



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

**GAS DE BOSONES DISTRIBUIDO EN
MULTILOSAS**

T E S I S

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA

OMAR ABEL RODRÍGUEZ LÓPEZ

TUTOR

DR. MIGUEL ÁNGEL SOLÍS ATALA (IF)

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR

DR. MAURICIO FORTES BESPROSVANI (IF)

DR. MANUEL DE LLANO DE LA GARZA (IIM)

MÉXICO, D.F., 2014



Universidad Nacional
Autónoma de México



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.

Resumen

Para conocer las propiedades de los sistemas cuánticos reales tales como los superconductores cupratos, películas de helio cuatro o de los excitones en semiconductores multicapas, es necesario conocer las propiedades de las partículas cuánticas fermiónicas o bosónicas dentro de las estructuras periódicas que las contienen. Las propiedades de los sistemas son una consecuencia del efecto combinado de las interacciones entre las partículas y de las constricciones espaciales. En esta tesis reportamos los efectos que ocasionan sólo las estructuras periódicas multicapas sobre las propiedades de un gas cuántico de bosones, dejando para un trabajo futuro calcular el efecto combinado de las interacciones y las restricciones espaciales. El trabajo se aborda simulando la estructura de capas periódicas mediante la aplicación de un potencial de Kronig-Penney en una de las tres direcciones de movimiento del gas de bosones, mientras que en las otras dos direcciones los bosones son libres. Mediante la solución de la ecuación de Schrödinger obtenemos el espectro de energías y las funciones de onda asociadas a las partículas. Con la relación de dispersión de las partículas y a través del gran potencial termodinámico, obtenemos algunas propiedades termodinámicas usando la estadística de Bose-Einstein. Primeramente calculamos la temperatura crítica de condensación Bose-Einstein T_c , la cual reportamos para diferentes valores de intensidad y periodo espacial del potencial. También estudiamos el comportamiento de las capacidades caloríficas específicas a volumen y presión constante, así como las velocidades del sonido isotérmica y adiabática, como funciones de la temperatura, para diferentes valores de los parámetros del potencial.

Algunos de los resultados más importantes que obtenemos son: a) la T_c es diferente de cero independientemente de la magnitud finita del potencial, es decir, no existen valores finitos de la magnitud del potencial para los cuales desaparezca la condensación Bose-Einstein. Además encontramos que la T_c es proporcional a la raíz cuadrada de la magnitud del potencial cuando éste es muy grande; b) el calor específico isocórico crece monótonamente hasta alcanzar un pico en $T_c < T_0$, con T_0 la temperatura crítica para un gas ideal de bosones tridimensional libre. Sin embargo a temperaturas mayores que T_c el calor específico puede presentar una estructura compleja, con un par de máximos y un mínimo que hacen evidente la existencia de un “crossover” dimensional en el sistema, cuando el gas de bosones pasa de un comportamiento tridimensional a uno bidimensional y regresa al tridimensional conforme aumenta la temperatura. Semejante cruce dimensional está íntimamente relacionado con la estructura de bandas del espectro de energía que describimos en detalle. El calor específico isobárico, por su parte, hereda la estructura del calor específico isocórico, pero diverge para temperaturas

menores que T_c pues es proporcional a la compresibilidad isotérmica la cual es infinita debajo de la temperatura de condensación Bose-Einstein. Finalmente encontramos que la velocidad del sonido adiabática es aproximadamente proporcional a $T^{5/4}$ para temperaturas menores que T_c , mientras que para temperaturas mayores a T_c es proporcional a la raíz cuadrada de la temperatura.

Abstract

In order to know the properties of real quantum systems such as superconducting cuprates, helium-4 films or excitons within multilayer semiconductors, is necessary to know the properties of the bosonic or fermionic quantum particles within the periodic structures that contain them. The properties of the systems are a consequence of the combined effect of the interactions between the particles and the spatial constrictions. In this thesis we report only the effects produced by the periodic multilayer structure over the properties of a quantum gas of bosons, letting for a future work the calculation of the combined effect of the interactions and spatial constrictions. The work is addressed by simulating the multilayer periodic structure through applying a Kronig-Penney potential in one of the three directions of movement of the boson gas, while in the other two directions the bosons are free to move. Through the solution of the Schrödinger equation we obtain the energy spectrum and the wave functions associated to the particles. With the dispersion relation of the particles and through the thermodynamic grand potential, we find some thermodynamic properties using Bose-Einstein statistics. Firstly we calculate the Bose-Einstein condensation critical temperature, T_c , which we analyse for different values of intensity and spatial period of the potential. Also we study the behaviour of the heat capacities at constant volume and constant pressure, as well as the isothermal and adiabatic sound velocities, as functions of the temperature, for different values of the Kronig-Penney potential parameters.

Some of the most important results we get are: a) T_c is non-zero independently of the finite magnitude of the potential, ergo there are no finite values of the potential magnitude for which Bose-Einstein condensation disappears. Also we found that T_c is proportional to the square root of the potential magnitude when this is very large; b) the isochoric specific heat increases monotonically until it reaches a peak for $T_c < T_0$, where T_0 is the critical temperature of a three-dimensional free ideal Bose gas. However for larger temperatures than T_c the specific heat may show a complex behaviour, with a pair of maximums and a minimum that make evident the existence of a dimensional “crossover” in the system, where the boson gas goes from a three-dimensional behaviour to a two-dimensional behaviour, and returns to the three-dimensional behaviour again as temperature increases. Such dimensional “crossover” is intimately related to the band structure of the energy spectrum. Meanwhile the isobaric specific heat inherits the structure of the isochoric specific heat, but it diverges for temperatures below T_c , as it is proportional to the isothermal compressibility, which is infinite below Bose-Einstein condensation temperature. Finally we found that the adiabatic sound velocity is roughly proportional to $T^{5/4}$ for temperatures below T_c , while above T_c is proportio-

nal to the square root of the temperature.

Índice general

Índice general	VII
Lista de abreviaturas y parámetros	IX
1 Introducción	1
2 Bosones sujetos a un potencial periódico	5
2.1. Propiedades termodinámicas	8
3 Espectro de energías	11
3.1. Generalidades	13
3.2. Espectro de energía como función de la magnitud y el ancho de las barreras	15
3.3. Funciones de onda	19
Algunos resultados	21
4 Temperatura crítica	29
4.1. Expresiones adimensionales	31
4.2. Un ejemplo base: ancho y separación de las barreras iguales	33
4.3. Otros sistemas similares	35
4.4. Comportamiento en función de la densidad de partículas	41
5 Calor específico isocórico	45
5.1. Expresiones adimensionales	48
5.2. Gas ideal	49
5.3. Un ejemplo base: ancho y separación de las barreras iguales	50
Fase mixta	51
Fase normal	52
5.4. Otros sistemas similares	55
5.5. El “crossover” dimensional	58
Ocupación por unidad de momento	59
5.6. Más allá de la brecha entre la primera y segunda banda de energía	64
6 Calor específico isobárico	69

ÍNDICE GENERAL

6.1. Expresiones adimensionales	72
6.2. Un ejemplo base: ancho y separación de las barreras iguales	74
6.3. Otros sistemas similares	78
7 Velocidad del sonido	83
7.1. Expresiones adimensionales	84
Gas ideal libre	86
7.2. Caso en el que el ancho y separación de las barreras son iguales	87
7.3. Otros sistemas similares	89
8 Conclusiones	93
A Algunas notas sobre métodos numéricos	99
Bibliografía	101

Lista de abreviaturas y parámetros

CBE	Condensación Bose-Einstein, estado de la materia en el cual todos sus componentes cuánticos se encuentran en el mismo estado
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
V_0	Magnitud del potencial del modelo de KP
a	Separación entre barreras de potencial del modelo de KP
b	Ancho de la barreras de potencial del modelo de KP
k_z	Componente del momento de los bosones correspondiente a la dirección z
ϵ_z	Componente de la energía de los bosones correspondiente a la dirección z
ϵ_{0z}	Energía del estado base de los bosones
$\bar{\epsilon}_z$	Energía de los bosones en unidades de energía $\hbar^2/2m(a+b)^2$
u_0	Magnitud del potencial del modelo de KP en unidades de energía $\hbar^2/2m(a+b)^2$
r	Cociente entre el ancho de las barreras y la separación entre ellas: $r = b/a$
T	Temperatura del sistema
V	Volumen del sistema
μ	Potencial químico
T_c	Temperatura crítica de condensación Bose-Einstein de los bosones dentro de la estructura periódica
μ_0	Potencial químico de los bosones a la temperatura crítica T_c . Corresponde a la energía del estado base.
T_0	Temperatura crítica de condensación Bose-Einstein de un gas ideal de bosones tridimensional de tamaño infinito
σ	Cociente entre energías: $\sigma = \hbar^2/2m(a+b)^2 k_B T_0$
$\bar{\epsilon}_{0z}$	Energía del estado base de los bosones, en unidades $\hbar^2/2m(a+b)^2$
$\bar{\mu}$	Potencial químico de los bosones en unidades de energía $\hbar^2/2m(a+b)^2$

LISTA DE ABREVIATURAS Y PARÁMETROS

$\bar{\mu}_0$	Potencial químico de los bosones a la temperatura crítica T_c , en unidades $\hbar^2/2m(a+b)^2$. Corresponde a $\bar{\epsilon}_{0z}$
\tilde{T}	Temperatura del sistema en términos de T_0 : $\tilde{T} = T/T_0$
\tilde{T}_c	Temperatura crítica de condensación de Bose-Einstein de los bosones en términos de T_0 : $\tilde{T}_c = T_c/T_0$
λ	Longitud de onda térmica de de Broglie
λ_0	Longitud de onda térmica de un gas ideal de bosones tridimensional de tamaño infinito a T_0
C_V	Calor específico a volumen constante del gas de bosones
$G_N(k_z)$	Fracción de bosones con momento k_z entre k_z y $k_z + dk_z$
C_p	Calor específico a presión constante del gas de bosones
κ_T	Compresibilidad isotérmica del gas de bosones
γ	Cociente entre las capacidades caloríficas a presión y volumen constante: $\gamma = C_p/C_V$
κ_S	Compresibilidad adiabática del gas de bosones
c_T	Velocidad del sonido isotérmica en el sistema periódico
c_S	Velocidad del sonido adiabática en el sistema periódico
$g_s(z)$	Función de Bose, también conocida como función Polilogaritmo
$\zeta(s)$	Función Zeta de Riemann, corresponde a $g_s(1)$

1

Introducción

En esta tesis nos planteamos formular un modelo teórico para estimar algunas propiedades físicas de sistemas con estructura de multicapas periódicas en los cuales se presenta la condensación de Bose-Einstein. La estructura de lasas periódicas sirve para emular, por ejemplo, la periodicidad de sistemas donde se producen fenómenos de superconductividad de alta T_c como los cupratos, donde la distribución de sus moléculas constituyentes se arregla en planos alternados de portadores de carga y de “aislante”, apilados en una dirección preferencial; para excitones (parejas electrón-hueco) en semiconductores multicapas [1, 2, 3, 4], o para bosones atrapados en redes ópticas [5, 6]. En principio el trabajo nace pensando en la superconductividad de alta T_c , pues ante la imposibilidad de explicarla con la teoría BCS se ha optado por nuevas y retomado viejas teorías para alcanzar tal fin. 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], y antes de la aparición de la teoría BCS en 1956. En la actualidad las teorías de la superconductividad de alta T_c que incorporan la condensación Bose-Einstein como un elemento esencial se han “perfeccionado” considerando no sólo los pares de electrones sino también los electrones desapareados, los huecos y los pares de huecos. Estos modelos Estadísticos Bosón-Fermión (BF) de la superconductividad empezaron a ser estudiados seriamente a principios de los años cincuenta [14, 15], y en 1989 Friedberg and T.D. Lee [16, 17] usaron el modelo para explicar la superconductividad en los cupratos.

El contenido de esta tesis es una investigación directamente relacionada con otras tantas llevadas a cabo por el grupo [18] de investigación de Física de Muchos Cuerpos de la UNAM (<http://manybody.fisica.unam.mx/>). El grupo de investigadores que lo integran ha venido desarrollando desde 1995 una versión de la teoría estadística bosón-femión 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 supone se comportan como bosones y que conviven con los electrones no apareados. Entre otros resultados se

han calculado las propiedades termodinámicas de esta mezcla de bosones con fermiones (electrones desapareados) y en particular, su temperatura crítica de condensación Bose-Einstein (CBE), que se ha 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, se ha 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 [19], 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 [20] 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. En un trabajo previo al discutido aquí, describimos el gas de Bose en una estructura de capas de grosor cero la cual modelamos con un potencial periódico de deltas de Dirac [21], donde calculamos entre otras propiedades, la temperatura de CBE así como su calor específico isocórico. Entre los resultados más interesantes está la presencia de un “crossover” dimensional donde el sistema pasa de comportarse como gas 3D a gas 2D. Este modelo lo usamos para simular películas de helio cuatro y el cuprato YBCO.

El modelo que estudiamos aquí es muy general en el sentido de que es aplicable a cualquier sistema de muchas partículas cuánticas con estructura de capas; por ejemplo, también puede ser usado para explicar las propiedades de películas de helio cuatro [23]. Aunque entre los pares de Cooper, los átomos de helio o los excitones existe interacción, aquí estaremos considerando que las densidades son tan bajas que las interacciones entre los componentes del sistema pueden dejarse pendientes sin perder en el cálculo las características esenciales del sistema real.

En el capítulo dos 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 aquel ejercido por un potencial de Kronig-Penney (KP) en una de las tres direcciones de movimiento de los bosones, mientras permitimos que sean libres en las otras dos. 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 direcciones paralelas a los planos los bosones se mueven libremente por lo que esa parte de su energía es la de una partícula libre, mientras que la energía en la dirección perpendicular a los planos es aquella que resulta de resolver el problema de una partícula en un potencial de barreras.

En el capítulo tres, a partir de resolver la ecuación que relaciona la energía y el momento de una partícula en un potencial de Kronig-Penney se realiza un análisis del espectro de energía y de las funciones de onda. Aunque el espectro energético fue discutido en [24], aquí hacemos una descripción más extensa. Una vez obtenida la relación de dispersión de las partículas se pueden obtener las propiedades termodinámicas cuando dichas partículas son bosones empleando la estadística de Bose-Einstein. No consideramos que el número de bosones esté restringido, así que se usa el Gran Potencial termodinámico, el cual está relacionado con la Gran Función de Partición, para determinar las propiedades macroscópicas. Así, en el capítulo cuatro, definimos la temperatura de condensación Bose-Einstein T_c , la calculamos y analizamos su comportamiento en función de los parámetros que caracterizan el potencial. Con esta información analizamos el comportamiento de las capacidades caloríficas específicas a volumen y presión constante en los capítulos cinco y seis, respectivamente. En el capítulo siete analizamos el comportamiento de la velocidad del sonido a temperaturas debajo y sobre T_c . Finalmente concluimos exponiendo de manera breve los resultados obtenidos, así como las posibles mejoras que se pueden hacer al modelo.

2

Bosones sujetos a un potencial periódico

Considérese un potencial tridimensional compuesto de barreras rectangulares idénticas que se extienden sobre todo el espacio, con un ancho y magnitud bien definidas, paralelas entre ellas y separadas una de otra una distancia fija. En las regiones ocupadas por las barreras el potencial tiene un valor constante, mientras que en las regiones entre barreras es cero. A este potencial están sujetas partículas bosónicas. La Fig. 2.1 ilustra la disposición de las barreras, cada una de las cuales tiene un ancho b , una magnitud V_0 y están separadas una de otra una distancia a . El periodo de este potencial es $a + b = a + b$. Por convención las barreras se distribuyen a lo largo del eje z , razón por

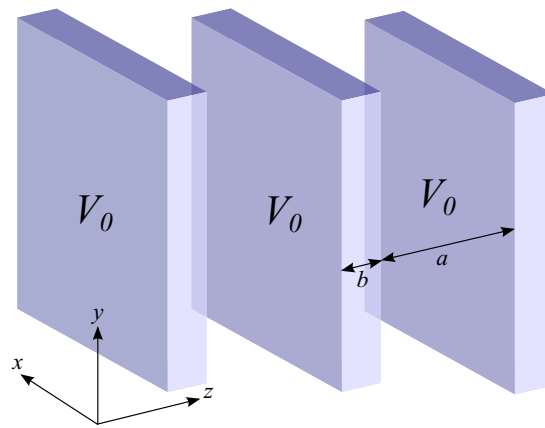


Figura 2.1: Potencial periódico tridimensional.

la cual los bosones son libres de moverse en las direcciones x y y . Este potencial se puede expresar matemáticamente como un potencial de Kronig-Penney unidimensional, es decir, que depende exclusivamente de la coordenada z , y su expresión es

$$\mathcal{U}(x, y, z) = V_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Theta[z - (n-1)(a+b) - a] \Theta[n(a+b) - z] \quad (2.1)$$

2. BOSONES SUJETOS A UN POTENCIAL PERIÓDICO

donde $\Theta(z)$ es la función escalón de Heaviside. El potencial también puede expresarse por pedazos como

$$\mathcal{U}(x, y, z) = \begin{cases} V_0 & (n-1)(a+b) + a < z < n(a+b) \quad \forall x, y \in \mathbb{R} \\ 0 & n(a+b) < z < n(a+b) + a \quad \forall x, y \in \mathbb{R} \end{cases} \quad (2.2)$$

para toda $n \in \mathbb{Z}$. En primera instancia la solución de la ecuación de Schrödinger tridimensional se puede obtener por separación de variables dado que el potencial no depende explícitamente de x y y . Así la ecuación

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(x, y, z) + \mathcal{U}(x, y, z) \Psi(x, y, z) = \varepsilon \Psi(x, y, z) \quad (2.3)$$

se puede separar en tres ecuaciones diferentes:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \mathcal{X}(x)}{dx^2} = \varepsilon_x \mathcal{X}(x), \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \mathcal{Y}(y)}{dy^2} = \varepsilon_y \mathcal{Y}(y) \quad (2.4)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \mathcal{Z}(z)}{dz^2} + V_z(z) \mathcal{Z}(z) = \varepsilon_z \mathcal{Z}(z) \quad (2.5)$$

las cuales se obtienen suponiendo una función de onda $\Psi(x, y, z) = \mathcal{X}(x) \mathcal{Y}(y) \mathcal{Z}(z)$, con la energía $\varepsilon = \varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z$ y que el potencial es una función exclusiva de z , $\mathcal{U}(x, y, z) \equiv V_z(z)$.

Las Ecs. (2.4) corresponden a partículas libres de masa m cuyas energías son

$$\varepsilon_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} \quad \varepsilon_y = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} \quad (2.6)$$

donde k_x y k_y son los momentos en las direcciones x y y respectivamente. Así, el problema central consiste en resolver la Ec. (2.5) y determinar los eigenvalores de la energía ε_z , para lo cual se debe conocer la función de onda y las condiciones de frontera a las que está sujeta. Respecto al primer punto el Teorema de Floquet nos da la respuesta: para cualquier potencial periódico $V_z(z)$ las soluciones de la ecuación diferencial Ec. (2.5) son de la forma

$$\mathcal{Z}(z) = e^{ik_z z} u_{k_z}(z) \quad (2.7)$$

donde k_z es el momento en la dirección z y u_{k_z} es una función periódica con el mismo periodo del potencial, es decir

$$u_{k_z}(z+a+b) = u_{k_z}(z) \quad (2.8)$$

con $a+b = a+b$. Las condiciones de frontera a las que está sujeta la función de onda son la continuidad de la función de onda y su derivada en las discontinuidades del potencial. Considérese el caso en que $n = 0$ para el potencial que corresponde al intervalo

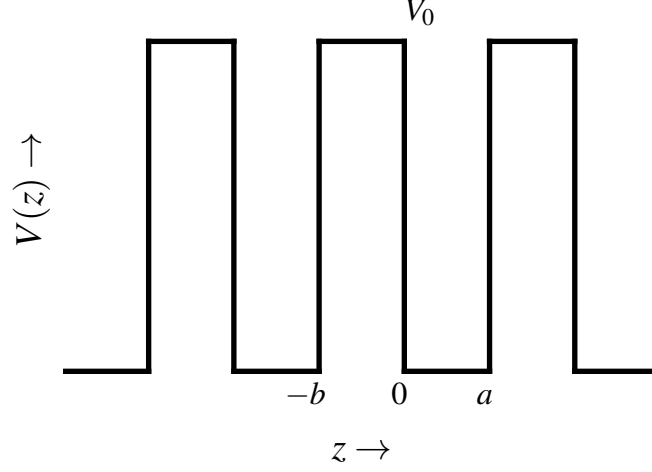


Figura 2.2: Potencial de Kronig-Penney.

$-b < z < a$. En éste podemos definir dos regiones: $-b < z < 0$ donde $V_z(z) = V_0$ y una función de onda $\mathcal{Z}_1(z)$, y $0 < z < a$ con $V_z(z) = 0$ y función de onda $\mathcal{Z}_2(z)$. La Ec. (2.5) se divide en los casos

$$\frac{d^2 \mathcal{Z}_1}{dz^2} - \kappa^2 \mathcal{Z}_1 = 0 \quad -b < z < 0 \quad (2.9)$$

$$\frac{d^2 \mathcal{Z}_2}{dz^2} + \alpha^2 \mathcal{Z}_2 = 0 \quad 0 < z < a \quad (2.10)$$

donde $\hbar\alpha = \sqrt{2m\varepsilon_z}$ y $\hbar\kappa = \sqrt{2m(V_0 - \varepsilon_z)}$. Las soluciones generales de estas ecuaciones son

$$\mathcal{Z}_1(z) = Ae^{\kappa z} + Be^{-\kappa z} \quad (2.11)$$

$$\mathcal{Z}_2(z) = Ce^{i\alpha z} + De^{-i\alpha z} \quad (2.12)$$

las cuales de acuerdo a Ec. (2.7) definen las funciones

$$u_{k_z,1}(z) = Ae^{(\kappa - ik_z)z} + Be^{-(\kappa + ik_z)z} \quad (2.13)$$

$$u_{k_z,2}(z) = Ce^{i(\alpha - k_z)z} + De^{-i(\alpha + k_z)z} \quad (2.14)$$

Las constantes A, B, C, D están determinadas por las condiciones de frontera, i.e., las condiciones de Dirichlet y de Neumann para \mathcal{Z} en la discontinuidad del potencial

$$\mathcal{Z}_1(0) = \mathcal{Z}_2(0) \quad \mathcal{Z}'_1(0) = \mathcal{Z}'_2(0) \quad (2.15)$$

Estas condiciones no son suficientes para solucionar el problema, ya que generan un sistema de dos ecuaciones lineales con cuatro incógnitas. Las ecuaciones restantes se obtienen de la periodicidad de la función u_{k_z} y su derivada, condiciones que, según Ec. (2.8), se puede expresar de la forma

$$u_{k_z,1}(-b) = u_{k_z,2}(a) \quad u'_{k_z,1}(-b) = u'_{k_z,2}(a) \quad (2.16)$$

Las cuatro condiciones de frontera generan un sistema homogéneo de cuatro ecuaciones con cuatro incógnitas $\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{0}$, donde \mathbf{X} es el vector columna $(A, B, C, D)^T$ y $\mathbf{A} =$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ i\alpha & -i\alpha & -\kappa & \kappa \\ e^{i(\alpha-k_z)a} & e^{-i(\alpha+k_z)a} & -e^{-(\kappa-ik_z)b} & e^{(\kappa+ik_z)b} \\ i(\alpha-k_z)e^{i(\alpha-k_z)a} & -i(\alpha+k_z)e^{-i(\alpha+k_z)a} & -(\kappa-ik_z)e^{-(\kappa-ik_z)b} & (\kappa+ik_z)e^{(\kappa+ik_z)b} \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

Las soluciones de interés del sistema $\mathbf{X} \neq \mathbf{0}$ existen únicamente cuando el determinante de \mathbf{A} se hace cero. Esta condición queda expresada por la ecuación

$$\frac{\kappa^2 - \alpha^2}{2\alpha\kappa} \sinh(\kappa b) \sin(\alpha a) + \cosh(\kappa b) \cos(\alpha a) = \cos k_z(a+b) \quad (2.18)$$

con $\hbar\kappa = \sqrt{2m(V_0 - \varepsilon_z)}$ y $\hbar\alpha = \sqrt{2m\varepsilon_z}$. De Ec. (2.18) se determina la relación de dispersión de las partículas, es decir, la relación entre el momento k_z y la energía ε_z . Con esto la energía total $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k})$ queda completamente determinada en función del momento $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)^T$.

2.1. Propiedades termodinámicas

El cálculo de las propiedades termodinámicas se hace partiendo del ensamble Gran Canónico y la correspondiente función de partición, a partir de la cual se determina el Gran Potencial Termodinámico. La expresión de este en función de sus variables naturales es

$$\Omega(T, V, \mu) = \Omega_0 + k_B T \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}) \quad (2.19)$$

donde T es la temperatura, V el volumen y μ el potencial químico. Se ha empleado la equivalencia $\varepsilon_{\mathbf{k}} \equiv \varepsilon(\mathbf{k})$ para evitar ambigüedades, y la contribución $\Omega_0 = k_B T \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_0 - \mu)})$ del estado base $\varepsilon_0 = \varepsilon(\mathbf{0})$ al potencial termodinámico se ha separado de la sumatoria, la cual incluye al resto de los estados. Además $\beta = 1/k_B T$.

En vista de que el espectro de energía de los bosones es continuo, dado que el sistema es infinito, las sumatorias pueden aproximarse por integrales haciendo uso de

la densidad de estados en el espacio de momentos $g(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k} = V/(2\pi)^3 d^3\mathbf{k}$, por lo cual

$$\Omega(T, V, \mu) = \Omega_0 + k_B T \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k} \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}) \quad (2.20)$$

A fin de simplificar más la ecuación de Ω se emplea la expansión de la función $\ln(1 - u) = -\sum_{n=1}^{\infty} u^n/n$, $|u| < 1$,

$$\begin{aligned} \Omega(T, V, \mu) &= \Omega_0 - k_B T \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-n\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}}{n} \\ &= \Omega_0 - k_B T \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\mu}}{n} \int d^3\mathbf{k} e^{-n\beta\varepsilon_{\mathbf{k}}} \end{aligned} \quad (2.21)$$

La integral sobre \mathbf{k} se evalúa sobre todos los valores del momento, por lo cual

$$\int d^3\mathbf{k} e^{-n\beta\varepsilon_{\mathbf{k}}} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x dk_y dk_z e^{-n\beta[(\hbar^2/2m)(k_x^2 + k_y^2) + \varepsilon_z]} \quad (2.22)$$

donde se ha empleado que la energía es separable, $\varepsilon = \varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z$, con ε_x y ε_y dadas por Ec. (2.6). Así, las integrales en las direcciones x y y son gaussianas, lo que da como resultado

$$\int d^3\mathbf{k} e^{-n\beta\varepsilon_{\mathbf{k}}} = \frac{2m\pi}{n\beta\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z e^{-n\beta\varepsilon_z} \quad (2.23)$$

y

$$\begin{aligned} \Omega(T, V, \mu) &= \Omega_0 - \frac{mV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\mu}}{n^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z e^{-n\beta\varepsilon_z} \\ &= \Omega_0 - \frac{mV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-n\beta(\varepsilon_z - \mu)}}{n^2} \end{aligned} \quad (2.24)$$

La sumatoria dentro de la integral resulta ser la expansión en serie de potencias de la función de Bose [25]

$$g_s(z) \equiv \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^s}$$

para $s = 2$ y argumento $e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}$. Entonces la ecuación final del Gran Potencial Termodinámico es

$$\Omega(T, V, \mu) = k_B T \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_0 - \mu)}) - \frac{mV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z g_2(e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) \quad (2.25)$$

Las propiedades termodinámicas están determinadas por la definición de Ω

$$\Omega = U - TS - \mu N \quad (2.26)$$

2. BOSONES SUJETOS A UN POTENCIAL PERIÓDICO

donde U es la energía interna, S es la entropía y N el número de bosones. A partir de su forma diferencial,

$$d\Omega = -SdT - pdV - Nd\mu, \quad (2.27)$$

se obtienen las relaciones

$$S = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right)_{V,\mu} \quad p = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial V}\right)_{T,\mu} \quad N = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_{T,V} \quad (2.28)$$

donde p es la presión del gas. Adicionalmente la relación fundamental $\Omega = -pV$ determina la ecuación de estado del sistema.

3

Espectro de energías

Como se establece en el Cap. 2 el espectro de energía se puede separar en tres componentes, una para cada dirección espacial, tal que $\varepsilon = \varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z$. En particular para las direcciones x y y los espectros corresponden al de una partícula libre, i.e. $\varepsilon_x = \hbar^2 k_x^2 / 2m$, $\varepsilon_y = \hbar^2 k_y^2 / 2m$, mientras que para ε_z el espectro de energías corresponde al de un potencial de Kronig-Penney unidimensional, y está determinado por la ecuación Ec. (2.18). La gráfica de la energía total ε existe en un espacio de cuatro dimensiones, y en consecuencia es imposible de visualizar. Sin embargo, esta limitación no es impedimento para deducir que las características del espectro están definidas esencialmente por ε_z , pues en las otras dos direcciones el espectro es proporcional al cuadrado del momento.

Según la Ec. (2.18) la relación de donde se obtiene la energía ε_z como función de k_z es

$$\frac{\kappa^2 - \alpha^2}{2\alpha\kappa} \sinh(\kappa b) \sin(\alpha a) + \cosh(\kappa b) \cos(\alpha a) = \cos k_z(a+b)$$

donde $\hbar\kappa = \sqrt{2m(V_0 - \varepsilon_z)}$ y $\hbar\alpha = \sqrt{2m\varepsilon_z}$. Ésta es una expresión de la forma $f(V_0, \varepsilon_z, a, b) = \cos((a+b)k_z)$, y es claro que cualquier solución de la ecuación debe satisfacer que

$$|f(V_0, \varepsilon_z, a, b)| \leq 1 \quad (3.1)$$

ya que k_z , a y b son cantidades reales. Más aún, dado que $|\cosh(\kappa b)| \geq 1$ se deduce claramente que las energías para las cuales

$$\alpha a = 2m\pi, \quad m \text{ entero} \quad (3.2)$$

son prohibidas o satisfacen justamente $f \equiv 1$. Todo esto viene a confirmar que el espectro de ε_z consiste de zonas de energía permitida, que satisfacen el criterio de la Ec. (3.1), y zonas prohibidas, lo cual define un espectro de bandas.

La generación de bandas se muestra en la Fig. 3.1a, donde se ha delimitado la región tal que el criterio Ec. (3.1) se cumple. Asimismo en la Fig. 3.1b se muestran las

3. ESPECTRO DE ENERGÍAS

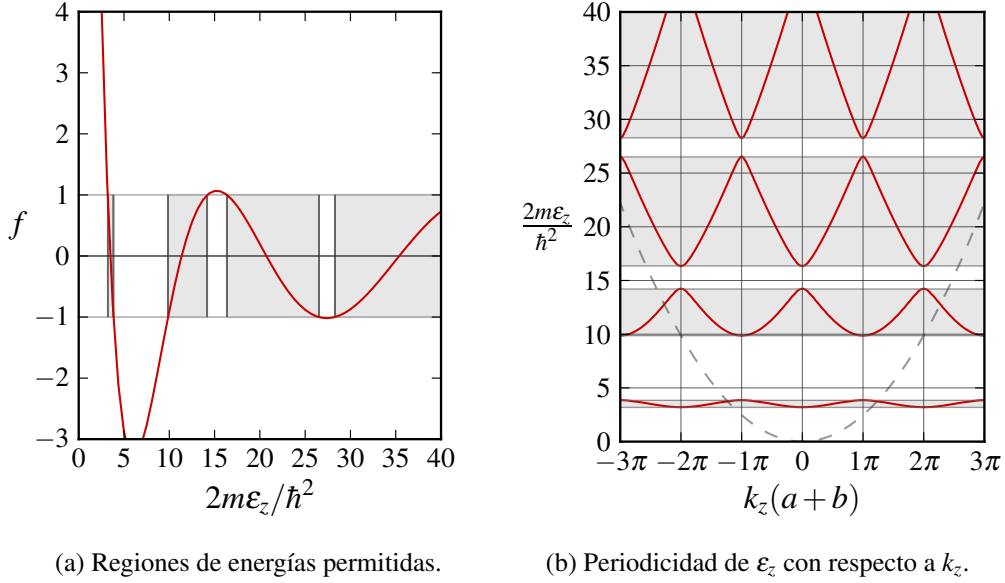


Figura 3.1: Espectro de energías de una partícula sujeta a un potencial de Kronig-Penney con $a = b = 1$ y $2mV_0/\hbar^2 = \pi^2$. Las zonas sombreadas indican las bandas de energía permitida.

primeras bandas de energía, donde ε_z es una función de k_z y es obvia su periodicidad ya que

$$f(V_0, \varepsilon_z, a, b) = \cos(k_z(a+b)) = \cos((k_z + 2\pi)(a+b)) \quad (3.3)$$

Los máximos y mínimos de cada banda corresponden a los valores $k_z(a+b) = m\pi$, donde m es un entero. Dada la periodicidad de ε_z ésta se puede visualizar de varias formas, una de ellas es el esquema de zona reducida, donde $-\pi \leq k_z(a+b) \leq \pi$, sin embargo para representar unívocamente el espectro se emplea un esquema extendido donde a la j -ésima banda le corresponde el intervalo $(j-1)\pi \leq k_z(a+b) \leq j\pi$.

La Ec. (2.18) depende de los parámetros a , b , V_0 y k_z , así como de muchas constantes físicas que es conveniente ocultar de las expresiones para simplificar el análisis general del espectro de energía. Se puede emplear el periodo de potencial, $a+b$, como unidad de longitud, y caracterizar las barreras de potencial en términos del cociente entre el ancho de las mismas y el espaciamiento entre dos de éstas consecutivas, $r = b/a$, y de estos se sigue directamente que $a = (a+b)/(1+r)$ y $b = r(a+b)/(1+r)$. Análogamente con la introducción de la unidad de energía $\hbar^2/2m(a+b)^2$ se puede adimensionalizar el potencial y la energía mediante los parámetros

$$u_0 = \frac{2m(a+b)^2}{\hbar^2} V_0 \quad \bar{\varepsilon}_z = \frac{2m(a+b)^2}{\hbar^2} \varepsilon_z. \quad (3.4)$$

Con estos parámetros la ecuación para obtener la relación de dispersión se transforma en

$$\frac{u_0 - 2\bar{\epsilon}_z}{2\sqrt{\bar{\epsilon}_z}\sqrt{u_0 - \bar{\epsilon}_z}} \sinh\left(\frac{r\sqrt{u_0 - \bar{\epsilon}_z}}{1+r}\right) \sin\left(\frac{\sqrt{\bar{\epsilon}_z}}{1+r}\right) + \cosh\left(\frac{r\sqrt{u_0 - \bar{\epsilon}_z}}{1+r}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{\bar{\epsilon}_z}}{1+r}\right) = \cos(k_z(a+b)) \quad (3.5)$$

¿Por qué hicimos estos cambios? En el caso de r la motivación es conceptual: es más intuitivo visualizar la estructura del potencial, e incluso sus efectos, en términos de la razón entre el ancho de las barreras y de la separación entre ellas. Por su parte las definiciones de u_0 y $\bar{\epsilon}_z$ son convenientes porque facilitan el análisis numérico así como el cómputo del espectro de energías correspondientes a una combinación específica de los parámetros.

3.1. Generalidades

Para visualizar el espectro de energía del potencial de Kronig-Penney, que depende de tres parámetros diferentes, hay que elegir el parámetro en función de cuál se va a mostrar. Para una imagen bidimensional se deben fijar dos parámetros, por ejemplo u_0 y r , y se grafica la energía $\bar{\epsilon}_z$ como función de $k_z(a+b)$. En general hay tres maneras de visualizar el espectro en dos dimensiones, que son cualquiera de las combinaciones (u_0, r) , $(u_0, k_z(a+b))$ y $(r, k_z(a+b))$. El parámetro restante se usa como variable independiente.

