, RF, \[Mu], \[Epsilon]0, Temp},
22
23  \[Gamma]0 = BosonSystem["\[Gamma]"];
24  digitsPrecFirstBand = BosonSystem["PrecisionFirstBand"];
25  Z32 = Zeta[3/2];
26
27  quadNodes = BosonSystem["QuadNodes"];
28  tanhWgs = Map[#[[2]] &, quadNodes["TS"]];
29  gaussWgs = Map[#[[2]] &, quadNodes["GL"]];
30  nNodesTS = Length[tanhWgs];
31  nNodesGL = Length[gaussWgs];
32  STEP = quadNodes["Step"];
33
34  If[BosonSystem["ShowMessages"] == True,
35    Print["-----"];
36    Print["Calculating Internal Energy per Boson of the System ..."];
37    ];
38
39
40  Temp = If[Precision[Temperature] == Infinity,
41    Temperature,
42    SetPrecision[Temperature, Infinity]
43    ];
44
45  getChemicalPotentialDP[BosonSystem, Temperature, ToBand];
46
47  RF = BosonSystem["RescalingFactor"];
48  \[Epsilon]0 = BosonSystem["Energies"]["Base"];
49  \[Mu] = BosonSystem["ChemicalPotential"];
50
51  If[Temp <= 1,
52    getEnergiesDP[BosonSystem, 1.0, Infinity, ToBand];
53    ,
54    getEnergiesDP[BosonSystem, Temp, Infinity, ToBand];
55    ];
56  restBands = BosonSystem["EnergyBandsCalculated"] - 1;
57
58  If[Temp <= BosonSystem["CriticalTemp"],
59
60    \[CapitalDelta]EFirstBand =
61    BosonSystem["DeltaEnergies"]["FirstBand"];
62
63    \[CapitalDelta]EFirstBandGL =
64    BosonSystem["DeltaEnergies"]["FirstBandGL"];

```

C. CÓDIGO FUENTE DE APLICACIÓN

```

65   \[CapitalDelta]ERestBands =
66     BosonSystem["DeltaEnergies"][ "RestBands"];
67
68   \[CapitalDelta]\[Epsilon]0FirstBand = \[CapitalDelta]EFirstBand;
69   \[CapitalDelta]\[Epsilon]0FirstBandGL = \
70 \[CapitalDelta]EFirstBandGL;
71   \[CapitalDelta]\[Epsilon]0RestBands = \[CapitalDelta]ERestBands;
72   (* restBands=Length[\[CapitalDelta]ERestBands]; *)
73
74   (* Print[
75     "Diference of energies first band mu: ", \
76 \[CapitalDelta]EFirstBandGL];
77     Print[
78     "Diference of energies first band e0: ", \
79 \[CapitalDelta]\[Epsilon]0FirstBandGL];
80     Print[
81     "Diference of energies second band mu: ", \
82 \[CapitalDelta]ERestBands[[1]]]; *)
83   ,
84
85   If[! NumericQ[\[Mu]] ,
86     Print [
87       "The_chemical_potential_of_the_system_has_not_been_calculated._\
88 Aborting_subsequent_calculations."];
89     Abort [];
90   ];
91
92   EFirstBand = BosonSystem["Energies"]["FirstBand"];
93   EFirstBandGL = BosonSystem["Energies"]["FirstBandGL"];
94   ERestBands = BosonSystem["Energies"]["RestBands"];
95
96   \[CapitalDelta]EFirstBand = Map[(# - \[Mu]) &, EFirstBand];
97   diffExt[k_] := Map[(# - \[Mu]) &, ERestBands[[k]]];
98   \[CapitalDelta]ERestBands = Map[diffExt , Range[restBands]];
99
100  \[CapitalDelta]\[Epsilon]0FirstBand =
101    BosonSystem["DeltaEnergies"][ "FirstBand"];
102  \[CapitalDelta]\[Epsilon]0RestBands =
103    BosonSystem["DeltaEnergies"][ "RestBands"];
104
105
106  \[CapitalDelta]EFirstBandGL = Map[(# - \[Mu]) &, EFirstBandGL];
107  \[CapitalDelta]\[Epsilon]0FirstBandGL =
108    Map[(# - \[Epsilon]0) &, EFirstBandGL];
109
