



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

EFFECTOS DEL DESORDEN EN LAS PROPIEDADES DE GASES  
CUÁNTICOS EN ESTRUCTURAS CUASI-PERIÓDICAS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:  
MAESTRA EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

PRESENTA:  
FIS. VIRIDIANA EVHERT BARRAGÁN VIDAL

TUTOR PRINCIPAL  
DR. MAURICIO FORTES BESPROSVANI  
IFUNAM

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR  
DR. MIGUEL ÁNGEL SOLÍS ATALA  
IFUNAM  
DR. MANUEL DE LLANO DE LA GARZA  
IIM

MÉXICO, D.F., ABRIL, 2015



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.

# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>8</b>
<b>2. Sistemas de bosones en estructuras periódicas</b>	<b>13</b>
2.1. El hamiltoniano general para $N$ partículas . . . . .	13
2.2. Estructuras periódicas . . . . .	19
2.3. Sistemas finitos con potenciales periódicos . . . . .	21
2.3.1. Potencial de Kronig Penney . . . . .	21
2.3.2. Potenciales delta de Dirac . . . . .	26
<b>3. Sistemas finitos con desorden</b>	<b>38</b>
3.1. Cuatro tipos de desorden . . . . .	38
3.2. Potencial peine de Dirac para un sistema desordenado . . . . .	39
<b>4. Propiedades termodinámicas</b>	<b>50</b>
4.1. Generalidades de un gas ideal de bosones en 3D . . . . .	50
4.2. Termodinámica de un gas ideal de bosones entre planos permeables dentro de una caja	60
4.2.1. Número de partículas . . . . .	60
4.2.2. Energía interna . . . . .	64
4.2.3. Calor específico . . . . .	66
4.2.4. Ecuación de estado . . . . .	73
4.2.5. Entropía . . . . .	74

4.3. Resultados . . . . .	75
<b>5. Conclusiones</b>	<b>90</b>

# Índice de figuras

2.1. Potencial de Kronig-Penney periódico. . . . .	22
2.2. Gráfica de la función $f(P, \alpha a) = \frac{P}{\alpha a} \text{sen}(\alpha a) + \cos(\alpha a)$ vs $\alpha a$ , para $P = 3\pi/2$ . Los valores permitidos de la energía $\varepsilon$ están dados por los intervalos de $\alpha = (2m\varepsilon/\hbar^2)^{1/2}$ , para los cuales la función se encuentra entre -1 y 1. . . . .	26
3.1. $\mathcal{M}$ barreras de potencial delta de Dirac dentro de una caja de paredes infinitas. . . .	40
3.2. Niveles de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ para una partícula dentro de una caja unidimensional con $\mathcal{M}$ potenciales delta, igualmente espaciadas una distancia $a/\lambda_0 = 1$ e igual intensidad $P = 10$ : (a) $\mathcal{M} = 1$ , (b) $\mathcal{M} = 2$ y (c) $\mathcal{M} = 10$ . . . . .	47
3.3. Niveles de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ para una partícula dentro de una caja unidimensional con 10 potenciales delta, igualmente espaciadas una distancia $a/\lambda_0 = 1$ . La intensidad de las deltas son: (a) $P = 1$ , (b) $P = 10$ y (c) $P = 100$ . . . . .	48
3.4. Niveles de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ para un sistema con 10 barreras de potencial, permeabilidad de las barreras de potencial $P = 10$ y variación de la distancia entre las barreras de potencial alrededor de sus posición ordenada $a/\lambda_0 = 1$ en los intervalos (a) $\Delta a_i \in [-0.001, 0.001]$ , (b) $\Delta a_i \in [-0.01, 0.01]$ y (c) $\Delta a_i \in [-0.1, 0.1]$ . . . . .	49
4.1. Calor específico de un gas ideal de bosones en 3D y 2D . . . . .	59
4.2. Barreras de potencial delta de Dirac en la dirección $z$ , e infinito en las direcciones $x$ y $y$ . . . . .	61

4.3. $C_V/Nk_B$ vs $T/T_0$ para un gas ideal en una caja con 100 barreras de potencial de permeabilidad $P = 10$ y distancia entre ellas $a/\lambda_0 = 1$ . . . . .	71
4.4. $C_V/Nk_B$ vs $T/T_0$ para partículas en una caja con 10 barreras de potencial de permeabilidad $P = 10$ , distancia entre ellas $a/\lambda_0 = 1$ y desorden composicional, para las tiradas aleatorias 1, 2, 3 y 4, en un número aleatorio $\Delta P_i$ , en el intervalo $\Delta P_i \in [-9, 9]$ , que equivale a una variación del 90 por ciento del desorden. . . . .	77
4.5. $C_V/Nk_B$ vs $T/T_0$ para partículas en una caja con 10 barreras de potencial de permeabilidad $P = 10$ , distancia entre ellas $a/\lambda_0 = 1$ y desorden estructural, para las tiradas aleatorias 1, 2, 3 y 4, en un número aleatorio $\Delta a_i$ , en el intervalo $\Delta a_i \in [-0.1, 0.1]$ , que equivale a una variación del 10 por ciento del desorden. . . . .	78
4.6. $C_V/Nk_B$ vs $T/T_0$ para partículas en una caja con 10 barreras de potencial de permeabilidad $P = 10$ y distancia entre ellas $a/\lambda_0 = 1$ , introduciendo vacancias en los sitios: $\{1,2\}$ , $\{1,3\}$ , $\{1,7\}$ , $\{1,10\}$ , comparadas con un sistema ordenado y un gas ideal. 80	80
4.7. Niveles de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ para sistemas con 10 deltas. Las distancias entre ellas es $a/\lambda_0 = 1$ e permeabilidad de las barreras de potencial $P = 10$ . (a) sistema ordenado, (b) vacancias $\{1,2\}$ , (c) vacancias $\{1,3\}$ , (d) vacancias $\{1,7\}$ , (e) vacancias $\{1,10\}$ . . . . .	81
4.8. $C_V/Nk_B$ vs $T/T_0$ para partículas en una caja con 10 barreras de potencial de permeabilidad $P = 10$ y distancia entre ellas $a/\lambda_0 = 1$ , introduciendo vacancias en los sitios: $\{2,1\}$ , $\{2,3\}$ , $\{2,5\}$ , $\{2,9\}$ , $\{2,10\}$ , comparadas con un sistema ordenado y un gas ideal. . . . .	82
4.9. Niveles de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ para sistemas ordenados con 10 barreras de potencial $a/\lambda_0 = 1$ , $P = 10$ , omitiendo las barreras de potencial (a) sistema ordenado, (b) vacancias $\{2,1\}$ , (c) vacancias $\{2,3\}$ , (d) vacancias $\{2,9\}$ , (e) vacancias $\{2,10\}$ . . . . .	83

4.10. $C_V/Nk_B$ vs $T/T_0$ para partículas en una caja con 10 barreras de potencial de permeabilidad $P = 10$ y distancia entre ellas $a/\lambda_0 = 1$ , introduciendo vacancias en los sitios: $\{1\}$ , $\{1,2\}$ , $\{1, 2, 10\}$ , $\{1, 2, 3, 10\}$ , comparadas un sistema ordenado y un gas ideal. . . . .	85
4.11. Niveles de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ para sistemas con 10 barreras de potencial $a/\lambda_0 = 1$ , $P = 10$ , omitiendo las barreras de potencial (a) sistema ordenado, (b) vacancias $\{1\}$ , (c) vacancias $\{1,2\}$ , (d) vacancias $\{1, 2, 10\}$ , (e) vacancias $\{1, 2, 3, 10\}$ . 86	86
4.12. $C_V/Nk_B$ vs $T/T_0$ para partículas en una caja con 100 barreras de potencial de permeabilidad $P = 10$ y distancia entre ellas $a/\lambda_0 = 1$ . Introduciendo 10, 20, 30 y 40 por ciento de vacancias en los sitios de manera simétrica, comparadas con un sistema ordenado y un gas ideal. . . . .	88
4.13. Niveles de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ para sistemas ordenados con 100 barreras de potencial $a/\lambda_0 = 1$ , $P = 10$ , omitiendo las barreras de potencial de manera simétrica y porcentual (a) sistema ordenado, (b) vacancia 10 , (c) vacancia 20, (d) vacancia 30, (e) vacancia 40. . . . .	89

## Resumen

En esta tesis estudiamos los efectos que causa el desorden en las propiedades termodinámicas de un gas ideal de bosones confinado dentro de una caja semi-infinita, la cual es infinita en las direcciones  $x$ ,  $y$  y finita de longitud  $L_z = (\mathcal{M} + 1)a$  en la dirección  $z$ . La caja está dividada por  $\mathcal{M}$  planos sin grosor cuyas separaciones e permeabilidades pueden ser todas iguales o diferentes. Con el fin de analizar los efectos del desorden en la posición e permeabilidad de los planos, estudiamos tres tipos de desorden:

1. Composicional. Para un sistema de  $\mathcal{M}$  barreras de potencial, donde variamos la permeabilidad de las barreras de potencial de manera aleatoria y dejando fijas las posiciones de las barreras de potencial.
2. Estructural. Para un sistema de  $\mathcal{M}$  barreras de potencial, donde variamos la posición de las barreras de potencial de manera aleatoria en una cantidad pequeña  $\varepsilon$  de su respectiva posición ordenada y dejando fija la permeabilidad de las barreras de potencial.
3. Vacancias. Donde eliminamos algunas barreras de potencial, anulando la permeabilidad de algunas barreras de potencial, simulando vacancias en una red. Estas vacancias son implementadas de manera simétrica o aleatoria, para  $\mathcal{M}$  barreras de potencial de permeabilidad fija y posición entre barreras de potencial fija.