Si se toma la primera posibilidad, fijando u_0 y r , se obtienen espectros como los de Fig. 3.2a y Fig. 3.2b. Ambos corresponden a $r = 1$, es decir, cuando el ancho de las barreras de potencial es igual al espaciamiento entre ellas. En este ejemplo las bandas corresponden a las líneas sólidas, mientras que las discontinuidades (saltos) corresponden a las regiones prohibidas, alternándose unas con las otras para formar el espectro. El tamaño de las brechas prohibidas no es constante, sino que disminuye a medida que crece $k_z(a+b)$, teniendo como consecuencia directa que el espectro se aproxime cada vez más al de la partícula libre, $\bar{\epsilon}_z^{\text{libre}} = (k_z(a+b))^2$.

Para los valores de u_0 usados en las figuras Fig. 3.2a y Fig. 3.2b no es particularmente obvia la distribución de las bandas debajo de la altura de las barreras de potencial, ya que sólo existe una banda completa, ni tampoco se puede decir mucho sobre el ancho de las mismas. Sin embargo, para las Fig. 3.2c y Fig. 3.2d es claro que a valores más elevados del potencial las bandas debajo de éste se asemejan cada vez más a niveles, y su número se incrementa. Estas bandas extremadamente angostas están localizadas alrededor de las energías

$$\bar{\epsilon}_{n,z}^{\text{ref}} = (1+r)^2 n^2 \pi^2 \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.6)$$

3. ESPECTRO DE ENERGÍAS

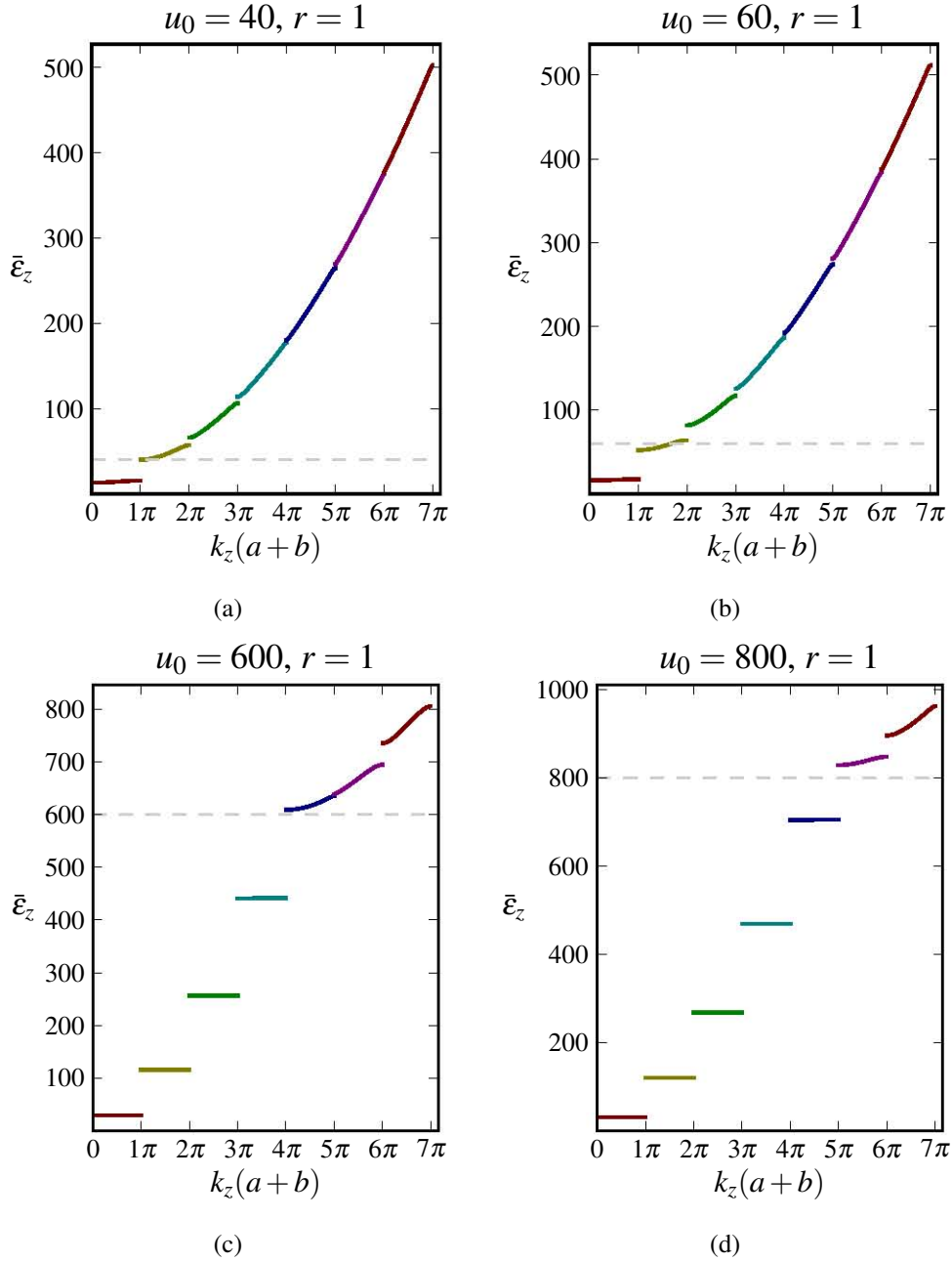


Figura 3.2: Espectro de energías en función de $k_z(a+b)$ para $r = 1$ y algunos valores representativos de u_0 . La línea punteada representa $\bar{\epsilon}_z = u_0$.

donde n es el índice de la banda. Si se recuerda que la energía de una partícula en una caja unidimensional de ancho a sólo puede tomar los valores $\epsilon_{n,z}^{\text{caja}} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} n^2 \pi^2$, que

adimensionaliza en términos de $\hbar^2/2m(a+b)^2$ se transforma en $\bar{\epsilon}_{n,z}^{\text{caja}} = (1+r)^2 n^2 \pi^2$, se encuentra que corresponde a $\bar{\epsilon}_{n,z}^{\text{ref}}$. Esta correspondencia viene a confirmar que para las partículas cuya energía es menor que u_0 el potencial es tan alto que efectivamente parecería infinito, por lo que sólo pueden tomar energías muy próximas a las dadas por Ec. (3.6). Sin embargo las energías disponibles aún forman una banda debido a que el potencial de Kronig-Penney consiste de una infinidad de pozos separados por las barreras de potencial.

3.2. Espectro de energía como función de la magnitud y el ancho de las barreras

Se puede obtener una visión más amplia del espectro si se visualiza la estructura de las bandas en función de la magnitud del potencial considerando solamente los valores extremos de las mismas, es decir, las energías mínima y máxima de una banda. Esto significa encontrar las energías de la j -ésima banda en los valores $k_z(a+b) = (j-1)\pi$ y $k_z(a+b) = j\pi$ respectivamente. De esta manera se puede visualizar el espectro para un valor fijo de r y para un amplio intervalo de u_0 mostrando solamente la evolución de la anchura de las bandas. Esto se muestra en la Fig. 3.3, donde se han graficado algunas bandas del espectro de energía para $r = 1$ y $r = 10$ sobre un intervalo de u_0 suficientemente amplio para observar el cambio de las mismas. Como referencia la curva $\bar{\epsilon}_z = u_0$ se ha indicado con una línea punteada.

Es claro como el ancho de las bandas disminuye con el incremento en la magnitud del potencial u_0 , y cómo las bandas de energía por debajo de la altura de la barrera tienden a un nivel de energía cuyo valor está dado por Ec. (3.6). Además de esto, la estructura de bandas tiene ciertos puntos en los cuales dos bandas se unen, es decir, que el borde superior de una banda entra en contacto con el borde inferior de la siguiente [24]. Se puede determinar la posición de estos puntos a partir de la relación de dispersión en las fronteras de bandas, es decir, en $k_z(a+b) = j\pi$, donde j es un entero. En las fronteras se obtienen dos ecuaciones a partir de la relación de dispersión:

$$\frac{u_0 - 2\bar{\epsilon}_z}{2\sqrt{\bar{\epsilon}_z}\sqrt{u_0 - \bar{\epsilon}_z}} \sinh\left(\frac{r\sqrt{u_0 - \bar{\epsilon}_z}}{1+r}\right) \sin\left(\frac{\sqrt{\bar{\epsilon}_z}}{1+r}\right) + \cosh\left(\frac{r\sqrt{u_0 - \bar{\epsilon}_z}}{1+r}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{\bar{\epsilon}_z}}{1+r}\right) = \pm 1 \quad (3.7)$$

donde el signo menos corresponde a j impar y el signo más a j par.

Considerando por el momento únicamente que $\bar{\epsilon}_z > u_0$ se aplica el cambio de variable $w \equiv r\sqrt{\bar{\epsilon}_z - u_0}/(1+r)$, $v \equiv \sqrt{\bar{\epsilon}_z}/(1+r)$ la ecuación anterior se transforma en

$$-\frac{w^2 + r^2 v^2}{2r w v} \sin(w) \sin(v) + \cos(w) \cos(v) = \pm 1. \quad (3.8)$$

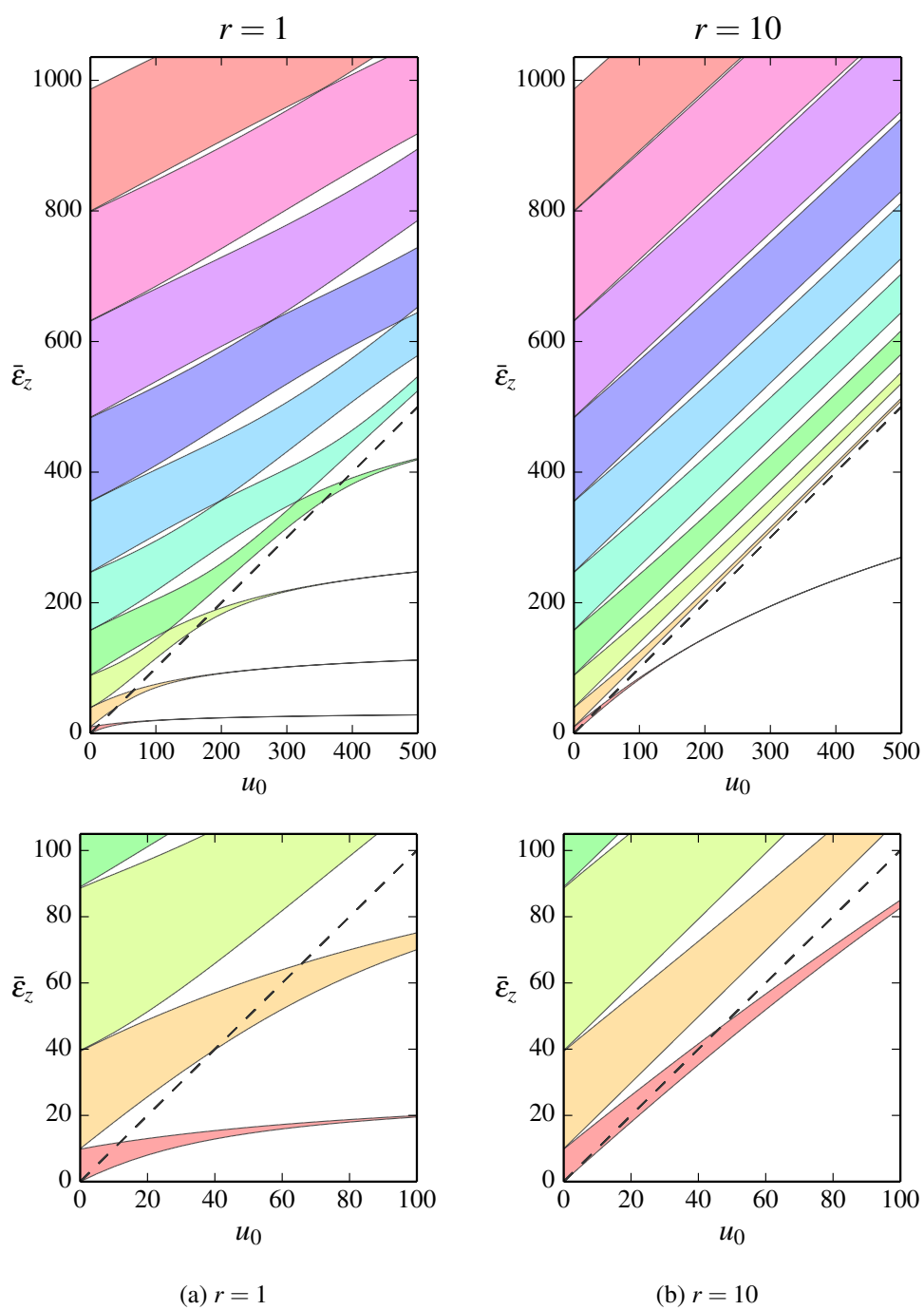


Figura 3.3: Bandas de energía como función de la magnitud del potencial. La línea punteada representa $\bar{\epsilon}_z = u_0$.

3.2. Espectro de energía como función de la magnitud y el ancho de las barreras

Tras algunas transformaciones algebraicas se pueden factorizar las ecuaciones anteriores; para el caso $\cos(k_z(a+b)) = 1$ las ecuaciones para las energías en la frontera quedan como

$$w\text{sen}(w) + r v \text{sen}(v) = -\sqrt{r w v}(\cos(w) - \cos(v)) \quad (3.9)$$

$$w\text{sen}(v) + r v \text{sen}(w) = \sqrt{r w v}(\cos(w) - \cos(v)) \quad (3.10)$$

mientras que para $\cos(k_z(a+b)) = -1$ los factores son

$$w\text{sen}(w) - r v \text{sen}(v) = \sqrt{r w v}(\cos(w) + \cos(v)) \quad (3.11)$$

$$w\text{sen}(v) - r v \text{sen}(w) = \sqrt{r w v}(\cos(w) + \cos(v)) \quad (3.12)$$

Luego entonces son estas ecuaciones las que definen los puntos donde las bandas se unen. Al sumar las ecuaciones (3.9) y (3.10) se obtiene la primera condición que deben satisfacer w y v : $\text{sen}(v) + \text{sen}(w) = 0$, por lo cual $w = v - m_1\pi$, con m_1 un entero impar, mientras que al restar la ecuación (3.11) de (3.12) se determina otra condición similar: $\text{sen}(w) - \text{sen}(v) = 0$, así que $w = v - m_2\pi$, con m_2 entero par. Luego entonces la relación entre ambos parámetros es $w = v - m\pi$.

Cuando aplicamos la relación $w = v - m\pi$ a las ecuaciones (3.9) y (3.10) y sumamos ambas obtenemos la relación

$$((-1)^m + 1)(w + r v)\text{sen}(v) = 0 \quad (3.13)$$

la cual se satisface para m impar, como era de esperarse, y cuando $v = n\pi$, con n entero. Haciendo lo mismo con las ecuaciones (3.11) y (3.12), y restando la segunda de la primera obtenemos

$$((-1)^m - 1)(w + r v)\text{sen}(v) = 0 \quad (3.14)$$

la cual se satisface para m par así como para $v = n\pi$. Dado que $v > 0$ se sigue que $n \geq 1$. Con v determinado obtenemos que $w = (n - m)\pi$; además como $0 < w < v$ entonces m está restringida a tomar valores tales que $0 < m < n$. Entonces los puntos donde entran en contacto las bandas están dados por

$$\bar{\epsilon}_z = (1 + r)^2 n^2 \pi^2, \quad n \geq 1, n \in \mathbb{Z} \quad (3.15)$$

$$u_0 = (1 + r)^2 n^2 \pi^2 - \left(\frac{1 + r}{r}\right)^2 (n - m)^2 \pi^2, \quad n > m > 0, m \in \mathbb{Z}, r \neq 0 \quad (3.16)$$

La Fig. 3.4 muestra los puntos de contacto para las primeras diez bandas. Es necesario notar que cuando nos restringimos a valores positivos de u_0 , como lo hemos hecho hasta ahora, m debe tomar valores tales que $m > n(1 - r)$, además de ser mayor que cero. Cuando $r \geq 1$ resulta que u_0 es positiva para cualquier valor de m ; cuando $r < 1$ solamente lo es cuando $m \geq [n(1 - r)]$, es decir, cuando es mayor o igual que el mínimo entero no menor que $n(1 - r)$.

Se puede realizar un análisis similar para la situación $u_0 > \bar{\epsilon}_z$, en la cual $w = iw'$, con $w' = r\sqrt{u_0 - \bar{\epsilon}_z}/(1+r)$. Este cambio introduce cantidades imaginarias en las relaciones algebraicas que llevan a la conclusión de que debajo del nivel de potencial las bandas nunca hacen contacto una con otra, solamente evolucionan hacia niveles claramente definidos a medida que se incrementa la magnitud de u_0 .

El espectro de bandas en dos casos que pueden considerarse extremos como $r = 0.001$ y $r = 1000$ se muestran en la Fig. 3.5. A primera vista los dos espectros son diferentes, y deben serlo ya que ambas situaciones no son equivalentes; sin embargo ambas tienen en común el hecho de que las bandas forman prácticamente un espectro continuo pues están en contacto para todo valor del intervalo u_0 mostrado. La diferencia es la energía a partir de la cual comienza el espectro: cuando r es pequeña esta energía corresponde a cero, mientras que cuando r es grande corresponde al nivel del potencial.

Cuando r es pequeña se tiene que $b \ll a$, así que las partículas interactúan débilmente con el potencial porque el espaciamiento entre barreras supera ampliamente el ancho de las mismas, y el nivel más bajo de energía es cero ya que el espectro tiende al de una partícula libre. Por supuesto, si la magnitud del potencial es mucho más elevado que el mostrado en las figuras lo anterior deja de ser cierto. Por otro lado cuando r es grande $a \ll b$, y es más adecuado visualizar el sistema ya no como barreras sino como una sucesión de pozos de potencial muy delgados. En este nuevo sistema los pozos tienen una profundidad u_0 y el cero de la energía corresponde a la altura del potencial del sistema anterior, es decir, a u_0 , ya que al pasar de barreras a pozos simplemente se está desplazando el potencial por una constante.

Para un único pozo de potencial existe siempre un estado ligado con energía menor que cero, y cuando el pozo se hacen más delgado la energía del estado ligado aumenta de magnitud, aproximándose cada vez mas a cero. El resultado para una sucesión

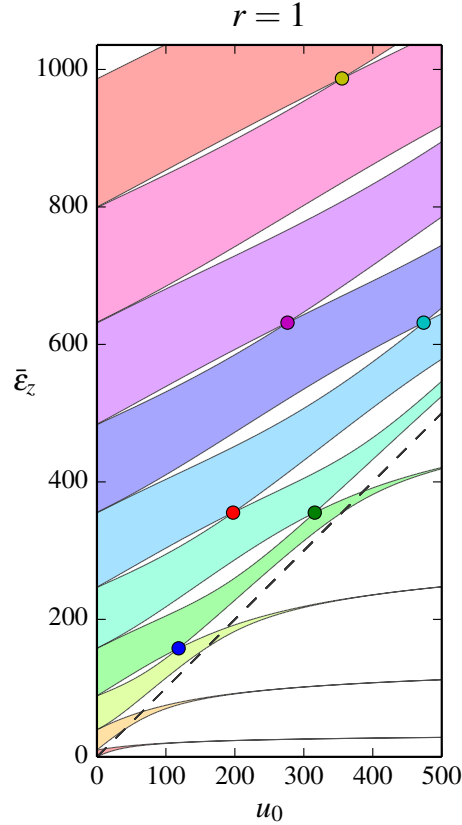


Figura 3.4: Puntos de contacto entre bandas de acuerdo a las ecuaciones (3.15) y (3.16).

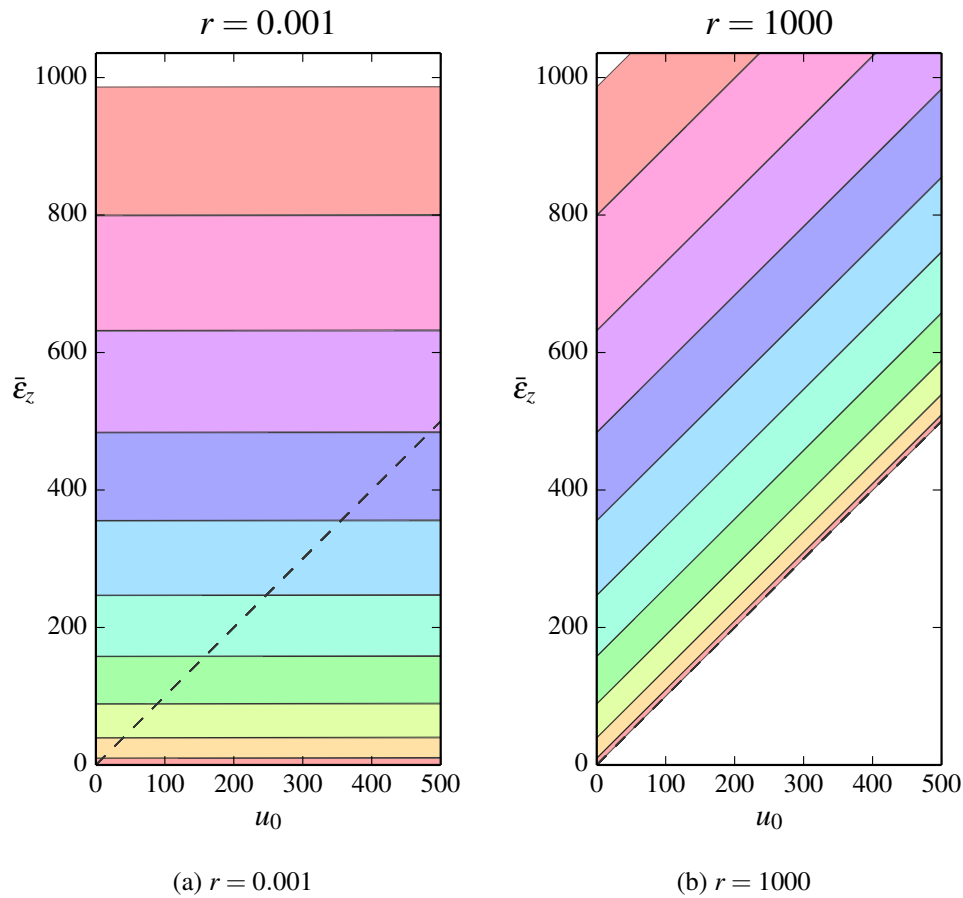


Figura 3.5: Bandas de energía como función de la magnitud del potencial. La línea punteada representa $\bar{\epsilon}_z = u_0$.

infinita de pozos es que la primera banda de energía, o al menos una fracción de ella, siempre estará debajo del cero de la energía, y a medida que los pozos se hacen más delgados su magnitud se incrementa. Por su parte las partículas con energías positivas interactúan débilmente con los pozos, así que su espectro se asemejará al de una partícula libre. Entonces cuando se pasa de la imagen de pozos a barreras nuevamente el cero pasa a corresponder al nivel de las barreras, u_0 , pero el espectro en esencia sigue siendo el mismo. Sin duda esto es lo que se observa en la Fig. 3.5b.

3.3. Funciones de onda

Para determinar las funciones de onda en la dirección z , que en principio están dadas por las ecuaciones (2.13) y (2.14), hemos seguido el procedimiento establecido en el

majestuoso libro *Quantum Mechanics* de Eugene Merzbacher, segunda edición, [26, p. 100]. Bajo este esquema las funciones de onda se determinan a través del método de la matriz de transferencia aplicado al potencial de Kronig-Penney. El trabajo realizado por Merzbacher [26, p. 104] lleva a que las eigenfunciones en la dirección z en las regiones donde $V_z(z) = 0$ están dadas por

$$\psi_v(z) = e^{ink_z l} \left[\beta_2 e^{i\alpha(z-(n-1/2)l)} + (\alpha_1 \sin \alpha l - \beta_1 \cos \alpha l - \text{sen} k_z l) e^{-i\alpha(z-(n-1/2)l)} \right] \quad (3.17)$$

donde $\hbar\alpha \equiv \sqrt{2m\varepsilon_z}$ y $l \equiv a + b$, en el intervalo $b/2 + (n-1)l < z < -b/2 + nl$, donde n es un entero. Desde luego, esta ecuación ha sido adaptada al contexto de nuestro sistema, donde las barreras tienen un ancho b y existe una separación a entre ellas, diferente a la nomenclatura que utiliza Merzbacher. Tampoco el entero n en Ec. (3.17) es el mismo que en la Ec. (2.2). Sin embargo, al igual que en el libro de Merzbacher, aún se asume que el centro de las barreras se encuentra en $z_h = (n-1)l$. Los coeficientes α_1 , β_1 , y β_2 adaptados a nuestro sistema están dados por

$$\alpha_1 = \cosh \kappa b \cos \alpha b - \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{\alpha} - \frac{\alpha}{\kappa} \right) \text{senh} \kappa b \text{sen} \alpha b \quad (3.18)$$

$$\beta_1 = \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{\alpha} - \frac{\alpha}{\kappa} \right) \text{senh} \kappa b \cos \alpha b + \cosh \kappa b \text{sen} \alpha b \quad (3.19)$$

$$\beta_2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{\alpha} + \frac{\alpha}{\kappa} \right) \text{senh} \kappa b, \quad (3.20)$$

donde $\hbar\kappa \equiv \sqrt{2m(V_0 - \varepsilon_z)}$. Las eigenfunciones en las regiones donde $V_z(z) = V_0$ son de la forma

$$\psi_h(z) = A e^{\kappa(z-nl)} + B e^{-\kappa(z-nl)} \quad (3.21)$$

para $-b/2 + (n-1)l < z < b/2 + (n-1)l$. Los coeficientes A y B se obtienen al igualar las eigenfunciones, así como sus derivadas, en los bordes de las barreras, es decir, en $z = b/2 + (n-1)l$. Esto resulta en el sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas

$$\psi_v(b/2 + (n-1)l) = \psi_h(b/2 + (n-1)l) \quad (3.22)$$

$$\psi'_v(b/2 + (n-1)l) = \psi'_h(b/2 + (n-1)l). \quad (3.23)$$

La solución de este sistema son las constantes

$$A = \frac{e^{ink_z l}}{2} \left[\left(1 + i \frac{\alpha}{\kappa} \right) \beta_2 e^{i\alpha(b-l)/2 - \kappa(b/2-l)} + \left(1 - i \frac{\alpha}{\kappa} \right) (\alpha_1 \sin \alpha l - \beta_1 \cos \alpha l - \text{sen} k_z l) e^{-i\alpha(b-l)/2 - \kappa(b/2-l)} \right] \quad (3.24)$$

$$B = \frac{e^{ink_z l}}{2} \left[\left(1 - i \frac{\alpha}{\kappa} \right) \beta_2 e^{i\alpha(b-l)/2 + \kappa(b/2-l)} + \left(1 + i \frac{\alpha}{\kappa} \right) (\alpha_1 \sin \alpha l - \beta_1 \cos \alpha l - \text{sen} k_z l) e^{-i\alpha(b-l)/2 + \kappa(b/2-l)} \right]. \quad (3.25)$$

Finalmente la función de onda normalizada sobre un periodo en la dirección z es

$$\mathcal{L}(z) = \frac{\psi(z)}{\left(\int_{-b/2+(n-1)l}^{-b/2+nl} |\psi(z)|^2 dz \right)^{1/2}} \quad (3.26)$$

donde $\psi(z)$ es la función

$$\psi(z) = \begin{cases} \psi_h(z) & -b/2 + (n-1)l < z < b/2 + (n-1)l \\ \psi_v(z) & b/2 + (n-1)l < z < -b/2 + nl \end{cases} \quad (3.27)$$

con n entero. Sin embargo, dado que la integración analítica de $\psi(z)$ es muy engorrosa normalizaremos la función de onda mediante la integración numérica de $|\psi(z)|^2$.

Algunos resultados

Consideremos un sistema al que recurriremos constantemente en posteriores capítulos, uno donde el ancho de las barreras es igual a la separación entre ellas, es decir, $r = 1$. Escogemos $u_0 = 100$ por ser un potencial donde el efecto de las barreras sobre el espectro de energías es notable, ya que existen dos bandas permitidas muy angostas debajo del nivel del potencial según la Fig. 3.3a.

Ahora bien, la función de onda $\mathcal{L}(z)$ depende de k_z , y en consecuencia de ε_z . Es conveniente representarla en términos de los parámetros adimensionales $k_z(a+b)$ y $\bar{\varepsilon}_z$, ya que son el tipo de cantidades con las que trabajamos al analizar el espectro de energías. Esto se logra mediante las equivalencias entre los parámetros físicos del potencial

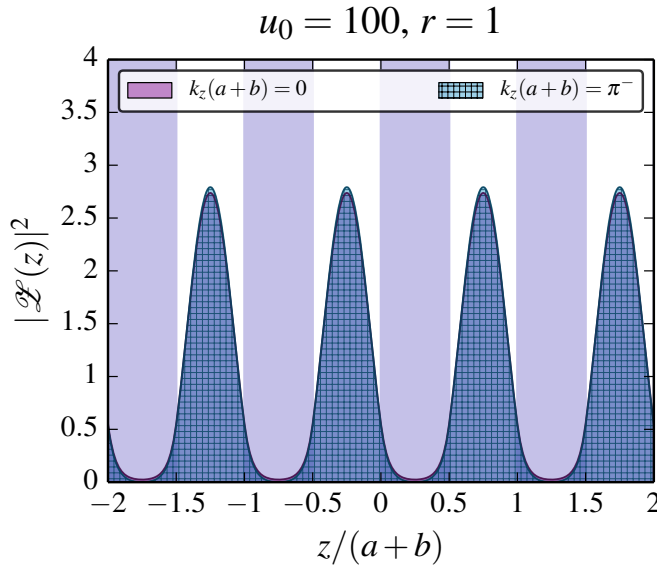


Figura 3.6: Densidad de probabilidad en el estado de mínima energía y en el borde superior de la primera banda. Las regiones sombreadas verticales representan la ubicación espacial de las barreras de potencial.

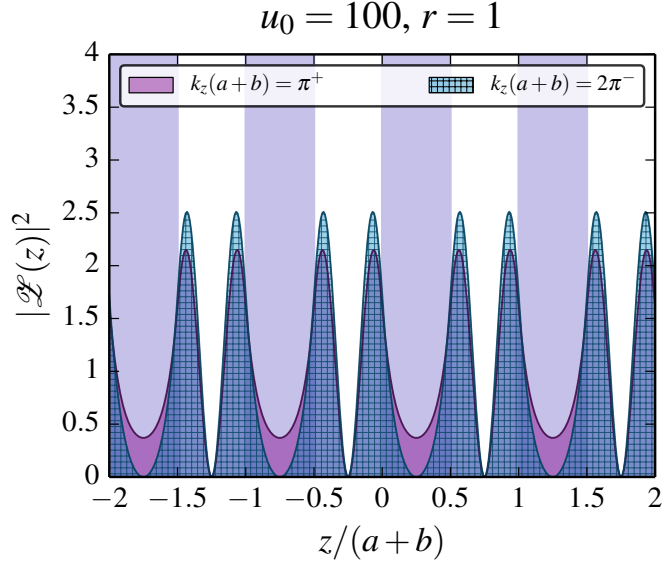


Figura 3.7: Densidad de probabilidad en los bordes inferior y superior de la segunda banda. Las regiones sombreadas verticales representan la ubicación espacial de las barreras de potencial.

y el parámetro adimensional $z/(a+b)$, que también resulta más conveniente para visualizar la densidad de probabilidad. Siendo así, sólo basta escoger $k_z(a+b)$ para obtener tanto $\mathcal{Z}(z)$ y la densidad de probabilidad $|\mathcal{Z}(z)|^2$.

En el caso de nuestro sistema se ha elegido $k_z(a+b) = 0$, que corresponde al estado de más baja energía del sistema, y $k_z(a+b) = \pi^-$, que corresponde al borde superior de la primera banda. Las gráficas de la densidad de probabilidad para estos momentos se muestran en la Fig. 3.6, donde se ha indicado la ubicación espacial de las barreras de potencial mediante una sucesión de regiones sombreadas verticales a fin de distinguir fácilmente cómo depende la densidad de probabilidad en las regiones donde el potencial es diferente de cero. Antes que nada, nótese que, según la Fig. 3.3a, la primera banda de energía se encuentra completamente debajo del nivel del potencial. Los resultados indican que la probabilidad de encontrar una partícula es mucho mayor en las regiones entre barreras que en las zonas donde el potencial actúa, por lo que la probabilidad de tunelaje es relativamente baja. Este es un resultado justificable pues para las partículas que ocupan estados con energías en la primera banda la altura de las barreras de potencial es muy alta, y disminuye considerablemente la probabilidad de que alguna de ellas atraviese las barreras.

Cuando las partículas se mueven a momentos más altos, i.e. a energías mayores, en particular a la segunda banda, la densidad de probabilidad cambia su distribución según la Fig. 3.7. En esta figura se visualiza la densidad de probabilidad para el mínimo y el máximo de la segunda banda, $k_z(a+b) = \pi^+$ y $k_z(a+b) = 2\pi^-$ respectivamente. En ambos casos la probabilidad de encontrar una partícula entre las barreras sigue siendo mayor, aunque la densidad se ha incrementado en la región donde actúan las barreras,

algo esperado dado que las energías de la segunda banda aún siguen debajo del nivel del potencial. Sin embargo, algo interesante en ambas situaciones es que la densidad es nula justo en medio de la región entre barreras. Esto es característico de una función de onda antisimétrica con un nodo justo en el punto central del pozo donde existe, y ocurre para todos los estados energéticos de la segunda banda. Esto es consistente con la situación límite en que u_0 tiende a infinito (donde el potencial es efectivamente el de una caja de paredes infinitas), la segunda banda se colapsa en el segundo nivel energético de una partícula en una caja, y cuyas funciones de onda para dicha energía son antisimétricas con un nodo a la mitad del espacio entre paredes. Por otra parte, a la mitad de las regiones ocupadas por las barreras la densidad de probabilidad se hace nula cuando la energía de las partículas es igual al borde superior de la segunda banda.

Podemos discutir algunas de las simetrías de la función de onda, las cuales hemos visualizado indirectamente en la densidad de probabilidad. Las simetrías en la región entre barreras se pueden deducir de la ecuación Ec. (3.17), donde los puntos medios de las regiones vacías entre barreras, que corresponden a $z_v = (n - 1/2)l$, son los puntos de referencia. Con esto en mente es claro que los puntos $z_1 = z + (n - 1/2)l$ y $z_2 = -z + (n - 1/2)l$ son equidistantes a los puntos medios, y son adecuados para analizar las simetrías. Para los casos que hemos visualizado $k_z l$ es un múltiplo entero de π , así que el factor $e^{ink_z l}$ es igual a ± 1 . Cuando se evalúa la función de onda en z_1 y z_2 sus partes real e imaginaria satisfacen las relaciones

$$\operatorname{Re}[\psi_v(z_1)] = \operatorname{Re}[\psi_v(z_2)] = \pm(\beta_2 + \alpha_1 \operatorname{sen} \alpha l - \beta_1 \cos \alpha l) \cos \alpha z \quad (3.28)$$

$$\operatorname{Im}[\psi_v(z_1)] = -\operatorname{Im}[\psi_v(z_2)] = \pm(\beta_2 - \alpha_1 \operatorname{sen} \alpha l + \beta_1 \cos \alpha l) \operatorname{sen} \alpha z \quad (3.29)$$

de donde es claro que la parte real es simétrica y la imaginaria es antisimétrica con respecto al punto medio. Más aún, cuando $k_z l$ es múltiplo entero de π se tiene que

$$\alpha_1 \operatorname{sen} \alpha l - \beta_1 \cos \alpha l = \pm \beta_2 \quad (3.30)$$

por lo que una de las partes de ψ_v es cero. Un análisis similar se puede hacer en las regiones ocupadas por las barreras a partir de Ec. (3.21). En general las simetrías dependen tanto de $k_z l$ como de n , y su estudio está lejos de ser trivial.