110  ];
111
112  (* Esta seccion representa la cuadratura del primer sumando para \
113 calcular la Energia Interna *)
114  quadTermsFirstBandS1 =
115    Map[tanhWgs[[#]]*
116      PolyLog[2 ,

```

C.9. Función que calcula la energía interna por bosón del sistema

```

117     N[Exp[-\[Gamma]0 \[CapitalDelta]EFirstBand[[#]]/Temp],
118     digitsPrecFirstBand]] &, Range[nNodesTS]];
119 quadFirstBandS1 = STEP*RF*Apply[Plus, quadTermsFirstBandS1];
120
121 quadTermsKbandS1[k_] :=
122   Map[gaussWgs[[#]]*
123     PolyLog[2,
124     N[Exp[-\[Gamma]0 \[CapitalDelta]ERestBands[[k, #]]/Temp],
125     MachinePrecision]] &, Range[nNodesGL]];
126 quadKbandS1[k_] := Apply[Plus, quadTermsKbandS1[k]];
127 quadRestBandsTotalTermsS1 = Map[quadKbandS1, Range[restBands]];
128 quadRestBandsS1 = Apply[Plus, quadRestBandsTotalTermsS1];
129
130 quadSystemS1 = Apply[Plus, {quadFirstBandS1, quadRestBandsS1}];
131
132 quadTermsFirstBandS2 =
133   Map[tanhWgs[[#]]*
134     N[\[CapitalDelta]\[Epsilon]0FirstBand[[#]]*
135     Log[1 - Exp[-\[Gamma]0 \[CapitalDelta]EFirstBand[[#]]/Temp]],
136     digitsPrecFirstBand] &, Range[nNodesTS]];
137 quadFirstBandS2 = STEP*RF*Apply[Plus, quadTermsFirstBandS2];
138
139 quadTermsKbandS2[k_] :=
140   Map[gaussWgs[[#]]*
141     N[\[CapitalDelta]\[Epsilon]0RestBands[[k, #]]*
142     Log[1 -
143     Exp[-\[Gamma]0 \[CapitalDelta]ERestBands[[k, #]]/Temp]],
144     MachinePrecision] &, Range[nNodesGL]];
145 quadKbandS2[k_] := Apply[Plus, quadTermsKbandS2[k]];
146 quadRestBandsTotalTermsS2 = Map[quadKbandS2, Range[restBands]];
147 quadRestBandsS2 = Apply[Plus, quadRestBandsTotalTermsS2];
148
149 quadSystemS2 = Apply[Plus, {quadFirstBandS2, quadRestBandsS2}];
150
151 InternalEnergyPerBoson =
152   Sqrt[\[Gamma]0 \[Pi]]/Z32 Temp*
153   quadSystemS1 - (\[Gamma]0 Sqrt[\[Gamma]0 \[Pi]])/
154   Z32 quadSystemS2;
155
156 BosonSystem["InternalEnergyPerBoson"] = InternalEnergyPerBoson;
157
158 If[BosonSystem["ShowMessages"] == True,
159   Print["Done. Internal Energy per Boson has been calculated. "];
160   Print["Internal Energy Per Boson ->", InternalEnergyPerBoson];
161   Print[
162     "|||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||||"];
163 ];
164
165 ];

```

C.10. Función que calcula el calor específico del sistema

```

1  Attributes[getSpecificHeatDP] = {HoldFirst};
2  getSpecificHeatDP[BosonSystem_, Temperature_, ToBand_: 0] := Module[
3      {systemEnergies, quadNodes, tanhWgs, gaussWgs, \[Gamma]0, Z32,
4      EFirstBand, ERestBands, \[CapitalDelta]EFirstBand,
5      diffEext, \[CapitalDelta]ERestBands,
6      \[CapitalDelta]\[Epsilon]0FirstBand, \
7  \[CapitalDelta]\[Epsilon]0RestBands,
8      nNodesTS, nNodesGL,
9      quadTermsFirstBandNm, quadFirstBandNm, quadTermsKbandNm,
10     quadKbandNm, quadRestBandsTotalTermsNm, quadRestBandsNm,
11     quadSystemNm,
12     quadTermsFirstBandDnm, quadFirstBandDnm, quadTermsKbandDnm,
13     quadKbandDnm, quadRestBandsTotalTermsDnm, quadRestBandsDnm,