Para obtener las propiedades termodinámicas, se consideró en las direcciones  $x$  y  $y$  el espectro de energías de una partícula libre y se calculó el espectro de energías de una partícula dentro de una caja unidimensional con  $\mathcal{M}$  barreras de potencial, que pueden presentar cualquiera de los tres tipos de desorden mencionados. Para calcular el espectro de energías de un sistema elegido, se asoció a cada una de las barreras de potencial una matriz transferencia, haciendo el producto de todas las matrices de transferencia y aplicando las condiciones de frontera, se obtiene la ecuación de disper-

sión de tal sistema. Debido a que resulta complicado manipular sistemas con un número mayor a tres barreras de potencial, se desarrolló un programa en el lenguaje computacional “C” que resuelve la relación de dispersión y obtiene el espectro de energía total que se introduce en la expresión del gran potencial y de allí calcular las propiedades termodinámicas.

Se calculó el calor específico  $C_V/Nk_B$  a volumen constante como función de la temperatura  $T/T_0$ , para estudiar si se presenta alguna transición de fase al implementar desorden a un sistema ordenado, ya que como sabemos la condensación Bose-Einstein (CBE) en tres dimensiones presenta una discontinuidad en su derivada a la temperatura crítica  $T_0$  y en dos dimensiones no ocurre. Además nos ayudamos del espectro de energía para analizar el comportamiento del calor específico.

Observamos que el calor específico muestra variaciones con el desorden composicional y estructural, pero al promediar diferentes tiradas aleatorias, el efecto del desorden se cancela. Al simular vacancias, notamos que se modifica la posición del máximo en el calor específico y eleva la temperatura del máximo comparado con sistemas ordenados. Conforme aumentamos el número de vacancias, el máximo también aumenta pero hasta determinado valor del orden del 20 por ciento. Si aumentamos el tamaño del sistema, los efectos son más notorios, ya que los máximos se agudizan observando que hay una tendencia a una fase condensada.

# Capítulo 1

## Introducción

En la ciencia moderna, la física del estado sólido forma la base teórica de la ciencia de los materiales, su marco teórico está basado principalmente en la formulación de la Ec. de Schrödinger de la mecánica cuántica no relativista y juega un papel muy importante debido a las contribuciones que aportan en la vida cotidiana, permitiéndonos crear nuevos materiales con diversas propiedades: eléctricas, magnéticas, térmicas, ópticas o mecánicas. Su desarrollo es indispensable en muchos campos como en las aplicaciones tecnológicas, las nano-estructuras [1]-[6], la condensación Bose-Einstein (CBE) [7]-[11] en potenciales ópticos periódicos [12] que es el estado de agregación de la materia para ciertos materiales a muy bajas temperaturas. Dicho fenómeno no tiene análogo clásico y ocurre en partículas bosónicas que cumplen que cualquier número de ellas pueden estar en un mismo nivel de energía [13, 14], por lo que a muy bajas temperaturas una cantidad macroscópica de las partículas se condensa en el mismo estado cuántico de mínima energía [15].

Este fenómeno llamado así por la colaboración entre Nath Bose y Albert Einstein hacia el año de 1924 en el artículo sobre fotones y sus propiedades estadísticas [16] y predicho en 1925 por Albert Einstein, tiene una relación con otros dos fenómenos, que aparentemente no la hay, pero que sí muestran similitud con la CBE son: la superconductividad a alta temperatura crítica  $T_c$  [17] que a pesar de que es propicia para partículas fermiónicas, estas pueden relacionarse si se consideran

las interacciones entre fermiones para formar bosones compuestos que pueden condensarse y la superfluidez en películas delgadas de ( $^4\text{He}$ ) [18] que es considerada como una representación de un CBE.

Los sólidos pueden clasificarse en amorfos, donde las partículas que conforman el sólido carecen de una estructura ordenada, los cristalinos, cuyos átomos están dispuestos de manera regular y ordenada formando redes periódicas y los cuasi-cristalinos con forma estructural ordenada pero no periódica. Estos tipos de sólidos, pueden modelarse por un potencial confinante y las propiedades de los fenómenos mencionados dependen del tipo de potencial, aunado a que los grandes avances de la nano ciencia permiten poder confinar por medio de experimentos partículas en sistemas tan pequeños como los puntos cuánticos [5] que son empleados para diseñar dispositivos electrónicos u ópticos [4]-[6].

Un amplio desarrollo en la investigación teórica y experimental se centra en los potenciales cuasi-periódicos unidimensionales [19], debido a su característica de estar ordenados en un punto intermedio entre periodicidad y desorden. Este tipo de desorden es llamado Harper [20] o modelo de Aubry-André [21] y es descrito por el siguiente hamiltoniano

$$H = -J \sum_j (c_{j+1}^* c_j + c_j^* c_{j+1}) + \Delta \sum_j \cos(2\pi\beta j + \phi) |c_j|^2, \quad (1.1)$$

que a determinados valores irracionales de  $\beta$  [22, 23] presenta una transición de fase de metal-aislante para extender a estados localizados exponencialmente, al igual que la localización de ondas en medios desordenados originalmente predicho por Anderson [24] en el contexto del transporte de electrones en cristales [25] llamado localización de Anderson. Este tipo de hamiltoniano se puede hacer con átomos ultra fríos en redes ópticas, dando la pauta al estudio de las propiedades de localización en sistemas cuasi-periódicos. La primera observación experimental de la localización de Anderson en potenciales cuasi-periódicos [26], fue realizada mediante el uso de un condensado de Bose-Einstein no-interactuante dentro de un potencial bicromático obtenido mediante la super-

posición de dos redes ópticas unidimensionales con diferentes longitudes de onda, dando camino a estudiar distintas propiedades como el efecto del tamaño finito por la presencia de un confinamiento particular o introducir desorden de manera aleatoria, considerando que emplear potenciales biocromáticos son una buena herramienta al aplicar cuasi-desorden en átomos ultra fríos.

Gran parte de la investigación se desarrolla en los cristales, debido a que la forma periódica en que están distribuidos los átomos nos permite desarrollar un modelo matemático más sencillo que los describa. Por ejemplo el teorema de Bloch [12] es un modelo que caracteriza a las funciones de onda de los electrones en un potencial periódico. Este potencial puede ser el de Kronig-Penney [27], donde la partícula se mueve por una cadena lineal infinita de potenciales rectangulares equidistantes entre ellos. Si se considera el límite de la barrera de potencial haciéndola infinitamente angosta e infinitamente alta se obtienen potenciales delta cuya intensidad es el producto entre el ancho y el alto de las barreras.

En esta tesis estudiamos un gas ideal de bosones sin interacción dentro de una estructura multicapas semi-infinita. Las direcciones  $L_x$  y  $L_y$  son infinitas y la dirección  $L_z$  es finita de longitud  $L_z = (\mathcal{M} + 1)a$ , con  $\mathcal{M}$  el número de planos (capas) y  $a$  la separación entre ellos. Los planos perpendiculares a la dirección  $z$ , son generados con  $\mathcal{M}$  potenciales delta cuyas intensidades están directamente relacionadas con las permeabilidades de los planos. Para analizar el efecto de variar la posición y la permeabilidad de los planos se introduce desorden, que se puede configurar de distintas formas como: *desorden composicional* donde se varía la permeabilidad de los planos (intensidad del potencial delta), pero dejando fija la posición entre cada uno de ellos, *desorden estructural* donde se varía la distancia entre los planos por una pequeña cantidad de su respectiva posición ordenada y dejando fija la permeabilidad; *vacancias* que consiste en omitir alguno de los planos, anulando la permeabilidad de alguno de estos, dejando a todos los demás con la misma permeabilidad y separación entre ellos. Las vacancias pueden ser de manera simétrica o aleatoria.

Comparamos dichos sistemas con las curvas del calor específico  $C_V$  versus la temperatura  $T$  y

observamos que introducir desorden, en particular vacancias en una red periódica, propicia la condensación de Bose-Einstein.

En el capítulo dos, se estudia un sistema de bosones en estructuras periódicas, iniciando por el hamiltoniano general para  $N$  partículas con interacción reducido a un hamiltoniano sin interacción. Se demuestra el teorema de Bloch que es un resultado fundamental para el estudio de estructuras periódicas. Posteriormente se calcula la relación de dispersión de un sistema de barreras de potencial tipo Kronig-Penney. Finalmente se considera el caso límite en que el ancho de las barreras de potencial tienden a cero y el alto de las barreras de potencial tienden a infinito, obteniendo que las barreras de potencial se convierten en deltas de Dirac con una determinada intensidad. Este potencial simula a cada elemento del sólido con un alcance puntual donde también se calcula la relación de dispersión por el método de la matriz de transferencia para  $\mathcal{M}$  planos.