Cuando las partículas emigran a la tercera banda han superado el nivel del potencial. En esta situación las barreras actúan como centros dispersores en lugar de paredes confinantes, y habría que esperar que la densidad de probabilidad cambiara sustancialmente. En la Fig. 3.8 se puede visualizar la distribución de la densidad para los bordes inferior y superior de la tercera banda, $k_z(a+b) = 2\pi^+$ y $k_z(a+b) = 3\pi^-$ respectivamente. Para ambos momentos ocurre que la densidad de probabilidad es mayor en las regiones ocupadas por las barreras que en el intervalo entre ellas; la proporción entre ambas es entre dos o tres veces. En comparación, para energías en la primera y segunda

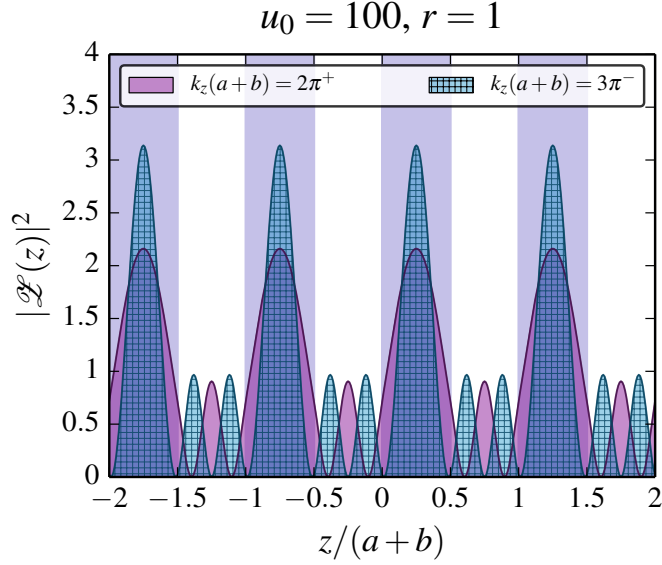


Figura 3.8: Densidad de probabilidad en los bordes inferior y superior de la tercera banda. Las regiones sombreadas verticales representan la ubicación espacial de las barreras de potencial.

banda la proporción análoga es completamente opuesta: la densidad de probabilidad en el intervalo donde actúan las barreras es varias veces menor a la densidad entre éstas últimas. La distribución de la densidad de probabilidad para partículas en la tercera banda, y en general para bandas superiores, muestra que es más probable encontrar una partícula en la región donde las barreras actúan que en la región entre estas. Por otra parte la frecuencia espacial de oscilación de la función de onda dictada por el vector de onda $\sqrt{2m\epsilon_z}/\hbar$, que afecta el número de nodos de la densidad de probabilidad, es mayor en la región entre barreras. Desde una perspectiva semiclásica podemos pensar que, como la frecuencia de oscilación de la función de onda es más alta entre las barreras la energía cinética de las partículas allí es mayor, por lo que tienden a concentrarse en las regiones donde su energía cinética es menor, es decir, en las regiones donde están las barreras.

Cuando la magnitud de las barreras se incrementa, por ejemplo, cuando $u_0 = 500$ y $r = 1$, existen cuatro bandas debajo del nivel del potencial, y las primeras tres realmente se asemejan a los niveles energéticos de una partícula en una caja. Así, para estados energéticos en la primera banda, es natural esperar que la densidad de probabilidad sea mucho mayor en la región entre barreras que donde se ubican éstas, muy similar a lo que se muestra en la Fig. 3.6. Los resultados para este potencial se muestran en la Fig. 3.9, donde se visualiza la densidad de probabilidad para el estado de mínima energía, $k_z(a+b) = 0$, y para el máximo de la primera banda, $k_z(a+b) = \pi^-$. Efectivamente la densidad de probabilidad se distribuye según nuestras expectativas, e incluso es más aguda que para $u_0 = 100$, ya que la probabilidad de tunelaje disminuye conforme se incrementa la magnitud de las barreras de potencial. Así, las partículas se encuentran

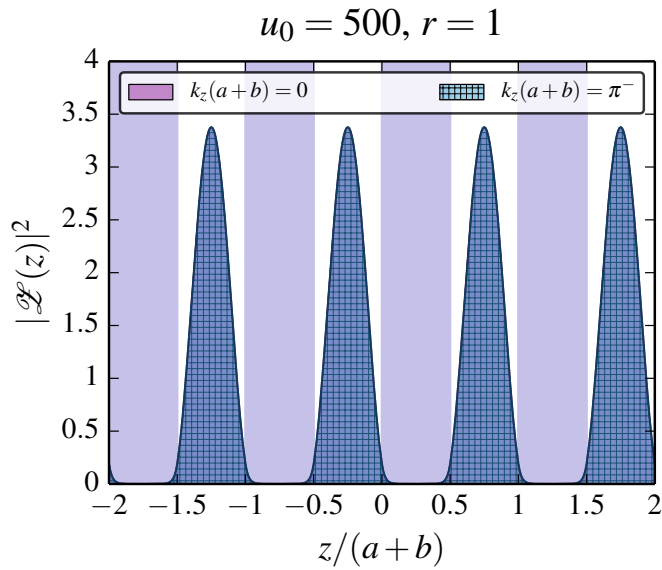


Figura 3.9: Densidad de probabilidad en el estado de mínima energía y en el borde superior de la primera banda. Las regiones sombreadas verticales representan la ubicación espacial de las barreras de potencial.

sugetas a un atrapamiento cada vez más grande a medida que la magnitud de las barreras se incrementa.

Por otro lado, cuando se disminuye la magnitud del potencial, puede esperarse que la probabilidad de tunelaje se incremente. Para un sistema con $u_0 = 10, r = 1$, los resultados se muestran en la Fig. 3.10, también para el estado de mínima energía y el máximo de la primera banda. En esta situación es claro que, aunque la densidad sigue

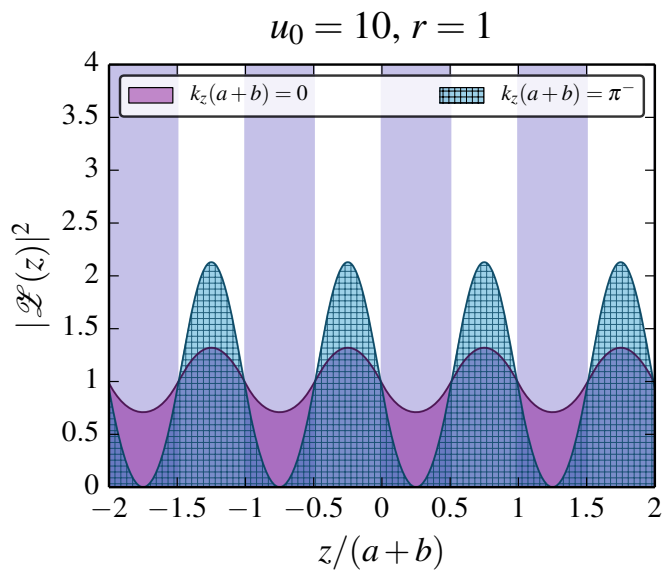


Figura 3.10: Densidad de probabilidad en el estado de mínima energía y en el borde superior de la primera banda. Las regiones sombreadas verticales representan la ubicación espacial de las barreras de potencial.

siendo mayor en el intervalo entre barreras para ambos momentos, es comparable en las regiones donde se ubican éstas. Así que el tunelaje es efectivamente más probable. Según la Fig. 3.3a la energía mínima de este sistema está debajo del nivel de potencial, pero no así el máximo de la primera banda: esta energía está ligeramente encima de u_0 ; un cálculo concreto indica que corresponde a $\bar{\epsilon}_z \approx 11.5$. En este caso ya no habría tunelaje, sino dispersión de las partículas por las barreras, y los resultados indican que es más probable encontrar partículas en el espacio vacío que donde se ubican las barreras.

Por otra parte, ¿cómo es la densidad de probabilidad cuando el ancho de las barreras aumenta o disminuye respecto a su separación? Siendo concretos, ¿qué pasa cuando r cambia? Considérese que r disminuye para u_0 fijo. En este caso al adelgazarse las barreras el sistema se asemeja cada vez más a un gas ideal libre, y en un caso límite como $r = 0.001$, mostrado en Fig. 3.5a, es prácticamente idéntico a éste. Así, para energías debajo de u_0 lo que puede esperarse es que la densidad de probabilidad se incremente en las regiones ocupadas por las barreras, y por lo tanto aumente la probabilidad de tunelaje.

Pero no vayamos tan lejos y consideremos que $r = 0.1$, es decir, barreras diez veces más angostas que la distancia entre ellas, caso para el cual el espectro de energías se muestra en la Fig. 3.11. En este caso las bandas son más anchas con respecto a $r = 1$ en Fig. 3.3a. En la dirección opuesta está el caso en que $r = 10$, donde las barreras son diez veces más anchas que la separación entre ellas, y cuyo espectro de energía se muestra en la Fig. 3.3b. En este caso el número de bandas debajo del potencial disminuye.

La densidad de probabilidad para el estado de mínima energía y el borde superior de la primera banda, para $u_0 = 100$ y $r = 0.1$, y cuyas magnitudes son menores que el valor del potencial, se muestra en la Fig. 3.12. En esta figura es claro cuán delgadas son las barreras respecto al periodo $a + b$ del potencial y es claro, al compararla con la Fig. 3.6, que la densidad de probabilidad ahora es mayor en las regiones ocupadas por las

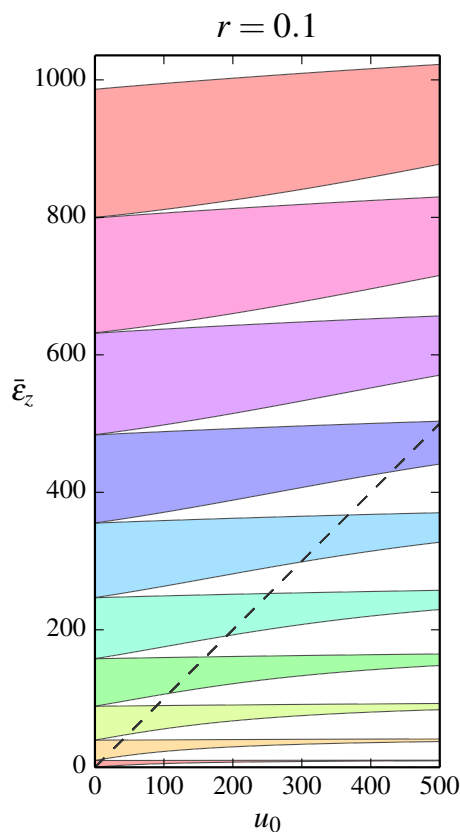


Figura 3.11: Espectro de energías para $r = 0.1$. La línea punteada representa $\bar{\epsilon}_z = u_0$.

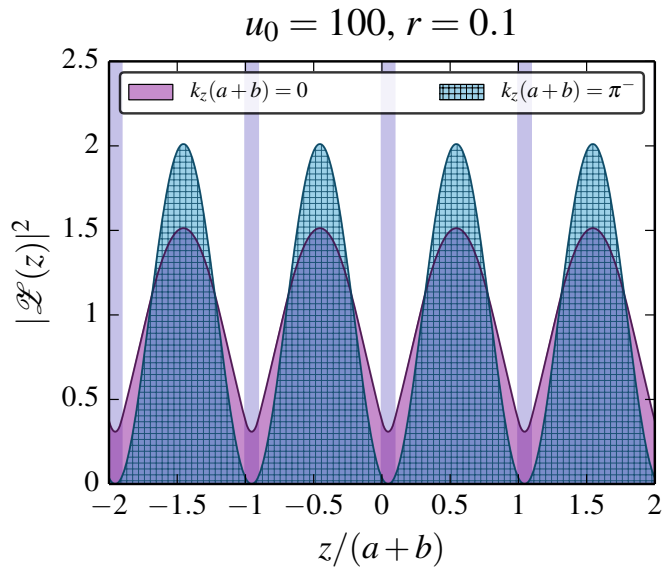


Figura 3.12: Densidad de probabilidad en el estado de mínima energía y en el borde superior de la primera banda. Las regiones sombreadas verticales representan la ubicación espacial de las barreras de potencial.

barreras, al menos en el estado de mínima energía; cuando $\bar{\epsilon}_z$ corresponde al máximo de la primera banda ($k_z(a+b) = \pi^-$) la densidad es nula justo a la mitad de las barreras. Así el confinamiento de las partículas disminuye en relación al sistema $u_0 = 100, r = 1$; en ambos la densidad de probabilidad sigue siendo mayor en el espacio entre barreras.

Finalmente tomamos un sistema con $u_0 = 100$, pero con $r = 10$. Las densidades de probabilidad para el estado de mínima energía y el máximo de la primera banda se

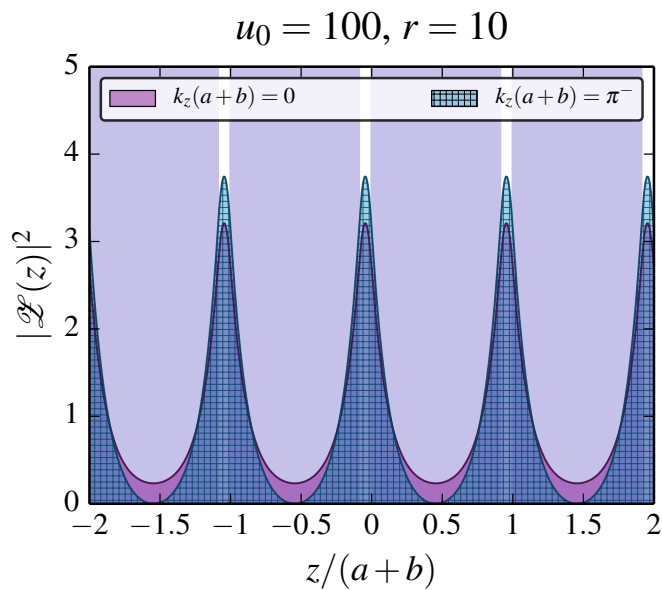


Figura 3.13: Densidad de probabilidad en el estado de mínima energía y en el borde superior de la primera banda. Las regiones sombreadas verticales representan la ubicación espacial de las barreras de potencial.

3. ESPECTRO DE ENERGÍAS

muestran en la Fig. 3.13. En ésta es clara la extensión de las barreras en proporción al periodo del potencial, así como dónde se ubican las regiones vacías. Las energías escogidas, así como la primera banda completa, son menores que u_0 según Fig. 3.3b. Las curvas indican que el efecto de engrosar las barreras es agudizar la densidades de probabilidad alrededor y dentro de las regiones vacías, aunque en las zonas donde el potencial es u_0 sigue habiendo una densidad y, por lo tanto, una probabilidad de tunelaje, considerables. Por las simetrías de la función de onda en el centro de las barreras la densidad de probabilidad es nula para el máximo de la primera banda.

En los casos que la energía es mayor que u_0 se puede esperar una densidad de probabilidad similar a la de la Fig. 3.8, donde la densidad es menor en la región entre barreras que donde se encuentran éstas. A medida que el momento de las partículas se incrementa su energía se aproxima cada vez más a la de una partícula libre, y es de esperarse que la densidad de probabilidad fluctuó menos entre las regiones ocupadas por las barreras y las regiones vacías.

4

Temperatura crítica

Para determinar si nuestro sistema presenta condensación Bose-Einstein a temperaturas diferentes de cero partimos de la ecuación de número, la cual se obtiene al derivar parcialmente el Gran Potencial con respecto al potencial químico según Ec. (2.25)

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

El Gran Potencial está dado por Ec. (2.28), así la ecuación de número es

$$N = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_0 - \mu)} - 1} + \frac{mV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z g_2' \left(e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)} \right) \beta e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)} \quad (4.1)$$

Aquí ε_0 es la energía total del estado base. En virtud de que ε_x y ε_y son cero con $k_x = k_y = 0$ se sigue que ε_0 corresponde a ε_z en $k_z = 0$, i.e. $\varepsilon_0 = \varepsilon_{0z} = \varepsilon_z(k_z = 0)$. La prima sobre g_2 significa la derivada con respecto a su argumento. Por otra parte se puede usar la propiedad de la función de Bose [25, p. 506] $u g_s'(u) = g_{s-1}(u)$, $u g_2'(u) = g_1(u) = -\ln(1 - u)$, con $u = e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}$, por lo que la ecuación de número queda como

$$N = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{0z} - \mu)} - 1} - \frac{mV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) \quad (4.2)$$

El primer término de esta ecuación es el número de bosones en el estado condensado, $N_0 = 1/(e^{\beta(\varepsilon_{0z} - \mu)} - 1)$, correspondiente al estado base del sistema cuya energía es ε_{0z} . Por lo tanto el segundo término corresponde al número de partículas en estados excitados N_e

$$N_e = - \frac{mV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) \quad (4.3)$$

y $N = N_0 + N_e$.

La Ec. (4.2) establece que a toda temperatura diferente de cero siempre habrá bosones en el estado base y en estados excitados, y el potencial químico μ tiene un papel muy importante en la distribución de ambos. Para un gas de Bose la condición $\mu \leq \varepsilon_{0z}$ se satisface a toda temperatura; en el caso en que μ es muy próximo a ε_{0z} el número

4. TEMPERATURA CRÍTICA

de bosones en el estado condensado N_0 puede ser una fracción significativa del número total de partículas. Es esta acumulación de una fracción macroscópica de partículas en el estado $\varepsilon = \varepsilon_{0z}$ lo que da origen al fenómeno de la condensación Bose-Einstein.

Ahora bien, como $\mu \leq \varepsilon_{0z}$ el número de partículas en estados excitados resulta estar acotado por

$$N_e^{(max)} = -\frac{mV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_z - \varepsilon_{0z})}) \quad (4.4)$$

límite que corresponde a $\mu = \varepsilon_{0z}$. Entonces mientras el número de partículas N sea menor que este límite prácticamente todos los bosones se distribuyen en los estados excitados, $N \approx N_e$ y el potencial químico está determinado implícitamente por Ec. (4.3). Cuando el número de bosones excede dicho límite, es decir, este límite se convierte en infinito, es de esperarse que los estados excitados acepten N_e de ellos, mientras que el resto son empujados masivamente al estado base ε_{0z} . En caso que N y V permanezcan constantes y se varíe T habrá condensación siempre que $N > N_e^{(max)}$, es decir, para toda $T < T_c$, donde T_c es la *temperatura de condensación Bose-Einstein* y corresponde al valor límite de los estados excitados a $T = T_c$. Por consiguiente el número de bosones a T_c es

$$N = -\frac{mV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta_c} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln(1 - e^{-\beta_c(\varepsilon_z - \mu_0)}), \quad (4.5)$$

temperatura a la cual $\mu = \mu_0 = \varepsilon_{0z}$ y $\beta_c = 1/k_B T_c$. Así la temperatura crítica queda determinada implícitamente por Ec. (4.5).

Es claro que cuando $T < T_c$ habrá una fracción N_0 y una fracción N_e conviviendo entre sí tal que $N = N_0 + N_e$. De acuerdo con esto, el sistema se puede ver como una mezcla de dos fases:

- **Fase condensada**, que consiste de N_0 bosones en el estado base ε_{0z} .
- **Fase normal**, formada por N_e bosones distribuidos en estados excitados.

Esto tiene implicaciones en las propiedades termodinámicas del sistema. En particular, como el número de partículas en el estado condensado es $N_0 = 1/(e^{\beta(\varepsilon_{0z} - \mu)} - 1)$, resulta que el potencial químico está dado por

$$\mu = \varepsilon_{0z} - k_B T \ln \left(\frac{N_0 + 1}{N_0} \right) \quad (4.6)$$

Para $T < T_c$ se tiene que $\mu = \mu_0 = \varepsilon_{0z}$ porque $(N_0 + 1)/N_0$ tiende a la unidad.

4.1. Expresiones adimensionales

En este punto es conveniente definir el parámetro adimensional

$$\sigma = \frac{\hbar^2}{2m(a+b)^2 k_B T_0} \quad (4.7)$$

donde $a+b$ es el periodo del potencial de Kronig-Penney y T_0 es la temperatura crítica de un gas ideal de bosones en 3D en el límite termodinámico

$$T_0 = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left(\frac{\eta_B}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3} \quad (4.8)$$

la cual depende de la densidad de bosones $\eta_B = N/V$ y de $\zeta(z)$, la función Zeta de Riemann.

Dividiendo la Ec. (4.5) entre N y haciendo uso de la paridad de la energía respecto a k_z se obtiene

$$1 = -\frac{m}{\eta_B(2\pi)^2\hbar^2} \frac{2}{\beta_c} \int_0^\infty dk_z \ln(1 - e^{-\beta_c(\varepsilon_z - \mu_0)}) \quad (4.9)$$

donde $\eta_B = N/V$ representa la densidad de bosones del sistema que se analiza en este trabajo.

Antes de proceder con más ecuaciones y equivalencias se debe recordar que bajo ciertos parámetros el sistema de estudio debe comportarse de manera semejante a un gas ideal de bosones libre y de tamaño infinito; esto se vio cuando se analizó el espectro de energías del sistema. Sin duda, es natural tomar el gas ideal de bosones como referencia también para los cálculos de temperatura crítica y para otras propiedades termodinámicas adicionales. Por lo tanto, si se considera que la densidad de bosones η_B de nuestro sistema es igual a la densidad de bosones de un gas ideal de bosones libre e infinito la Ec. (4.8) se puede utilizar, junto con la definición de σ de Ec. (4.7) para llegar a la equivalencia

$$\eta_B = \frac{\zeta(3/2)}{(4\pi\sigma)^{3/2}(a+b)^3} \quad (4.10)$$

Con esta igualdad y tras algunos pasos algebraicos se llega a que

$$\frac{m}{\eta_B(2\pi)^2\hbar^2} = \frac{(a+b)\sqrt{\sigma/\pi}}{\zeta(3/2)k_B T_0} \quad (4.11)$$

con lo cual la Ec. (4.9) queda expresada como

$$-1 = \frac{2\sqrt{\sigma/\pi} T_c}{\zeta(3/2) T_0} \int_0^\infty \ln(1 - e^{-\beta_c(\varepsilon_z - \mu_0)}) dk'_z \quad (4.12)$$

donde $dk'_z \equiv (a+b)dk_z$. Se puede ir más lejos a partir de que

$$\varepsilon_z - \mu_0 = \sigma(\bar{\varepsilon}_z - \bar{\mu}_0)k_B T_0 \quad (4.13)$$

4. TEMPERATURA CRÍTICA

donde $\bar{\varepsilon}_z \equiv \varepsilon_z / (\hbar^2 / 2m(a+b)^2)$ y $\bar{\mu}_0 \equiv \mu_0 / (\hbar^2 / 2m(a+b)^2)$ son la energía y el potencial químico adimensionalizados con la unidad de energía $\hbar^2 / 2m(a+b)^2$. Esto deja la Ec. (4.12) en términos de la temperatura crítica en su forma final adimensionalizada

$$-1 = \frac{2\sqrt{\sigma/\pi}}{\zeta(3/2)} \tilde{T}_c \int_0^\infty \ln(1 - e^{-\sigma(\bar{\varepsilon}_z - \bar{\mu}_0)/\tilde{T}_c}) dk'_z, \quad (4.14)$$

donde \tilde{T}_c está definida por

$$\tilde{T}_c \equiv \frac{T_c}{T_0}. \quad (4.15)$$

La Ec. (4.14) es adecuada para obtener resultados numéricos ya que las energías necesarias se obtienen a partir de Ec. (3.5) y el parámetro \tilde{T}_c está adimensionalizado. Sin embargo está la cuestión de cómo definir σ en función de un solo parámetro de referencia, ya que es un cociente de energías, una es $\hbar^2 / 2m(a+b)^2$, empleada como unidad para determinar el espectro de energías del sistema, y la otra es $k_B T_0$, donde T_0 es la referencia para la temperatura. La solución a esto se encuentra en la relación que determina implícitamente la fugacidad de un gas ideal de bosones libre a una temperatura T , $z = e^{\beta\mu}$, en términos de la densidad de partículas

$$g_{3/2}(z) = \lambda^3 \eta_B \quad (4.16)$$

donde la longitud de onda térmica λ a una temperatura T está dada por

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}} \quad (4.17)$$

Para un gas ideal libre a $T \leq T_0$ la fugacidad es igual a la unidad, entonces su longitud de onda térmica a su temperatura de condensación T_0 satisface la relación

$$\lambda_0^3 \eta_B = \zeta(3/2) \quad (4.18)$$

siendo $\lambda_0 = h / \sqrt{2\pi m k_B T_0}$. La expresión para η_B dada en Ec. (4.10) permite redefinir σ en función del periodo $a+b$ del potencial y de la longitud de onda térmica λ_0 mediante la relación

$$\sigma = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{a+b}{\lambda_0} \right)^{-2} \quad (4.19)$$

de tal manera que σ queda determinado por un solo parámetro adimensional, $(a+b)/\lambda_0$.

Con todo lo anterior se pueden obtener resultados numéricos de manera muy conveniente ya que todos los parámetros del sistema están adecuadamente adimensionalizados. Es necesario tomar en cuenta la naturaleza discontinua del espectro de energías (compuesto de bandas separadas por regiones prohibidas) antes de proceder con la integración, así como la singularidad en $k'_z = 0$.

4.2. Un ejemplo base: ancho y separación de las barreras iguales

El efecto de la magnitud del potencial, así como de la anchura de las barreras, en la temperatura crítica se ilustra en las figuras 4.1 y 4.2, en las que se muestra la dependencia de T_c/T_0 con respecto a u_0 y $(a+b)/\lambda_0$ para $r = 1$. Este caso representa un potencial en el cual el ancho de las barreras y la separación entre ellas son iguales. La Fig. 4.1 muestra curvas de T_c/T_0 vs. u_0 para seis valores representativos de $(a+b)/\lambda_0$; a su vez estas curvas corresponden a cortes horizontales sobre la gráfica de T_c/T_0 vs. u_0 y $(a+b)/\lambda_0$ mostrada en la Fig. 4.2, la cual es una gráfica de niveles, donde cada nivel representa un valor de T_c/T_0 , mientras que su color es indicativo de su magnitud: valores más bajos de la temperatura crítica corresponden a colores más oscuros.

Es inmediato que la temperatura crítica adimensionalizada en términos de T_0 siempre tiene un valor menor a la unidad. La gráfica de niveles en Fig. 4.2 muestra una región amplia donde el valor de T_c/T_0 es prácticamente igual a uno, mas nunca sobrepasa dicho valor. El efecto directo de la amplitud de potencial u_0 es disminuir el valor de T_c/T_0 monótonamente, como se ve en la Fig. 4.1; esta disminución corresponde a las regiones donde el color es más oscuro. Ambas figuras muestran que, para un valor fijo de $(a+b)/\lambda_0$, a valores pequeños de u_0 corresponden temperaturas críticas próximas a T_0 . Lo anterior se justifica con base en la definición $u_0 \equiv 2m(a+b)V_0/\hbar^2$, por lo que cuando u_0 es pequeño la magnitud del potencial V_0 también lo es, y la interacción de los bosones con la barreras es despreciable, así que el sistema se comporta como un gas de partículas libres; la temperatura crítica de un sistema así es T_0 , en consecuencia para el potencial de Kronig-Penney se tiene que $T_c/T_0 \rightarrow 1$ cuando $u_0 \rightarrow 0$, como es de esperarse.

Ahora bien, la gráfica de niveles indica que la rapidez con que disminuye T_c/T_0 cuando se incrementa la magnitud del potencial de Kronig-Penney depende del tamaño del periodo del mismo, $(a+b)/\lambda_0$, así como de la relación entre la anchura-separación de las barreras de potencial, i.e., de r . Sorprendentemente, cuando la magnitud de las barreras es muy grande se obtiene que T_c/T_0 es proporcional a $u_0^{-1/2}$: la pendiente de las curvas de T_c/T_0 vs. u_0 en la Fig. 4.1, cuya escala es logarítmica en ambos ejes, es igual a $-1/2$. Nótese que el menor valor de u_0 para el cual la relación empieza a ser válida depende del periodo espacial del potencial. De los casos mostrados se observa que para $(a+b)/\lambda_0 = 1$, la relación se cumple más pronto.

La gráfica de niveles es algo peculiar, pues parece sugerir que T_c/T_0 es cero cuando la magnitud de u_0 es extremadamente grande: esto es lo que se deduce a partir de la región donde el nivel correspondiente tiene el color más oscuro. Entonces se podría concluir que hay una región bien definida en el dominio formado por u_0 y $(a+b)/\lambda_0$ donde $T_c/T_0 = 0$, y donde, en consecuencia, no hay condensación Bose-Einstein. Sin

Figura 4.1: Curvas de T_c/T_0 vs. u_0 , $r = 1$, para seis valores de $(a + b)/\lambda_0$. La línea punteada significa $T_c/T_0 = u_0^{-1/2}$.

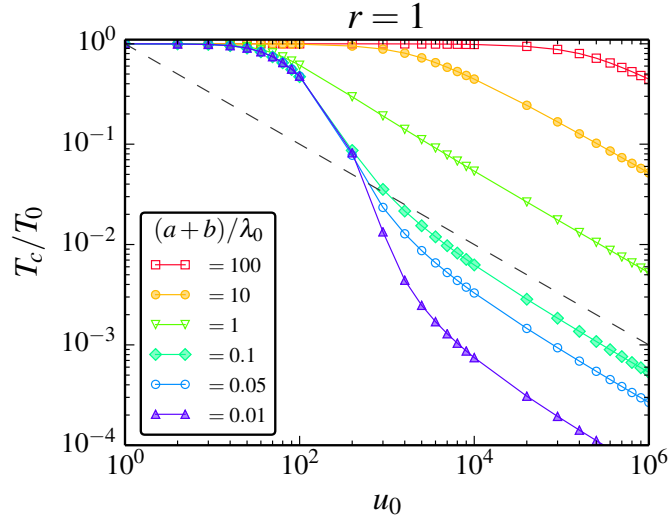
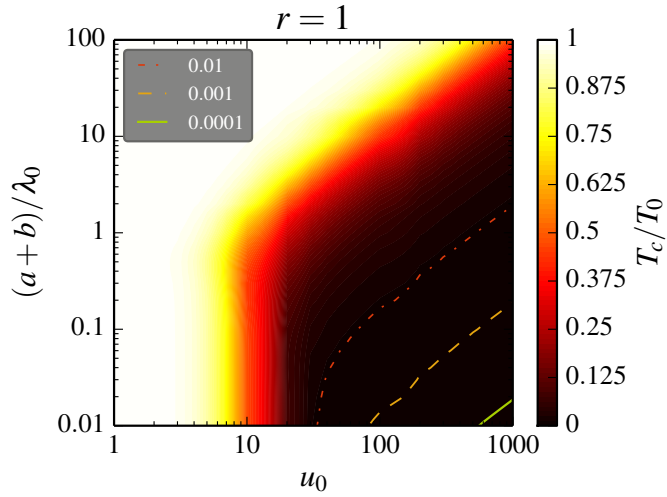


Figura 4.2: T_c/T_0 vs. u_0 y $(a + b)/\lambda_0$ para $r = 1$. Las líneas a guión-punto, guión y sólida demuestran la continuidad T_c/T_0 .



embargo, la Fig. 4.1 demuestra que este no es el caso, que siempre hay condensación Bose-Einstein y que la temperatura crítica se puede hacer tan pequeña al escoger los valores adecuados de u_0 y $(a + b)/\lambda_0$. Además la geometría del potencial indica que la tendencia de T_c/T_0 hacia cero se debe a que cuando u_0 crece el sistema se asemeja a un gas de bosones en dos dimensiones, y esto es importante: un gas de bosones en 2D sin interacciones en una región infinita no presenta condensación Bose-Einstein. Precisamente cuando la magnitud de las barreras de potencial se incrementa, i.e. u_0 , la dinámica de los bosones en la dirección transversal a las barreras, que por convención es z , se ve restringida, mientras que en las direcciones x y y los bosones son libres,

comportándose como un gas que no es completamente 2D o 3D. Enumerando, cuando $(a+b)/\lambda_0$ permanece constante, se tienen los siguientes extremos:

- **Gas 2D.** Se presenta cuando $u_0 \rightarrow \infty$. Los bosones están confinados en cajas de ancho finito en la dirección z , pero de tamaño infinito en x y y ; el gas es bidimensional y $T_c/T_0 \rightarrow 0$.
- **Gas 3D.** Cuando $u_0 \rightarrow 0$ no hay barreras de potencial, los bosones son libres en todas direcciones y $T_c \rightarrow T_0$

Se puede plantear la situación donde u_0 se mantiene constante, la cual corresponde a un corte vertical sobre la gráfica de niveles plasmada en la Fig. 4.2, y que es análoga a aquella que da origen a la Fig. 4.1. Pues bien, bajo esta circunstancia la gráfica de niveles muestra que $T_c \rightarrow T_0$ cuando $(a+b)/\lambda_0 \gg 1$, para cualquier valor de u_0 . Esto se debe a que cuando el periodo del potencial se incrementa (hasta tender a infinito) la interacción de los bosones con las barreras disminuye. Para la figura en cuestión $r = 1$, lo cual implica que cuando $(a+b)/\lambda_0$ crece el ancho de las barreras, así como el espaciamiento entre ellas, también crecen, de tal suerte que la interacción de los bosones con las barreras disminuye pues, valga la expresión, hay más espacio vacío. Esto lleva al sistema al extremo donde es un gas 3D y $T_c \rightarrow T_0$. Cuando $(a+b)/\lambda_0 \ll 1$, sin embargo, el sistema no tiende al extremo de gas 2D necesariamente. Considérense tres situaciones en función del valor de u_0 :

1. $u_0 = 1$. El sistema se aproxima a un gas 3D pues $T_c/T_0 \approx 1$ para cualquier valor de $(a+b)/\lambda_0$. Esto significa que las barreras no tienen un efecto considerable sobre la dinámica de los bosones.
2. $u_0 = 100$. El color de los niveles indica que el valor de T_c/T_0 es menor a la unidad cuando $(a+b)/\lambda_0 < 1$, y permanece constante a medida que $(a+b)/\lambda_0 \rightarrow 0$. El comportamiento del sistema es intermedio entre gas 2D y 3D.
3. $u_0 = 10^6$. La magnitud de T_c/T_0 es mucho menor que la unidad, excepto cuando $(a+b)/\lambda_0 \rightarrow \infty$, así que se comporta como gas 2D esencialmente.

4.3. Otros sistemas similares

Se puede analizar el comportamiento de T_c/T_0 para otro valor de r de la misma manera que se hizo en el ejemplo anterior. Caminando en esta dirección se presentan las figuras 4.3 y 4.4, que corresponden a $r = 0.1$, es decir, cuando la razón entre el ancho de las barreras y la separación entre ellas es uno a diez. Esta situación corresponde a

Figura 4.3: Curvas de T_c/T_0 vs. u_0 , $r = 0.1$, para seis valores de $(a + b)/\lambda_0$. La línea punteada significa $T_c/T_0 = u_0^{-1/2}$.

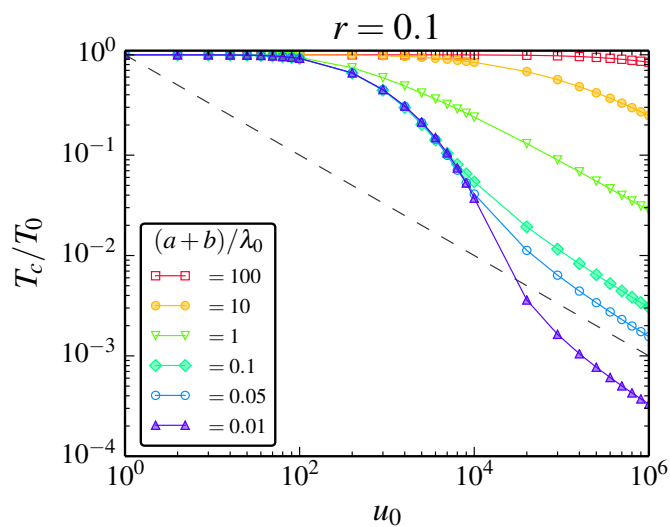
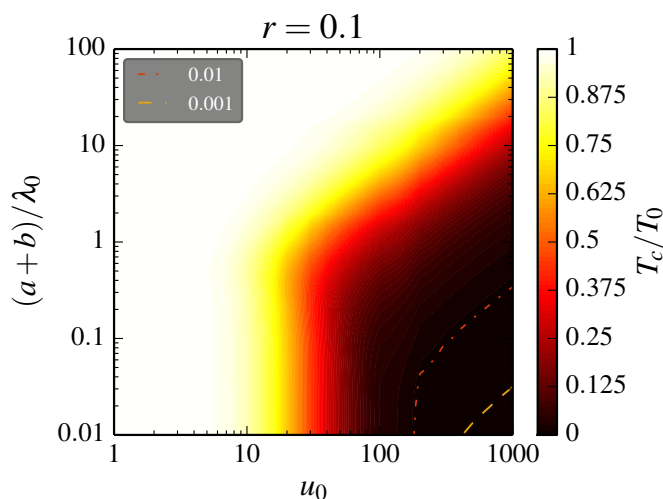


Figura 4.4: T_c/T_0 vs. u_0 y $(a + b)/\lambda_0$ para $r = 0.1$.



barreras de potencial muy delgadas, así que es natural esperar que el efecto de las barreras sobre T_c/T_0 se menor respecto al ejemplo anterior. Más allá de dicha expectativa ¿qué indican los resultados en las figuras en cuestión?