14     quadSystemDnm,
15     quadTermsFirstBandS1, quadFirstBandS1, quadTermsKbandS1,
16     quadKbandS1, quadRestBandsTotalTermsS1, quadRestBandsS1,
17     quadSystemS1,
18     quadTermsFirstBandS2, quadFirstBandS2, quadTermsKbandS2,
19     quadKbandS2, quadRestBandsTotalTermsS2, quadRestBandsS2,
20     quadSystemS2,
21     quadTermsFirstBandS3, quadFirstBandS3, quadTermsKbandS3,
22     quadKbandS3, quadRestBandsTotalTermsS3, quadRestBandsS3,
23     quadSystemS3,
24     quadSystem,
25     digitsPrecFirstBand, restBands,
26     STEP, prec, Entropy, RF, \[Mu], TD\[Mu]DT,
27     InternalEnergyPerBoson, \[Epsilon]0,
28     SpecificHeat, Temp},
29
30     \[Gamma]0 = BosonSystem["\[Gamma]"];
31     digitsPrecFirstBand = BosonSystem["PrecisionFirstBand"];
32     Z32 = Zeta[3/2];
33
34     quadNodes = BosonSystem["QuadNodes"];
35     tanhWgs = Map[#[[2]] &, quadNodes["TS"]];
36     gaussWgs = Map[#[[2]] &, quadNodes["GL"]];
37     nNodesTS = Length[tanhWgs];
38     nNodesGL = Length[gaussWgs];
39
40     If[BosonSystem["ShowMessages"] == True,
41         Print["-----"];
42         Print["Calculating Specific Heat of the System ..."],
43         ];
44
45     Temp = If[Precision[Temperature] == Infinity,
46         Temperature,
47         SetPrecision[Temperature, Infinity]
```

C.10. Función que calcula el calor específico del sistema

```

48     ];
49
50     getInternalEnergyPerBosonDP[BosonSystem, Temp, ToBand];
51     \[Mu] = BosonSystem["ChemicalPotential"];
52     InternalEnergyPerBoson = BosonSystem["InternalEnergyPerBoson"];
53     restBands = BosonSystem["EnergyBandsCalculated"] - 1;
54     STEP = quadNodes["Step"];
55     RF = BosonSystem["RescalingFactor"];
56
57     If[Temp <= BosonSystem["CriticalTemp"],
58
59         \[CapitalDelta]EFirstBand =
60         BosonSystem["DeltaEnergies"]["FirstBand"];
61         \[CapitalDelta]ERestBands =
62         BosonSystem["DeltaEnergies"]["RestBands"];
63         \[CapitalDelta]\[Epsilon]0FirstBand = \[CapitalDelta]EFirstBand;
64         \[CapitalDelta]\[Epsilon]0RestBands = \[CapitalDelta]ERestBands;
65         TD\[Mu]DT = 0;
66         ,
67
68         If[! NumericQ\[Mu],
69             Print[
70                 "The_chemical_potential_of_the_system_has_not_been_calculated._\
71                 Aborting_subsequent_calculations."];
72             Abort[];
73         ];
74         EFirstBand = BosonSystem["Energies"]["FirstBand"];
75         ERestBands = BosonSystem["Energies"]["RestBands"];
76
77         \[CapitalDelta]EFirstBand = Map[(# - \[Mu]) &, EFirstBand];
78         diffEext[k_] := Map[(# - \[Mu]) &, ERestBands[[k]]];
79         \[CapitalDelta]ERestBands = Map[diffEext, Range[restBands]];
80
81         \[CapitalDelta]\[Epsilon]0FirstBand =
82         BosonSystem["DeltaEnergies"]["FirstBand"];
83         \[CapitalDelta]\[Epsilon]0RestBands =
84         BosonSystem["DeltaEnergies"]["RestBands"];
85
86
87         quadTermsFirstBandNm =