En el capítulo tres estudiamos tres tipos de desorden: estructural, composicional y vacancias. Encontrando una expresión más general de la relación de dispersión para  $\mathcal{M}$  barreras de potencial distribuidas desordenadamente, esto es que pueden variar tanto la intensidad como la posición o simular vacancias; con esta generalización se derivará una matriz de transferencia total, que proviene de resolver para cada una de las barreras de potencial delta de Dirac, con su respectiva posición e intensidad y multiplicar cada una de estas matrices de transferencia.

En el capítulo cuatro describimos de manera breve las generalidades de un gas ideal de bosones en tres dimensiones obteniendo las expresiones para el número de partículas  $N$ , la energía interna  $U$  y el calor específico  $C_V$ , calculando la temperatura a la que ocurre la Condensación Bose-Einstein en tres dimensiones y probando la imposibilidad de la transición en dos dimensiones. En la siguiente sección del capítulo calcularemos análogamente el número de partículas  $N$ , la energía interna  $U$ , el calor específico  $C_V$ , la entropía  $S$ , la ecuación de estado y la fugacidad  $z$  partiendo de la expresión de número total de partículas dividida entre el volumen para nuestro sistema.

Una vez obtenidas las expresiones para la relación de dispersión y el calor específico, se elaboró un algoritmo en el lenguaje de cómputo “C”, que desarrolla los cálculos numéricos, iniciando por el producto de cada una de las matrices de transferencia de cada configuración del sistema que se requiera, encontrando la matriz de transferencia total, para después hallar el espectro de energía, la fugacidad  $z$  y el calor específico  $C_V$ .

En la parte final del capítulo reportamos los resultados obtenidos al graficar el calor específico versus la temperatura con sus respectivos espectros de energía para los tres tipos de desorden: composicional, estructural y vacancias.

En el capítulo cinco concluimos que al introducir desorden composicional y estructural, existen variaciones en el calor específico, pero al promediar distintas tiradas aleatorias los efectos del desorden se cancelan. Cuando se simulan vacancias, se modifica la posición del máximo en el calor específico y eleva la temperatura del máximo comparado con sistemas ordenados. Al aumentar el número de vacancias el máximo aumenta pero sólo hasta determinado valor del orden del 20 por ciento. Cuando aumentamos el número de barreras en el sistema los efectos que causan las vacancias son más notorios ya que los máximos se hacen más pronunciados, observando que existe una tendencia a la condensación de Bose-Einstein. Para entender el comportamiento del máximo en el calor específico, nos ayudamos del espectro de energías, observando que el número de vacancias es proporcional al número de niveles de energía que disminuyen en su valor y el nivel de mínima energía contribuye en el máximo del calor específico.

## Capítulo 2

# Sistemas de bosones en estructuras periódicas

### 2.1. El hamiltoniano general para $N$ partículas

El hamiltoniano para  $N$  bosones es

$$\hat{H} = \int d\vec{r} \left[ -\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \hat{\psi}(\vec{r}) + V(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) + \frac{U_0}{2} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \right], \quad (2.1)$$

donde  $\hat{\psi}^\dagger(\vec{r})$  y  $\hat{\psi}(\vec{r})$  son los operadores de campo bosónico[28],  $V$  el potencial externo y  $U_0$  la interacción de contacto entre bosones.

Las fluctuaciones cuánticas sobre el estado en el que todos los átomos se condensan en un sólo estado cuántico es de la siguiente forma

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) + \delta\hat{\psi}(\vec{r}). \quad (2.2)$$

Consideremos un gas uniforme de bosones interactuando, contenido en una caja de volumen  $\mathcal{V}$ .

Expresamos los operadores de campo de creación y aniquilación de la Ec. (2.1) en términos de los operadores que crean y destruyen partículas en el estado de momento por la transformación

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \frac{1}{\mathcal{V}^{1/2}} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \hat{a}_{\mathbf{p}} \quad (2.3)$$

$$= \frac{\mathcal{V}^{1/2}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\mathbf{p} e^{i\mathbf{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \hat{a}_{\mathbf{p}}, \quad (2.4)$$

donde  $\mathcal{V}$  es el volumen. La transformación inversa es

$$\hat{a}_{\mathbf{p}} = \frac{1}{\mathcal{V}^{1/2}} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \hat{\psi}(\vec{r}) \quad (2.5)$$

entonces el hamiltoniano (2.1) se convierte en

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} \epsilon_p^0 \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{U_0}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q}} \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}'} \hat{a}_{\mathbf{p}}, \quad (2.6)$$

donde  $\epsilon_p^0 = p^2/2m$ . Aquí los operadores  $\hat{a}_{\mathbf{p}}$  y  $\hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger$  que destruyen y crean bosones en el estado con momento  $\mathbf{p}$  satisfacen las relaciones usuales de conmutación de Bose

$$[\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{p}'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}, \quad [\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{p}'}] = [\hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger, \hat{a}_{\mathbf{p}'}^\dagger] = 0. \quad (2.7)$$

Asumimos que en el sistema con interacciones, el menor estado de energía para una sola partícula tiene una ocupación macroscópica, es decir,  $N_0/N$  (donde  $N_0$  son las partículas que se encuentran en el estado base) tiende a un valor distinto de cero en el límite termodinámico, i.e., cuando  $N$  y  $\mathcal{V}$  tienden a infinito, de tal manera que la densidad del sistema  $N/\mathcal{V}$  se mantiene constante. En el sistema no perturbado tenemos

$$\hat{a}_0^\dagger |N_0\rangle = \sqrt{N_0 + 1} |N_0 + 1\rangle \quad y \quad \hat{a}_0 |N_0\rangle = \sqrt{N_0} |N_0 - 1\rangle, \quad (2.8)$$

y en el hamiltoniano, por lo tanto, reemplazamos  $\hat{a}_0$  y  $\hat{a}_0^\dagger$  por  $\sqrt{N_0}$ , como propuso Bogoliubov por

primera vez [29]. Esto es equivalente a usar la Ec. (2.2) con la función de onda para el estado condensado dado por  $\psi = \sqrt{N_0}\phi_0$ , donde  $\phi_0 = \mathcal{V}^{-1/2}$ , es la función de onda para el estado con momento cero.

Dentro de la aproximación de Bogoliubov, se supone que  $\delta\hat{\psi}(\vec{r})$  es pequeña y conserva en las interacciones todos los términos que tienen (al menos) dos potencias de  $\psi(\vec{r})$  o  $\psi^*(\vec{r})$ . Esto es equivalente a incluir términos que no son más que cuadráticos en  $\delta\hat{\psi}(\vec{r})$  y  $\delta\hat{\psi}^\dagger(\vec{r})$ , que se encuentra en  $\hat{a}_{\mathbf{p}}$  y  $\hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger$  para  $\mathbf{p} \neq 0$ . Uno encuentra

$$H = \frac{N_0^2 U_0}{2\mathcal{V}} + \sum_{\mathbf{p}(\mathbf{p} \neq 0)} (\epsilon_p^0 + n_0 U_0) \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{n_0 U_0}{2} \sum_{\mathbf{p}(\mathbf{p} \neq 0)} (\hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{p}}^\dagger + \hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}}), \quad (2.9)$$

donde  $n_0 = N_0/\mathcal{V}$  es la densidad de las partículas en el estado con momento cero.

La tarea ahora es encontrar los valores propios del hamiltoniano (2.9). El hamiltoniano original, conserva el número de partículas, y por lo tanto queremos encontrar los valores propios del nuevo hamiltoniano para un número promedio fijo de partículas. El operador para el número total de partículas está dado por

$$\hat{N} = \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}}, \quad (2.10)$$

que, considerando los estados con momento nulo como números nos da

$$\hat{N} = N_0 + \sum_{\mathbf{p}(\mathbf{p} \neq 0)} \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}}. \quad (2.11)$$

Expresado en términos del número total de partículas, el hamiltoniano (2.9) se puede escribir

$$\hat{H} = \frac{N^2 U_0}{2\mathcal{V}} + \sum_{\mathbf{p}(\mathbf{p} \neq 0)} \left[ (\epsilon_p^0 + n_0 U_0) \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{n_0 U_0}{2} (\hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{p}}^\dagger + \hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}}) \right], \quad (2.12)$$

donde, en el primer término, hemos remplazado a  $\hat{N}$  por su valor esperado. Esto es posible porque

las fluctuaciones en el número de partículas son pequeñas. Dado que se consideran poco diferentes las partículas del estado con todas las partículas que se encuentran en el estado condensado, no hay ninguna diferencia entre considerar la densidad total o la densidad del estado condensado, en los términos que aparecen en la suma.

La energía  $\epsilon_p^0 + n_0 U_0$ , no depende de la dirección de  $p$ , y por lo tanto podemos escribir al hamiltoniano (2.12) en la forma simétrica

$$\hat{H} = \frac{N^2 U_0}{2\mathcal{V}} + \sum'_{\mathbf{p}(\mathbf{p} \neq \mathbf{0})} \left[ (\epsilon_p^0 + n_0 U_0) (\hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} + \hat{a}_{-\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{p}}) + n_0 U_0 (\hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{p}}^\dagger + \hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}}) \right], \quad (2.13)$$

donde la primera suma indica que se debe de tomar sólo sobre una mitad del espacio de momentos, ya que los términos correspondientes a  $\mathbf{p}$  y  $-\mathbf{p}$  debe ser contado una sola vez.