Desde una perspectiva global el comportamiento de T_c/T_0 no ha cambiado: en la Fig. 4.4 se conservan las regiones donde se aproxima a la unidad y donde se aproxima a cero, $T_c \rightarrow T_0$ cuando $(a + b)/\lambda_0 \rightarrow \infty$ y $T_c \rightarrow 0$ cuando $u_0 \rightarrow \infty$. Desde una perspectiva más detallada sí hay diferencias, principalmente relacionadas con la rapidez con que la temperatura crítica decrece en función de u_0 . Con respecto a la Fig. 4.2 para el caso en que $r = 1$, la Fig. 4.4 muestra que T_c/T_0 decrece más lentamente, en vista de que

los niveles transitan de un color claro a un color oscuro sobre un intervalo más extenso de u_0 , lo cual tiene sentido ya que las barreras de potencial son más delgadas que el ejemplo anterior. Esto sugiere que el resultado de incrementar la anchura de las barreras respecto a la separación entre ellas es una caída más pronunciada de la temperatura crítica, y los bosones pasan de un régimen donde son cuasi-libres, representado por los niveles de color claro, a un régimen donde están completamente atrapados por el potencial, representado por los niveles de color oscuro en un intervalo más compacto de u_0 . Es muy interesante que incluso para este ejemplo las curvas de T_c/T_0 vs. u_0 en la Fig. 4.3 muestran que la temperatura crítica también es proporcional a $u_0^{-1/2}$ cuando este último parámetro es lo suficientemente grande.

Un potencial bastante diferente corresponde al caso en que $r = 10$, cuando el ancho de las barreras es diez veces mayor que su separación. ¿Cómo es el comportamiento de la temperatura crítica? A primera vista es muy parecido al caso en que $r = 1$, como lo muestran las figuras 4.5 y 4.6. Un análisis más a fondo muestra que la región de niveles de color claro, donde $T_c/T_0 \approx 1$, es más extensa; por su parte las curvas de T_c/T_0 vs u_0 muestran un decaimiento más pronunciado de la temperatura crítica. Una vez más se sostiene que T_c/T_0 es proporcional a $u_0^{-1/2}$ para u_0 lo suficientemente grande.

Un caso más extremo corresponde a $r = 1000$, cuyos resultados se muestran en las figuras 4.7 y 4.8. En esta situación el ancho de las barreras es mil veces más grande que su separación, y la gráfica de niveles correspondiente indica que la región donde el sistema se comporta prácticamente como un gas de bosones libres es considerablemente más extensa que para $r = 10$. Conjugado con esto las curvas de T_c/T_0 vs. u_0 muestran que la caída de la temperatura crítica es incluso más pronunciada. De las curvas no se puede asegurar de forma concluyente que T_c/T_0 sea proporcional a $u_0^{-1/2}$ cuando éste es muy grande. Aún más, de la figura se deduce que la pendiente de las curvas es menor que $-1/2$, aproximándose a -1 .

De los resultados anteriores es claro que el principal efecto de incrementar r es extender la región donde el sistema se asemeja a un gas libre, pero de manera simultánea incrementa la rapidez con que el sistema pasa de comportarse como un gas libre en tres dimensiones a uno en dos dimensiones, como función de la magnitud de las barreras de potencial V_0 . Esto se torna interesante cuando se visualiza la estructura del potencial en el caso en que $r = 1000$, o en general cuando r es mucho mayor que uno: en estas condiciones las barreras de potencial son muy anchas en comparación con la separación entre ellas, i.e. $b \gg a$. Siendo así las cosas, la sucesión de barreras de potencial de magnitud V_0 y ancho b alternadas con regiones vacías de ancho a es equivalente a una sucesión de pozos de potencial de magnitud $-V_0$ y ancho a separados una distancia b , y dichos pozos son muy delgados porque $a \ll b$. Así que la condición extrema en que el sistema consiste de pozos atractivos muy delgados tiene efectos interesantes sobre el comportamiento de la temperatura crítica, en particular que la proporcionalidad de

4. TEMPERATURA CRÍTICA

Figura 4.5: Curvas de T_c/T_0 vs. u_0 , $r = 10$, para seis valores de $(a + b)/\lambda_0$. La línea punteada significa $T_c/T_0 = u_0^{-1/2}$.

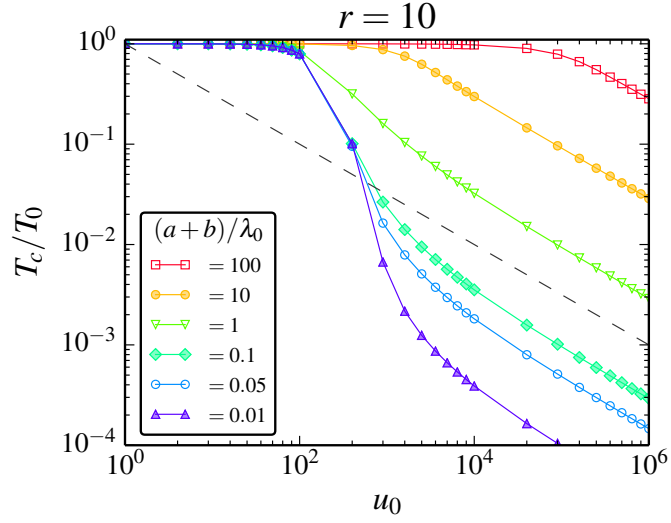
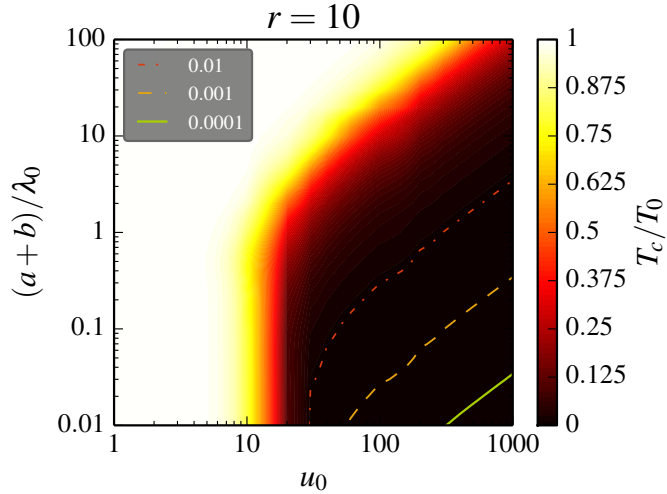


Figura 4.6: T_c/T_0 vs. u_0 y $(a + b)/\lambda_0$ para $r = 10$.



T_c/T_0 respecto a u_0 cuando este último valor es muy grande parece cambiar de $(u_0)^{-1/2}$ a $(u_0)^{-1}$.

No resulta evidente cómo obtener una relación tan simple entre u_0 y \tilde{T}_c a partir de Ec. (4.14), sin embargo cuando $u_0 \gg 1$ es posible hacer ciertas aproximaciones para simplificar dicha relación. De los resultados obtenidos en Cap. 3 es claro que cuando u_0 es muy grande las primeras bandas del espectro de energía se aproximan a niveles tales que

$$\tilde{\epsilon}_z = (1+r)^2 n^2 \pi^2 \quad (n-1)\pi \leq k_z(a+b) < n\pi, \quad n \geq 1. \quad (4.20)$$

La integral en Ec. (4.14) se puede descomponer como la suma sobre cada una de las

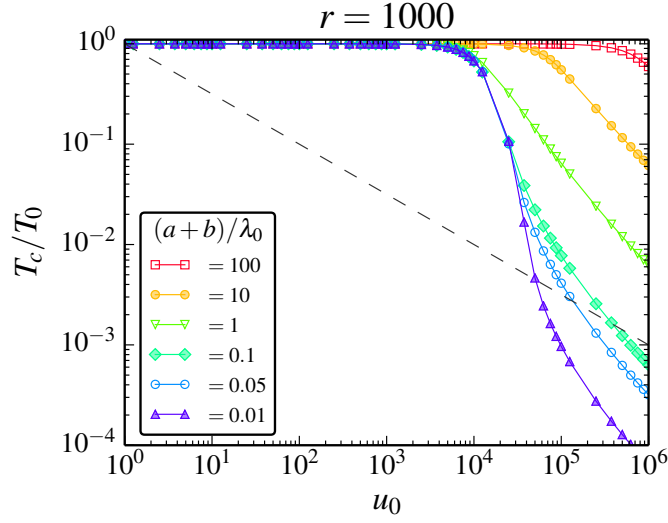


Figura 4.7: Curvas de T_c/T_0 vs. u_0 , $r = 1000$, para seis valores de $(a + b)/\lambda_0$. La línea punteada significa $T_c/T_0 = u_0^{-1/2}$.

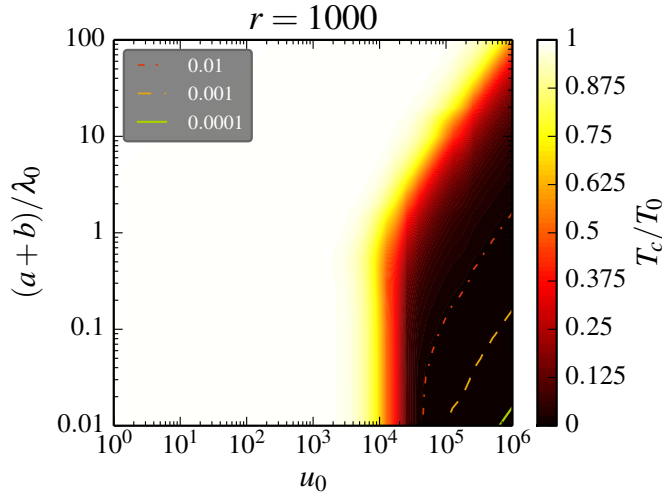


Figura 4.8: T_c/T_0 vs. u_0 y $(a + b)/\lambda_0$ para $r = 1000$.

bandas,

$$\int_0^\infty \ln(1 - e^{-\sigma(\bar{\epsilon}_z - \bar{\mu}_0)/\bar{T}_c}) dk'_z = \sum_{n=1}^\infty \int_{(n-1)\pi}^{n\pi} \ln(1 - e^{-\sigma(\bar{\epsilon}_z - \bar{\mu}_0)/\bar{T}_c}) dk'_z. \quad (4.21)$$

Dado que la primera banda es muy angosta entonces la diferencia $\bar{\epsilon}_z - \bar{\mu}_0$, donde $\bar{\mu}_0 = \bar{\epsilon}_{0z}$, es muy pequeña en comparación con el resto de las bandas, por lo cual sólo la primera banda contribuye de manera considerable a la integral total:

$$\int_0^\infty \ln(1 - e^{-\sigma(\bar{\epsilon}_z - \bar{\mu}_0)/\bar{T}_c}) dk'_z \approx \int_0^\pi \ln(1 - e^{-\sigma(\bar{\epsilon}_z - \bar{\mu}_0)/\bar{T}_c}) dk'_z. \quad (4.22)$$

4. TEMPERATURA CRÍTICA

Si se aproxima $\bar{\varepsilon}_z$ mediante una serie de Taylor alrededor de $k'_z = 0$ hasta términos de segundo orden se obtiene

$$\bar{\varepsilon}_z = \bar{\varepsilon}_{0z} + \frac{1}{2}(k'_z)^2 D_{k'_z}^2 \bar{\varepsilon}_z \Big|_0 \quad (4.23)$$

y entonces

$$\int_0^\infty \ln(1 - e^{-\sigma(\bar{\varepsilon}_z - \bar{\mu}_0)/\tilde{T}_c}) dk'_z \approx \int_0^\pi \ln(1 - e^{-A(k'_z)^2/\tilde{T}_c}) dk'_z, \quad (4.24)$$

donde $A = \frac{1}{2}\sigma D_{k'_z}^2 \bar{\varepsilon}_z \Big|_0$. Puesto que $\ln(1 - u) = -g_1(u)$ entonces

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \ln(1 - e^{-A(k'_z)^2/\tilde{T}_c}) dk'_z &= - \int_0^\pi \sum_{n=1}^\infty \frac{e^{-An(k'_z)^2/\tilde{T}_c}}{n} dk'_z \\ &= - \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n} \int_0^\pi e^{-An(k'_z)^2/\tilde{T}_c} dk'_z \end{aligned} \quad (4.25)$$

Bajo el cambio de variable $u = k'_z/\sqrt{\tilde{T}_c}$

$$\int_0^\pi e^{-An(k'_z)^2/\tilde{T}_c} dk'_z = \sqrt{\tilde{T}_c} \int_0^{\pi/\sqrt{\tilde{T}_c}} e^{-Anu^2} du \approx \sqrt{\tilde{T}_c} \int_0^\infty e^{-Anu^2} du = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi\tilde{T}_c}{An}}, \quad (4.26)$$

donde la última aproximación se puede hacer ya que \tilde{T}_c es muy pequeña cuando $u_0 \gg 1$. Así llegamos a que

$$\int_0^\infty \ln(1 - e^{-\sigma(\bar{\varepsilon}_z - \bar{\mu}_0)/\tilde{T}_c}) dk'_z \approx -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi\tilde{T}_c}{A}} \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^{3/2}} = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi\tilde{T}_c}{A}} \zeta(3/2), \quad (4.27)$$

lo cual nos lleva a la relación que determina \tilde{T}_c ,

$$\frac{T_c}{T_0} = \left(\frac{1}{2} D_{k'_z}^2 \bar{\varepsilon}_z \Big|_0 \right)^{1/3}. \quad (4.28)$$

Esta relación establece una conexión muy simple entre \tilde{T}_c y la relación de dispersión del sistema. Se puede proceder aún más ya que

$$D_{k'_z}^2 \bar{\varepsilon}_z \Big|_0 = - \left(D_{\bar{\varepsilon}_z} h(\bar{\varepsilon}_z) \Big|_{\bar{\varepsilon}_{0z}} \right)^{-1}, \quad (4.29)$$

donde la función $h(\bar{\varepsilon}_z)$ corresponde al lado izquierdo de la Ec. (3.5). En vista de esto resulta que no es sencillo obtener una relación directa entre T_c/T_0 y u_0 a partir de simplificar Ec. (3.5) en el caso que $u_0 \gg 1$, aunque se puede establecer una ecuación sencilla para T_c/T_0 en función de la relación de dispersión. No fue posible evidenciar la dependencia directa de u_0 y r , a fin de aclarar cuando es válido el comportamiento $T_c/T_0 \propto u_0^{-1/2}$ en función de r , o bien cuando $T_c/T_0 \propto u_0^{-1}$ pasa a serlo.

4.4. Comportamiento en función de la densidad de partículas

Como se establece al inicio de este capítulo la temperatura crítica depende de tres variables convenientemente adimensionalizadas: u_0 , r y $(a+b)/\lambda_0$. λ_0 es la longitud de onda térmica de un gas de bosones libre a su temperatura de condensación Bose-Einstein, y depende de su densidad; es este último concepto el que conecta el gas de bosones entre capas con un gas libre al considerar que ambos tienen la misma densidad de partículas N/V en el límite termodinámico. Es legítimo preguntar entonces cuál es la dependencia de la temperatura crítica T_c/T_0 con respecto a la densidad de partículas.

Para el análisis de las propiedades termodinámicas del gas de bosones se ha supuesto que el sistema se encuentra en la condición de límite termodinámico, i.e. la densidad N/V es constante, aunque N y V sean cantidades infinitas. Incluso cuando la distribución de bosones en escalas de longitud del orden del periodo del potencial, $a+b$, no tiene por qué ser constante, el cociente N/V impone una cantidad de bosones N_u en un volumen igual a un cubo de arista $a+b$. Así la densidad queda expresada como

$$\eta_B = \frac{N_u}{(a+b)^3}. \quad (4.30)$$

La temperatura crítica es la función

$$T_c/T_0 = f(u_0, r, (a+b)/\lambda_0), \quad (4.31)$$

la cual no tiene una expresión analítica, mas su comportamiento se visualiza en las secciones 4.2 y 4.3; notablemente $0 \leq f \leq 1$. Para establecer cómo depende f , y por lo tanto T_c/T_0 , de la densidad de bosones η_B recuérdese que para un gas ideal libre se satisface la relación $\eta_B \lambda_0^3 = \zeta(3/2)$, según Ec. (4.18). Esta igualdad implica que $(a+b)/\lambda_0 = (a+b)(\eta_B/\zeta(3/2))^{1/3}$, la cual junto con la definición de T_0 dada por Ec. (4.8) determina la temperatura crítica como

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left(\frac{\eta_B}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3} f \left(\frac{2m(a+b)}{\hbar^2} V_0, \frac{b}{a}, (a+b) \left(\frac{\eta_B}{\zeta(3/2)} \right)^{1/3} \right). \quad (4.32)$$

Esta es la expresión más conveniente de T_c como función de la densidad pues elimina el “ensombrecimiento” producido por los factores adimensionales que hace difícil visualizar su dependencia en función de η_B . A diferencia de las expresiones adimensionales definidas con anterioridad, resulta estéril buscar una adimensionalización de T_c como función de η_B ; después de todo esta última no es adimensional.

La Ec. (4.32) establece que T_c es proporcional a $\eta_B^{2/3}$, y también depende de la función f , con la diferencia de que la función ahora depende directamente de los parámetros físicos del potencial y de η_B . Los cambios de variable, sin embargo, no alteran el hecho de que $0 \leq f \leq 1$. Esto implica que hasta cierto punto el comportamiento de la

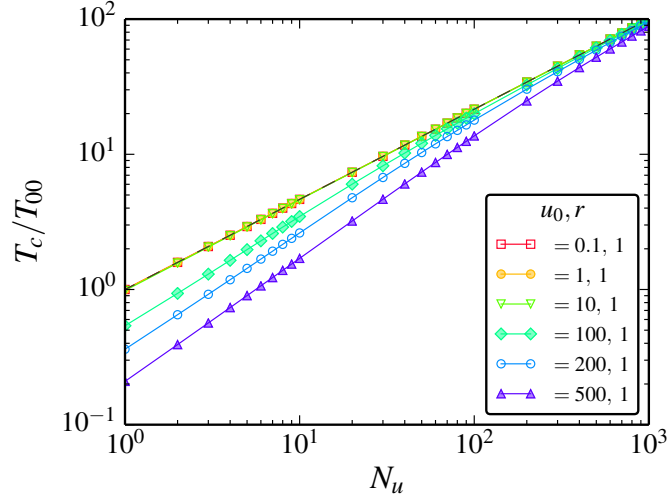


Figura 4.9: T_c/T_{00} vs. N_u para algunos valores representativos de u_0 y r . La línea a guiones corresponde a $N_u^{2/3}$.

función f será heredado por T_c , puesto que habrá una competencia entre el factor $\eta_B^{2/3}$ y f . Para analizar el comportamiento de T_c en términos de la densidad considérese por un momento la temperatura crítica de un gas ideal de Bose libre tal que su densidad de partículas es igual a un bosón en un volumen igual a un cubo de arista $a+b$; la densidad de este gas es $\eta_B = 1/(a+b)^3$, y su temperatura de condensación Bose-Einstein es

$$T_{00} \equiv \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B(a+b)^2} \left(\frac{1}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3}. \quad (4.33)$$

Con este parámetro la Ec. (4.32) se puede adimensionalizar como

$$\frac{T_c}{T_{00}} = N_u^{2/3} f \left(u_0, r, \left(\frac{N_u}{\zeta(3/2)} \right)^{1/3} \right), \quad (4.34)$$

y la temperatura crítica queda expresada en términos del número de bosones N_u dentro del volumen $(a+b)^3$. Esto también implica la equivalencia $(a+b)/\lambda_0 \equiv (N_u/\zeta(3/2))^{1/3}$. A partir de esta ecuación el comportamiento de T_c/T_{00} corresponde al mostrado en la Fig. 4.9, donde se muestran curvas para algunos valores representativos de u_0 y r . En la misma figura se indica, mediante una línea a guiones, la relación $T_c/T_{00} = N_u^{2/3}$. De esta figura se deduce claramente como cuando u_0 es muy pequeño la temperatura crítica es prácticamente proporcional a $N_u^{2/3}$ para cualquier número de bosones. Esto no es más que la manifestación de que, cuando la magnitud de las barreras de potencial es pequeña el sistema se asemeja mucho a un gas ideal de Bose libre. A medida que la intensidad de las barreras se incrementa el valor de T_c baja respecto al gas libre, debido a su dependencia de la función f , sin embargo, cuando el número de bosones es muy grande el comportamiento de la temperatura crítica tiende a ser el mismo para todos

4.4. Comportamiento en función de la densidad de partículas

los sistemas. Cuando se mantienen constantes los factores V_0 , a y b , y sólo se varía el número de bosones N_u , los resultados anteriores nos permiten enumerar los siguientes extremos:

- **Baja densidad**, $\eta_B \ll 1$. Dada la equivalencia $(a+b)/\lambda_0 \equiv (N_u/\zeta(3/2))^{1/3}$, y de acuerdo con las secciones 4.2 y 4.3, la función f tiende a un valor constante que depende de u_0 y r . Naturalmente el factor $\eta_B^{2/3}$ es muy pequeño también. En el límite cuando $\eta_B \rightarrow 0$ el resultado es $T_c = 0$.
- **Alta densidad**. Nuevamente, dado que $(a+b)/\lambda_0 \equiv (N_u/\zeta(3/2))^{1/3}$, cuando $\eta_B \gg 1$ la función f tiende a la unidad, así que el comportamiento de T_c es proporcional a $\eta_B^{2/3}$ esencialmente.

Es de esperarse que para aquellos valores de u_0 y r donde T_c/T_0 es aún más pequeña las curvas de T_c/T_{00} disminuyan más respecto al comportamiento del gas de Bose libre, y es precisamente el análisis previo de $T_c/T_0 = f(u_0, r, (a+b)/\lambda_0)$ el que da esta información.

5

Calor específico isocórico

El calor específico isocórico, es decir, el que corresponde a un proceso termodinámico a volumen constante, está definido en términos de la entropía S del sistema como

$$C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{V,N} \quad (5.1)$$

Otra forma de determinarlo es en términos de la energía interna del sistema U

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V,N} \quad (5.2)$$

cuya expresión se puede encontrar a partir del Gran Potencial Ω a través de la relación

$$U(T, V, \mu) = -k_B T^2 \left(\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\Omega}{k_B T} \right) \right)_{V,z} \quad (5.3)$$

donde $z = e^{\beta\mu}$ es la fugacidad, y permanece constante durante la derivación parcial aunque depende de T . Cualquiera de los dos caminos es igualmente válido, mas aquí se obtendrá U de Ω :

$$\begin{aligned} U(T, V, \mu) &= \frac{\varepsilon_{z0} e^{-\beta(\varepsilon_{z0}-\mu)}}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_{z0}-\mu)}} \frac{\partial \beta}{\partial T} \\ &\quad - \frac{mV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \varepsilon_z \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_z-\mu)}) \frac{\partial \beta}{\partial T} \\ &\quad + \frac{mV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z g_2(e^{-\beta(\varepsilon_z-\mu)}) \frac{\partial \beta}{\partial T} \end{aligned} \quad (5.4)$$

Para llegar a esta ecuación se ha empleado la relación $ug'_2(u) = -\ln(1-u)$ con $u = e^{-\beta(\varepsilon_z-\mu)}$ de la misma manera a como se hizo con la temperatura crítica. Ahora bien, $\beta = 1/k_B T$, entonces $\partial \beta / \partial T = -1/k_B T^2$. Dada la Ec. (5.3), y empleando la paridad de ε_z respecto a k_z se llega a que la energía interna del sistema es

$$\begin{aligned} U(T, V, \mu) &= \frac{\varepsilon_{z0}}{e^{\beta(\varepsilon_{z0}-\mu)} - 1} - \frac{mV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{\beta} \int_0^{\infty} dk_z \varepsilon_z \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_z-\mu)}) \\ &\quad + \frac{mV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{\beta^2} \int_0^{\infty} dk_z g_2(e^{-\beta(\varepsilon_z-\mu)}). \end{aligned} \quad (5.5)$$

5. CALOR ESPECÍFICO ISOCÓRICO

Al observar con atención la ecuación anterior se encuentra que el primer término corresponde al número de bosones en el estado base, $N_0(T)$, según la ecuación de número Ec. (4.2), multiplicado por la energía de dicho estado, de manera que el término cuantifica la contribución total a la energía de los bosones en el estado base. Así que si a la Ec. (5.5) se le suma un cero de la forma $\varepsilon_{z0}N_e(T) - \varepsilon_{z0}N_e(T)$, que corresponde a la contribución a la energía de los bosones en estados excitados según Ec. (4.2), se puede reescribir la energía interna en la forma

$$U(T, V, \mu) = N\varepsilon_{z0} - \frac{mV}{(2\pi)^2\hbar^2} \frac{2}{\beta} \int_0^\infty dk_z (\varepsilon_z - \varepsilon_{z0}) \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) + \frac{mV}{(2\pi)^2\hbar^2} \frac{2}{\beta^2} \int_0^\infty dk_z g_2(e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) \quad (5.6)$$

Ésta es la ecuación para la energía interna del sistema en función de la temperatura, el volumen y el potencial químico.

El calor específico está dado por la derivada parcial de la energía interna respecto a la temperatura a N y V constantes,

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{N, V}. \quad (5.7)$$

Para determinarlo ponemos el potencial químico como función del número de partículas, $\mu = \mu(T, V, N)$, y usamos la regla de la cadena,

$$\left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{N, V} = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{\mu, V} + \left(\frac{\partial U}{\partial \mu} \right)_{T, V} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{N, V}. \quad (5.8)$$

El resultado es una expresión algo extensa dado que $\beta = 1/k_B T$ aparece frecuentemente:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{N, V} &= \frac{mV}{(2\pi)^2\hbar^2} \frac{2}{\beta^2} \frac{\partial \beta}{\partial T} \int_0^\infty dk_z (\varepsilon_z - \varepsilon_{z0}) \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) \\ &\quad - \frac{mV}{(2\pi)^2\hbar^2} \frac{4}{\beta^3} \frac{\partial \beta}{\partial T} \int_0^\infty dk_z g_2(e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) \\ &\quad + \frac{mV}{(2\pi)^2\hbar^2} \frac{2}{\beta} \int_0^\infty dk_z (\varepsilon_z - \varepsilon_{z0}) \frac{-\frac{\partial \beta}{\partial T}(\varepsilon_z - \mu) + \beta \frac{\partial \mu}{\partial T}}{e^{\beta(\varepsilon_z - \mu)} - 1} \\ &\quad - \frac{mV}{(2\pi)^2\hbar^2} \frac{2}{\beta^2} \int_0^\infty dk_z \left(-\frac{\partial \beta}{\partial T}(\varepsilon_z - \mu) + \beta \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) \quad (5.9) \end{aligned}$$

Para llegar a esta expresión se ha empleado $ug'_2(u) = g_1(u) = -\ln(1 - u)$ con $u = e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}$, al igual que se hizo con la energía interna. Sustituyendo $\partial \beta / \partial T = -\beta / T$ se

obtiene

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{N,V} &= -\frac{mV}{(2\pi)^2\hbar^2} \frac{2}{\beta T} \int_0^\infty dk_z (\varepsilon_z - \varepsilon_{z0}) \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) \\
&+ \frac{mV}{(2\pi)^2\hbar^2} \frac{4}{\beta^2 T} \int_0^\infty dk_z g_2(e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) \\
&+ \frac{mV}{(2\pi)^2\hbar^2} \frac{2}{T} \int_0^\infty dk_z (\varepsilon_z - \varepsilon_{z0}) \frac{(\varepsilon_z - \mu) + T \frac{\partial \mu}{\partial T}}{e^{\beta(\varepsilon_z - \mu)} - 1} \\
&- \frac{mV}{(2\pi)^2\hbar^2} \frac{2}{\beta T} \int_0^\infty dk_z \left((\varepsilon_z - \mu) + T \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) \quad (5.10)
\end{aligned}$$

A partir de la ecuación anterior se puede llegar a la expresión final del calor específico por bosón en función de la temperatura y el volumen:

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= -\frac{mV}{(2\pi)^2\hbar^2} \frac{2}{N} \int_0^\infty dk_z (\varepsilon_z - \varepsilon_{z0}) \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) \\
&+ \frac{mV}{(2\pi)^2\hbar^2} \frac{4}{N\beta} \int_0^\infty dk_z g_2(e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) \\
&+ \frac{mV}{(2\pi)^2\hbar^2} \frac{2\beta}{N} \int_0^\infty dk_z (\varepsilon_z - \varepsilon_{z0}) \frac{(\varepsilon_z - \mu) + T \frac{\partial \mu}{\partial T}}{e^{\beta(\varepsilon_z - \mu)} - 1} \\
&- \frac{mV}{(2\pi)^2\hbar^2} \frac{2}{N} \int_0^\infty dk_z \left((\varepsilon_z - \mu) + T \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) \quad (5.11)
\end{aligned}$$

De manera natural aparece una dependencia de la derivada del potencial químico respecto a la temperatura, para la cual no se tiene ninguna expresión aún. Por supuesto, se sobreentiende que dicha derivada corresponde al número de partículas N y a volumen V constante, es decir, $\frac{\partial \mu}{\partial T} \equiv \left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{N,V}$. Para determinar la derivada se parte de la Ec. (4.3), i.e., $N = N(T, V, \mu)$, la cual determina el potencial químico de manera implícita en la fase normal del gas, i.e., para $T > T_c$. En la fase mixta, es decir, $T \leq T_c$ el potencial químico es constante según Ec. (4.6), y corresponde a la energía del estado base del sistema, $\mu = \varepsilon_{z0}$. Por lo tanto en la fase mixta

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{N,V} \equiv 0. \quad (5.12)$$

mientras que para la fase normal se deriva implícitamente Ec. (4.3) respecto a T , susti-

tuyendo $\partial\beta/\partial T = -\beta/T$, con lo que se obtiene

$$\begin{aligned}
 0 &= -\frac{mV}{(2\pi)^2\hbar^2} \frac{1}{\beta T} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) \\
 &+ \frac{mV}{(2\pi)^2\hbar^2} \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{(-\frac{\partial\beta}{\partial T}(\varepsilon_z - \mu) + \beta \frac{\partial\mu}{\partial T})}{e^{\beta(\varepsilon_z - \mu)} - 1} \\
 &= \frac{N}{T} + \frac{mV}{(2\pi)^2\hbar^2} \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{((\varepsilon_z - \mu) + T \frac{\partial\mu}{\partial T})}{e^{\beta(\varepsilon_z - \mu)} - 1}
 \end{aligned} \tag{5.13}$$

El término $\frac{\partial\mu}{\partial T}$ puede salir de la integral ya que no depende de k_z . Luego entonces, tras algunos pasos algebraicos y considerando la paridad de la energía respecto a k_z se obtiene la ecuación

$$T \left(\frac{\partial\mu}{\partial T} \right)_{N,V} = - \frac{1 + \frac{mV}{(2\pi)^2\hbar^2} \frac{2}{N} \int_0^{\infty} dk_z \frac{\varepsilon_z - \mu}{e^{\beta(\varepsilon_z - \mu)} - 1}}{\frac{mV}{(2\pi)^2\hbar^2} \frac{2}{N} \int_0^{\infty} \frac{dk_z}{e^{\beta(\varepsilon_z - \mu)} - 1}} \tag{5.14}$$

la cual es válida para $T > T_c$. En el límite cuando $T \rightarrow T_c$ se tiene que $\left(\frac{\partial\mu}{\partial T} \right)_{N,V} = 0$, ya que el denominador de Ec. (5.14) tiende a infinito.

5.1. Expresiones adimensionales

Para que las ecuaciones para la energía interna por bosón, el calor específico por bosón y la variación del potencial químico respecto a la temperatura se pueden emplear para cálculos numéricos se utilizan el conjunto de parámetros adimensionales que se introdujeron para calcular la temperatura crítica: los parámetros σ y \tilde{T}_c , Ec. (4.7) y Ec. (4.15) respectivamente, así como la relación Ec. (4.11)

$$\frac{m}{\eta_B(2\pi)^2\hbar^2} = \frac{(a+b)\sqrt{\sigma/\pi}}{\zeta(3/2)k_B T_0}$$

donde $\eta_B = N/L^3$. Igualmente se emplea la relación

$$\varepsilon_z - \mu = \sigma(\bar{\varepsilon}_z - \bar{\mu})k_B T_0 \tag{5.15}$$

donde $\bar{\varepsilon}_z$ y $\bar{\mu}$ son la energía y el potencial químico adimensionalizados por la energía $\hbar^2/2m(a+b)^2$ respectivamente. El parámetro \tilde{T} está dado por el cociente

$$\tilde{T} = \frac{T}{T_0} \tag{5.16}$$

Luego entonces la ecuación adimensionalizada para la energía interna por bosón queda expresada como

$$\begin{aligned} \frac{U}{N\sigma k_B T_0} &= \bar{\epsilon}_{0z} - \frac{2\sqrt{\sigma/\pi}}{\zeta(3/2)} \tilde{T} \int_0^\infty dk'_z (\bar{\epsilon}_z - \bar{\epsilon}_{0z}) \ln(1 - e^{-\sigma(\bar{\epsilon}_z - \bar{\mu})/\tilde{T}}) \\ &\quad + \frac{2\sqrt{\sigma/\pi}}{\sigma\zeta(3/2)} \tilde{T}^2 \int_0^\infty dk'_z g_2(e^{-\sigma(\bar{\epsilon}_z - \bar{\mu})/\tilde{T}}) \end{aligned} \quad (5.17)$$

El factor $U/N\sigma k_B T_0$ es la energía interna por bosón en las mismas unidades que $\bar{\epsilon}_z$ y $\bar{\mu}$, puesto que $\sigma k_B T_0 = \hbar^2/2m(a+b)^2$. Por otra parte el calor específico queda expresado como

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{Nk_B} &= -\frac{2\sigma\sqrt{\sigma/\pi}}{\zeta(3/2)} \int_0^\infty dk'_z (\bar{\epsilon}_z - \bar{\epsilon}_{0z}) \ln(1 - e^{-\sigma(\bar{\epsilon}_z - \bar{\mu})/\tilde{T}}) \\ &\quad + \frac{4\sqrt{\sigma/\pi}}{\zeta(3/2)} \tilde{T} \int_0^\infty dk'_z g_2(e^{-\sigma(\bar{\epsilon}_z - \bar{\mu})/\tilde{T}}) \\ &\quad + \frac{2\sigma^2\sqrt{\sigma/\pi}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{\tilde{T}} \int_0^\infty dk'_z (\bar{\epsilon}_z - \bar{\epsilon}_{0z}) \frac{((\bar{\epsilon}_z - \bar{\mu}) + \frac{T}{\sigma k_B T_0} \frac{\partial \mu}{\partial T})}{e^{\sigma(\bar{\epsilon}_z - \bar{\mu})/\tilde{T}} - 1} \\ &\quad - \frac{2\sigma\sqrt{\sigma/\pi}}{\zeta(3/2)} \int_0^\infty dk'_z \left((\bar{\epsilon}_z - \bar{\mu}) + \frac{T}{\sigma k_B T_0} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \ln(1 - e^{-\sigma(\bar{\epsilon}_z - \bar{\mu})/\tilde{T}}) \end{aligned} \quad (5.18)$$

y el factor que depende de la derivada del potencial químico respecto a la temperatura adquiere la forma

$$\frac{T}{\sigma k_B T_0} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{N,V} = -\frac{1 + \frac{2\sigma\sqrt{\sigma/\pi}}{\zeta(3/2)} \int_0^\infty dk'_z \frac{\bar{\epsilon}_z - \bar{\mu}}{e^{\sigma(\bar{\epsilon}_z - \bar{\mu})/\tilde{T}} - 1}}{\frac{2\sigma\sqrt{\sigma/\pi}}{\zeta(3/2)} \int_0^\infty \frac{dk'_z}{e^{\sigma(\bar{\epsilon}_z - \bar{\mu})/\tilde{T}} - 1}} \quad (5.19)$$

Para las tres expresiones $dk'_z \equiv (a+b)dk_z$.