88         Map[tanhWgs[[#]] \[CapitalDelta]EFirstBand [[#]]/
89         N[Exp\[Gamma]0 \[CapitalDelta]EFirstBand [[#]]/Temp] - 1,
90         digitsPrecFirstBand] &, Range[nNodesTS]];
91         quadFirstBandNm = STEP*RF*Apply[Plus, quadTermsFirstBandNm];
92         quadTermsKbandNm[k_] :=
93         Map[gaussWgs[[#]] \[CapitalDelta]ERestBands [[k, #]]/
94         N[Exp\[Gamma]0 \[CapitalDelta]ERestBands [[k, #]]/Temp] - 1,
95         MachinePrecision] &, Range[nNodesGL]];
96         quadKbandNm[k_] := Apply[Plus, quadTermsKbandNm[k]];
97         quadRestBandsTotalTermsNm = Map[quadKbandNm, Range[restBands]];
98         quadRestBandsNm = Apply[Plus, quadRestBandsTotalTermsNm];
99

```

C. CÓDIGO FUENTE DE APLICACIÓN

```

100 quadSystemNm = Apply[Plus, {quadFirstBandNm, quadRestBandsNm}];
101
102
103 quadTermsFirstBandDnm =
104   Map[tanhWgs[[#]] 1/
105     N[Exp[\[Gamma]0 \[CapitalDelta]EFirstBand[[#]]/Temp] - 1,
106     digitsPrecFirstBand] &, Range[nNodesTS]];
107 quadFirstBandDnm = STEP*RF*Apply[Plus, quadTermsFirstBandDnm];
108 quadTermsKbandDnm[k_] :=
109   Map[gaussWgs[[#]] 1/
110     N[Exp[\[Gamma]0 \[CapitalDelta]ERestBands[[k, #]]/Temp] - 1,
111     MachinePrecision] &, Range[nNodesGL]];
112 quadKbandDnm[k_] := Apply[Plus, quadTermsKbandDnm[k]];
113 quadRestBandsTotalTermsDnm = Map[quadKbandDnm, Range[restBands]];
114 quadRestBandsDnm = Apply[Plus, quadRestBandsTotalTermsDnm];
115
116 quadSystemDnm = Apply[Plus, {quadFirstBandDnm, quadRestBandsDnm}];
117
118 TD\[Mu]DT = -((
119   1 + (\[Gamma]0 Sqrt[\[Gamma]0 \[Pi]])/Z32 quadSystemNm)/(
120   Sqrt[\[Gamma]0 \[Pi]]/Z32 quadSystemDnm));
121
122
123 ];
124
125
126 quadTermsFirstBandS1 =
127   Map[tanhWgs[[#]]*
128     PolyLog[2,
129     N[Exp[-\[Gamma]0 \[CapitalDelta]EFirstBand[[#]]/Temp],
130     digitsPrecFirstBand]] &, Range[nNodesTS]];
131 quadFirstBandS1 = STEP*RF*Apply[Plus, quadTermsFirstBandS1];
132
133 quadTermsKbandS1[k_] :=
134   Map[gaussWgs[[#]]*
135     PolyLog[2,
136     N[Exp[-\[Gamma]0 \[CapitalDelta]ERestBands[[k, #]]/Temp],
137     MachinePrecision]] &, Range[nNodesGL]];
138 quadKbandS1[k_] := Apply[Plus, quadTermsKbandS1[k]];
139 quadRestBandsTotalTermsS1 = Map[quadKbandS1, Range[restBands]];
140 quadRestBandsS1 = Apply[Plus, quadRestBandsTotalTermsS1];
141
142 quadSystemS1 = Apply[Plus, {quadFirstBandS1, quadRestBandsS1}];
143
144
145 quadTermsFirstBandS2 = Map[tanhWgs[[#]]*
146   Log[
147     N[1 - Exp[-\[Gamma]0 \[CapitalDelta]EFirstBand[[#]]/Temp],
148     digitsPrecFirstBand]]*(\[Gamma]0*\[CapitalDelta]EFirstBand[[#\
149 ]]) + TD\[Mu]DT) &,
150   Range[nNodesTS]];
151 quadFirstBandS2 = STEP*RF*Apply[Plus, quadTermsFirstBandS2];

```

Lista de abreviaturas

BCS	Teoría publicada por John Bardeen, Leon Cooper y John Robert Schrieffer que explica el fenómeno de la superconductividad convencional.
CBE	Condensación Bose-Einstein, estado de la materia en el cual todos sus componentes cuánticos se encuentran en el mismo estado.