La estructura del hamiltoniano es ahora simple, ya que consiste en una suma de términos independientes de la forma

$$\epsilon_0 (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{b}^\dagger \hat{b}) + \epsilon_1 (\hat{a}^\dagger \hat{b}^\dagger + \hat{b} \hat{a}). \quad (2.14)$$

Aquí  $\epsilon_0$  y  $\epsilon_1$  son números. Los operadores  $\hat{a}^\dagger$  y  $\hat{a}$  crean y aniquilan bosones en el estado con momento  $\mathbf{p}$ , y,  $\hat{b}^\dagger$  y  $\hat{b}$  son los operadores correspondientes para el estado con momento  $-\mathbf{p}$ .

Los valores propios y los estados propios de este hamiltoniano pueden ser obtenidos mediante la realización de una transformación canónica, como lo hizo Bogoliubov en el contexto de helio líquido [29]. Este método ha demostrado ser muy fructífero, y se utiliza ampliamente en la teoría de superconductividad y magnetismo, así como en otros campos. La idea básica es la introducción de un nuevo conjunto de operadores  $\hat{\alpha}$  y  $\hat{\beta}$ , de tal manera que el hamiltoniano tiene sólo términos proporcionales a  $\hat{\alpha}^\dagger \hat{\alpha}$  y  $\hat{\beta}^\dagger \hat{\beta}$ .

Los operadores de creación y aniquilación para bosones obedecen las relaciones de conmutación

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = [\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1 \quad y \quad [\hat{a}, \hat{b}^\dagger] = [\hat{b}, \hat{a}^\dagger] = 0. \quad (2.15)$$

Introduciendo nuevos operadores  $\hat{\alpha}$  y  $\hat{\beta}$  por la transformación

$$\hat{\alpha} = u\hat{a} + v\hat{b}^\dagger, \quad \hat{\beta} = u\hat{b} + v\hat{a}^\dagger, \quad (2.16)$$

donde  $u$  y  $v$  son coeficientes por determinar. Es necesario que también estos operadores cumplan las reglas de conmutación de Bose,

$$[\hat{\alpha}, \hat{\alpha}^\dagger] = [\hat{\beta}, \hat{\beta}^\dagger] = 1 \quad y \quad [\hat{\alpha}, \hat{\beta}^\dagger] = [\hat{\beta}, \hat{\alpha}^\dagger] = 0. \quad (2.17)$$

Dado que la fase de  $u$  y  $v$  es arbitraria, podemos tomar  $u$  y  $v$  como reales. Introduciendo la Ec. (2.16) en la Ec. (2.17) y usando los operadores (2.15), se puede ver que  $u$  y  $v$  satisfacen la condición

$$u^2 - v^2 = 1. \quad (2.18)$$

La transformación inversa correspondiente a la Ec. (2.16) es

$$\hat{a} = u\hat{\alpha} - v\hat{\beta}^\dagger, \quad \hat{b} = u\hat{\beta} - v\hat{\alpha}^\dagger. \quad (2.19)$$

Ahora sustituyendo la Ec. (2.19) en la Ec. (2.14), obtenemos

$$\hat{H} = 2v^2\epsilon_0 - 2uv\epsilon_1 + [\epsilon_0(u^2 + v^2) - 2uv\epsilon_1](\hat{\alpha}^\dagger\hat{\alpha} + \hat{\beta}^\dagger\hat{\beta}) \quad (2.20)$$

$$+ [\epsilon_1(u^2 + v^2) - 2uv\epsilon_0](\hat{\alpha}\hat{\beta} + \hat{\beta}^\dagger\hat{\alpha}^\dagger). \quad (2.21)$$

El término proporcional a  $\hat{\alpha}\hat{\beta} + \hat{\beta}^\dagger\hat{\alpha}^\dagger$  se puede eliminar al elegir  $u$  y  $v$  de manera que el coeficiente es cero

$$\epsilon_1(u^2 + v^2) - 2uv\epsilon_0 = 0. \quad (2.22)$$

El signo de  $u$  es arbitrario y si adoptamos la convención de que es positivo, la condición de normalización (2.18) se satisface con la siguiente parametrización de  $u$  y  $v$

$$u = \cosh t, v = \sinh t, \quad (2.23)$$

que a su vez implica que la condición (2.22) puede ser escrita como

$$\epsilon_1(\cosh^2 t + \sinh^2 t) - 2\epsilon_0 \sinh t \cosh t = 0 \quad (2.24)$$

o

$$\tanh 2t = \frac{\epsilon_1}{\epsilon_0}. \quad (2.25)$$

Para este resultado encontramos

$$u^2 = \frac{1}{2} \left( \frac{\epsilon_0}{\epsilon} + 1 \right) \quad y \quad v^2 = \frac{1}{2} \left( \frac{\epsilon_0}{\epsilon} - 1 \right) \quad (2.26)$$

donde

$$\epsilon = \sqrt{\epsilon_0^2 - \epsilon_1^2}. \quad (2.27)$$

Es necesario elegir la rama positiva de la raíz cuadrada, pues de otro modo  $u$  y  $v$  serían imaginarios, contrario a la hipótesis inicial. Resolviendo para  $u^2 + v^2$  y  $2uv$  en términos de la razón  $\epsilon_1/\epsilon_0$  y la inserción de las expresiones en la Ec. (2.21), da como resultado

$$H = \epsilon(\hat{\alpha}^\dagger \hat{\alpha} + \hat{\beta}^\dagger \hat{\beta}) + \epsilon - \epsilon_0. \quad (2.28)$$

La energía del estado mínimo es  $\epsilon - \epsilon_0$ , que es negativo, y los estados excitados corresponden a la adición de dos tipos independientes de bosones con energía  $\epsilon$ , creados por los operadores  $\hat{\alpha}^\dagger$  y  $\hat{\beta}^\dagger$ .

Para que  $\epsilon$  sea real, la magnitud de  $\epsilon_0$  debe superar la de  $\epsilon_1$ . Si  $|\epsilon_1| > |\epsilon_0|$ , la energía de excitación

es imaginaria y corresponde a una inestabilidad del sistema.

El hamiltoniano de la Ec. (2.1) se redujo al nuevo hamiltoniano de la Ec. (2.28), escrito en términos del conjunto de operadores  $\hat{\alpha}$  y  $\hat{\beta}$  que permiten se pueda resolver de manera analítica.

## 2.2. Estructuras periódicas

Un potencial periódico tiene la forma  $V(r) = V(r + a)$ , que impone una restricción en la función de onda  $\psi(x)$ , de tal manera que se define un operador  $\hat{T}$  tal que cambia  $\psi(x)$  por una distancia  $a$ , la función de onda resultante  $\psi(x + a)$  es un múltiplo de  $\psi(x)$  y entonces podemos escribirlo como

$$\hat{T}\psi(x) = t\psi(x) = \psi(x + a), \quad (2.29)$$

donde  $t$  es una unidad de magnitud constante.

Aplicando el operador de traslación  $n$  veces obtenemos

$$\hat{T}^n\psi(x) = t^n\psi(x) = \psi(x + na). \quad (2.30)$$

Si imponemos condiciones de frontera periódica en un punto de la red unidimensional, para un arreglo de  $N$  átomos, tal que  $y(x) = y(x + Na)$ , dichas condiciones a la frontera son llamadas condiciones de frontera de Born-von Karmen, tenemos

$$\hat{T}^N\psi(x) = t^N\psi(x) = \psi(x + Na) = \psi(x), \quad (2.31)$$

cuando  $t^N = 1$  encontramos que  $t$  es una de las  $N$  raíces de la unidad, o que

$$t = e^{2\pi il/N} \quad l = 0, 1, 2, \dots, N - 1 \quad (2.32)$$

definiendo a  $k$  por  $k = 2l\pi/Na$ ,  $t$  se convierte en  $t = e^{ika}$  y podemos escribir

$$\psi(x + a) = e^{ika}\psi(x). \quad (2.33)$$

Ahora, toda función  $\psi(x)$  que satisface esta ecuación se puede escribir en la forma

$$\psi(x) = u(x)e^{ikx} \quad (2.34)$$

considerando que  $u(x)$  es una función con periodo  $a$ , tal que,  $u(x + a) = u(x)$ .

Para corroborar que esto es cierto, escribimos

$$\psi(x + a) = u(x + a)e^{ik(x+a)} = e^{ika}u(x + a)e^{ikx} \quad (2.35)$$

$$= e^{ika}u(x)e^{ikx} \quad (2.36)$$

$$= e^{ika}\psi(x) \quad (2.37)$$

que es igual a la Ec. (2.33).

La Ec. (2.34) es un resultado fundamental para la física del estado sólido y es conocida como el teorema de Bloch que nos dice que toda función de onda para un potencial periódico de periodo  $a$  debe tener necesariamente esta forma [30].

Los átomos que forman una red, pueden ser representados por barreras de potencial periódicos. Un ejemplo, es el potencial de Kronig-Penney [27]-[30], que está representado por barreras de potencial de ancho  $b$  y de altura  $V_0$ , separadas por pozos de ancho  $a$  en donde el potencial vale cero y el periodo del potencial es  $a + b$ . Este modelo nos permite estudiar las características esenciales del comportamiento de bosones dentro de estructuras periódicas unidimensionales. Dicho modelo será explicado en la siguiente sección.