5.2. Gas ideal

Incluso antes de mostrar resultados se debe esperar que el calor específico del sistema se aproxime al calor específico de un gas ideal libre de bosones en el caso límite en que la magnitud de las barreras de potencial es cero o bien su anchura es nula también, pues en dichos casos realmente no hay ningún potencial periódico con el cual los bosones interaccionen. En esta situación la temperatura crítica del sistema es $T_c = T_0$, y el calor específico crece proporcionalmente a $T^{3/2}$ para $T < T_c$, y a $T = T_c$, $C_V(T_c)/Nk_B \approx 1.925$ [25]. La Fig. 5.1 muestra el calor específico calculado para esta situación, el cual reproduce lo indicado anteriormente, incluido el pico de C_V a $T = T_c$.

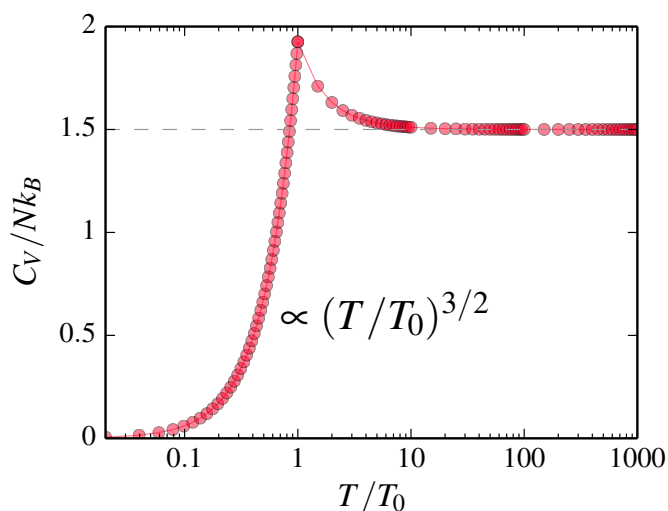


Figura 5.1: Calor específico para un gas ideal de bosones.

El intervalo de temperaturas mostrado está en términos de T_0 , y para este caso particular se cumple que $T/T_0 = T/T_c$.

Para cualquier otra situación en la cual los bosones interactúan con un potencial de Kronig-Penney no nulo C_V diferirá del mostrado anteriormente al menos en dos aspectos: la temperatura a la cual se produce la condensación Bose-Einstein, T_c , y a la cual se produce el cambio en la derivada del calor específico, i.e. el pico, y la forma de la curva de C_V a $T > T_c$ debido a la presencia de las barreras de potencial que atrapan a los bosones cuyas energías pertenecen a bandas permitidas debajo del nivel del potencial u_0 .

5.3. Un ejemplo base: ancho y separación de las barreras iguales

Considérese un potencial de Kronig-Penney tal que $u_0 = 100$ y $r = 1$, lo cual significa que se tiene un potencial de una magnitud relativamente moderada como para que la temperatura crítica no sea demasiado baja para un amplio intervalo de su periodo $a + b$, y que el ancho de las barreras es la mitad del tamaño del periodo de potencial. Además es un buen ejemplo ya que las primeras bandas de su espectro están claramente definidas de acuerdo a la Fig. 3.4. Para este potencial las gráficas del calor específico en función de la temperatura para diferentes valores de $(a + b)/\lambda_0$ se muestran en la Fig. 5.2. Es muy claro que el calor específico muestra una estructura más compleja que el caso de un gas ideal de bosones libres. Al igual que para aquellos se pueden caracterizar dos situaciones:

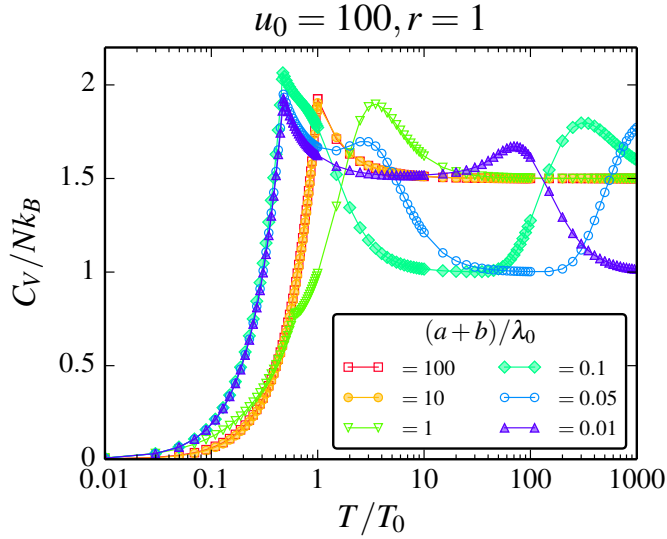


Figura 5.2: Curvas del calor específico a volumen constante de un gas de bosones con $u_0 = 100$ y $r = 1$.

- Fase mixta, correspondiente a $T \leq T_c$. Hay una fracción no nula de los bosones en el estado base de sistema resultado de la condensación Bose-Einstein, en coexistencia con otra fracción en estados excitados. La fracción condensada se denomina *fase condensada*, mientras que la fracción restante es la *fase normal*.
- Fase normal, corresponde a $T > T_c$. Prácticamente todos los bosones están en estados excitados.

Las características del calor específico en ambas fases se describen enseguida.

Fase mixta

El calor específico crece de manera monótona a medida que $T \rightarrow T_c$, e inclusive puede presentarse un máximo local a la temperatura de transición en forma de *pico* de la misma manera que en el caso libre. Por otra parte, conforme $T \rightarrow 0$ C_V se va a cero. Cuando se compara con el calor específico del gas ideal para $T \leq T_0$, que está dado por [25, p. 163]

$$\frac{C_V}{Nk_B} = \frac{15}{4} \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \quad (5.20)$$

puede verse que algunas curvas parecen crecer en forma proporcional a $(T/T_c)^{3/2}$, aunque estas corresponden solamente a los extremos donde $(a+b)/\lambda_0$ es muy pequeño ó muy grande. Esta semejanza está justificada en el caso que $(a+b)/\lambda_0 \gg 1$, ya que los bosones interactúan débilmente con el potencial dado que las barreras tienden a separarse cada vez más, incluso si r permanece constante. Esto tiene un efecto directo

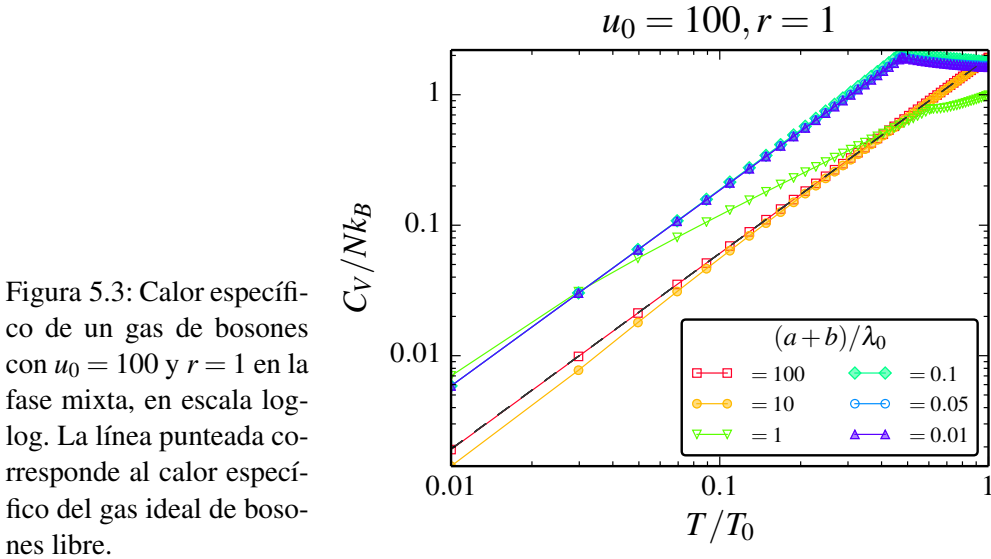


Figura 5.3: Calor específico de un gas de bosones con $u_0 = 100$ y $r = 1$ en la fase mixta, en escala log-log. La línea punteada corresponde al calor específico del gas ideal de bosones libre.

en T_c que naturalmente tiende a T_0 , y por lo tanto se esperaría que el valor del calor específico a la temperatura de transición fuera muy cercano a $C_V/Nk_B = 1.925$. Esto es lo que sucede sin duda, y se muestra con más detalle en la Fig. 5.3, en la cual se ilustra la dependencia de C_V respecto a T/T_0 en escala log-log. Las pendientes de las rectas en los casos extremos se aproximan mucho a $3/2$, lo cual significa que C_V/Nk_B crece proporcionalmente a $(T/T_c)^{3/2}$ en éstos.

La semejanza del comportamiento de C_V/Nk_B para $(a+b)/\lambda_0 \ll 1$ al calor específico de un gas ideal de bosones libres, así como de las notables diferencias en casos intermedios de $(a+b)/\lambda_0$ está relacionada con la forma en que se distribuyen los bosones en la primera banda de energía. Esto se discute con detalle en las siguientes secciones.

Fase normal

Durante la fase normal el calor específico no disminuye monótonamente como en el gas ideal, sino que presenta máximos y mínimos locales que están directamente relacionados con los parámetros del potencial de Kronig-Penney u_0 y r , así como de $(a+b)/\lambda_0$.

En un análisis caso por caso de la Fig. 5.2, se observa que cuando $(a+b)/\lambda_0 = 0.01$ el calor específico presenta un pico a T_c , cuyo valor es muy próximo al del gas ideal de bosones 3D libre a T_0 , es decir, 1.925; después disminuye al valor de $3/2$ y más adelante alcanza un máximo a cierta temperatura que aún no conocemos, pero cuyo origen discutiremos más adelante; a partir de esta última temperatura disminuye a uno aproximadamente.

Cuando $(a+b)/\lambda_0 = 0.05$ se observa un pico prácticamente a la misma temperatura T_c que en el caso anterior, después disminuye un poco para luego alcanzar un primer máximo, a partir del cual disminuye hasta la unidad. La diferencia más importante con el caso anterior es que C_V/Nk_B aumenta nuevamente hasta alcanzar un segundo máximo, a partir del cual debe disminuir a $3/2$, pues a altas temperaturas nuestro sistema debe alcanzar el límite clásico, donde C_V/Nk_B es $3/2$. Es claro en este caso que la región donde el calor específico disminuye a la unidad está delimitado por ambos máximos.

Cuando $(a+b)/\lambda_0 = 0.1$ el calor específico también tiene un pico a T_c , pero allí su valor es ligeramente mayor que 2. En este caso particular se aprecia que C_V/Nk_B disminuye hasta uno sin manifestar un máximo antes de tal caída, como en los casos anteriores; sin embargo, como en éstos, a mayores temperaturas sube hasta alcanzar un máximo, a partir del cual disminuye a $3/2$.

La curva donde $(a+b)/\lambda_0 = 1$ es bastante diferente al resto, ya que en este caso hay un pico a T_c , pero es muy pequeño, y el valor del calor específico allí es menor que uno. Más adelante discutiremos por qué pasa esto. A temperaturas mayores C_V/Nk_B se incrementa hasta alcanzar un máximo, para después disminuir monótonamente a $3/2$. Ya no hay un máximo a partir de cual disminuya a uno de forma similar a los otros casos.

Finalmente cuando $(a+b)/\lambda_0$ es 10 o 100 el comportamiento de C_V/Nk_B es prácticamente igual al del gas ideal de bosones libre en tres dimensiones: el pico se localiza a $T_c/T_0 = 1$, su valor es aproximadamente 1.925 y disminuye monótonamente a $3/2$. En estos casos no hay disminución del calor específico a la unidad.

Parece difícil encontrar una relación entre $(a+b)/\lambda_0$ y la temperatura T a la que se producen los máximos y mínimos luego de un primer vistazo de la Fig. 5.2. Por supuesto, esto se debe en parte a que se han graficado sólo seis curvas de C_V vs. T . Si se extienden los cálculos a más valores de $(a+b)/\lambda_0$ se pueden obtener gráficas de nivel similares a las obtenidas para la temperatura crítica, por ejemplo en las figuras 4.2 y 4.6. El resultado se muestra en la Fig. 5.4. Al igual que para la temperatura crítica, colores más claros significan valores más altos del calor específico. Para esta figura se ha realizado un análisis adicional sobre el espectro de energías, específicamente se ha determinado la diferencia de energía entre el estado base ϵ_{0z} y la mínima energía de la segunda banda en la dirección z . A esta diferencia de energías $\Delta\epsilon_z^{\text{dif}}$ se le asocia una temperatura T_{dif} tal que es igual a la energía térmica $\Delta\epsilon_z^{\text{dif}} = k_B T_{\text{dif}}$.

Para calcular el espectro de energía del sistema se emplea la Ec. (3.5), en donde los parámetros $\bar{\epsilon}_z$ y u_0 que determinan la relación de dispersión están definidos por Ec. (3.4). Esto significa que la magnitud de la diferencia entre el estado base y el mínimo de la segunda banda se calcula en las unidades $\hbar^2/2m(a+b)^2$, llámese $\Delta\bar{\epsilon}_z^{\text{dif}}$. Entonces

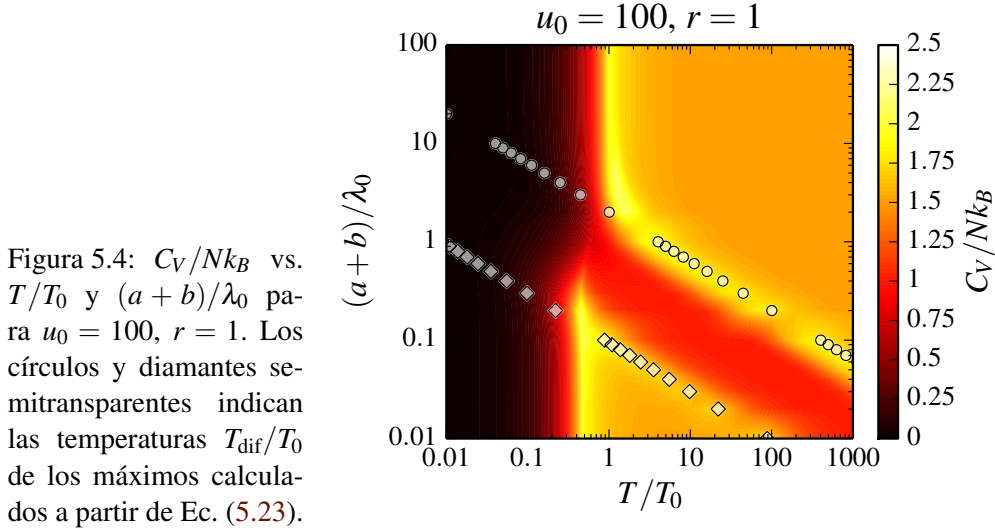


Figura 5.4: C_V/Nk_B vs. T/T_0 y $(a+b)/\lambda_0$ para $u_0 = 100$, $r = 1$. Los círculos y diamantes semitransparentes indican las temperaturas T_{dif}/T_0 de los máximos calculados a partir de Ec. (5.23).

la diferencia $\Delta\epsilon_z^{\text{dif}}$ queda expresada por

$$\Delta\epsilon_z^{\text{dif}} = k_B T_{\text{dif}} = \Delta\bar{\epsilon}_z^{\text{dif}} \frac{\hbar^2}{2m(a+b)^2}. \quad (5.21)$$

Dividiendo ambos términos de la igualdad por $k_B T_0$ se llega a la equivalencia

$$\frac{T_{\text{dif}}}{T_0} = \Delta\bar{\epsilon}_z^{\text{dif}} \sigma \quad (5.22)$$

donde $\sigma = \hbar^2/2m(a+b)^2 k_B T_0$ según Ec. (4.7). Con el mismo factor σ en términos de $(a+b)/\lambda_0$ según Ec. (4.19) la relación para el cociente T_{dif}/T_0 es

$$\frac{T_{\text{dif}}}{T_0} = \frac{1}{4\pi} \Delta\bar{\epsilon}_z^{\text{dif}} \left(\frac{a+b}{\lambda_0} \right)^{-2}. \quad (5.23)$$

Dada la ecuación que determina la relación de dispersión, i.e., Ec. (3.5), la diferencia $\Delta\bar{\epsilon}_z^{\text{dif}}$ es independiente de $(a+b)/\lambda_0$, sólo es función de u_0 y r .

El cociente dado por Ec. (5.23) para $u_0 = 100$ y $r = 1$, para diferentes valores de $(a+b)/\lambda_0$ corresponde a los círculos semitransparentes con borde oscuro en la Fig. 5.4. En la fase normal los puntos se distribuyen de manera excepcional sobre una línea que corresponde con uno de los máximos locales en el calor específico para un valor $(a+b)/\lambda_0$ específico, que resaltan en la gráfica de niveles por su color más claro. El comportamiento de C_V/Nk_B es tal que este máximo es aquél a partir del cual el calor específico disminuye monótonamente a su valor clásico de $3/2$ a medida que se incrementa la temperatura, de lo que se deduce que para $T \geq T_{\text{dif}}$ el efecto de las barreras de potencial sólo disminuye.

Para $T < T_{\text{dif}}$ existe una región en la cual C_V/Nk_B se aproxima a la unidad, y que se extiende sobre un amplio intervalo de temperaturas. Que su valor disminuya a la unidad no es algo fortuito, más bien es consecuencia directa de la estructura del potencial, en donde los bosones siempre son libres para moverse en las direcciones x y y . En el caso más extremo donde las barreras de potencial tienen una magnitud infinita los bosones se comportan como partículas en un espacio físico de dos dimensiones, pues están restringidas a la región vacía entre las barreras, y en el límite clásico su calor específico tiende a la unidad conforme la temperatura se incrementa. En el otro extremo, cuando no hay barreras, los bosones son partículas libres en un espacio tridimensional, y su calor específico tiende a $3/2$ en el límite clásico. Se deduce entonces que, una temperatura fija el comportamiento de los bosones puede aproximarse más a un gas bidimensional que a uno tridimensional, o viceversa, en función de los parámetros del potencial. Para la región de temperaturas donde C_V/Nk_B se aproxima a la unidad se puede afirmar que los bosones se comportan más como un gas en dos dimensiones que como uno en tres. Se puede visualizar a los bosones como si estuvieran atrapados por las barreras de potencial, libres para moverse únicamente en las direcciones x y y .

Finalmente, con anterioridad discutimos que para algunas curvas de calor específico puede aparecer otro máximo a partir del cual, cuando se incrementa la temperatura, C_V/Nk_B disminuye a la unidad, de tal suerte que el intervalo donde el calor específico disminuye está delimitado por los dos máximos. Esto también se observa en la Fig. 5.4. Hasta ahora, para cada valor de $(a+b)/\lambda_0$, hemos encontrado uno de los máximos. Pues bien, para cada valor de $(a+b)/\lambda_0$ se ha encontrado que el otro máximo también está dado, con bastante aproximación, por la Ec. (5.23); sin embargo en este caso $\Delta\epsilon_z^{\text{dif}}$ tiene otro valor: corresponde, aproximadamente, a un cuarto de la diferencia entre el estado base ϵ_{0z} y el máximo de la primera banda. La ubicación de estos máximos se indica mediante diamantes semitransparentes con borde oscuro en la Fig. 5.4; se puede observar cómo se distribuyen bastante cerca de los otros máximos locales, que se distinguen, también, por su color más claro en la gráfica de niveles.

5.4. Otros sistemas similares

Se puede preguntar de manera natural: ¿cuál es el comportamiento de C_V/Nk_B para otros parámetros de u_0 y r ? Para responder esta interrogante se puede proceder de manera similar al caso analizado en la sección anterior. Para empezar se analiza el sistema $u_0 = 100$, $r = 10$, que corresponde a un potencial con la misma altura que el caso anterior, sólo que el ancho de las barreras es diez veces mayor que el espacio entre ellas.

De acuerdo a los resultados del Cap. 3 incrementar el parámetro r tiene el efecto de elevar la magnitud de las energías del sistema, así como ensanchar la región prohibida

Figura 5.5: Curvas del calor específico a volumen constante de un gas de bosones con $u_0 = 100$ y $r = 10$.

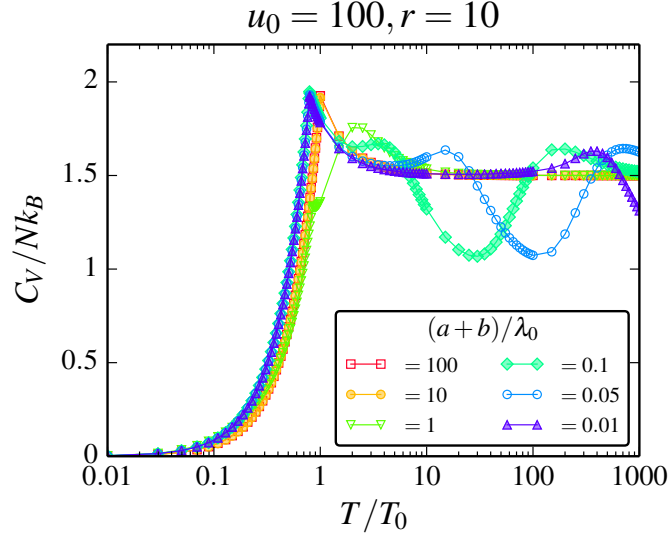
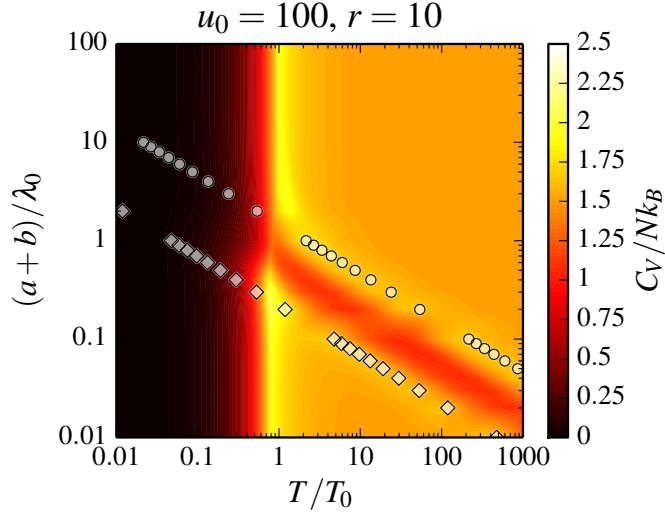


Figura 5.6: $C_V / N k_B$ vs. T / T_0 y $(a+b) / \lambda_0$ para $u_0 = 100$, $r = 10$. Los círculos y diamantes semitransparentes indican las temperaturas T_{dif} / T_0 de los máximos calculados a partir de Ec. (5.23).



entre las bandas; para los nuevos parámetros la segunda banda de energía se encuentra completamente sobre el nivel del potencial según se indica en la Fig. 3.3b. Al haber una sola banda debajo de u_0 significa que se tiene un sistema donde el efecto del potencial, para la mayor parte de los bosones, en comparación con el caso $r = 1$, es menor. También implica que, en la fase normal, el gas tiene un comportamiento más cercano al de un gas ideal en tres dimensiones. Sin embargo el calor específico aún muestra un intervalo donde su valor disminuye hacia la unidad, lo que indica una transición entre regímenes tridimensional y bidimensional, dependiendo en que sentido cambie la temperatura. Como lo muestra la Fig. 5.5, este intervalo es más pequeño en com-

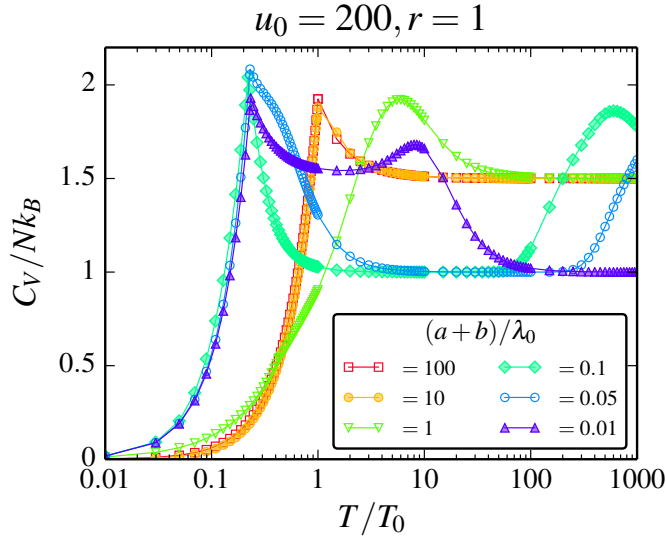


Figura 5.7: Curvas del calor específico a volumen constante de un gas de bosones con $u_0 = 200$ y $r = 1$.

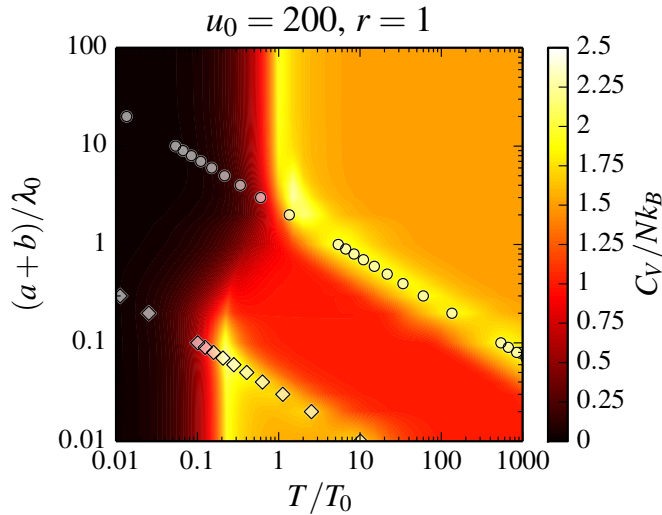


Figura 5.8: C_V/Nk_B vs. T/T_0 y $(a+b)/\lambda_0$ para $u_0 = 200$, $r = 1$. Los círculos y diamantes semitransparentes indican las temperaturas T_{dif}/T_0 de los máximos calculados a partir de Ec. (5.23).

paración con el caso $r = 1$ en la Fig. 5.2. Por otra parte, en la fase mixta, i.e. $T \leq T_c$, es proporcional a $(T/T_c)^{3/2}$ en los extremos donde $(a+b)/\lambda_0$ es muy pequeño o muy grande, y crece hasta su valor máximo (localmente) a la temperatura de condensación Bose-Einstein, donde muestra su característica forma de pico.

En la Fig. 5.6 se han indicado las temperaturas definidas por Ec. (5.23), y de forma notable se ajustan sobre los máximos locales para un valor fijo de $(a+b)/\lambda_0$, al igual que sucedió para $u_0 = 100$, $r = 1$. Parece ser que la temperatura T_{dif} que corresponde a la diferencia $\Delta\epsilon_z^{\text{dif}}$ entre el estado base ϵ_{0z} y el mínimo de la segunda banda es un punto de quiebre donde el comportamiento del gas pasa a ser completamente tridimensional,

a partir del cual el calor específico disminuye monótona y asintóticamente a su valor clásico $3/2$ a medida que la temperatura se incrementa.

En la misma dirección, ahora con los parámetros $u_0 = 200$, $r = 1$, se han calculado curvas de C_V/Nk_B para algunos valores de $(a+b)/\lambda_0$, plasmadas en la Fig. 5.7. Nuevamente, en la fase mixta, es proporcional a $(T/T_c)^{3/2}$ cuando $(a+b)/\lambda_0$ es muy pequeño o muy grande. Para valores intermedios esto no se cumple. Por su parte, en la fase normal ahora es particularmente notable el comportamiento bidimensional de los bosones: la región donde el calor específico se aproxima a la unidad es más extensa con respecto a los casos anteriores. Esto es así porque la magnitud del potencial es mayor, el efecto de las barreras sobre los bosones también lo es, y los bosones se encuentran restringidos en mayor medida a la región entre las barreras de potencial, asemejándose aún más a un gas en dos dimensiones. El espectro de energías en la Fig. 3.3a muestra las primeras tres bandas debajo del potencial, y la región prohibida entre las primeras dos es mayor que para $u_0 = 100$, $r = 1$. Para este caso también se tiene una gráfica de niveles, Fig. 5.8, donde se han indicado los puntos que corresponden a las temperaturas definidas por Ec. (5.23) para un valor de $(a+b)/\lambda_0$ fijo; una vez más están distribuidos muy próximos a la ubicación de los máximos del calor específico.

¿Qué se puede concluir de la discusión anterior? En los tres sistemas las temperaturas determinadas por Ec. (5.23) son una muy buena aproximación de los máximos del calor específico. Sin duda el origen del segundo máximo local del calor específico, aquel que se produce a mayores temperaturas, está relacionado con el ancho de la brecha entre el estado base y la segunda banda de energía del espectro. Al mismo tiempo no nos resultó tan claro el origen del primer máximo, aunque encontramos que satisface la misma relación matemática que el segundo: Ec. (5.23), salvo que con un valor diferente de $\Delta\varepsilon_z^{\text{dif}}$.

5.5. El “crossover” dimensional

Todas las gráficas de niveles obtenidas hasta este punto, es decir, las figuras 5.4, 5.6 y 5.8 contienen la temperatura T_{dif} y el tamaño de la celda unidad $(a+b)/\lambda_0$, tal que la energía térmica $k_B T_{\text{dif}}$ es igual a la brecha energética entre el estado base y la segunda banda del espectro, $\Delta\varepsilon_z^{\text{dif}}$; la relación está dada por Ec. (5.23), y de forma notable estos puntos caen cerca de la ubicación de los máximos de C_V/Nk_B , a partir de donde disminuye de manera asintótica a $3/2$ para temperaturas crecientes. Indudablemente el origen de estos máximos está relacionado con la brecha energética. Si se disminuye la temperatura más allá de T_{dif} el calor específico decrece debajo de la línea de $3/2$, y si los parámetros del sistema son los adecuados puede alcanzar un valor mínimo de uno, el cual puede mantenerse sobre un amplio intervalo de temperaturas. En todo caso la

estructura de C_V/Nk_B indica que hay un “crossover” en la dimensionalidad del gas, el cual comienza, a medida que disminuye la temperatura, a T_{dif} dada por Ec. (5.23).

El calor específico muestra que para $T > T_{\text{dif}}$ aproximadamente, los bosones se comportan como partículas en tres dimensiones; su valor tiende al límite clásico de $3/2$ para T muy grande. Puesto que T_{dif} depende de la brecha energética $\Delta\varepsilon_z^{\text{dif}} = k_B T_{\text{dif}}$ entre la primera y segunda banda del espectro de energía, se deduce que el “crossover” de gas 2D a 3D a temperaturas cada vez mayores se da porque los bosones están migrando a bandas de mayor energía, y la proporción de bosones en estados excitados se incrementa como consecuencia. Para estos bosones el efecto dinámico de las barreras de potencial se ve reducido, y por consiguiente el atrapamiento, hasta que desaparece a temperaturas extremadamente altas. En dirección opuesta, a temperaturas menores que T_{dif} los bosones atrapados por el potencial ocupan los estados disponibles en la primera banda (mas no ocupan de manera masiva el estado base, ya que aún no se produce la condensación Bose-Einstein) ya que no pueden superar la brecha $\Delta\varepsilon_z^{\text{dif}}$. Su proporción respecto al total es mucho mayor que la de los bosones que puedan ocupar estados de mayor energía, por lo que el atrapamiento se intensifica.

Puede notarse que, en todos los sistemas analizados, a medida que $(a+b)/\lambda_0$ se incrementa el “crossover” tiende a desaparecer, y a valores muy grandes de ese parámetro simplemente no existe. La razón por la cual no hay “crossover” en estos casos se debe a que conforme $(a+b)/\lambda_0$ se incrementa la temperatura T_{dif} se aproxima a T_c . Luego entonces cuando $T_{\text{dif}} < T_c$ el comportamiento de C_V/Nk_B está gobernado por la condensación Bose-Einstein, y disminuye monótonamente a cero, desapareciendo el “crossover”.

Ocupación por unidad de momento

La ocupación de los estados excitados a temperaturas mayores o menores que T_{dif} se puede visualizar a partir de la ecuación de número, Ec. (4.3). Restringirse solamente a los estados excitados es suficiente ya que en la fase normal, $T > T_c$, la proporción de bosones en el estado base es despreciable, y en la fase mixta, $T \leq T_c$ la capacidad de ocupación del estado base es infinita.

La Ec. (4.3) se puede definir en términos de una función $\rho_N(k_z)$ dada por

$$\rho_N(k_z) = -\frac{mV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta} \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) \quad (5.24)$$

tal que el número de bosones en estados excitados es

$$N_e = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_N(k_z) dk_z \quad (5.25)$$

Se puede normalizar la función ρ_N con respecto al número total de bosones N ,

$$G_N(k_z) \equiv \frac{1}{N} \rho_N(k_z) = -\frac{mV}{N(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta} \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}), \quad (5.26)$$

tal que la función G_N satisface la relación

$$\int_{-\infty}^{\infty} G_N(k_z) dk_z = 1 - \frac{N_0}{N}. \quad (5.27)$$

Así, para $T \geq T_c$ la fracción de bosones en el estado base N_0/N es despreciable, y la integral es prácticamente igual a la unidad. Sin embargo, cuando $T < T_c$ N_0/N es una fracción significativa del total de partículas, y la integral es menor que uno.

La función G_N puede interpretarse como una función de densidad, más específicamente como la fracción de partículas con momento k_z en $[k_z, k_z + dk_z]$, normalizada con respecto al total de bosones. Por lo tanto nos da información de cuantos bosones puede aceptar un único estado con momento k_z .

La función G_N puede adimensionalizarse como otras funciones, de tal manera que sea adecuada para cálculos numéricos:

$$G_N(k_z) = -\frac{\sqrt{\sigma/\pi}}{\zeta(3/2)} \tilde{T} \ln(1 - e^{-\sigma(\tilde{\varepsilon}_z - \tilde{\mu})/\tilde{T}}). \quad (5.28)$$

¿Qué tipo de información entrega esta función? De particular interés es visualizar cómo se distribuyen los bosones a temperaturas antes y después del “crossover”, y comparar el resultado con otros a temperaturas donde el sistema se comporta como gas 3D, o incluso a $T \leq T_c$, cuando hay una proporción de bosones macroscópica condensados en el estado base.

Es natural partir del sistema $u_0 = 100$, $r = 1$ estudiado anteriormente. Dada la información en las figuras 5.2 y 5.4 el “crossover” sólo se produce cuando $(a + b)/\lambda_0 < 1$. Esta es información valiosa ya que se restringe el análisis a algunos valores representativos de $(a + b)/\lambda_0$, en particular aquellos empleados en la Fig. 5.2 que sean menores que la unidad. Así, $(a + b)/\lambda_0 = 0.05$ parece ser una elección adecuada, dado que el intervalo de temperaturas empleado, que va desde 0.01 hasta 1000, abarca el intervalo donde se produce la condensación Bose-Einstein, el intervalo donde el sistema se comporta como gas 2D y donde pasa a comportarse como gas 3D.