HTS	High Temperature Superconductors, por sus siglas en inglés, son materiales cuya temperatura crítica de transición al estado superconductor es tan alta que su dinámica está fuera del alcance de la teoría BCS.
KP	Kronig-Penney. Modelo propuesto por R. L. Kronig y W. G. Penney en 1930 para explicar las propiedades de partículas dentro de un potencial periódico.
YBCO	Cuprato superconductor cuya composición química es $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$.

Lista de parámetros

a	Ancho de la celda unidad de la estructura periódica.
V_0	Magnitud del potencial del modelo de KP.
b	Ancho de la barrera de potencial del modelo de KP.
λ	Longitud de onda térmica de los bosones en la estructura periódica.
λ_0	Longitud de onda térmica de un gas ideal de bosones tridimensional de tamaño infinito.
P_0	Intensidad del potencial delta para un sistema de KP en el límite cuando las barreras se hacen infinitamente grandes ($V_0 \rightarrow \infty$) y su ancho tiende a cero ($b \rightarrow 0$). $P_0 = mV_0b\lambda_0/\hbar^2$.
P	Producto de P_0 por a/λ_0 .
P_{10}	Intensidad del primer potencial delta para un sistema de KP con dos deltas por celda unidad.
P_{20}	Intensidad del segundo potencial delta para un sistema de KP con dos deltas por celda unidad.
$\beta_2 a$	Separación relativa entre los potenciales delta para un sistema de KP con dos deltas por celda unidad.
β_2	Razón de la separación relativa entre los potenciales delta y el ancho de la celda unidad para un sistema de KP con dos deltas por celda unidad.
ε, E	Energía de los bosones dentro de la estructura periódica.
$\bar{\varepsilon}$	Energía de los bosones dentro de la estructura periódica, en unidades de energía $\hbar^2/2ma^2$, i.e., $\bar{\varepsilon} = \varepsilon/(\hbar^2/2ma^2)$.
ε_0	Energía del estado base de los bosones dentro de la estructura periódica.
$\bar{\varepsilon}_0$	Energía del estado base de los bosones dentro de la estructura periódica, en unidades $\hbar^2/2ma^2$.
k	Momento de los bosones dentro de la estructura periódica.

μ	Potencial químico de los bosones dentro de la estructura periódica.
$\bar{\mu}$	Potencial químico de los bosones dentro de la estructura periódica, en unidades de energía $\hbar^2/2ma^2$.
T_c	Temperatura crítica de condensación de Bose-Einstein de los bosones dentro de la estructura periódica.
T_0	Temperatura crítica de condensación de Bose-Einstein de un gas ideal de bosones tridimensional de tamaño infinito.
\tilde{T}_c	Temperatura crítica de condensación de Bose-Einstein de los bosones dentro de la estructura periódica, en unidades de T_0 , i.e., $\tilde{T}_c = T_c/T_0$.
μ_0	Potencial químico de los bosones dentro de la estructura periódica a la temperatura crítica T_c . Corresponde a la energía del estado base.
$\bar{\mu}_0$	Potencial químico de los bosones dentro de la estructura periódica a la temperatura crítica T_c , en unidades $\hbar^2/2ma^2$.
γ	Cociente entre energías: $\gamma = \hbar^2/2ma^2k_B T_0$.
C_V	Calor específico del sistema de bosones dentro de la estructura periódica.
$g_s(z)$	Función de Bose, también conocida como función polilogaritmo.
$\zeta(s)$	Función Zeta de Riemann, correspondiente a $g_s(1)$.
T_λ	Temperatura de transición a la cual el ^4He líquido normal pasa al estado superfluido. $T_\lambda = 2.17\text{K}$.
T_F	Temperatura de Fermi.
$P_{0(\text{CuO})}$	Intensidad de uno de los planos-delta de nuestro modelo de capas aplicado al cuprato YBCO. Este plano-delta corresponde a la posición de las cadenas de CuO en la estructura cristalina del YBCO.
$P_{0(\text{Y})}$	Intensidad del plano-delta restante de nuestro modelo de capas aplicado al cuprato YBCO. Este plano-delta corresponde a la posición de los átomos de Y en la estructura cristalina del YBCO.