## 2.3. Sistemas finitos con potenciales periódicos

Dado que es de nuestro interés estudiar el comportamiento en sistemas periódicos ordenados o desordenados, descartando la interacción entre partículas (en nuestro caso bosones), con el fin de analizar los efectos que causa el potencial de confinamiento, como los cristales, donde justamente la estructura periódica de los átomos que forman el sólido proporcionan un potencial para la partícula [31].

Es por ello que en las siguientes subsecciones, estudiaremos a detalle dos tipos de barreras de potencial, primero el potencial de Kronig-Penney para el caso infinito que satisface el teorema de Bloch y segundo, el potencial delta de Dirac, el cual se resuelve empleando el método de la matriz de transferencia, obteniendo para cada uno de ellos su respectiva relación de dispersión que nos proporciona las energías que pueden tener las partículas en determinado número de onda  $k$ .

### 2.3.1. Potencial de Kronig Penney

El potencial de Kronig-Penney [27]-[30], representado por barreras de potencial de ancho  $b$  y de altura  $V_0$ , separadas por pozos de ancho  $a$  en donde el potencial es cero, de tal manera que el periodo del potencial es  $a + b$ , como se muestra en la Fig. 2.1, se puede escribir de la siguiente manera

$$V(z) = V_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Theta[z - (a + (n - 1)(a + b))] \Theta[-z + n(a + b)], \quad (2.38)$$

con  $\Theta$  la función de Heaviside y  $V_0$  que corresponde a la altura de la barrera de potencial en la región  $-b < z < 0$  o cero en la región  $0 < z < a$ .

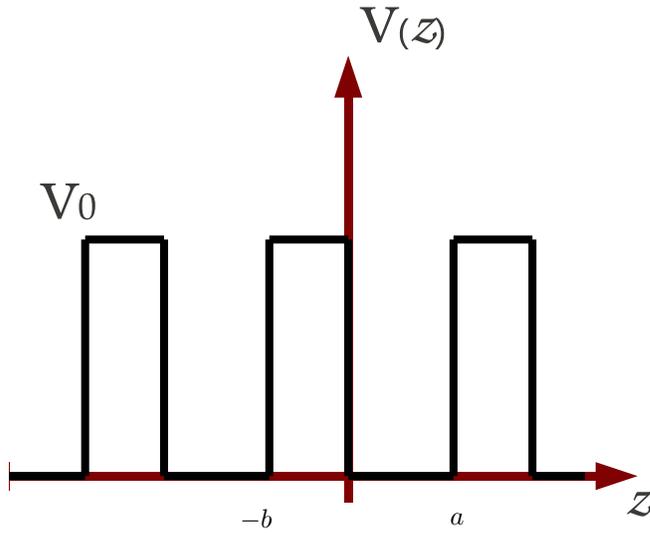


Figura 2.1: Potencial de Kronig-Penney periódico.

La función de onda  $\psi(z)$  para un bosón sujeto al potencial de Kronig-Penney, satisface la siguiente Ec. de Schrödinger

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + \alpha^2\psi(z) = 0 \quad \text{si} \quad 0 < z < a, \quad (2.39)$$

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} - \beta^2\psi(z) = 0 \quad \text{si} \quad -b < z < 0 \quad (2.40)$$

con las siguientes constantes definidas, donde la energía de los bosones está dada por  $\varepsilon$  y puede ser mayor o menor que  $V_0$

$$\alpha^2 \equiv \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}, \quad (2.41)$$

$$\beta^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - \varepsilon). \quad (2.42)$$

Para resolver este sistema de ecuaciones, el teorema de Bloch es de suma importancia porque facilita determinar soluciones de potenciales periódicos; en este caso la función de onda  $\psi(z)$  es de la siguiente manera

$$\psi(z) = e^{ikz}u(z), \quad (2.43)$$

con  $k$  el número de onda y  $u_k$  una función con el mismo periodo del potencial. Si sustituimos a  $\psi(z)$  en las Ecs. (2.39) y (2.40), obtenemos el siguiente sistema de Ecs. diferenciales de segundo orden en términos de  $u_k$

$$u'' + 2iku' + (\alpha^2 - k^2)u = 0 \quad 0 < z < a \quad (2.44)$$

$$u'' + 2iku' - (\beta^2 + k^2)u = 0 \quad -b < z < 0, \quad (2.45)$$

proponiendo soluciones de la forma  $u = e^{-\gamma z}$  y  $u = e^{\gamma z}$  respectivamente, se obtienen por solución general

$$u_1 = Ae^{i(\alpha-k)z} + Be^{-i(\alpha+k)z} \quad 0 < z < a \quad (2.46)$$

$$u_2 = Ce^{(\beta-ik)z} + De^{-(\beta+ik)z} \quad -b < z < 0, \quad (2.47)$$

donde las constantes  $A, B, C$  y  $D$  son determinadas por las condiciones a la frontera en el intervalo  $[a, b]$  y deben cumplir la continuidad en la función y su derivada.

Las condiciones a la frontera mencionadas son las siguientes:

I) Para  $z = 0$

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad y \quad \psi_1'(0) = \psi_2'(0). \quad (2.48)$$

II) Para el periodo  $a + b$

$$u_1(a) = u_2(-b) \quad y \quad u_1'(a) = u_2'(-b). \quad (2.49)$$

De este modo, al aplicar las condiciones a la frontera, obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones lineal homogéneo

$$\begin{aligned} A + B &= C + D \\ i\alpha A - i\alpha B &= \beta C - \beta D \\ Ae^{i(\alpha-k)a} + Be^{-i(\alpha+k)b} &= Ce^{-(\beta-ik)b} + De^{(\beta+ik)b} \\ i(\alpha-k)Ae^{i(\alpha-k)a} - i(\alpha+k)Be^{-i(\alpha+k)b} &= (\beta-ik)Ce^{-(\beta-ik)b} - (\beta+ik)De^{(\beta+ik)b}, \end{aligned}$$

que tiene por solución distinta a la trivial si su determinante es cero

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ i\alpha & -i\alpha & -\beta & \beta \\ e^{i(\alpha-k)a} & e^{-i(\alpha+k)b} & -e^{-(\beta-ik)b} & -e^{(\beta+ik)b} \\ i(\alpha-k)e^{i(\alpha-k)a} & -i(\alpha+k)e^{-i(\alpha+k)b} & -(\beta-ik)e^{-(\beta-ik)b} & (\beta+ik)e^{(\beta+ik)b} \end{vmatrix} = 0. \quad (2.50)$$

Resolviendo el determinante obtenemos la relación de dispersión que nos dice la energía que tiene una partícula a determinada  $k$

$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \sinh(\beta b) \sin(\alpha a) + \cosh(\beta b) \cos(\alpha a) = \cos[(a+b)k]. \quad (2.51)$$

Para determinar la energía de las partículas, se tienen los casos cuando  $\varepsilon < V_0$  o  $\varepsilon > V_0$ , en cada caso cambia ligeramente la relación de dispersión. Aquí sólo mostraremos el caso cuando  $\varepsilon < V_0$  sin ningún particular.

Consideramos el límite cuando el ancho de la barrera  $b$  es muy próxima a cero y la altura de la barrera  $V_0$  infinita, de tal manera que la intensidad de la barrera de potencial está determinada por el producto entre  $bV_0 = cte$ , de la siguiente manera.

$$\lim_{b \rightarrow 0} \frac{\sinh(\beta b)}{\beta b} = 1, \quad (2.52)$$

$$\lim_{b \rightarrow 0} \cosh(\beta b) = 1 \quad (2.53)$$

y

$$\lim_{b \rightarrow 0} (\beta^2 - \alpha^2)ab = \frac{2mV_0ba}{\hbar^2} = P. \quad (2.54)$$

Obteniendo entonces una nueva expresión para la relación de dispersión de un potencial de Kroning-Penney con una delta por celda unitaria

$$\frac{P}{\alpha a} \sin(\alpha a) + \cos(\alpha a) = \cos(ka). \quad (2.55)$$

Esta ecuación no tiene solución analítica para  $\varepsilon$  en función de  $k$ . Como podemos observar el lado izquierdo de la ecuación contiene términos implícitos de la energía y el lado derecho toma valores entre -1 y 1 de tal manera que al graficar la energía versus  $\alpha a$  (ver Fig. 2.2), observamos que el espectro de energía esta conformado por bandas de energías permitidas y regiones prohibidas. El ancho de estas bandas aumenta conforme  $\alpha a$  crece o disminuye si la intensidad de la barrera  $P$  crece, de tal manera que si  $P \rightarrow \infty$  la ecuación anterior tiene solución si el  $\sin(\alpha a) = 0$  y esto sólo ocurre cuando  $\alpha a = n\pi$ , por consiguiente estas bandas se convierten en niveles de energía

correspondientes a los de una partícula confinada en un pozo de potencial de ancho  $a$  y paredes infinitas, estos niveles de energía toman los siguientes valores