La distribución de los bosones por momento para las dos primeras bandas de energía, es decir, $k_z(a + b) \in [0, 2\pi]$, se muestra en la Fig. 5.9 para diez valores representativos de T/T_0 . Con base en la curva de C_V/Nk_B vs. T/T_0 para $(a + b)/\lambda_0 = 0.05$, se observa que a $T/T_0 = 500$ el sistema apenas tiende a comportarse como gas 3D, y a $T/T_0 = 1000$ el calor específico se aproxima al máximo asociado a $\Delta\varepsilon_z^{\text{dif}}$ entre el estado base y el mínimo de la segunda banda. En ambos casos la distribución de bosones es

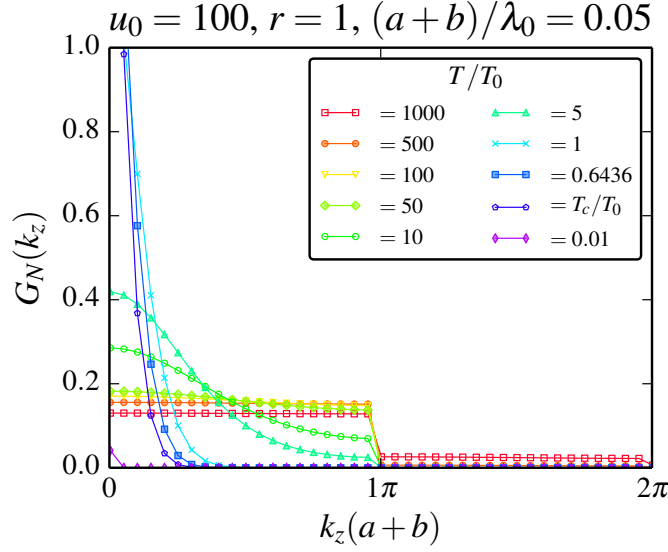


Figura 5.9: $G_N(k_z)$ vs. k_z para algunos valores representativos de T/T_0 . $T_c/T_0 = 0.47492$.

constante para las primeras dos bandas del espectro de energía. Cuando $T/T_0 = 100$ y $T/T_0 = 50$ claramente el sistema se comporta como un gas de bosones en 2D. En estos casos la densidad de bosones se concentra completamente en la primera banda, mas comienza a dejar de ser constante, lo cual se vuelve más notorio cuando T/T_0 disminuye aún más. Para este sistema la temperatura crítica es $T_c/T_0 = 0.47492$, y en la gráfica se muestra la respectiva densidad de bosones. Para $T \leq T_c$ la densidad diverge hacia infinito cuando $k_z = 0$ para todo valor de $(a+b)/\lambda_0$; esto se debe a la condensación Bose-Einstein, cuando la capacidad de ocupación del estado base es infinita.

El ejemplo anterior tiene la característica de que la condensación Bose-Einstein es claramente identificable: hay un pico muy evidente en las curvas de C_V/Nk_B vs. T/T_0 en la Fig. 5.2. Sin embargo también hay condensación Bose-Einstein para el caso particular $(a+b)/\lambda_0 = 1$, mas la condensación no es tan evidente; hay un pico a $T = T_c$, pero la magnitud de C_V/Nk_B a esta temperatura está muy por debajo del valor que muestran otras curvas, incluso debajo de la unidad. ¿Cuál es la razón de esto? Cuando se acude a la gráfica de niveles del calor específico en Fig. 5.4 la situación se aclara: la condensación Bose-Einstein se produce en la región de temperaturas donde el sistema tiende a comportarse como gas 2D, así que C_V/Nk_B a $T = T_c$ no se incrementa tanto como en otros casos. Asimismo los resultados en la Fig. 5.10 indican que para $T/T_0 \leq 1$ la función G_N es despreciable para toda k_z excepto en la primera banda. Algo similar se obtuvo para el ejemplo anterior. Este es un resultado importante: es la manifestación del atrapamiento de los bosones por el potencial. El valor considerablemente menor del calor específico a la temperatura de condensación Bose-Einstein es el resultado de la competencia entre el incremento monótono del calor específico en la fase mixta $T \leq T_c$

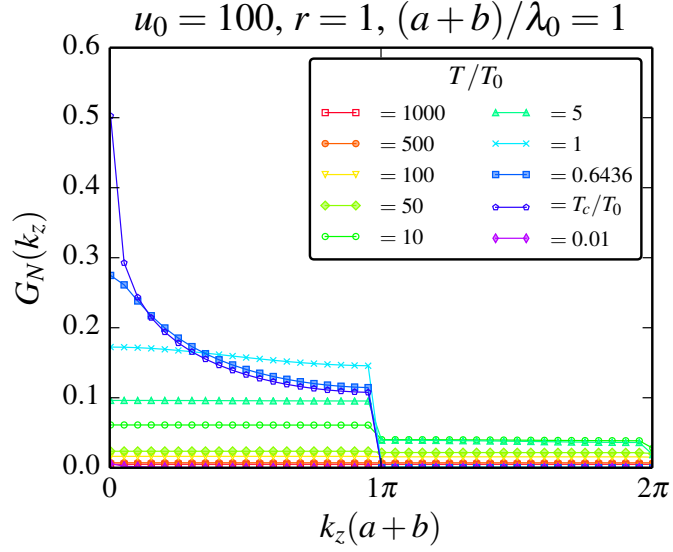


Figura 5.10: $G_N(k_z)$ vs. k_z para algunos valores representativos de T/T_0 . $T_c/T_0 = 0.612087$.

y la disminución por el atrapamiento de los bosones por la estructura de capas del sistema.

Cuando se incrementa la magnitud del potencial la temperatura crítica disminuye, y la región donde el sistema se comporta como gas 2D se extiende. Para $u_0 = 200$ y $r = 1$ las curvas de C_V/Nk_B vs. T/T_0 en la Fig. 5.7 hacen evidente dicha afirmación. La densidad de bosones por momento para $(a+b)/\lambda_0 = 0.05$ se muestra en la Fig. 5.11. De forma notable esta figura muestra que la densidad de bosones por momento se concentra en la primera banda para valores de T/T_0 donde el calor específico es igual, o muy próximo a la unidad (donde hay un comportamiento 2D), pero además está el hecho de que la densidad G_N es prácticamente constante en toda la banda de energía. Este hecho es muy relevante, pues indica que el intervalo de temperaturas donde el sistema se comporta de manera sobresaliente como un gas en 2D es aquel donde la densidad de bosones por unidad de momento se concentra en la primera banda, pero además donde dicha densidad es constante. Para temperaturas cercanas a T_c la densidad también se concentra en la primera banda, pero no es constante: es mayor cerca del estado base; finalmente diverge en $k_z = 0$ cuando $T = T_c$.

Con fines de comparación, para $u_0 = 200$ y $r = 1$, cuando $(a+b)/\lambda_0 = 1$, el calor específico a $T = T_c$ es menor a la unidad, situación análoga a la que ocurrida con $u_0 = 100$, $r = 1$, $(a+b)/\lambda_0 = 1$. La forma de $G_N(k_z)$ se ilustra en la Fig. 5.12. En esta situación la densidad G_N se concentra en la primera banda para $T/T_0 \leq 1$, y es constante para algunas temperaturas, manifestación, una vez más, del atrapamiento de los bosones por el potencial.

Algunas conclusiones de todo lo anterior se pueden resumir de la siguiente manera:

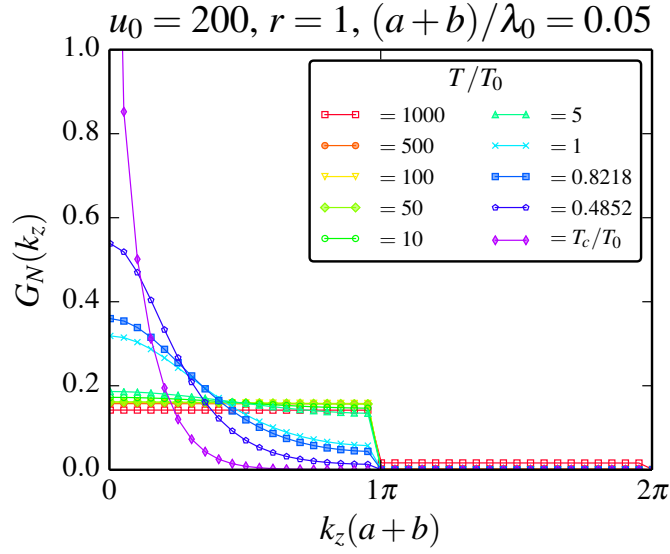


Figura 5.11: $G_N(k_z)$ vs. k_z para algunos valores representativos de T/T_0 . $T_c/T_0 = 0.22982$.

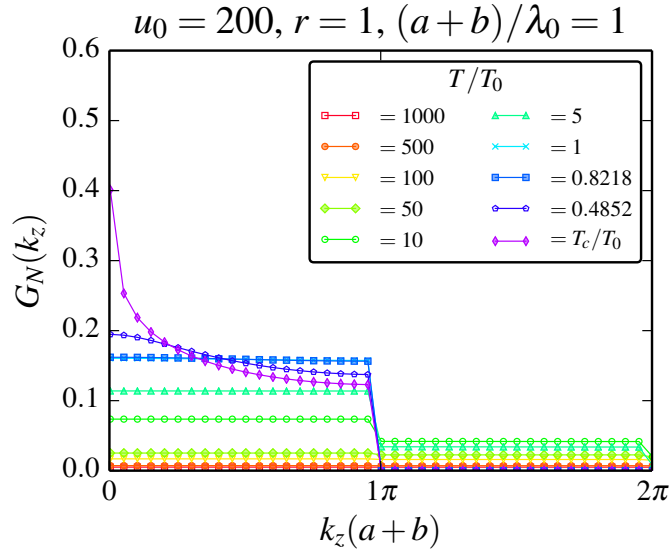


Figura 5.12: $G_N(k_z)$ vs. k_z para algunos valores representativos de T/T_0 . $T_c/T_0 = 0.43116$.

dado un sistema con parámetros u_0 , r y $(a+b)/\lambda_0$ constantes a una temperatura T/T_0

1. Cuando la densidad $G_N(k_z)$ es constante y su valor es despreciable, excepto en la primera banda, el sistema se comporta como un gas ideal de bosones libres en 2D.
2. Cuando la densidad $G_N(k_z)$ deja de ser despreciable más allá de la primera banda, y es constante en cada banda, el sistema se comporta como un gas ideal de

bosones libres en 3D. El resultado es que los bosones están migrando a bandas de energía más alta.

3. Cuando la densidad $G_N(k_z)$ es despreciable excepto en la primera banda, mas su valor no es constante, y es mayor alrededor del estado base, el sistema vuelve a comportarse como un gas 3D, con un respectivo incremento en C_V/Nk_B .
4. A $T \leq T_c$ la densidad $G_N(k_z)$ diverge en $k_z = 0$, como consecuencia de la condensación Bose-Einstein.

Estas dos últimas conclusiones explican el comportamiento del calor específico respecto a la temperatura para valores intermedios de $(a+b)/\lambda_0$ (cuando no es ni mucho mayor ni mucho menor que uno) y para $(a+b)/\lambda_0 \ll 1$. En el primer caso la densidad $G_N(k_z)$ es constante, o muy uniforme, alrededor de la temperatura de condensación Bose-Einstein, así que hay una competencia notable entre el crecimiento monótono de C_V/Nk_B en la fase mixta y la disminución del mismo por efectos de atrapamiento. Como consecuencia el calor específico se comporta muy diferente al del gas ideal libre en 3D. En el caso en que $(a+b)/\lambda_0 \ll 1$ la densidad $G_N(k_z)$ a temperaturas cercanas a T_c no es constante, sino que se incrementa alrededor del estado base, así que el sistema se asemeja a un gas 3D. Por lo tanto C_V/Nk_B es muy semejante al de este último.

Cuando se enlazan las conclusiones anteriores con la temperatura T_{dif} (v. Ec. (5.23)) y todo lo que ésta implica, se impone una restricción al intervalo de u_0 y r dónde dichas conclusiones son válidas. La razón es que, hasta ahora, el máximo que se produce a mayor temperatura T_{dif} se ha asociado con la diferencia de energías $\Delta\epsilon_z^{\text{dif}}$ entre los bordes inferiores de primera y la segunda banda, pero no se ha concluido que $\Delta\epsilon_z^{\text{dif}}$ sea siempre dicha diferencia. Y sin duda, esto no siempre se cumple, como se muestra en seguida.

5.6. Más allá de la brecha entre la primera y segunda banda de energía

Los ejemplos ilustrados parecieran indicar que el “crossover” depende de la diferencia entre el estado base y la segunda banda del espectro de energía. Siendo estrictos, se debe analizar el calor específico de sistemas con otros valores para los parámetros u_0 y r para identificar el intervalo de validez de la relación entre el “crossover” y la brecha $\Delta\epsilon_z^{\text{dif}}$. Dada la evolución del espectro de energía en la Fig. 3.3a y la relación encontrada entre éste y el “crossover” es buena idea escoger los parámetros $u_0 = 500$ y $r = 1$: el espectro muestra cuatro bandas debajo de u_0 que se aproximan a los correspondientes niveles energéticos de una partícula en una caja de ancho a (la diferencia entre este po-

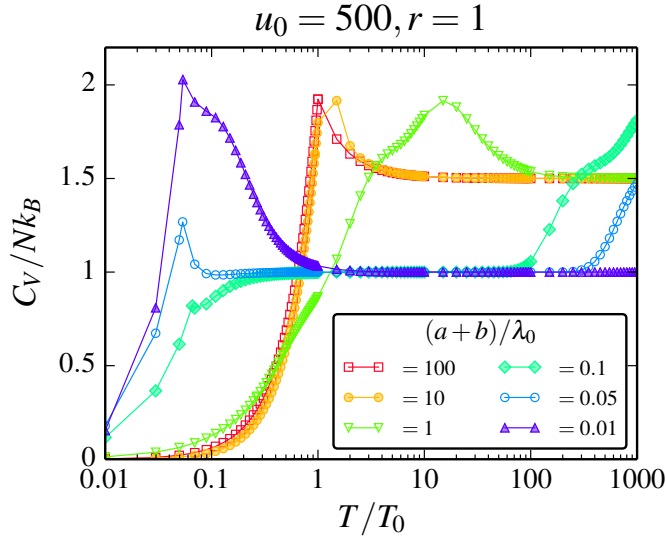


Figura 5.13: Curvas del calor específico a volumen constante de un gas de bosones con $u_0 = 500$ y $r = 1$.

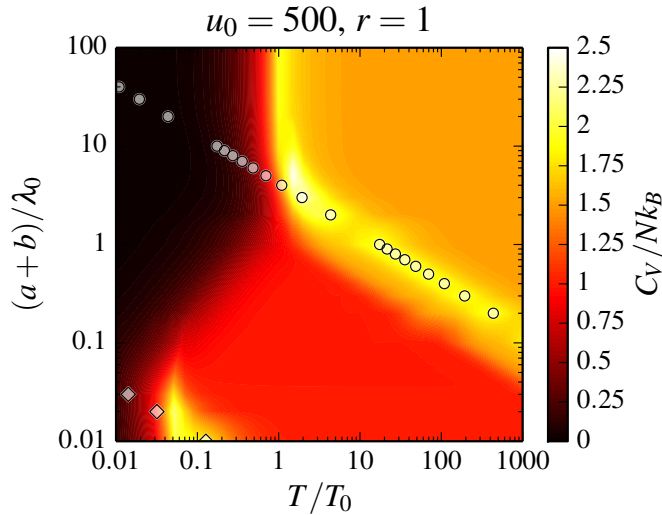


Figura 5.14: C_V/Nk_B vs. T/T_0 y $(a+b)/\lambda_0$ para $u_0 = 500$, $r = 1$. Los círculos y diamantes semitransparentes indican las temperaturas T_{dif}/T_0 de los máximos calculados a partir de Ec. (5.23).

tencial y una caja de paredes infinitas no parece ser sustancial para los bosones dentro de dichas bandas). Los resultados se muestran en las figuras 5.13 y 5.14.

En el mismo sentido que los ejemplos anteriores el efecto directo del incremento de u_0 es extender la región donde el sistema se comporta como un gas bidimensional, como lo muestra la gráfica de niveles en Fig. 5.14. Simultáneamente la temperatura crítica disminuye considerablemente cuando $(a+b)/\lambda_0 \ll 1$, lo cual desplaza el pico en C_V/Nk_B a $T = T_c$ a la izquierda en la Fig. 5.13. Estos son comportamientos análogos a los que se presentan en los ejemplos anteriores, e incluso, en la Fig. 5.14 se grafican círculos y diamantes en color blanco semitransparente que corresponden a las tempe-

raturas T_{dif} definidas en la Ec. (5.23) para un valor de $(a+b)/\lambda_0$ y $\Delta\varepsilon_z^{\text{dif}}$ dado. Estos puntos son la diferencia sustancial del sistema respecto a los anteriores: en particular la temperatura T_{dif} indicada por los círculos está asociada no a la diferencia de energía $\Delta\varepsilon_z^{\text{dif}}$ entre el estado base y el mínimo de la segunda banda, sino a la diferencia **entre el estado base y el mínimo de la tercera banda de energía**. Este es un resultado importante, pues confirma que la diferencia $\Delta\varepsilon_z^{\text{dif}}$ asociada al máximo a partir del cual C_V/Nk_B tiende al límite clásico es, en general, una función no trivial de u_0 y r : puede corresponder a la diferencia entre el estado base y la segunda, tercera o bandas superiores, según la magnitud de las barreras de potencial y la relación anchura-separación de las mismas. Notablemente la temperatura T_{dif} indicada por los diamantes sigue estando determinada por $\Delta\varepsilon_z^{\text{dif}}$, cuando esta diferencia equivale a un cuarto del ancho de la primera banda aproximadamente.

Ahora que se ha demostrado que $\Delta\varepsilon_z^{\text{dif}}$ puede estar asociada a la diferencia de energía entre el estado base y alguna banda superior, ¿cambia esto las conclusiones obtenidas del análisis de la densidad de bosones por unidad de momento $G_N(k_z)$ que definen el comportamiento 2D o 3D del sistema? Para responder esta pregunta se tiene que visualizar la densidad para este sistema, y las figuras 5.15 y 5.16 contienen dicha información en las primeras tres bandas de energía, para $(a+b)/\lambda_0 = 0.01$ y $(a+b)/\lambda_0 = 1$ respectivamente. Ahora se ha elegido un valor diferente a los casos analizados en la sección anterior, debido a que el “crossover” abarca una región más grande: el valor $(a+b)/\lambda_0 = 0.01$ es interesante porque C_V/Nk_B muestra claramente el pico causado por la condensación Bose-Einstein, y es igual a la unidad en un amplio intervalo de temperaturas. Así que en este intervalo hay ciertas expectativas sobre la densidad $G_N(k_z)$

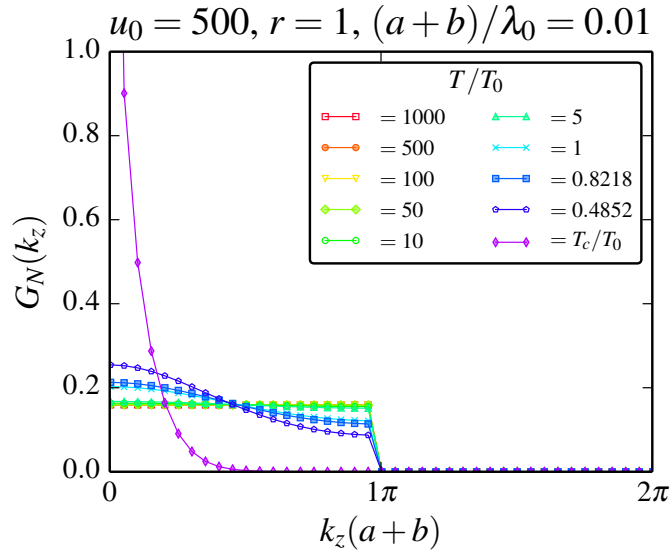


Figura 5.15: $G_N(k_z)$ vs. k_z para algunos valores representativos de T/T_0 . $T_c/T_0 = 0.05371$.

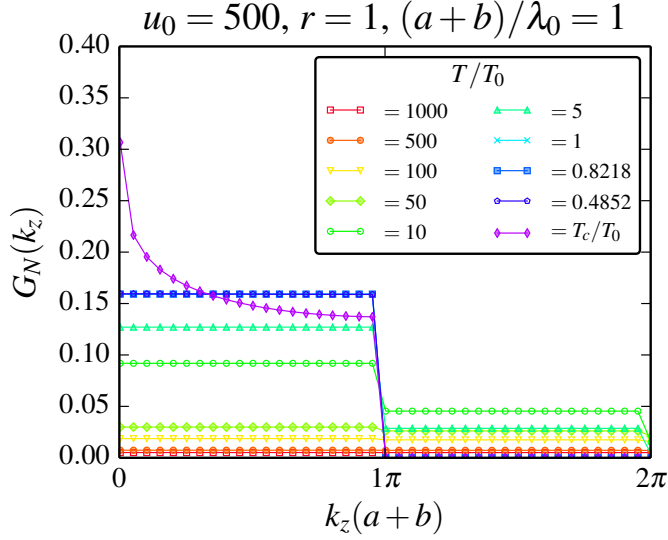


Figura 5.16: $G_N(k_z)$ vs. k_z para algunos valores representativos de T/T_0 . $T_c/T_0 = 0.26290$.

de acuerdo a los resultados anteriores: la Fig. 5.15 indica claramente que la densidad de bosones es prácticamente constante para toda $T/T_0 > 1$, y sólo en la primera banda, y según la gráfica de niveles en Fig. 5.14, todas estas temperaturas caen dentro del intervalo donde el sistema se comporta como gas 2D. Adicionalmente, a temperaturas menores a la unidad la densidad $G_N(k_z)$ es no nula sólo en la primera banda, pero ya no es constante; en este intervalo el calor específico crece más allá de $3/2$, y tiene el pico resultado de la condensación Bose-Einstein. Así, los resultados para este sistema no entran conflicto con las conclusiones obtenidas en la sección anterior. El caso en que $(a+b)/\lambda_0 = 1$ es similar a los anteriores para este mismo parámetro: C_V/Nk_B menor a la unidad. Para todas las curvas $G_N(k_z)$ es prácticamente constante excepto a $T = T_c$ (lo cual no significa que para temperaturas intermedias deje de ser constante), y para $T/T_0 \leq 1$ es despreciable excepto en la primera banda. Es a estas temperaturas el sistema se comporta como un gas en 2D según la gráfica de niveles de C_V/Nk_B . Para $T/T_0 > 1$ la densidad de bosones es constante, pero se extiende más allá de la primera banda. A estas temperaturas el sistema tiende a comportarse como un gas 3D libre según su calor específico.

Entonces ¿qué se puede concluir de los resultados anteriores? Todo indica que la forma de la densidad de bosones $G(k_z)$ determina si el sistema se comporta como un gas 2D o 3D, y por lo tanto dónde se produce el “crossover”. Además parece ser que las conclusiones dadas al final de la Sec. 5.5 son válidas en general para cualquier valor de u_0, r y $(a+b)/\lambda_0$.

6

Calor específico isobárico

El calor específico isobárico, que corresponde a un proceso termodinámico a presión constante, está definido en términos de la entropía S como

$$C_p = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{p,N} \quad (6.1)$$

Ésta es una definición análoga a la de C_V , y de manera similar se puede determinar a partir de la entalpía $H \equiv U + pV$

$$C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_{p,N} \quad (6.2)$$

en lugar de la energía interna U . Esta expresión parece más atractiva que Ec. (6.1) puesto que ya se ha determinado la energía interna U , y la ecuación de estado corresponde al Gran potencial $\Omega = -pV$. Sin embargo en este trabajo se procederá de una forma alternativa, ya que también son de interés las compresibilidades isotérmica y adiabática del sistema.

La relación básica para determinar C_p está dada por [25, p. 189]

$$C_p = C_V + TV \kappa_T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{V,N}^2 \quad (6.3)$$

donde κ_T es la compresibilidad isotérmica

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_{T,N} \quad (6.4)$$

La presión se determina directamente del Gran potencial, Ec. (2.25) y la ecuación de estado $-pV = \Omega$. La expresión para la presión es

$$p(T, V, \mu) = -\frac{k_B T}{V} \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_{0z} - \mu)}) + \frac{m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z g_2(e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) \quad (6.5)$$

con $\varepsilon_{0z} \equiv \varepsilon_0$ la energía de estado base del sistema.

6. CALOR ESPECÍFICO ISOBÁRICO

Antes de proceder, se puede deducir algo muy interesante de la presión. Según la definición del número de bosones en el estado base, $N_0 = 1/(e^{\beta(\epsilon_0 - \mu)} - 1)$, se sigue que el primer término de Ec. (6.5) es

$$-\frac{k_B T}{V} \ln(1 - e^{-\beta(\epsilon_0 - \mu)}) = k_B T V^{-1} \ln(N_0 + 1). \quad (6.6)$$

Si la densidad del sistema es $\eta_B = N/V$ entonces $V^{-1} \ln(N_0 + 1) = \eta_B N^{-1} \ln(N_0 + 1) \propto N^{-1} \ln(N_0 + 1)$, y como $N_0 \leq N$ entonces el primer término de la presión es, a lo más, proporcional a $N^{-1} \ln N$. Por lo tanto este término es despreciable para cualquier valor de μ , y se puede eliminar de la ecuación p , cuya expresión final es

$$p(T, V, \mu) = \frac{m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z g_2(e^{-\beta(\epsilon_z - \mu)}). \quad (6.7)$$

Físicamente este resultado significa que los bosones en el estado base no contribuyen a la presión.

La expresión para la presión permite deducir otra característica peculiar del gas de bosones sin siquiera recurrir al álgebra: dado que la presión no depende explícitamente del volumen y el potencial químico es constante para $T \leq T_c$ entonces la compresibilidad isotérmica del gas es infinita en su fase mixta.

En la fase normal, i.e. $T > T_c$, se vuelve necesario calcular la derivada parcial $\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_{T,N}$ que aparece en la definición de κ_T . En vista de que el número de partículas N no es variable natural de p hay que evaluar la regla de la cadena para dicha parcial. Considerando el potencial químico $\mu = \mu(T, V, N)$ se obtiene la relación

$$\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_{T,N} = \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_{T,\mu} + \left(\frac{\partial p}{\partial \mu}\right)_{T,V} \left(\frac{\partial \mu}{\partial V}\right)_{T,N}. \quad (6.8)$$

Claramente el primer término del lado derecho de la igualdad se anula según Ec. (6.7). Entonces

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \frac{1}{\left(\frac{\partial p}{\partial \mu}\right)_{T,V} \left(\frac{\partial \mu}{\partial V}\right)_{T,N}} \quad (6.9)$$

La primera de las dos parciales se obtiene de manera directa de la fórmula para p :

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \mu}\right)_{T,V} = -\frac{m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln(1 - e^{-\beta(\epsilon_z - \mu)}) \quad (6.10)$$

Al comparar esta ecuación con Ec. (4.2) sale a relucir la sencillez de esta parcial:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \mu}\right)_{T,V} = \frac{N_e}{V}, \quad (6.11)$$

que no es más que la densidad de bosones en estados excitados, $N_e/V = (N - N_0)/V$, y ya que la proporción de los bosones en el estado base N_0 es despreciable en la fase normal se sigue que $N_e = N$ para todo fin práctico.

Queda por determinar la otra parcial, la cual se puede determinar de manera análoga a $\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{N,V}$ en el caso del calor específico isocórico. Esto significa usar la Ec. (4.3) como punto de partida y derivar,

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial V}\right)_{T,N} = \frac{k_B T}{V} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)})}{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z}{e^{\beta(\varepsilon_z - \mu)} - 1}}. \quad (6.12)$$

Por lo tanto la compresibilidad isotérmica para $T > T_c$ es

$$\kappa_T = -\frac{V}{Nk_B T} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z}{e^{\beta(\varepsilon_z - \mu)} - 1}}{\int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)})}. \quad (6.13)$$

Como es de esperarse, ésta es un cantidad positiva ya que la integral en el denominador de κ_T es negativa.

Ahora bien, para calcular la parcial $\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{V,N}$ se aplica la regla de la cadena, de forma análoga al caso de κ_T :

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{V,N} = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{V,\mu} + \left(\frac{\partial p}{\partial \mu}\right)_{T,V} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{V,N} \quad (6.14)$$

La primera parcial del lado derecho de la igualdad corresponde a

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{V,\mu} &= \frac{m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{\beta^2 T} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z g_2(e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) \\ &\quad - \frac{m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{\beta T} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z (\varepsilon_z - \mu) \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) \end{aligned} \quad (6.15)$$

mientras que los factores del segundo miembro son cantidades conocidas: el factor $\left(\frac{\partial p}{\partial \mu}\right)_{V,T}$ está dado por Ec. (6.11), y $\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{V,N} \equiv \left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{N,V}$ está dada por Ec. (5.14),

$$T \left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{N,V} = -\frac{1 + \frac{mV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{N} \int_0^{\infty} dk_z \frac{\varepsilon_z - \mu}{e^{\beta(\varepsilon_z - \mu)} - 1}}{\frac{mV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{N} \int_0^{\infty} \frac{dk_z}{e^{\beta(\varepsilon_z - \mu)} - 1}}$$

Así, la ecuación del calor específico a presión constante por bosón a una temperatura T es

$$\begin{aligned} \frac{C_p}{Nk_B} = \frac{C_V}{Nk_B} - \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z}{e^{\beta(\varepsilon_z - \mu)} - 1}}{\int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)})} & \left[\frac{mV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{N\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z g_2(e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) - \right. \\ & \left. - \frac{mV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z (\varepsilon_z - \mu) \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) + \frac{1}{k_B} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{N,V} \right]^2. \end{aligned} \quad (6.16)$$

Nótese que las integrales dentro de los corchetes en la ecuación anterior son prácticamente las mismas que aparecen en la expresión para el calor específico isocórico, lo cual significa que no presentan divergencias para ningún intervalo de temperatura. Inclusive $\left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{N,V}$ está perfectamente definida para toda T . Por lo tanto se concluye que C_p debe presentar el mismo tipo de divergencia que la compresibilidad isotérmica, ya que las integrales que definen esta última están presentes en la ecuación de la primera; así C_p es infinita para $T \leq T_c$. Por último, pero no menos importante: la estructura de C_V debe ser heredada por C_p .

La Ec. (6.16) puede simplificarse ligeramente si se reconoce que, para $T > T_c$, la integral en el divisor de κ_T en Ec. (6.13) aparece en la ecuación de número, Ec. (4.3), de tal forma que la ecuación para C_p se puede reescribir como

$$\begin{aligned} \frac{C_p}{Nk_B} = \frac{C_V}{Nk_B} + \frac{m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{V}{N\beta} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z}{e^{\beta(\varepsilon_z - \mu)} - 1} & \left[\frac{mV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2}{N\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z g_2(e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) - \right. \\ & \left. - \frac{mV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z (\varepsilon_z - \mu) \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_z - \mu)}) + \frac{1}{k_B} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{N,V} \right]^2. \end{aligned} \quad (6.17)$$

6.1. Expresiones adimensionales

Usando la Ec. (4.11) con $\eta_B = N/V$ se puede redefinir C_p en una ecuación adecuada para calcularla numéricamente:

$$\begin{aligned} \frac{C_p}{Nk_B} = \frac{C_V}{Nk_B} + \frac{2\sqrt{\sigma/\pi}}{\zeta(3/2)} \tilde{T} \int_0^{\infty} \frac{dk'_z}{e^{\sigma(\tilde{\varepsilon}_z - \tilde{\mu})/\tilde{T}} - 1} & \left[\frac{4\sqrt{\sigma/\pi}}{\zeta(3/2)} \tilde{T} \int_0^{\infty} dk'_z g_2(e^{-\sigma(\tilde{\varepsilon}_z - \tilde{\mu})/\tilde{T}}) - \right. \\ & \left. - \frac{2\sigma\sqrt{\sigma/\pi}}{\zeta(3/2)} \int_0^{\infty} dk'_z (\tilde{\varepsilon}_z - \tilde{\mu}) \ln(1 - e^{-\sigma(\tilde{\varepsilon}_z - \tilde{\mu})/\tilde{T}}) + \frac{1}{k_B} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{N,V} \right]^2 \end{aligned} \quad (6.18)$$

donde $dk'_z \equiv (a+b)dk_z$. Además se ha empleado la paridad de la energía respecto a k_z . La parcial del potencial químico está dada por

$$\frac{1}{k_B} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{N,V} = -\frac{\sigma}{\bar{T}} \frac{1 + \frac{2\sigma\sqrt{\sigma/\pi}}{\zeta(3/2)} \int_0^\infty dk'_z \frac{\bar{\epsilon}_z - \bar{\mu}}{e^{\sigma(\bar{\epsilon}_z - \bar{\mu})/\bar{T}} - 1}}{\frac{2\sigma\sqrt{\sigma/\pi}}{\zeta(3/2)} \int_0^\infty \frac{dk'_z}{e^{\sigma(\bar{\epsilon}_z - \bar{\mu})/\bar{T}} - 1}}. \quad (6.19)$$

Por supuesto está la cuestión de cómo adimensionalizar la compresibilidad isotérmica κ_T dada por Ec. (6.4). Puede pensarse que, como se ha hecho hasta ahora, lo conveniente es recurrir a la correspondiente relación para la compresibilidad isotérmica de un gas ideal de bosones libres [25, p. 189]

$$\kappa_T^{(\text{libre})} = \frac{V}{Nk_B T} \frac{g_{1/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \quad (6.20)$$

donde $z = e^{\beta\mu}$ es la fugacidad del gas. Sin embargo, resulta que a la temperatura de condensación Bose-Einstein del gas ideal libre, T_0 , la fugacidad es $z = 1$, así que la compresibilidad es infinita pues $\lim_{z \rightarrow 1} g_{1/2}(z) = \infty$. Entonces ésta no es la mejor opción. Por otra parte, se reconoce que las unidades de la compresibilidad son las del inverso de una presión, así que parece adecuado recurrir a la ecuación para la presión del mismo gas ideal de bosones libre a $T < T_c$,

$$p(T) = \frac{k_B T}{\lambda^3} \zeta(5/2) \quad (6.21)$$

donde λ es la longitud de onda térmica del gas. A $T = T_0$ la presión es

$$p_0 = \frac{k_B T_0}{\lambda_0^3} \zeta(5/2). \quad (6.22)$$

La longitud de onda térmica a T_0 , λ_0 , satisface la relación $\eta_B \lambda_0 = \zeta(3/2)$, $\eta_B = N/V$, por lo cual la ecuación para p_0 es

$$p_0 = \frac{Nk_B T_0}{V} \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)}. \quad (6.23)$$

Entonces el término $Nk_B T_0/V$, que está directamente relacionado con la presión de un gas ideal a T_0 , es el factor ideal para adimensionalizar la ecuación de κ_T , Ec. (6.13), la cual toma la forma

$$\frac{Nk_B T_0 \kappa_T}{V} = -\frac{T_0}{T} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z}{e^{\beta(\epsilon_z - \mu)} - 1}}{\int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln(1 - e^{-\beta(\epsilon_z - \mu)})}. \quad (6.24)$$

Como el denominador corresponde a la ecuación de número, Ec. (4.3), la forma adimensionalizada de la compresibilidad isotérmica es

$$\frac{Nk_B T_0 \kappa_T}{V} = \frac{2\sqrt{\sigma/\pi}}{\zeta(3/2)} \int_0^\infty \frac{dk'_z}{e^{\sigma(\bar{\epsilon}_z - \bar{\mu})/\bar{T}} - 1}. \quad (6.25)$$

6.2. Un ejemplo base: ancho y separación de las barreras iguales

Dada la forma del calor específico isobárico en Ec. (6.18) se deduce que las características de κ_T serán heredadas a C_p/Nk_B . En particular, la compresibilidad es una función que diverge hacia infinito cuando $T \rightarrow T_c$, como se concluyó con anterioridad. En el caso particular en que $u_0 = 100$, $r = 1$, que es un sistema que se ha manejado con regularidad, la compresibilidad isotérmica se muestra en la Fig. 6.1 para seis valores representativos de $(a+b)/\lambda_0$. A diferencia de otras figuras mostradas a lo largo de este trabajo la compresibilidad se muestra en función de T/T_c , la cual es una escala de temperaturas más conveniente porque para $T \leq T_c$ aquella no está definida. Este cambio de escala también se refleja en el factor que adimensionaliza la compresibilidad, donde la cantidad graficada es

$$\frac{Nk_B T_c \kappa_T}{V} = \left(\frac{T_c}{T_0}\right) \frac{Nk_B T_0 \kappa_T}{V} \quad (6.26)$$

para la cual $Nk_B T_0 \kappa_T/V$ está dada por Ec. (6.25). El efecto inmediato de este cambio de variable es que todas las curvas tienen en común una asíntota en $T = T_c$. Las mayores diferencias se concentran en el intervalo $T/T_c < 10$, así que se ha graficado κ_T en este intervalo.