Bibliografía

- [1] J. G. Bednorz and K. A. Müller, “Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system”, *Z. Physik* **64**, 189 (1986).
- [2] M. Anderson, J. Ensher, M. Matthews, C. Wieman, and E. Cornell, “Observations of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor”, *Science* **269**, 198 (1995).
- [3] L. Gao, Y. Y. Xue, F. Chen, Q. Xiong, R. L. Meng, D. Ramirez, and C. W. Chu, “Superconductivity up to 164 K in $\text{HgBa}_2\text{C}_{am-1}\text{Cu}_m\text{O}_{2m+2+\delta}$ ($m=1, 2$, and 3) under quasihydrostatic pressures”, *Phys. Rev. B* **50**, 4260 (1994).
- [4] J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani, and J. Aimitsu, “Superconductivity at 39K in magnesium diboride”, *Nature* **410**, 63 (2001).
- [5] J. Bardeen, L. Cooper, and J. Schrieffer, “Theory of Superconductivity”, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [6] Y. Kamihara, H. Hiramatsu, M. Hirano, R. Kawamura, H. Yanagi, T. Kamiya, and H. Hosono, “Iron-Based Layered Superconductor: LaOFeP ”, *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 10012 (2006).
- [7] R. Friedberg and T. D. Lee, “Gap energy and long-range order in the boson-fermion model of superconductivity”, *Phys. Rev. B* **40**, 6745 (1989).
- [8] R. Friedberg, T. Lee, and H. Re, “Coherence length and vortex filament in the boson-fermion model of superconductivity”, *Phys. Rev. B* **42**, 4122 (1990).
- [9] Y. J. Uemura, G. M. Luke, B. J. Sternlieb, J. H. Brewer, J. F. Carolan, W.Ñ. Hardy, R. Kadono, J. R. Kempton, R. F. Kiefl, S. R. Kreitzman, et al., “Universal

- Correlations between T_c and n_s/m^* (Carrier Density over Effective Mass) in High- T_c Cuprate Superconductors”, Phys. Rev. Lett **62**, 2317 (1989).
- [10] X. Wen and R. Kan, “Charged boson condensation in high- T_c superconductors”, Phys. Rev. B **37**, 595 (1998).
- [11] R. A. Ogg, “Bose-Einstein Condensation of Trapped Electron Pairs. Phase Separation and Superconductivity of Metal-Ammonia Solutions”, Phys. Rev. **69**, 243 (1946).
- [12] V. Ginzburg and U. F. Nauk., “Der gegenwärtige Stand der Theorie der Supraleitung”, Fortschritte der Physik **1**, 101 (1953).
- [13] N. Bogoliubov, V. Tolmachev, and D. Shirkov, “A New Method in the Theory of Superconductivity”, Fortschr. Phys **6**, 605 (1958).
- [14] M. Schafroth, “Theory of Superconductivity”, Phys. Rev. **96**, 1442 (1954).
- [15] J. Blatt, *Theory of Superconductivity* (Academic Press, New York, 1964).
- [16] D. Eagles, “Possible Pairing without Superconductivity at Low Carrier Concentrations in Bulk and Thin-Film Superconducting Semiconductors”, Phys. Rev. **186**, 456 (1969).
- [17] R. Friedberg and T. Lee, “Gap energy and long-range order in the boson-fermion model of superconductivity”, Phys. Rev. B **40**, 6745 (1989).
- [18] R. Friedberg, T. Lee, and H.-C. Ren, “The s-channel theory of superconductivity on a one-dimensional lattice of parallel (CuO_2) planes”, Phys. Lett. A **152**, 417 (1991).
- [19] A. Fiory, S. Martin, R. Fleming, L. Schneemeyer, J. Waszczak, A. Hebard, and S. Sunshine, “Transport, tunneling X-ray, and penetration depth studies of superconducting $\text{Bi}_{2+x}\text{Sr}_{2-y}\text{CuO}_{6\pm d}$ crystals”, Physica C **162**, 1195 (1989).
- [20] A. P. M. Casas, N. D. A. Rigo, R. Quick, M. Fortes, M. Solís, O. Navarro, M. de Llano, A. Valladares, and O. Rojo, “BEC-Driven superconductivity in the cuprates”, Intl. J. M. Phys. B **13**, 3489 (1999).