$$\varepsilon_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.56)$$

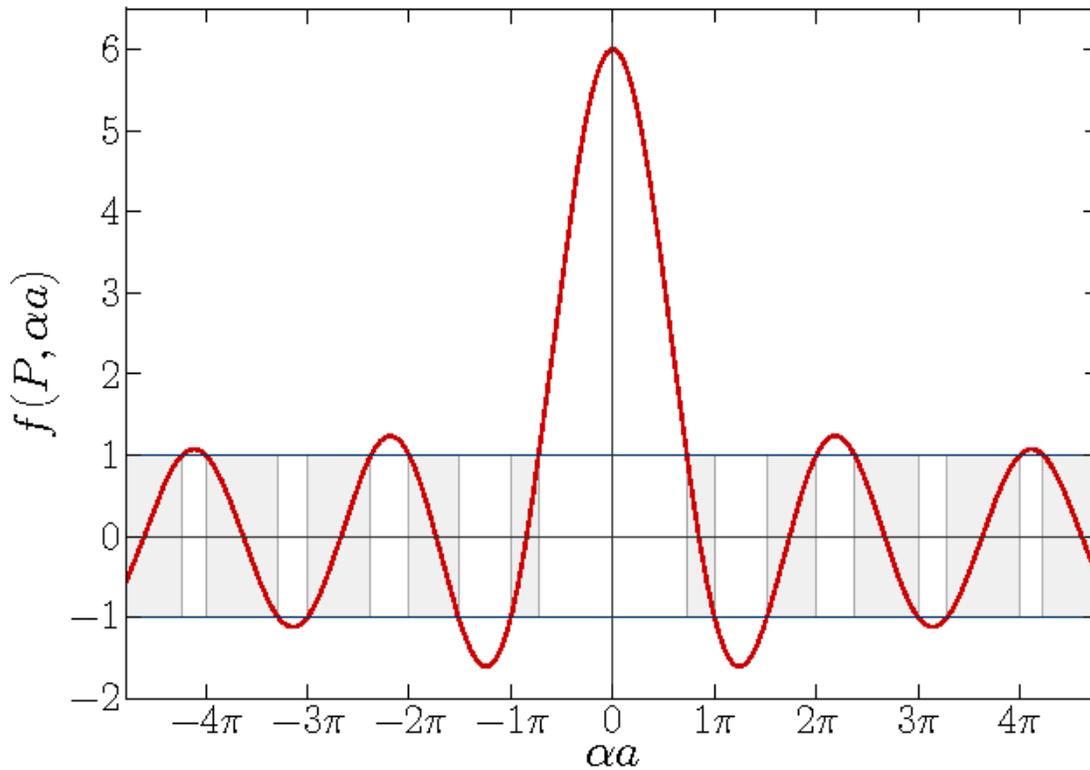


Figura 2.2: Gráfica de la función  $f(P, \alpha a) = \frac{P}{\alpha a} \sin(\alpha a) + \cos(\alpha a)$  vs  $\alpha a$ , para  $P = 3\pi/2$ . Los valores permitidos de la energía  $\varepsilon$  están dados por los intervalos de  $\alpha = (2m\varepsilon/\hbar^2)^{1/2}$ , para los cuales la función se encuentra entre -1 y 1.

### 2.3.2. Potenciales delta de Dirac

La física experimental en los últimos años ha tenido un gran auge, por ejemplo, la nanociencia donde se estudian sistemas de pocos nanómetros como los fullerenos o los nanotubos, las trampas atómicas,

la superconductividad de alta temperatura crítica, las redes ópticas. Considerando el importante avance de la nanociencia, en esta tesis se estudiarán sistema finitos, en particular, nos proponemos estudiar un sistema de  $N$  bosones confinados en un número finito de potenciales, de tal manera que el procedimiento presentado este capítulo es una generalización para  $\mathcal{M}$  potenciales delta de Dirac en sistemas ordenados, obteniendo la relación de dispersión y su espectro de energía.

En la dirección  $z$  las partículas se encuentran confinadas por una caja de potencial impenetrable de longitud  $L_z = (\mathcal{M} + 1)a$ , donde las barreras de potencial delta de Dirac están denotadas por  $\mathcal{M}$  y  $a$  es la distancia entre cada una de las barreras de potencial.

Por otra parte la Ec. de Schrödinger independiente del tiempo, es de la siguiente manera.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + V(z)\psi(z) = E\psi(z), \quad (2.57)$$

con el potencial

$$V(z) = \sum_{i=1}^{\mathcal{M}} \Lambda \delta(z - ia), \quad (2.58)$$

donde  $\Lambda$  corresponde a la intensidad y la función de onda que es solución a la Ec. de Schrödinger, está dada por

$$\psi_j(z) = A_j e^{i\alpha z} + B_j e^{-i\alpha z} \quad z_{j-1} \leq z \leq z_j, \quad j = 1, \dots, \mathcal{M} + 1. \quad (2.59)$$

De manera convencional, imponemos la condición de continuidad en  $\psi_j(z)$  para cada una de las barreras de potencial de la siguiente manera

$$\psi_1(a) = \psi_2(a); \quad \psi_2(2a) = \psi_3(2a); \dots \quad \psi_{j-1}(ja) = \psi_j(ja), \quad (2.60)$$

debido a la singularidad de la delta, la derivada de la función de onda  $\psi'(z)|_{z=qa}$  es discontinua, teniendo que integrar la ecuación de Schrödinger entre el intervalo  $qa - \varepsilon < z < qa + \varepsilon$  de la siguiente forma

$$\int_{qa-\varepsilon}^{qa+\varepsilon} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_j(z)}{dz^2} + V(z)\psi_j(z) - E\psi_j(z) \right] dz = 0. \quad (2.61)$$

En el límite cuando  $\varepsilon \rightarrow 0$  se tiene por un lado que

$$\int_{qa-\varepsilon}^{qa+\varepsilon} E\psi_j(z) dz = 0$$

y por otro

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{qa-\varepsilon}^{qa+\varepsilon} \frac{d^2\psi_j(z)}{dz^2} dz + \int_{qa-\varepsilon}^{qa+\varepsilon} \lambda\delta(z)\psi_j(z) dz = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi'_{j+1}(qa) - \psi'_j(qa)) + \lambda\psi_j(qa). \quad (2.62)$$

Sustituyendo (2.59) en (2.62) para cada uno de los potenciales delta de Dirac, se obtienen  $2(\mathcal{M}+1)$  ecuaciones, de las cuales  $2\mathcal{M}$  proviene de la continuidad de la función de onda y la discontinuidad de sus derivadas en las posiciones de las deltas. Explícitamente éstas son

$$\begin{aligned} A_j e^{i\alpha z_j} + B_j e^{-i\alpha z_j} &= A_{j+1} e^{i\alpha z_j} + B_{j+1} e^{-i\alpha z_j}, \\ A_j e^{i\alpha z_j} \left( \frac{2m\Lambda_j}{i\alpha\hbar^2} + 1 \right) + B_j e^{-i\alpha z_j} \left( \frac{2m\Lambda_j}{i\alpha\hbar^2} - 1 \right) &= A_{j+1} e^{i\alpha z_j} + B_{j+1} e^{-i\alpha z_j}, \end{aligned}$$

que podemos escribir como

$$\begin{pmatrix} A_{j+1} e^{i\alpha z_j} \\ B_{j+1} e^{-i\alpha z_j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{m\Lambda_j}{i\alpha\hbar^2} + 1 & \frac{m\Lambda_j}{i\alpha\hbar^2} \\ -\frac{m\Lambda_j}{i\alpha\hbar^2} & -\frac{m\Lambda_j}{i\alpha\hbar^2} + 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_j e^{i\alpha z_j} \\ B_j e^{-i\alpha z_j} \end{pmatrix}. \quad (2.63)$$

Dado que los vectores columna en la Ec. (2.63) pueden reescribirse como el producto de la matriz

diagonal con elementos  $e^{i\alpha z_j}$ ,  $e^{-i\alpha z_j}$ , podemos escribir explícitamente la siguiente ecuación

$$\begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} = \mathbb{P}_j \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix}, \quad (2.64)$$

con la definición

$$\mathbb{P}_j \equiv \mathbb{E}_j^{-1} \mathbb{M}_j \mathbb{E}_j, \quad (2.65)$$

$$\mathbb{M}_j \equiv \begin{pmatrix} \frac{m\Lambda_j}{i\alpha\hbar^2} + 1 & \frac{m\Lambda_j}{i\alpha\hbar^2} \\ -\frac{m\Lambda_j}{i\alpha\hbar^2} & -\frac{m\Lambda_j}{i\alpha\hbar^2} + 1 \end{pmatrix}, \quad (2.66)$$

$$\mathbb{E}_j \equiv \begin{pmatrix} e^{i\alpha z_j} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha z_j} \end{pmatrix}, \quad (2.67)$$

teniendo en cuenta  $k < j < \mathcal{M}$ .