La compresibilidad muestra cierta estructura cuando T se aproxima a T_c , sin embargo su comportamiento tiende a estabilizarse muy rápidamente a medida que T/T_c crece. A partir de alguna temperatura κ_T es prácticamente proporcional a $(T/T_c)^{-1}$, relación indicada por la línea punteada en la gráfica. Esto es así porque a temperaturas altas el sistema tiende al límite clásico donde se comporta como un gas ideal en 3D; en este límite la ecuación de estado es $PV = Nk_B T$, luego entonces la definición de κ_T en Ec. (6.4) implica que

$$\kappa_T = \frac{V}{Nk_B T} \quad (6.27)$$

es la compresibilidad isotérmica de un gas ideal, la cual adimensionalizada toma la forma

$$\frac{Nk_B T_c \kappa_T}{V} = \left(\frac{T}{T_c}\right)^{-1}, \quad (6.28)$$

haciendo evidente la proporcionalidad antes mencionada.

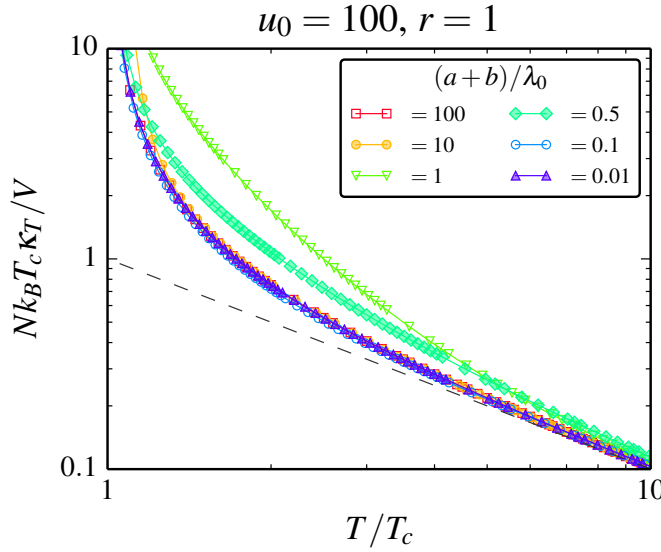


Figura 6.1: $Nk_B T_c \kappa_T / V$ vs. T/T_c para algunos valores representativos de $(a+b)/\lambda_0$. La línea punteada significa $(T/T_c)^{-1}$.

Esta gráfica muestra que en los extremos donde $(a+b)/\lambda_0 \ll 1$ o $(a+b)/\lambda_0 \gg 1$ la compresibilidad se aproxima más rápidamente al límite clásico. Esto es así porque, según lo discutido en la Sec. 5.4, cuando $(a+b)/\lambda_0 \gg 1$ el sistema se comporta como un gas 3D esencialmente. En el caso en que $(a+b)/\lambda_0 \ll 1$ es pequeño el sistema presenta un “crossover” dimensional en cierto intervalo de temperaturas, pero cuando T se aproxima a T_c se comporta de nuevo esencialmente como un gas 3D.

Es para los valores intermedios de $(a+b)/\lambda_0$, donde el “crossover” produce comportamientos peculiares tanto en C_V/Nk_B como en la densidad de ocupación $G_N(k_z)$, donde la compresibilidad muestra un comportamiento diferente ya que tiende al límite clásico con menor rapidez. Para todos los casos es bastante claro que κ_T tiene un comportamiento monótono y tiende al límite clásico 3D muy rápidamente.

¿Cómo es el calor específico isobárico? La gráfica de C_p/Nk_B para seis valores representativos de $(a+b)/\lambda_0$ se muestra en la Fig. 6.2, y confirma la presencia de un comportamiento complejo. Éste se puede caracterizar en intervalos de temperatura de manera similar a como se hizo con C_V/Nk_B : por una parte, cuando $T \rightarrow T_c$ el calor específico isobárico diverge, debido a su dependencia de κ_T . En el otro extremo cuando T/T_c es muy grande tiende al límite clásico para un gas 3D, que es $5/2$. En la región intermedia pueden aparecer máximos y mínimos locales para algunos valores de $(a+b)/\lambda_0$ resultado del atrapamiento de los bosones por el potencial, lo cual se discutió ampliamente al analizar el calor específico isocórico en el Cap. 5. Cuando $(a+b)/\lambda_0 \gg 1$ el comportamiento de C_p/Nk_B es monótono decreciente, pues el sistema se asemeja bastante a un gas de bosones 3D libre. Para los valores de $(a+b)/\lambda_0$ donde hay “crossover” dimensional existen intervalos de temperatura donde el sistema

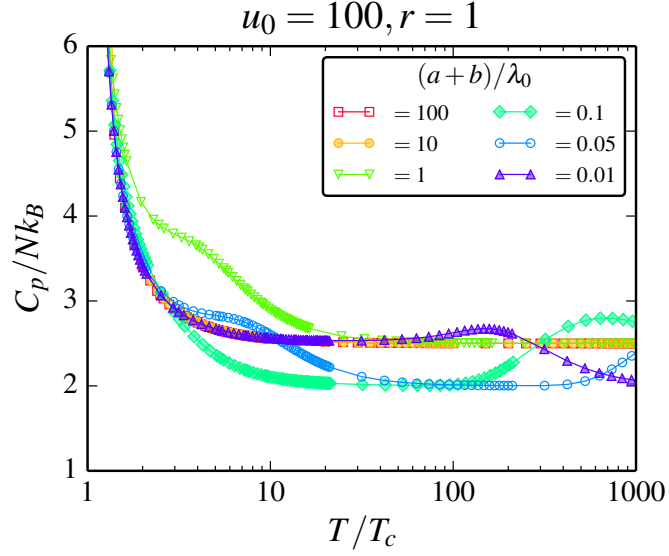


Figura 6.2: C_p/Nk_B vs. T/T_c para algunos valores representativos de $(a+b)/\lambda_0$.

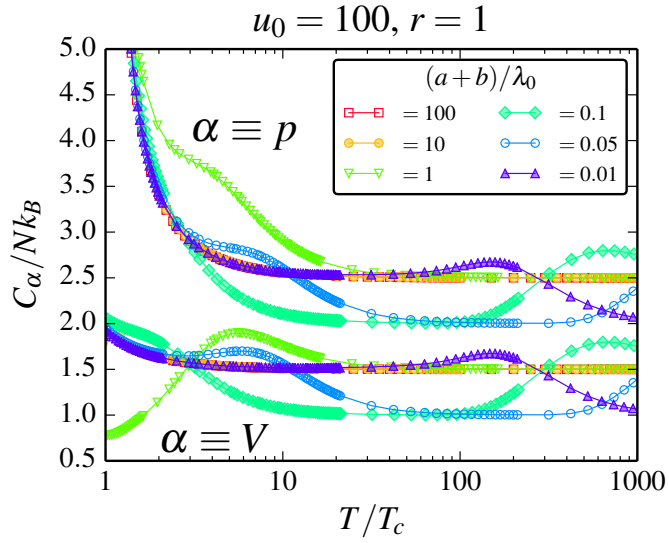


Figura 6.3: C_p/Nk_B y C_V/Nk_B vs. T/T_c para algunos valores representativos de $(a+b)/\lambda_0$.

se comporta como un gas 2D y C_p/Nk_B disminuye a 2, que es el valor del calor específico isobárico de un gas 2D en el límite clásico. El mismo fenómeno se manifiesta en el cociente entre las capacidades caloríficas,

$$\gamma \equiv \frac{C_p}{C_V}, \quad (6.29)$$

cuyo cálculo se visualiza en la Fig. 6.4. En esta figura el intervalo de temperaturas correspondiente al “crossover” de gas 3D a 2D es aquella donde γ es aproximadamente igual a 2; la razón es que para un gas de bosones con dos grados de libertad en el

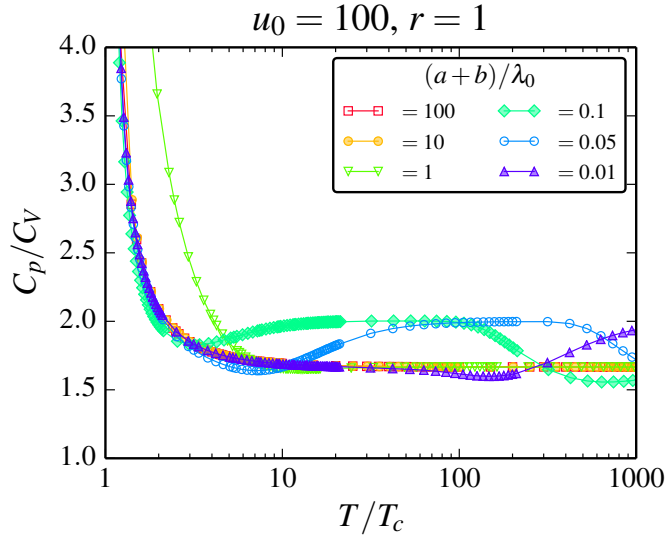


Figura 6.4: C_p/C_V vs. T/T_c para algunos valores representativos de $(a+b)/\lambda_0$.

límite clásico el cociente γ es precisamente 2. La estructura de ambas capacidades caloríficas se manifiesta en un conjunto de máximos y mínimos locales naturalmente, y la divergencia a $T = T_c$ se mantiene. Para los valores de $(a+b)/\lambda_0$ muy grandes donde no se presenta “crossover” γ disminuye monótonamente, y prácticamente no muestra estructura. A temperaturas muy altas γ tiende a $5/3 \approx 1.67$ indistintamente del valor de $(a+b)/\lambda_0$.

Vale la pena subrayar que la presencia de los máximos y mínimos locales en las curvas de calor específico isobárico se debe a su dependencia de C_V/Nk_B , como se manifiesta en la Fig. 6.3, donde las curvas de C_p/Nk_B corresponden a valores más altos y las de C_V/Nk_B a menores valores. En ambos conjuntos de curvas los máximos y mínimos locales, así como los puntos de inflexión, se producen a las mismas temperaturas.

Finalmente, el intervalo de temperaturas donde el efecto de la estructura del potencial en el calor específico isobárico es claramente visible corresponde al “crossover” dimensional; con relación a la compresibilidad isotérmica esto indica que el principal efecto de la estructura sobre κ_T es incrementar su magnitud respecto a la compresibilidad de otros sistemas cuyo comportamiento se asemeja más al de un gas 3D libre, o sea cuando $(a+b)/\lambda_0 \gg 1$ o $(a+b)/\lambda_0 \ll 1$. Esto es lo que se visualiza, por ejemplo, en la Fig. 6.1, donde $Nk_B T_c \kappa_T / V$ para $(a+b)/\lambda_0 = 1$, o bien para $(a+b)/\lambda_0 = 0.5$, es mayor que para el resto de los sistemas.

6.3. Otros sistemas similares

Cuando se incrementa la magnitud de las barreras de potencial, por ejemplo, en el sistema $u_0 = 200$, $r = 1$, el comportamiento de C_p/Nk_B cambia en forma muy similar a C_V/Nk_B , ya que la compresibilidad isotérmica sigue siendo una función monótona decreciente que tiende al límite clásico 3D muy rápidamente, como se visualiza en la Fig. 6.5. En este aspecto no cambia drásticamente respecto al sistema $u_0 = 100$, $r = 1$; la diferencia sustancial está en la magnitud de κ_T , que es mayor cuando u_0 se incrementa. El efecto de la estructura del potencial es similar: donde el sistema tiende a comportarse como gas 3D libre la compresibilidad isotérmica es menor, y tiende más rápidamente al límite clásico. Aún más: incluso cuando el intervalo de T/T_c visualizado en esta gráfica es mayor que en el sistema anteriormente analizado, se puede notar que, para valores intermedios de $(a+b)/\lambda_0$, κ_T es mayor, y decrece más lentamente, con respecto al sistema $u_0 = 100$, $r = 1$.

El calor específico isobárico en función de T/T_c para seis valores representativos de $(a+b)/\lambda_0$ se visualiza en la Fig. 6.6. Los resultados ilustran el conjunto de máximos y mínimos locales asociados a su dependencia de C_V/Nk_B , así como la divergencia a $T = T_c$ por efectos de la compresibilidad isotérmica. Es claro que hay diferencias con respecto al calor específico isobárico de nuestro ejemplo base; sin embargo, las mayores diferencias quedan mejor ilustradas por la razón entre capacidades caloríficas, C_p/C_V , plasmada en la Fig. 6.7. Esta figura es contundente ya que muestra con claridad como los intervalos de temperatura donde el sistema se comporta como gas 2D se magnifican como consecuencia del incremento de la magnitud del potencial y el atrapamiento de

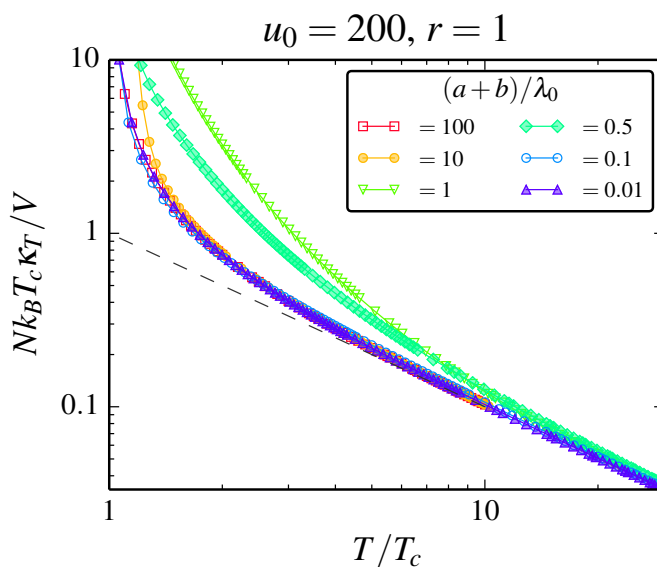


Figura 6.5: $Nk_B T_c \kappa_T / V$ vs. T/T_c para algunos valores representativos de $(a+b)/\lambda_0$.

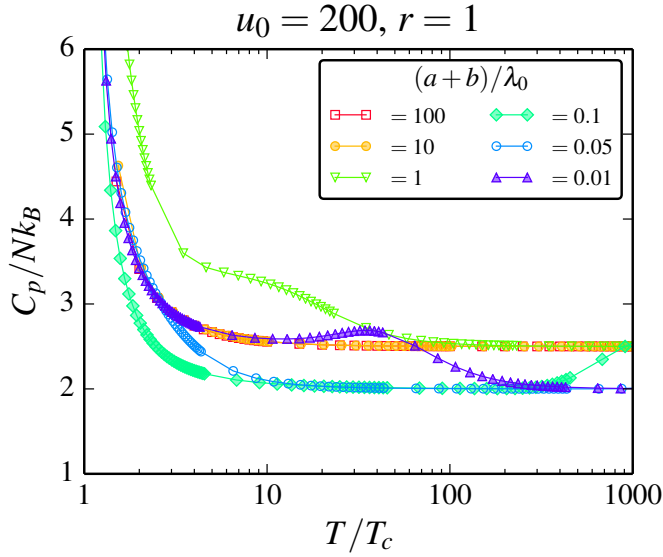


Figura 6.6: C_p/Nk_B vs. T/T_c para algunos valores representativos de $(a+b)/\lambda_0$.

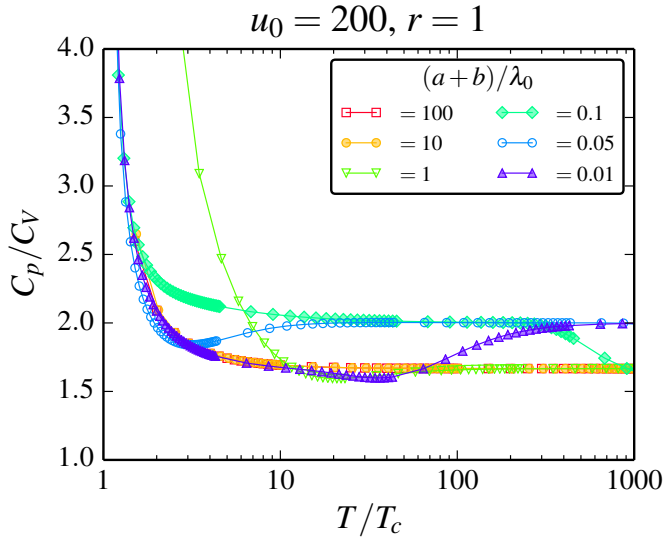


Figura 6.7: C_p/C_V vs. T/T_c para algunos valores representativos de $(a+b)/\lambda_0$.

los bosones. Es claro entonces que la diferencia de capacidades caloríficas del sistema entre procesos que ocurren a volumen constante y otros a presión constante se hace más grande cuando la magnitud del potencial se incrementa.

Hay un valor particular, $(a+b)/\lambda_0 = 1$, para el cual este efecto es particularmente intenso. En este caso concreto, analizado previamente en la Sec. 5.5, resulta que el calor específico isocórico C_V/Nk_B disminuye considerablemente cuando T es muy próxima a T_c , pues el atrapamiento de los bosones contrarresta el incremento monótono del calor específico conforme aumenta T en la fase mixta. Simultáneamente, a T pró-

ximas (y mayores) que T_c , el calor específico isobárico se incrementa por efectos de la compresibilidad isotérmica creciente.

Cuando se incrementa la magnitud del potencial, por ejemplo, cuando $u_0 = 500$ y $r = 1$, los resultados siguen la ruta trazada por los sistemas anteriores. En primer lugar la magnitud de la compresibilidad isotérmica se incrementa, y las diferencias cuando el periodo del potencial $(a+b)/\lambda_0$ cambia se vuelven aún más notorias; en los casos en que $(a+b)/\lambda_0$ es muy grande o muy pequeño la compresibilidad disminuye más rápidamente. Lo anterior puede ser visualizado en la Fig. 6.8.

En segundo lugar está el comportamiento del calor específico isobárico, plasmado en la Fig. 6.9. Es peculiar como en el límite clásico, es decir, a temperaturas altas ($T/T_c > 10$), C_p se comporta ya sea como un gas de bosones en 2D para $(a+b)/\lambda_0 < 1$, donde tiende a 2, o bien como un gas 3D para $(a+b)/\lambda_0 \geq 1$, donde tiende a $5/2$; no hay casos intermedios donde se manifieste el “crossover” dimensional por la magnitud tan alta del potencial, que intensifica el atrapamiento de los bosones. En los casos en que existe “crossover”, esencialmente para $(a+b)/\lambda_0 < 1$, el intervalo de temperaturas donde el sistema se comporta como gas 2D se extiende y no permite visualizar el cambio de comportamiento de 2D a 3D. Por supuesto lo anterior no significa que para dichos valores de $(a+b)/\lambda_0$ el “crossover” dimensional no exista, simplemente no se manifiesta en el intervalo de temperaturas visualizado. La extensión del comportamiento 2D del sistema se observa también en la gráfica de niveles del calor específico isocórico en la Fig. 5.14.

En última instancia está la razón de la capacidades caloríficas, mostrada en la Fig.

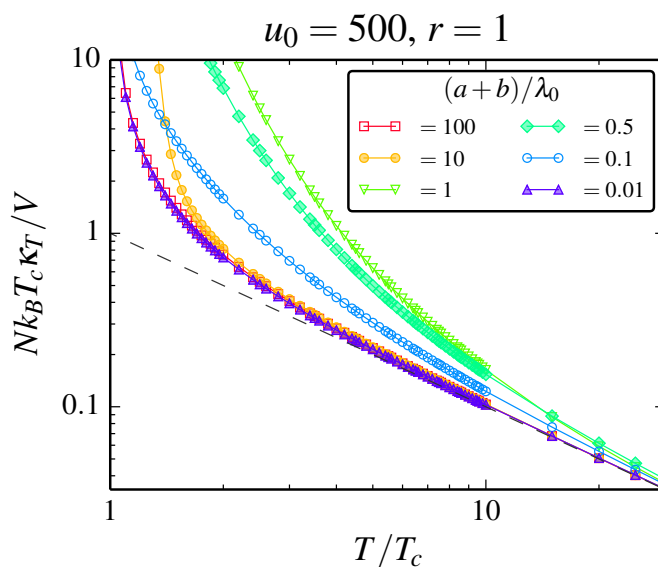


Figura 6.8: $Nk_B T_c \kappa_T / V$ vs. T/T_c para algunos valores representativos de $(a+b)/\lambda_0$.

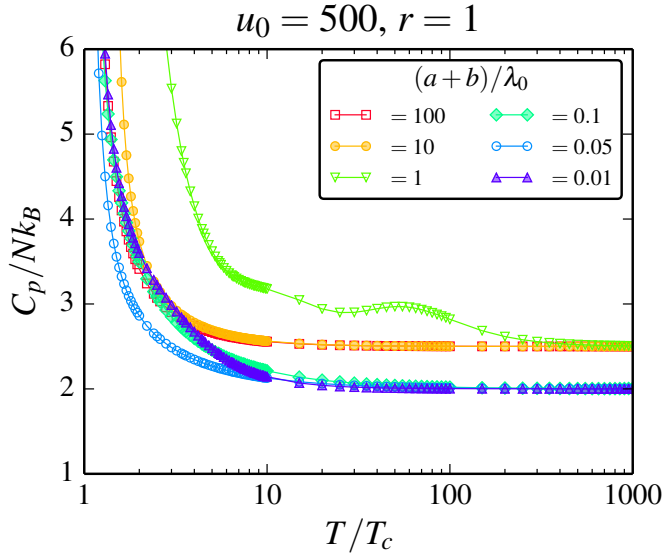


Figura 6.9: C_V/Nk_B y C_p/Nk_B vs. T/T_c para algunos valores representativos de $(a+b)/\lambda_0$.

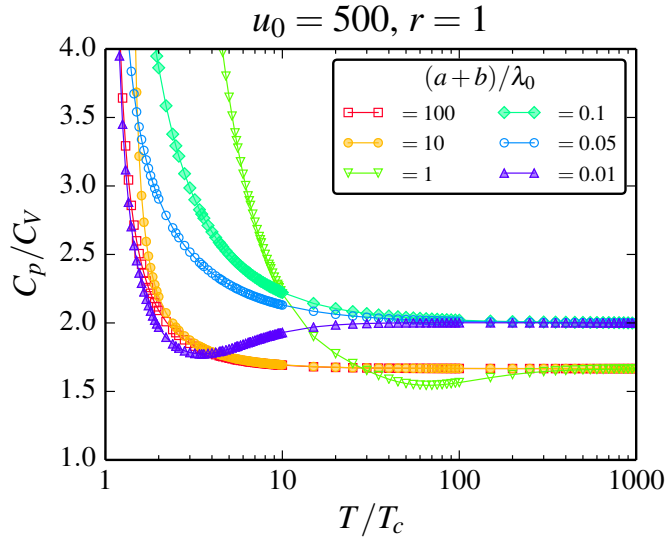


Figura 6.10: C_p/C_V vs. T/T_c para algunos valores representativos de $(a+b)/\lambda_0$.

6.10, que viene a confirmar que la diferencia entre C_p y C_V se incrementa conforme aumenta la magnitud del potencial.

A manera de resumen, los sistemas analizados permiten concluir que el comportamiento global del calor específico isobárico depende principalmente, a temperaturas cercanas a T_c , de la compresibilidad isotérmica, y a temperaturas $T \gg T_c$ del calor específico isocórico. El comportamiento característico de C_V/Nk_B es heredado por C_p/Nk_B : los máximos y mínimos locales, así como el “crossover” dimensional. Por último se observa que cuando se incrementa la magnitud del potencial la proporción entre las

6. CALOR ESPECÍFICO ISOBÁRICO

capacidades caloríficas a presión constante C_p y a volumen constante C_V también se incrementa.

7

Velocidad del sonido

En este punto es posible determinar la velocidad del sonido de nuestro sistema, ya que las propiedades necesarias para tal fin pueden ser calculadas de las ecuaciones enunciadas en capítulos anteriores.

Existen dos formas de medir la velocidad de las ondas longitudinales en sólidos, líquidos o gases; una de ellas consiste en medir la compresibilidad del sistema estudiado a una temperatura constante, es decir, se mide la compresibilidad isotérmica κ_T . Por otra parte, a la temperatura y presión ambiente las mediciones proporcionan valores de la compresibilidad adiabática κ_S , es decir, a entropía S constante. La primera está dada por la ecuación termodinámica Ec. (6.4), mientras que la segunda está definida de forma análoga

$$\kappa_S = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_{S,N}. \quad (7.1)$$

La definición de la magnitud de la velocidad del sonido esta definida en función de κ_T y de κ_S por las relaciones

$$c_T^2 = \frac{1}{\rho \kappa_T} \quad c_S^2 = \frac{1}{\rho \kappa_S} \quad (7.2)$$

donde $\rho \equiv mN/V$ es la densidad del sistema en cuestión. Estas expresiones resultan atractivas ya que los resultados obtenidos en capítulos anteriores (al menos para κ_T hasta este punto) son directamente aplicables para obtener la velocidad de las ondas longitudinales del sonido. Hay un detalle importante, sin embargo: la ecuaciones para c_T y c_S están definidas para un sistema homogéneo con $\rho = mN/V$ constante. En el caso de nuestro sistema las características del potencial sugieren que la densidad bosónica no es constante a nivel local, sino que cambia por la presencia misma de las barreras de magnitud V_0 , y en última instancia depende explícitamente de la función de onda $\Psi(x, y, z)$. Así que las ecuaciones (7.2) representan las velocidades del sonido en términos de la densidad promedio.

Para κ_T la expresión concreta está dada por la Ec. (6.13). En el caso de κ_S esta se

puede determinarse de la ecuación termodinámica

$$\frac{C_p}{C_V} = \frac{\kappa_T}{\kappa_S} \quad (7.3)$$

por lo que

$$\kappa_S = \frac{C_V}{C_p} \kappa_T = \frac{\kappa_T}{\gamma}. \quad (7.4)$$

donde $\gamma = C_p/C_V$.

Dado que κ_T y C_p están bien definidas sólo para $T > T_c$ en dicho intervalo de temperaturas se puede calcular κ_S directamente de dicho cociente. Sin embargo, para $T \leq T_c$ se tiene que obtener una expresión considerando la relación entre las dos capacidades caloríficas y la compresibilidad isotérmica establecida en la Ec. (6.3),

$$C_p = C_V + TV \kappa_T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{V,N}^2.$$

Así, la compresibilidad adiabática está dada por

$$\kappa_S = \frac{C_V}{C_V + TV \kappa_T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{V,N}^2} \kappa_T \quad (7.5)$$

$$= \frac{C_V}{C_V/\kappa_T + TV \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{V,N}^2} \quad (7.6)$$

y dada la divergencia de κ_T para $T \leq T_c$ se obtiene

$$\kappa_S = \frac{C_V}{TV \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{V,N}^2}. \quad (7.7)$$

Esta ecuación establece que κ_S es una cantidad bien definida para $T \leq T_c$, pues la derivada parcial en el denominador corresponde al factor entre corchetes del segundo término de la Ec. (6.16), y las integrales dentro de este factor son cantidades finitas, además de que $\left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{N,V} = 0$.

7.1. Expresiones adimensionales

En este punto se tiene una expresión adimensional para la compresibilidad isotérmica, establecida en Ec. (6.25),

$$\frac{Nk_B T_0 \kappa_T}{V} = \frac{2\sqrt{\sigma/\pi}}{\zeta(3/2)} \int_0^\infty \frac{dk'_z}{e^{\sigma(\bar{\epsilon}_z - \bar{\mu})/\bar{T}} - 1}.$$

Con el fin de obtener valores numéricos de la compresibilidad adiabática κ_S se procede de la misma manera, es decir, se adimensionaliza en términos del factor $Nk_B T_0/V$, con lo que, para $T > T_c$, κ_S es

$$\frac{Nk_B T_0 \kappa_S}{V} = \frac{1}{\gamma} \frac{Nk_B T_0 \kappa_T}{V}, \quad (7.8)$$

relación para la cual C_V/Nk_B , C_p/Nk_B y $Nk_B T_0 \kappa_T/V$ están dadas por Ec. (5.18), Ec. (6.18) y Ec. (6.25) respectivamente.

Para el intervalo $T < T_c$ se parte de la Ec. (6.14)

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{V,N} = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{V,\mu} + \left(\frac{\partial p}{\partial \mu}\right)_{V,T} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{V,N}$$

donde $\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{N,V} = 0$ y $\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{V,\mu}$ está dada por Ec. (6.15). Así la expresión adimensional de κ_S es

$$\begin{aligned} \frac{Nk_B T_0 \kappa_S}{V} = \frac{C_V}{Nk_B} \frac{1}{\tilde{T}} \left[\frac{4\sqrt{\sigma/\pi}}{\zeta(3/2)} \tilde{T} \int_0^\infty dk'_z g_2(e^{-\sigma(\tilde{\epsilon}_z - \tilde{\mu})/\tilde{T}}) - \right. \\ \left. - \frac{2\sigma\sqrt{\sigma/\pi}}{\zeta(3/2)} \int_0^\infty dk'_z (\tilde{\epsilon}_z - \tilde{\mu}) \ln(1 - e^{-\sigma(\tilde{\epsilon}_z - \tilde{\mu})/\tilde{T}}) \right]^{-2}. \end{aligned} \quad (7.9)$$

Desde el punto de vista computacional, las integrales dentro del término en corchetes también forman parte de la expresión de C_V/Nk_B , ahorrando tiempo de cálculo.

Dicho todo lo anterior, las ecuación para la velocidad del sonido adiabática se puede adimensionalizar como

$$c_S = \sqrt{\frac{V}{mN\kappa_S}} \quad (7.10)$$

$$= \sqrt{\frac{k_B T_0}{m}} \sqrt{\frac{V}{Nk_B T_0 \kappa_S}} \quad (7.11)$$

donde el factor $\sqrt{k_B T_0/m}$ es proporcional a la raíz de la velocidad cuadrática media de las partículas de un gas ideal de Bose libre [25, p. 189] a su temperatura de condensación Bose-Einstein,

$$\langle u^2 \rangle = \frac{3k_B T_0}{m} \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)}. \quad (7.12)$$

Al definir $c_0 \equiv \sqrt{5\langle u^2 \rangle}/3$ la expresión adimensional de la velocidad del sonido adiabática se transforma en

$$\frac{c_S}{c_0} = \sqrt{\frac{3\zeta(3/2)}{5\zeta(5/2)}} \sqrt{\frac{V}{Nk_B T_0 \kappa_S}}. \quad (7.13)$$

Una expresión análoga resultaría para la velocidad isotérmica, sin embargo, dado que para visualizar κ_T en el Cap. 6 se usó la escala T/T_c , la velocidad isotérmica está dada más convenientemente por

$$\frac{c_T}{c_c} = \sqrt{\frac{V}{Nk_B T_c \kappa_T}}. \quad (7.14)$$

donde $c_c = \sqrt{k_B T_c / m}$ es la unidad de velocidad para adimensionalizar.

Gas ideal libre

La principal razón para definir el parámetro c_0 es que para un gas ideal de Bose libre la velocidad del sonido adiabática a $T \geq T_0$ está dada por [25, p. 189],

$$c_S^{\text{libre}} = \left(\frac{5k_B T}{3m} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \right)^{1/2} \quad (7.15)$$

así que cuando $T = T_0$ resulta que $c_S^{\text{libre}} = c_0$. En términos de c_0 se tiene

$$\frac{c_S^{\text{libre}}}{c_0} = \left(\frac{\zeta(3/2)g_{5/2}(z)}{\zeta(5/2)g_{3/2}(z)} \right)^{1/2} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{1/2}. \quad (7.16)$$

Nótese que, cuando $z \rightarrow 1$, lo cual sucede a temperaturas altas, la velocidad es prácticamente proporcional a $(T/T_0)^{1/2}$. Naturalmente, en los casos en que nuestro sistema tiende a comportarse como un gas ideal libre la velocidad del sonido adiabática debe aproximarse a c_S^{libre} . Desde luego, éste es un comportamiento esperado sólo para $T \geq T_0$, porque para $T < T_0$ la expresión para c_S^{libre} es diferente. En este intervalo de temperaturas se debe determinar directamente de la definición en Ec. (7.7), la cual depende de la presión del gas ideal de Bose libre [25, p. 159],

$$p = \frac{k_B T}{\lambda^3} \zeta(5/2) \quad (7.17)$$

y del calor específico isocórico [25, p. 163],

$$C_V = \frac{15}{4} \zeta(5/2) \frac{V}{N\lambda^3} \quad (7.18)$$

con $\lambda = h/\sqrt{2m\pi k_B T}$ la longitud de onda térmica. Tras algunos pasos algebraicos el resultado que se obtiene es

$$c_S^{\text{libre}} = \left(\frac{5k_B T_0}{3m} \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)} \right)^{1/2} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{5/4}. \quad (7.19)$$

Se puede notar que el primer factor equivale a c_0 , por lo que la velocidad del sonido adiabática en términos de c_0 para $T < T_c$ es simplemente

$$\frac{c_S^{\text{libre}}}{c_0} = \left(\frac{T}{T_0} \right)^{5/4}. \quad (7.20)$$

Se concluye entonces que en la fase mixta la velocidad del sonido es proporcional a $(T/T_0)^{5/4}$, diferente a la proporcionalidad en la fase normal. De forma análoga a Ec. (7.16), éste debe ser un límite natural para ciertos parámetros de nuestro sistema cuando $T < T_c$.

En el caso de la velocidad del sonido isotérmica sólo está definida para $T > T_c$, pues κ_T diverge para $T \leq T_c$. Dado que para un gas ideal de Bose libre en el límite clásico $Nk_B T_c \kappa_T / V = (T/T_c)^{-1}$, entonces la velocidad isotérmica en la fase normal en el mismo límite es

$$\frac{c_T^{\text{libre}}}{c_c} = \left(\frac{T}{T_c} \right)^{1/2}. \quad (7.21)$$

En este límite $c_c = \sqrt{k_B T_0 / m}$ pues la temperatura crítica T_c es precisamente T_0 . Nuestro sistema debe alcanzar este comportamiento también.

7.2. Caso en el que el ancho y separación de las barreras son iguales

Nuestro sistema base corresponde a los parámetros $u_0 = 100$, $r = 1$, igual al uso para estudiar las propiedades analizadas en capítulos anteriores. Para este caso los cálculos de la velocidad adiabática e isotérmica se muestran en las figuras 7.1 y 7.2 para seis valores representativos de $(a+b)/\lambda_0$. En ambas figuras se ha enfatizado la línea (a guiones) que representa la proporcionalidad $(T/T_0)^{1/2}$ en el caso de c_S/c_0 y $(T/T_c)^{1/2}$ para c_T/c_c .

Dada la escala de temperaturas evaluada ambas figuras indican que la velocidad del sonido para $T \geq T_c$ tiende al límite clásico muy rápidamente: para la velocidad adiabática las curvas se aproximan por encima a la recta $c_S/c_0 = (T/T_0)^{1/2}$, mas no tienden a esta recta debido al factor constante presente en Ec. (7.13). Para la velocidad isotérmica las curvas se aproximan por debajo a la recta indicativa de $c_T/c_c = (T/T_c)^{1/2}$. Las mayores diferencias entre curvas se presentan a temperaturas cercanas a la temperatura de condensación Bose-Einstein. Ahora bien, es claro que en el caso de c_T la velocidad se hace cero en $T = T_c$, ya que la compresibilidad isotérmica diverge a la temperatura de condensación Bose-Einstein; el efecto de la estructura se manifiesta en la rapidez con que la velocidad disminuye en función de $(a+b)/\lambda_0$. Dado el intervalo de temperaturas visualizado se podría esperar algún cambio sustancial debido al “crossover” dimensional, pero los resultados indican que ambas velocidades son poco sensibles al cambio de dimensionalidad en el sistema. Los cambios más importantes son consecuencia de la condensación Bose-Einstein.

Por otro lado, la velocidad adiabática muestra un comportamiento más complejo dado que κ_S está definida para toda temperatura. En las curvas de la velocidad adia-

Figura 7.1: Velocidad del sonido adiabática vs. T/T_0 para seis valores representativos de $(a+b)/\lambda_0$. La línea a guiones significa $(T/T_0)^{1/2}$, y la línea a guión-punto significa $(T/T_0)^{5/4}$.