- [21] V. C. Aguilera-Navarro, M. de Llano, and M. A. Solís, “Bose-Einstein condensation for general dispersion relations”, Eur. J. Phys. **20**, 177 (1999).

-
- [22] M. Grether, M. Fortes, M. de Llano, J. del Río, F. Sevilla, M. Solís, and A. Valladares, “Harmonically Trapped Quantum Gases”, *Eur. Phys. J. D* **23**, 117 (2003).
- [23] M. Bretz, “Heat Capacity of Multilayer He⁴ on Graphite”, *Phys. Rev. Lett.* **31**, 1447 (1973).
- [24] L. Keldysh and A. Kozlov, “Collective properties of excitons in semiconductors”, *Sov. Phys. JETP* **27**, 521 (1968).
- [25] J. Lin and J. Wolfe, “Bose-Einstein condensation of paraexcitons in stressed Cu₂O”, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1222 (1993).
- [26] X. Zhu, P. Littlewood, M. S. Hybertsen, and T. M. Rice, “Exciton Condensate in Semiconductor Quantum Well Structures”, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1633 (1995).
- [27] L. Butov, C. Lai, A. Ivanov, A. Gossard, and D. Chemaia, “Towards Bose-Einstein condensation of excitons in potential traps”, *Nature* **417**, 47 (2002).
- [28] R. de L. Kronig and W. G-Penney, “Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices”, *Proc. Roy. Soc.* **130**, 499 (1930).
- [29] D. A. McQuarry, “The Kronig-Penney Model. A single lecture illustrating the band structure of solids”, *The Chemical Educator* **1**, 1 (1996).
- [30] P. H. A. Santana and A. Rosato, “Use of the Laplace Transform Method to Solve the One-Dimensional Periodic-Potential Problem”, *American Journal of Physics* **41**, 1138 (1973).
- [31] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics* (Butterworth-Heinemann, Oxford, 1996), 2nd ed.
- [32] D. F. Goble and L. E. H. Trainor, “New Correlation Length in Bose-Gase Models of Liquid Helium”, *Phys. Rev. Lett.* **157**, 167 (1967).
- [33] J. M. Ziman, “Bose-Einstein Condensation in Helium Films”, *Philosophical Magazine Series 7* **44**, 548 (1953).
- [34] S. Doniach, “Theory of the Critical Temperature of Superfluid Phase Transitions in Two Dimensions”, *Phys. Rev. Lett.* **24**, 1450 (1973).
- [35] L. M. Steele, C. J. Yeager, and D. Finotello, “Precision Specific-Heat Studies of Thin Superfluids Films”, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 3673 (1993).

- [36] A. Mourachkine, *High-Temperature Superconductivity in Cuprates: The Nonlinear Mechanism and Tunneling Measurements* (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2002).
- [37] C. P. P. Jr., H. A. Farach, and R. J. Creswick, *Superconductivity* (Academic Press, New York, 2007), 2nd ed.
- [38] F. J. Sevilla, M. Grether, M. Fortes, M. de Llano, O. Rojo, M. A. Solís, and A. A. Valladares, “Low-dimensional BEC”, *Journal of Low Temperature Physics* **121**, 281 (2000).
- [39] J. R. Schrieffer and J. S. Brooks, *Handbook of High-Temperature Superconductivity. Theory and Experiment* (Springer, New York, 2007), 1st ed.
- [40] J. E. Wright, B. Woodfield, J. Gordon, R. Fisher, and N. Phillips *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1550 (1999).
- [41] J. E. Gordon, R. A. Fisher, S. Kim, and N. E. Phillips, “Lattice and electronic specific heat of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ”, *Physica C* **162**, 484 (1989).
- [42] R. E. Crandall, “Note on fast polylogarithm computation”, www.reed.edu/crandall/papers/Polylog.pdf (2006).
- [43] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C* (Cambridge University Press, Cambridge, 1992), 2nd ed.
- [44] D. H. Bailey, K. Jeyabalan, and X. S. Li, “A Comparison of Three High-Precision Quadrature Schemes”, *Experimental Mathematics* **14**, 317 (2005).
- [45] M. Mori, “Discovery of the double exponential transformation and its developments”, *Publ. Res. Inst. Math. Sci.* **41**, 897 (2005).