Las dos ecuaciones restantes para tener solución única, provienen de las condiciones de frontera en  $z = 0$  y  $z = L$ , dados por:

$$A_1 + B_1 = 0, \quad (2.68)$$

$$A_{\mathcal{M}+1}e^{i\alpha L} + B_{\mathcal{M}+1}e^{-i\alpha L} = 0. \quad (2.69)$$

Podemos relacionar los coeficientes de la región 1 con los de la región  $\mathcal{M} + 1$  a través de la matriz de transferencia, de la siguiente manera

$$\begin{pmatrix} A_{\mathcal{M}+1} \\ B_{\mathcal{M}+1} \end{pmatrix} = \mathbb{P}_{\mathcal{M}} \mathbb{P}_{\mathcal{M}-1} \cdots \mathbb{P}_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad (2.70)$$

dado que consideramos el caso cuando  $z_j = aj$ , con  $(\mathcal{M} + 1)a = L$ , tenemos que

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}_{\mathcal{M}}\mathbb{P}_{\mathcal{M}-1}\cdots\mathbb{P}_1 &= \mathbb{E}_{\mathcal{M}}^{-1}\mathbb{M}\mathbb{E}_{\mathcal{M}}\mathbb{E}_{\mathcal{M}-1}^{-1}\mathbb{M}\mathbb{E}_{\mathcal{M}-1}\cdots\mathbb{E}_1^{-1}\mathbb{M}\mathbb{E}_1 \\
&= [\mathbb{E}_1^{\mathcal{M}}]^{-1}\mathbb{M}[\mathbb{E}_1^{\mathcal{M}}(\mathbb{E}_1^{-1})^{\mathcal{M}-1}]\mathbb{M}[\mathbb{E}_1^{\mathcal{M}-1}(\mathbb{E}_1^{-1})^{\mathcal{M}-2}]\cdots\mathbb{M}\mathbb{E}_1 \\
&= [\mathbb{E}_1^{\mathcal{M}}]^{-1}\mathbb{M}\mathbb{E}_1\cdots\mathbb{M}\mathbb{E}_1 \\
&= [\mathbb{E}_1^{\mathcal{M}}]^{-1}[\mathbb{M}\mathbb{E}_1]^{\mathcal{M}} \\
&= [\mathbb{E}_1^{\mathcal{M}}]^{-1}\bar{\mathbb{M}}^{\mathcal{M}}.
\end{aligned}$$

Asimismo, al definir  $\bar{\mathbb{M}} = \mathbb{M}\mathbb{E}$ , se puede evaluar  $\bar{\mathbb{M}}^{\mathcal{M}}$  como sigue; dado que la matriz de transferencia  $\bar{\mathbb{M}}$  es de la forma [32]

$$\bar{\mathbb{M}} = \begin{pmatrix} v & w \\ w^* & v^* \end{pmatrix}, \quad (2.71)$$

con  $w = \frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2}e^{-i\alpha a}$  y  $v = [1 + \frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2}]e^{i\alpha a}$ , sólo dos elementos son independientes, y la conservación del flujo de corriente requiere que el  $\det\bar{\mathbb{M}} = |v|^2 - |w|^2 = 1$  [32], el cual nos deja sólo con un parámetro independiente. Nótese que  $\bar{\mathbb{M}}$  se puede reescribir como

$$\bar{\mathbb{M}} = \begin{pmatrix} \operatorname{Re}(v) + i\operatorname{Im}(v) & w \\ w^* & \operatorname{Re}(v) - i\operatorname{Im}(v) \end{pmatrix} \quad (2.72)$$

$$= \operatorname{Re}(v) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} i\operatorname{Im}(v) & w \\ w^* & -i\operatorname{Im}(v) \end{pmatrix}, \quad (2.73)$$

donde  $\operatorname{Re}(v) = \frac{1}{2}(v + v^*) = \frac{1}{2}\operatorname{Tr}(\bar{\mathbb{M}})$  puede ser tomado como el parámetro independiente.

Denotemos por  $\mathbb{G}$  a la segunda matriz de la expresión anterior,

$$\bar{\mathbb{M}} = \operatorname{Re}(v) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \mathbb{G}, \quad (2.74)$$

esta satisface que la  $\operatorname{Tr}(\mathbb{G}) = 0$ , además, al considerar que  $\operatorname{Re}^2(v) + \operatorname{Im}^2(v) - |w|^2 = 1$ , encontramos que

$$\mathbb{G}^2 = -[1 - \operatorname{Re}^2(v)] \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.75)$$

y podemos redefinir a  $\mathbb{G}$  escribiéndola como

$$\mathbb{G}' = \begin{pmatrix} \frac{\operatorname{Im}(v)}{\sqrt{1 - \operatorname{Re}^2(v)}} & -i \frac{w}{\sqrt{1 - \operatorname{Re}^2(v)}} \\ -i \frac{w^*}{\sqrt{1 - \operatorname{Re}^2(v)}} & -\frac{\operatorname{Im}(v)}{\sqrt{1 - \operatorname{Re}^2(v)}} \end{pmatrix} = \frac{-i}{\sqrt{1 - \operatorname{Re}^2(v)}} \mathbb{G}, \quad (2.76)$$

con estas consideraciones y la Ec. (2.74), tenemos que

$$\begin{aligned} \bar{\mathbb{M}} &= \operatorname{Re}(v) \mathbb{I} + \mathbb{G} \\ &= \operatorname{Re}(v) \mathbb{I} + \frac{\sqrt{1 - \operatorname{Re}^2(v)}}{i} \mathbb{G}', \end{aligned} \quad (2.77)$$

además de la Ec. (2.75) se obtiene que

$$\mathbb{I} = \frac{-\mathbb{G}^2}{1 - \operatorname{Re}^2(v)} = \mathbb{G}'^2, \quad (2.78)$$

esta última propiedad de  $\mathbb{G}'$  y recordando que la exponencial de una matriz se puede definir a través de una serie de potencias de la siguiente manera

$$\bar{\mathbb{M}} = \sum_0^{\infty} \frac{(ip)^n}{n!} \mathbb{G}^n \quad (2.79)$$

$$= \sum_{n \text{ par}} \frac{(ip)^n}{n!} \mathbb{I} + \sum_{n \text{ impar}} \frac{(ip)^n}{n!} \mathbb{G}'. \quad (2.80)$$

Se puede escribir la Ec. (2.78) equivalentemente, como

$$\bar{\mathbb{M}} = \cos p \mathbb{I} + i \operatorname{sen} p \mathbb{G}', \quad (2.81)$$

donde  $\cos p \equiv \frac{1}{2} \operatorname{Tr}(\bar{\mathbb{M}})$ .

Finalmente escribimos a  $\bar{\mathbb{M}}$  como la exponencial de una matriz, de siguiente manera

$$\bar{\mathbb{M}} = e^{ip \mathbb{G}'} \quad (2.82)$$

y entonces evaluar las potencias de  $\bar{\mathbb{M}}$  inmediatamente, pues

$$\bar{\mathbb{M}}^{\mathcal{M}} = e^{i\mathcal{M}p \mathbb{G}'}. \quad (2.83)$$

Escribiendo  $\bar{\mathbb{M}}^{\mathcal{M}} = \cos(\mathcal{M}p) \mathbb{I} + i \operatorname{sen}(\mathcal{M}p) \mathbb{G}'$  tenemos que las ecuaciones (2.70) pueden ser reescritas como

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A_{\mathcal{M}+1} \\ B_{\mathcal{M}+1} \end{pmatrix} &= \mathbb{E}_1^{-\mathcal{M}} \bar{\mathbb{M}}^{\mathcal{M}} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \\ &= \mathbb{E}_1^{-\mathcal{M}} [\cos(\mathcal{M}p) \mathbb{I} + i \operatorname{sen}(\mathcal{M}p) \mathbb{G}'] \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \\ &= [\cos(\mathcal{M}p) \mathbb{E}_1^{-\mathcal{M}} + i \operatorname{sen}(\mathcal{M}p) \mathbb{E}_1^{-\mathcal{M}} \mathbb{G}'] \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

dado que  $\mathbb{G}' = (\bar{\mathbb{M}} - \cos p \mathbb{I})/i \operatorname{sen} p$  obtenemos

$$\begin{pmatrix} A_{\mathcal{M}+1} \\ B_{\mathcal{M}+1} \end{pmatrix} = \left\{ \left[ \cos(\mathcal{M}p) - \frac{\operatorname{sen}(\mathcal{M}p)}{\operatorname{sen} p} \cos p \right] \mathbb{E}_1^{-\mathcal{M}} + \frac{\operatorname{sen}(\mathcal{M}p)}{\operatorname{sen} p} \mathbb{E}_1^{-\mathcal{M}} \bar{\mathbb{M}} \right\} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix},$$

que puede ser escrita como

$$\begin{pmatrix} A_{\mathcal{M}+1} \\ B_{\mathcal{M}+1} \end{pmatrix} = \mathbf{P} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix},$$

donde las cuatro entradas de la matriz  $\mathbf{P}$  están dadas por

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{11} &= \mathbf{P}_{22}^* = e^{-i\alpha\mathcal{M}a} \left[ \cos(\mathcal{M}p) - \frac{\operatorname{sen}(\mathcal{M}p)}{\operatorname{sen} p} \cos p + \frac{\operatorname{sen}(\mathcal{M}p)}{\operatorname{sen} p} v \right] \\ \mathbf{P}_{12} &= \mathbf{P}_{21}^* = e^{-i\alpha\mathcal{M}a} \frac{\operatorname{sen}(\mathcal{M}p)}{\operatorname{sen} p} w. \end{aligned}$$