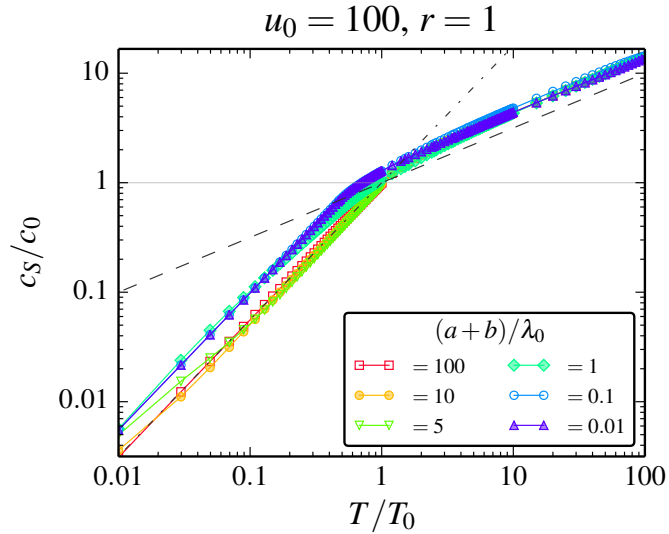
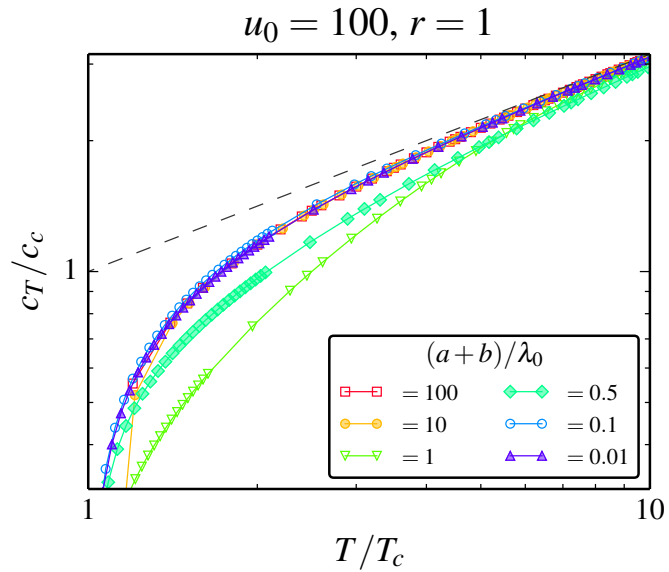


Figura 7.2: Velocidad del sonido isotérmica vs. T/T_c para seis valores representativos de $(a+b)/\lambda_0$. La línea a guiones significa $(T/T_c)^{1/2}$.



bática en Fig. 7.1, donde la escala de temperaturas está dada en términos de T/T_0 , la condensación Bose-Einstein se manifiesta como un cambio brusco de la pendiente de las curvas (en escala logarítmica); la temperatura a la que ocurre el cambio corresponde a T_c , y como tal es diferente para cada valor de $(a+b)/\lambda_0$. El aspecto más visible del comportamiento de c_S es el cambio en la pendiente de las curvas que ocurre alrededor de T_c , ya que en la fase normal es prácticamente proporcional de $(T/T_0)^{1/2}$ para toda temperatura, mientras que en la fase mixta pasa a ser proporcional a $(T/T_0)^{5/4}$. Los resultados indican que incluso para $T \leq T_c$ la velocidad se aproxima rápidamente al

límite $(T/T_0)^{5/4}$, que corresponde al comportamiento de un gas de Bose libre; para los casos en que $(a+b)/\lambda_0$ es muy grande o muy pequeño la aproximación es notable. Para valores intermedios del periodo del potencial, por ejemplo cuando $(a+b)/\lambda_0 = 5$, se observa una ligera discrepancia del límite de gas de Bose libre a bajas temperaturas en forma de una inflexión en la curva de c_S donde la proporcionalidad desaparece.

Por último, pero no menos importante: los cálculos indican que la velocidad del sonido adiabática a $T = 0$ es siempre cero, al igual que en un gas de Bose libre. Esto significa que la estructura multicapas del sistema no tiene un efecto sobre la velocidad de las ondas longitudinales en el cero absoluto. Por supuesto hay que tomar este resultado con un grano de sal, dado el argumento esgrimido al principio de este capítulo donde se aclara que las velocidades aquí calculadas toman en cuenta sólo la densidad promedio mN/V del sistema, y no los efectos de las barreras de potencial en la distribución de los bosones a nivel local, los cuales dependen en última instancia de la función de onda.

7.3. Otros sistemas similares

Considérese ahora otro sistema al cual hemos recurrido constantemente: $u_0 = 200$, $r = 1$, es decir, donde se ha duplicado la magnitud de las barreras de potencial manteniendo la geometría. Ya hemos visto que el incremento de u_0 magnifica el comportamiento 2D del sistema, disminuye la temperatura de condensación Bose-Einstein y además incrementa la relación entre las capacidades caloríficas C_p y C_v . ¿Cómo es afectada la velocidad de las ondas longitudinales por este cambio? Los resultados se muestran en las figuras 7.3 y 7.4.

En el mismo sentido que el ejemplo base, la velocidad del sonido no es afectada sensiblemente por el “crossover” dimensional. La velocidad isotérmica c_T mantiene un comportamiento similar, mas en general el incremento de la magnitud de las barreras de potencial disminuye su valor. La rápida tendencia a aproximarse al comportamiento clásico proporcional a $(T/T_c)^{1/2}$ se mantiene también. Es en la velocidad adiabática c_S donde aparecen los cambios más importantes para temperaturas menores y/o cercanas a T_c/T_0 , porque para $T \gg T_0$ tiende rápidamente al comportamiento clásico.

Ahora bien, los resultados del Cap. 4 muestran que cuando $u_0 = 200$, $r = 1$, la temperatura crítica puede disminuir considerablemente si $(a+b)/\lambda_0$ es menor, o mucho menor, que la unidad; en consecuencia la temperatura a la cual se produce el cambio en la pendiente de c_S también lo hará. Esto se refleja en una “dispersión” de los puntos donde se produce el cambio de la proporcionalidad de c_S , que, igual que en el ejemplo anterior, pasa de $(T/T_0)^{1/2}$ en la fase normal ($T > T_c$) a $(T/T_0)^{5/4}$ en la fase mixta. En los extremos donde $(a+b)/\lambda_0 \gg 1$ o $(a+b)/\lambda_0 \ll 1$ la velocidad es prácticamente proporcional a $(T/T_0)^{5/4}$ en la fase mixta, igual que para un gas ideal de bosones li-

Figura 7.3: Velocidad del sonido adiabática vs. T/T_0 para seis valores representativos de $(a+b)/\lambda_0$. La línea a guiones significa $(T/T_0)^{1/2}$, y la línea a guión-punto significa $(T/T_0)^{5/4}$.

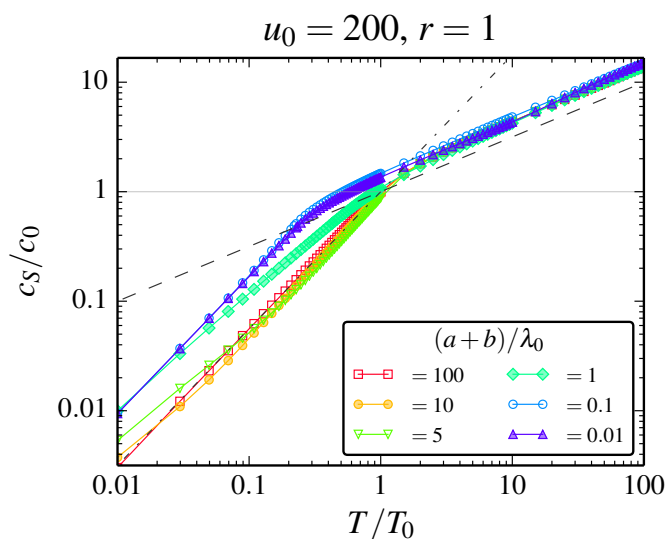
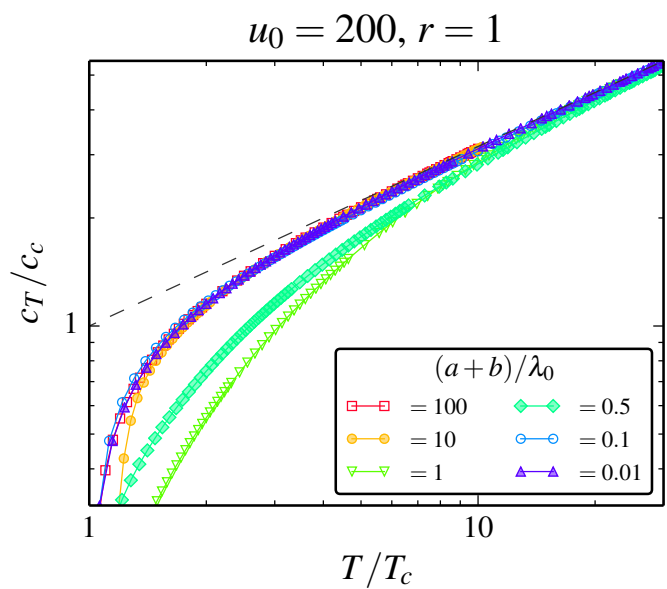


Figura 7.4: Velocidad del sonido isotérmica vs. T/T_c para seis valores representativos de $(a+b)/\lambda_0$. La línea a guiones significa $(T/T_c)^{1/2}$.



bre, aunque desde luego ambas situaciones no son equivalentes. En el caso en que se toman valores intermedios de $(a+b)/\lambda_0$ también hay una inflexión de algunas curvas. Finalmente, la velocidad es cero a $T = 0$.

Al incrementar a magnitud del potencial, ahora a $u_0 = 500$, manteniendo $r = 1$, los resultados obtenidos se muestran en las figuras 7.5 y 7.6. Esta vez el efecto de atrapamiento de las barreras es tal que la diferencia entre curvas para diferentes valores de $(a+b)/\lambda_0$ se ve magnificada. Con respecto al comportamiento de la velocidad iso-

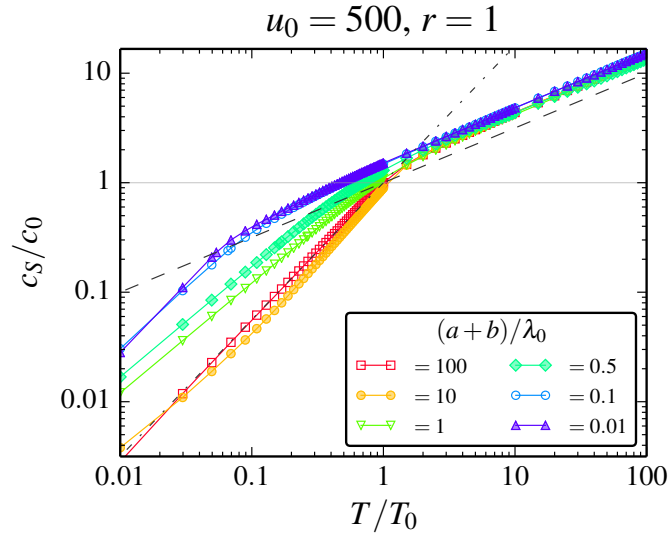


Figura 7.5: Velocidad del sonido adiabática vs. T/T_0 para seis valores representativos de $(a+b)/\lambda_0$. La línea a guiones significa $(T/T_0)^{1/2}$, y la línea a guión-punto significa $(T/T_0)^{5/4}$.

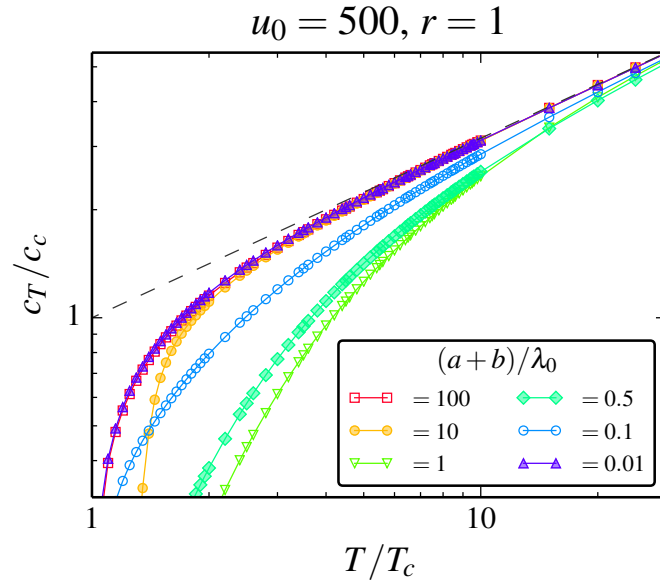


Figura 7.6: Velocidad del sonido isotérmica vs. T/T_c para seis valores representativos de $(a+b)/\lambda_0$. La línea a guiones significa $(T/T_c)^{1/2}$.

térmica, se aprecia que su magnitud disminuye con respecto a los sistemas anteriores, por lo que se puede concluir que éste es el principal efecto de la altura de las barreras de potencial sobre c_T . También tiende muy rápidamente al límite clásico $(T/T_c)^{1/2}$. En el caso de la velocidad adiabática el efecto de las barreras se manifiesta alrededor de la temperatura de condensación Bose-Einstein, como se estableció anteriormente; a $T > T_c$ su comportamiento tiende rápidamente al de un gas ideal, es decir, proporcional $(T/T_0)^{1/2}$. No está de más enfatizar que, para este sistema, donde la magnitud de las

barreras de potencial es tan alta la diferencia entre T_c cuando $(a+b)/\lambda_0 \gg 1$ y cuando $(a+b)/\lambda_0 \ll 1$ puede ser de hasta dos ordenes de magnitud, de acuerdo a los resultados en Cap. 4.

Así, la temperatura a la cual ocurre el “quiebre” de la pendiente puede variar muchísimo de un valor de $(a+b)/\lambda_0$ a otro. No obstante lo anterior, para los valores extremos de $(a+b)/\lambda_0$ resulta que c_S es prácticamente proporcional a $(T/T_0)^{5/4}$, mientras que para los casos intermedios se tiene nuevamente una inflexión de las curvas. Y en el mismo sentido que los sistemas anteriormente analizados, la velocidad de las ondas longitudinales es cero en el cero absoluto.

8

Conclusiones

En esta tesis se analizó el comportamiento de un gas de bosones sin interacciones con una distribución espacial en forma de losas paralelas de ancho finito y sección transversal infinita. Uno de los objetivos es mostrar los efectos de la estructura confinante sobre las propiedades termodinámicas del gas de bosones. Este trabajo también es una forma de continuación del estudio de las propiedades del mismo gas dentro de un potencial multiplanar, analizado por el autor del presente trabajo en su tesis para obtener el grado de Licenciado en Física [21]. La diferencia sustancial radica en que para el actual trabajo las capas del potencial periódico tienen un ancho no nulo, mientras que en el trabajo previo la estructura consistía de capas de ancho cero, a semejanza de planos de permeabilidad finita, modelados con un potencial delta de Dirac periódico.

Primero que todo, el espectro de energía de los bosones consiste de una sucesión de regiones de energía permitida, separadas por regiones de energía prohibida –brechas de energía prohibida–, las cuales forman un espectro de bandas, resultado muy bien conocido de los potenciales periódicos. Dado que las barreras de potencial tienen una magnitud V_0 el espectro se parte en dos intervalos: uno donde la energía es menor que la altura de las barreras y otro donde es mayor. Como función de V_0 las bandas debajo de la altura de las barreras evolucionan a niveles de energía a medida que V_0 crece, y en el límite cuando V_0 tiende a infinito corresponden a los niveles de energía de una partícula en una caja de ancho a . Es particularmente interesante cómo las bandas debajo de V_0 tienden muy rápidamente a niveles de energía, como se puede visualizar en la Fig. 3.3. Esto indica que para los bosones ocupando dichos estados energéticos el potencial efectivamente es muy similar a una caja de paredes infinitas. El ancho b de las barreras tiene un efecto muy importante ya que cuando b es muy grande comparada con a , el sistema se comporta como una sucesión de pozos de potencial.

Además del espectro de energía se analizó la temperatura de condensación Bose-Einstein, T_c , definida según un criterio muy claro explicado en Cap. 4. Se encontró que T_c disminuye monótonamente conforme aumenta la magnitud del potencial. Cuando V_0 es suficientemente intenso, y $(a+b)/\lambda_0$ y $r = b/a$ permanecen constantes, T_c/T_0 es proporcional a $u_0^{-1/2}$ (siendo $u_0 \equiv 2mV_0(a+b)^2/\hbar^2$). El mismo comportamiento se mantiene para cualquier valor de r . Este resultado es importante pues establece una re-

lación sencilla para la temperatura crítica y el potencial, a pesar de la complejidad de la expresión que determina a la T_c en la Ec. (4.5). El intervalo de validez de esta relación depende del tamaño del periodo del potencial. La consecuencia directa de estos resultados es que siempre existe una temperatura de condensación Bose-Einstein, la cual puede ser extremadamente pequeña, pero nunca cero, excepto cuando u_0 es infinito.

La disminución de la temperatura crítica cuando la magnitud del potencial se incrementa se debe a que el sistema se asemeja cada vez más a un gas atrapado en dos dimensiones (geométricamente el potencial se parece más a una sucesión de cajas de paredes infinitas). Al estar ocupando una región infinita un gas ideal de bosones en 2D no presenta condensación Bose-Einstein, y su temperatura crítica es nula. Desde luego, nuestro sistema no es un gas 2D estrictamente porque aunque la magnitud de las barreras de potencial se haga infinita la región entre ellas tiene un ancho a diferente de cero, aunque los resultados parecieran sugerir que incluso con estas características el sistema se comporta como un gas 2D. Por otra parte no pudimos encontrar una descripción analítica para el caso $r = 1000$, donde T_c/T_0 parece ser proporcional a u_0^{-1} ; esto bien puede estar reflejando el cambio del sistema de barreras a un sistema de pozos, porque cuando r es muy grande nuestro sistema es, conceptualmente, más próximo a una sucesión infinita de pozos. Todos estos resultados están fuertemente relacionados con la dependencia de la temperatura crítica respecto a la densidad de bosones N/V , ya que el comportamiento de T_c a bajas densidades es sensible a los valores de u_0 y r . Para una densidad igual a cero la temperatura crítica es nula, y para densidades muy grandes es esencialmente proporcional a $\eta_B^{2/3}$. Sin embargo para densidades “intermedias” el comportamiento de la T_c como función de la densidad manifiesta la presencia de la estructura que confina al gas.

El análisis realizado sobre el calor específico isocórico C_V muestra comportamientos notoriamente diferentes si las temperaturas son menores que T_c o mayores que T_c . Para $T < T_c$ el calor específico se incrementa siempre de manera monótona; en los casos en que el periodo del potencial $(a+b)/\lambda_0$ es muy pequeño o muy grande crece de manera proporcional a $(T/T_c)^{3/2}$ como en el caso de un gas de Bose ideal libre. A la temperatura de condensación Bose-Einstein se presenta un máximo local en forma de pico cuya altura es función tanto del periodo como de la altura del potencial. Para el intervalo $T > T_c$ difiere del comportamiento de C_V/Nk_B de un gas ideal de Bose libre en que no decrece de manera monótona al valor $3/2$ en el límite clásico, sino que puede presentar algunos máximos y mínimos locales cuyo origen está en la naturaleza periódica y geométrica del potencial. Además estos mínimos o máximos aparecen sólo para algunos valores de $(a+b)/\lambda_0$.

Los máximos locales están directamente relacionados con la estructura de bandas, y pueden presentarse uno o dos dependiendo del valor de $(a+b)/\lambda_0$. Como un ejemplo particular, cuando $u_0 = 100$, $r = 1$, la energía térmica $k_B T_{\text{dif}}$ del máximo que se pre-

senta a mayor temperatura T_{dif} es proporcional a la diferencia de energías $\Delta\epsilon_z^{\text{dif}}$ entre los mínimos de la primera y la segunda banda, como se establece en la Ec. (5.23). La correspondencia entre la temperatura de los máximos y la diferencia entre los mínimos de la primera y la segunda banda se cumple para una gran cantidad de sistemas, sin embargo cuando u_0 se incrementa la diferencia pasa a ser entre los mínimos de la primera y la tercera banda, como en el caso del sistema $u_0 = 500$, $r = 1$. Este cambio indica que conforme se incrementa el valor de u_0 la diferencia corresponderá al mínimo de la primera banda y a bandas superiores. Aunque la diferencia de energías entre los bordes inferiores de la primera y subsecuentes bandas depende exclusivamente de u_0 y r , no pudimos encontrar una forma funcional para tal dependencia.

La presencia del máximo discutido en el párrafo anterior es muy importante porque define un punto donde el sistema sufre un “crossover” dimensional: pasa de comportarse esencialmente como un gas 3D para $T > T_{\text{dif}}$ a comportarse como un gas en 2D para $T \lesssim T_{\text{dif}}$. En esta región 2D el calor específico disminuye a la unidad, que es el valor de C_V/Nk_B para un gas de Bose en 2D en el límite clásico, y así se mantiene en un intervalo de temperaturas que depende de u_0 y r . A medida que la temperatura disminuye se puede presentar un segundo máximo local donde el calor específico se incrementa nuevamente sobre $3/2$, y se mantiene así hasta la temperatura de condensación Bose-Einstein. La temperatura T_{max} de este máximo esta relacionado con el ancho de la primera banda de energía en una forma similar a la relación entre T_{dif} y el otro máximo, mas una relación funcional contundente requerirá un análisis extra. En este punto lo más que se encontró es que la temperatura T_{max} a la que ocurren estos máximos es proporcional a una cuarta parte del ancho de la primera banda de energía, pero el análisis extra es requerido para despejar dudas.

Adicionalmente surgió la pregunta ¿cómo están distribuidos los bosones en las bandas de energía en cada una de estos intervalos de temperatura? Así, se partió de la ecuación de número Ec. (4.3), cuya fórmula integral nos permitió definir una densidad de bosones por unidad de momento $G_N(k_z)$. Lo que se encontró fue muy revelador, pues esta función tiene comportamientos muy diferentes para cada intervalo de temperatura. Así, donde el sistema se comporta como un gas 2D los bosones se distribuyen prácticamente en la primera banda, y su distribución es constante, es decir, $G_N(k_z)$ es la misma para cualquier momento k_z , como se ilustra en la Sec. 5.5. En contraste, a altas temperaturas donde el sistema se comporta como gas 3D, es decir, a $T > T_{\text{dif}}$, los bosones se distribuyen más allá de la primera banda, a medida que migran a energías más altas por efectos térmicos. En este caso los bosones también se distribuyen de manera constante sobre la primera banda, así como en las bandas subsecuentes. Finalmente, para $T \leq T_c$ donde el calor específico se incrementa como $(T/T_0)^{3/2}$ cuando T tiende a T_c los bosones se siguen distribuyendo preferentemente en la primera banda, pero la distribución ya no es constante; a medida que la temperatura disminuye los bosones se empiezan a

distribuir más alrededor del estado base ε_{0z} . Esta aglomeración se incrementa cada vez más mientras T disminuye, y en T_c la densidad $G_N(k_z)$ diverge en $k_z = 0$, como resultado de la condensación Bose-Einstein, cuando los bosones empiezan a ser empujados en masa al estado base. A temperaturas debajo de T_c hay una porción macroscópica de bosones en el estado base, así que la integral de $G_N(k_z)$ sobre todos los estados energéticos es menor que la unidad, como se establece en Ec. (5.27). Las conclusiones anteriores resultaron ser válidas para cualquier sistema.

Con respecto al calor específico isobárico C_p , es claro que existe una fuerte relación entre éste y el calor específico isocórico, de acuerdo a la relación termodinámica Ec. (6.3). También depende de la compresibilidad isotérmica. Los resultados indican que esta última cantidad es positiva y diverge a infinito cuando $T \rightarrow T_c^+$, es siempre monótona decreciente, aunque varía ligeramente como función de $(a+b)/\lambda_0$, ya que cuando este parámetro es muy grande o muy pequeño disminuye más rápidamente hacia el límite clásico $(T/T_c)^{-1}$. En los casos intermedios la tasa a la que disminuye es menor. La razón por la cual κ_T es infinita para $T \leq T_c$ yace en que la presión del gas de bosones en la fase mixta es independiente del volumen del mismo.

El principal efecto de κ_T sobre C_p/Nk_B es que esta última cantidad también diverge para $T \leq T_c$, como se visualiza en las figuras correspondientes en el Cap. 6. A temperaturas mucho mayores que T_c el comportamiento de C_p/Nk_B hereda prácticamente todas las características de C_V/Nk_B : se pueden presentar máximos y mínimos locales a las mismas temperaturas, por lo que también se visualiza el “crossover” dimensional. La diferencia principal es que los valores de C_p/Nk_B son siempre mayores que los de C_V/Nk_B , y en el intervalo donde el sistema se comporta como un gas 2D su valor tiende a 2. A que temperaturas se manifiesta el “crossover”, así como la extensión de la región donde el sistema se comporta como gas 2D dependen de u_0 y r : se magnifica cuando u_0 se incrementa. El calor específico isobárico a temperaturas extremadamente altas tiende al valor clásico de un gas en 3D, i.e., $5/2$.

Con ambas capacidades caloríficas se determinó la relación entre ellas, es decir, el parámetro termodinámico $\gamma \equiv C_p/C_V$. En particular se encontró que incrementar la magnitud de las barreras de potencial, i.e. u_0 , tiene como resultado incrementar el cociente γ , lo cual significa que la diferencia entre procesos termodinámicos a presión constante y a volumen constante en nuestro sistema también aumenta. Los intervalos de temperatura donde el sistema se comporta como gas 2D o 3D, así como el “crossover”, se manifiestan claramente en su comportamiento. Al igual que C_p , γ diverge para $T \leq T_c$, y además tiende al límite clásico $5/3$ cuando las temperaturas son muy altas.

Finalmente estudiamos el comportamiento de la velocidad del sonido isotérmica y adiabática del sistema. Sin embargo los cálculos realizados se basan en la densidad promedio del sistema, mN/V , donde m es la masa de los bosones, de tal forma que las velocidades se pueden determinar a partir de las compresibilidades isotérmica κ_T y

adiabática κ_S , como se establece en la Ec. (7.2). Esta suposición es importante porque en última instancia la densidad de bosones no es constante, pues la estructura de capas afecta la probabilidad de encontrar una partícula en un punto dado. Esto significa que la densidad de bosones depende de la densidad de probabilidad, $|\Psi(x, y, z)|^2$, donde $\Psi(x, y, z)$ es solución de la ecuación de Schrödinger con el potencial de Kronig-Penney, es decir, de las ecuaciones (2.4) y (2.5).

La velocidad del sonido isotérmica c_T sólo está definida para $T > T_c$, pues κ_T diverge para $T \leq T_c$; en consecuencia c_T es nula a la temperatura de condensación Bose-Einstein. Como función de T tiende muy rápidamente al límite clásico $(T/T_c)^{1/2}$, así que las mayores diferencias por efecto de la estructura se localizan alrededor de T_c . En particular, cuando la magnitud de las barreras de potencial se incrementa la velocidad c_T disminuye. Esta disminución también depende del periodo del potencial $(a+b)/\lambda_0$; cuando este parámetro es muy pequeño o muy grande la velocidad tiende más rápido al límite clásico.

La velocidad del sonido adiabática c_S contrasta con la isotérmica en que la compresibilidad adiabática κ_S sí está definida para toda temperatura. Así, cuando la temperatura es mayor que T_c la velocidad adiabática tiende rápidamente hacia el límite clásico $(T/T_0)^{1/2}$; en este aspecto se asemeja a c_T . Por otra parte, cuando $T \leq T_c$ y hay una fracción macroscópica de bosones en el estado base la velocidad pasa a ser, para ciertos valores de $(a+b)/\lambda_0$, prácticamente proporcional a $(T/T_0)^{5/4}$, lo cual se visualiza como un cambio de pendiente en las curvas de la velocidad. Esto significa que la velocidad del sonido disminuye más rápidamente cuando la fracción de bosones en el estado condensado se incrementa. El cambio de la pendiente se produce alrededor de la temperatura de condensación Bose-Einstein. Por último, muy importante es el resultado de que en nuestro sistema la velocidad c_S es cero a $T = 0$. En este sentido no se diferencia del gas ideal de Bose libre.

Los resultados obtenidos en esta tesis ilustran el efecto de un potencial periódico con barreras de potencial de magnitud y anchura finitas. Al no haber interacciones entre los bosones todos los cambios respecto al gas ideal de Bose se deben a la presencia de estructura. Sin embargo hay cálculos que podrían obtenerse desde una perspectiva que considere el cambio de la distribución espacial de las partículas por efecto del potencial: las velocidades del sonido y las compresibilidades, e incluso el calor específico isobárico que depende de la compresibilidad isotérmica. La motivación para hacer esto es simple: el sistema no es isotrópico. Además de lo anterior queda por integrar el efecto de posibles interacciones entre los bosones, lo cual nos requeriría partir desde las bases, es decir, resolver la ecuación de Schrödinger para un potencial que tome en cuenta cómo interaccionan las partículas. Esto podría hacerse partiendo de la ecuación de Gross-Pitaevskii, pero es igualmente deseable que la nueva dirección que tomemos sea aplicable para cualquier temperatura encima o debajo de la temperatura de conden-

8. CONCLUSIONES

sación Bose-Einstein.



Algunas notas sobre métodos numéricos

Este trabajo depende fuertemente de cálculos numéricos. Aquí se explica a grandes rasgos cómo se calculan las energías y las propiedades termodinámicas, así como el lenguaje de programación y el software empleado para tal fin.

El software

Para calcular las propiedades de interés se ha usado el sistema de álgebra computacional Mathematica. El lenguaje de programación usado es el propio de Mathematica.

Las rutinas

Se ha escrito una rutina específica para calcular cada una de las cantidades de interés en su forma adimensional: energía, funciones de onda, temperatura crítica, fugacidad, energía interna, calor específico isocórico y calor específico isobárico. Cada una de las rutinas aprovecha la capacidad intrínseca de Mathematica para hacer aritmética de precisión arbitraria. Las rutinas más demandantes cuentan con un sistema de *cache ad hoc* para reutilizar datos previamente calculados y reducir el tiempo de ejecución.

Detalles de implementación

La rutina que calcula la energía en función del momento es una de las más complejas, dado que la relación está dada implícitamente por la Ec. (3.5). Al no haber una relación explícita entre energía y momento lo mejor que podemos hacer es obtener un estimado inicial por ensayo y error. Las energías son raíces de una ecuación no lineal, y se calculan empleando el método de Newton con el estimado obtenido previamente como aproximación inicial. La precisión del resultado puede ser especificada.

Las rutinas que calculan propiedades termodinámicas tienen una estructura común, donde se les suministra un conjunto de parámetros y devuelven un valor numérico. Posiblemente pueden emitir otros valores internos a contextos superiores donde son

de interés en sí mismos, como es el caso de las compresibilidades que determinan el calor específico isobárico. La precisión del resultado puede ser especificada. El flujo de ejecución es prácticamente lineal, salvo que se haga uso de la cache.

Todas las propiedades termodinámicas dependen de integrales impropias que tienen al momento k'_z como variable independiente, el cual va desde cero hasta infinito. Estas integrales son de la forma

$$A = \int_0^{\infty} f(k'_z) dk'_z \quad (\text{A.1})$$

y se pueden descomponer en una suma de integrales sobre cada una de las bandas del espectro de energía:

$$A = \sum_{n=1}^{\infty} \int_{(n-1)\pi}^{n\pi} f(k'_z) dk'_z. \quad (\text{A.2})$$

Para evaluar estas integrales hasta la precisión especificada en la rutina correspondiente se tiene que escoger:

- a) el algoritmo más adecuado para la naturaleza del integrando
- b) el número de bandas que garantice la precisión

La mayoría de los integrandos que determinan las propiedades termodinámicas tienen una singularidad en $k'_z = 0$, es decir, en la primera banda, donde divergen, mientras que para el resto de las bandas son funciones acotadas. Así, para la primera banda del espectro de energía, $k'_z \in (0, \pi]$, las integrales se evalúan usando el algoritmo de integración por transformación exponencial doble [27], que es ideal para integrandos con singularidades. Para el resto de las bandas, donde los integrandos son acotados, una elección adecuada es la cuadratura de Gauss-Kronrod aplicada adaptativamente, es decir, se subdivide el intervalo de integración en dos mitades y se integra en cada subintervalo. Aquella mitad donde el error estimado es mayor se subdivide y se integra recursivamente, hasta alcanzar la precisión indicada. Con estos dos algoritmos se puede integrar sobre cada banda hasta la precisión elegida. Luego entonces, como el intervalo de integración es infinito, se integra sobre un número creciente de bandas hasta que la adición de la integral de la n -ésima banda no altera el resultado de la suma de las integrales de las $n - 1$ bandas previas.

Algunas cantidades como la temperatura crítica y la fugacidad están dadas implícitamente por la ecuación de número. En estos casos se emplea un esquema mixto, donde la propiedad en cuestión se calcula mediante el método de la secante para encontrar raíces de ecuaciones no lineales: se dan dos aproximaciones iniciales, y para obtener una nueva aproximación se realizan varias integraciones numéricas de acuerdo al esquema indicado anteriormente.

Bibliografía

- [1] L. Keldysh and A. Kozlov, “Collective properties of excitons in semiconductors”, *Sov. Phys. JETP* **27**, 521 (1968).
- [2] J. Lin and J. Wolfe, “Bose-Einstein condensation of paraexcitons in stressed Cu_2O ”, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1222 (1993).
- [3] X. Zhu, P. Littlewood, M. S. Hybertsen, and T. M. Rice, “Exciton Condensate in Semiconductor Quantum Well Structures”, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1633 (1995).
- [4] L. Butov, C. Lai, A. Ivanov, A. Gossard, and D. Chemia, “Towards Bose-Einstein condensation of excitons in potential traps”, *Nature* **417**, 47 (2002).
- [5] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch, “Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms”, *Nature* **415**, 39 (2002).
- [6] I. Bloch, “Ultracold quantum gases in optical lattices”, *Nature Physics* **1**, 23 (2005).
- [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. N. 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] R. Friedberg and T. Lee, “Gap energy and long-range order in the boson-fermion model of superconductivity”, *Phys. Rev. B* **40**, 6745 (1989).
- [17] R. Friedberg, T. Lee, and H.-C. Ren, “The s-channel theory of superconductivity on a one-dimensional lattice of parallel (CuO₂) planes”, *Phys. Lett. A* **152**, 417 (1991).
- [18] M. Casas, A. Puente, A. Rigo, M. J. Davidson, R. M. Quick, M. Fortes, M. A. Solís, M. de Llano, O. Navarro, A. A. Valladares, et al., “BEC-Driven superconductivity in the cuprates”, *Intl. J. M. Phys. B* **13**, 3489 (1999).
- [19] V. C. Aguilera-Navarro, M. de Llano, and M. A. Solís, “Bose-Einstein condensation for general dispersion relations”, *Eur. J. Phys.* **20**, 177 (1999).
- [20] M. Grether, M. Fortes, M. de Llano, J. L. del Río, F. J. Sevilla, M. A. Solís, and A. A. Valladares, “Harmonically Trapped Quantum Gases”, *Eur. Phys. J. D* **23**, 117 (2003).
- [21] O. A. Rodríguez, *Condensación Bose-Einstein en estructuras multicapas periódicas* (Facultad de Ciencias, UNAM, México, 2010), tesis de licenciatura.
- [22] O. A. Rodríguez and M. A. Solís, “BEC and Dimensional Crossover in a Boson Gas Within Multi-slabs”, *Journal of Low Temperature Physics* **175**, 435 (2014).
- [23] M. Bretz, “Heat Capacity of Multilayer He⁴ on Graphite”, *Phys. Rev. Lett.* **31**, 1447 (1973).
- [24] G. Allen, “Band Structures in One-Dimensional Crystals with Square-Well Potentials”, *Physical Review* **91**, 531 (1953).
- [25] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics* (Butterworth-Heinemann, Oxford, 1996), 2nd ed.
- [26] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* (Wiley, 1970), 2nd ed.

- [27] H. Takahasi and M. Mori, “Double exponential formulas for numerical integration”, *Publications of the Research Institute for Mathematical Sciences* **9**, 721 (1974).
- [28] J. D. Hunter, “Matplotlib: A 2D graphics environment”, *Computing In Science & Engineering* **9**, 90 (2007).

Esta tesis se escribió usando el sistema de composición de textos \LaTeX y la clase *memoir*. Las gráficas se diseñaron con el paquete *matplotlib* en el lenguaje de programación *Python*. Además se usó el editor de gráficos vectoriales *Inkscape*. La fuente usada para el texto es Times.

Los cálculos numéricos se hicieron mediante el software de álgebra computacional *Mathematica*. El código fuente de la aplicación puede ser consultado en <http://bit.ly/1eYtQ0e>.