De este modo hemos reducido nuestro sistema de  $2\mathcal{M}$  ecuaciones a sólo 2 con cuatro incógnitas. Así, junto con las dos ecuaciones que satisfacen los coeficientes  $A_1$ ,  $B_1$ ,  $A_{\mathcal{M}+1}$  y  $B_{\mathcal{M}+1}$  en las fronteras, tenemos que resolver el siguiente sistema de ecuaciones lineales

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ \mathbf{P}_{11} & \mathbf{P}_{12} & -1 & 0 \\ \mathbf{P}_{21} & \mathbf{P}_{22} & 0 & -1 \\ 0 & 0 & e^{i\alpha L} & e^{-i\alpha L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \\ A_{\mathcal{M}+1} \\ B_{\mathcal{M}+1} \end{pmatrix} = 0. \quad (2.84)$$

La condición de solubilidad del sistema de ecuaciones se determina haciendo que el determinante de la matriz de  $4 \times 4$  en la Ec. (2.84) se anule, explícitamente

$$e^{i\alpha L} \mathbf{P}_{12} + e^{-i\alpha L} \mathbf{P}_{11}^* - e^{i\alpha L} \mathbf{P}_{11} - e^{-i\alpha L} \mathbf{P}_{12}^* = 0$$

o

$$\Im(e^{i\alpha L} \mathbf{P}_{12}) - \Im(e^{i\alpha L} \mathbf{P}_{11}) = 0,$$

donde  $\Im(\rho)$  denota la parte imaginaria de un número complejo arbitrario  $\rho$ . Esta última ecuación se puede escribir como

$$\frac{\text{sen } \mathcal{M}p}{\text{sen } p} \Im(e^{i\alpha a} w) - \left[ \cos(\mathcal{M}p) - \frac{\text{sen}(\mathcal{M}p)}{\text{sen } p} \cos p \right] \Im(e^{i\alpha a}) - \frac{\text{sen } \mathcal{M}p}{\text{sen } p} \Im(e^{i\alpha a} v) = 0.$$

Dado que  $w = \frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} e^{-i\alpha a}$  y  $v = \left[1 + \frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2}\right] e^{i\alpha a}$  (ver definición de  $\bar{\mathbb{M}}$ , Ec. (2.71)), tenemos que

$$-\frac{\text{sen } \mathcal{M}p}{\text{sen } p} \frac{m\Lambda}{\alpha\hbar^2} - \left[ \cos(\mathcal{M}p) - \frac{\text{sen}(\mathcal{M}p)}{\text{sen } p} \cos p \right] \text{sen } \alpha a + \frac{\text{sen}(\mathcal{M}p)}{\text{sen } p} \left[ \frac{m\Lambda}{\alpha\hbar^2} \cos 2\alpha a - \text{sen } 2\alpha a \right] = 0$$

entonces

$$-\frac{1}{\text{sen } p} [\cos \mathcal{M}p \text{sen } p - \text{sen } \mathcal{M}p \cos p] \text{sen } \alpha a + \frac{\text{sen}(\mathcal{M}p)}{\text{sen } p} \left[ \frac{m\beta}{\alpha\hbar^2} (\cos 2\alpha a - 1) - \text{sen } 2\alpha a \right] = 0.$$

Si  $\text{sen } p \neq 0$  tenemos

$$\text{sen}(\mathcal{M} - 1)p \text{sen } \alpha a - \text{sen } \mathcal{M}p \left[ \frac{m\Lambda}{k\hbar^2} 2 \text{sen}^2 \alpha a + 2 \cos \alpha a \text{sen } \alpha a \right] = 0,$$

que puede ser puesto en la forma

$$\text{sen } \alpha a [\text{sen}(\mathcal{M} - 1)p - 2 \text{sen } \mathcal{M}p \cos p] = 0, \quad (2.85)$$

donde hemos usado que  $\cos p = (m\Lambda/\alpha\hbar^2) \text{sen } \alpha a + \cos \alpha a$ . Haciendo uso de la relación de recurrencia- para los polinomios de Chebyshev:  $\text{sen}(n + 1)\theta - 2 \cos \theta \text{sen } n\theta + \text{sen}(n - 1)\theta = 0$

(ver por ejemplo [33]) las condiciones de la Ec. (2.85) se reescriben como

$$\text{sen } \alpha a \text{ sen}(\mathcal{M} + 1)p = 0.$$

De esta manera tenemos dos conjuntos de soluciones, las provenientes de la condición  $\text{sen } \alpha a = 0$  que implican  $\alpha = j\pi/a$  con  $j = 1, 2, \dots$  y aquellos provenientes de la condición  $\text{sen}(\mathcal{M} + 1)p = 0$ . Esta condición implica  $(\mathcal{M} + 1)p = n\pi$  con  $n \in \mathbb{Z}$  o equivalentemente  $p = \arccos(\frac{m\Lambda}{\alpha\hbar} \text{sen } \alpha a + \cos \alpha a) = n\pi/(\mathcal{M} + 1)$ . Tomando el coseno de ambos lados obtenemos,

$$\boxed{\frac{m\Lambda}{\alpha\hbar^2} \text{sen } \alpha a + \cos \alpha a = \cos \frac{n\pi}{\mathcal{M} + 1}}, \quad (2.86)$$

con  $n = 0, 1, \dots, \mathcal{M} + 1$ , donde se puede observar que existen  $\mathcal{M} + 2$  posibles valores, de los cuales solo son posibles  $\mathcal{M} + 1$ , para descartar uno de estos valores pedimos que el  $\text{sen } \alpha a = 0$  si y solo si  $\alpha a = pa$  con  $p \in \mathbb{Z}$ , de tal manera que  $\cos \alpha a = (-1)^p$ , obteniendo la siguiente igualdad  $(-1)^p = \cos \frac{n\pi}{\mathcal{M} + 1}$  para  $p$  que denota cada banda. Entonces si el índice de banda es par  $n = 0$ , el conjunto solución está dado cuando  $n = 0, 1, \dots, \mathcal{M}$  y si el índice de banda es impar  $n = \mathcal{M} + 1$ , el conjunto solución está dado cuando  $n = 1, 2, \dots, \mathcal{M}$ .

Como se muestra en la Fig. 3.3 hay nivel fijos y sobre éstos hay otros niveles que comienzan a concentrarse hacia los niveles fijos dependiendo de la intensidad de las deltas. Para explicarlo recurrimos a la Ec. (2.86) y multiplicamos por  $a/a$ , teniendo entonces la siguiente ecuación

$$\frac{m\Lambda a}{\hbar^2} \frac{\text{sen } \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a = \cos \frac{n\pi}{\mathcal{M} + 1} \quad (2.87)$$

$$P \frac{\text{sen } \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a = \cos \frac{n\pi}{\mathcal{M} + 1} \quad (2.88)$$

con

$$\text{con } P = \frac{m\Lambda a}{\hbar^2}. \quad (2.89)$$

En el límite termodinámico haciendo tender  $\mathcal{M} \rightarrow \infty$ , recuperamos la expresión (2.55), definiendo a  $k = n\pi/(\mathcal{M} + 1)a$ .

Si  $P = 0$  tenemos

$$\cos \alpha a = \cos \frac{n\pi}{\mathcal{M} + 1} \quad (2.90)$$

$$\Rightarrow \alpha a = \frac{n\pi}{\mathcal{M} + 1} \quad (2.91)$$

$$\Rightarrow (\alpha a)^2 = \frac{n^2 \pi^2}{(\mathcal{M} + 1)^2}, \quad (2.92)$$

recordemos que

$$\alpha^2 \equiv \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}, \quad (2.93)$$

$$\Rightarrow \varepsilon = \frac{\alpha^2 a^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (2.94)$$

$$= \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2 (\mathcal{M} + 1)^2}, \quad (2.95)$$

que son las energías para los niveles de una caja de longitud  $(\mathcal{M} + 1)a$ .

Si  $P \rightarrow \infty$  los niveles de energía corresponden a sólo una de las cajas de longitud  $a$

$$\varepsilon = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad (2.96)$$

De estos dos casos, cuando  $P = 0$  y  $P \rightarrow \infty$ , tenemos que los niveles fijos son aquellos cuando  $P \rightarrow \infty$  y están dados por la Ec. (2.96), estos niveles fijos aumentan su valor de energía conforme

aumenta el número de niveles, esto es, que para una delta su nivel fijo será  $n = 1$  y así sucesivamente hasta que para  $n$  barreras de potencial habrá  $\mathcal{M} + 1$  niveles.

Esto es

$$\alpha a = l\pi \quad l \in N \quad (2.97)$$

$$\cos(l\pi) = \cos \frac{n\pi}{(\mathcal{M} + 1)}, \quad (2.98)$$

y el  $\cos(l\pi)$  sólo puede tomar valores entre 1 y -1, entonces

$$(-1)^l = \cos \frac{n\pi}{(\mathcal{M} + 1)}, \quad (2.99)$$

si  $l = 1$  entonces

$$-1 = \cos \frac{n\pi}{(\mathcal{M} + 1)} \quad (2.100)$$

y esto sólo ocurre cuando  $n = (\mathcal{M} + 1)$  dando el índice de nivel de energía fijo,  $n = 0$  corresponderá al caso de  $l$  (índice de banda) impar.

En este capítulo se estudiaron distintos tipos de estructuras periódicas. Primero se redujo el problema de un hamiltoniano de  $N$  bosones con interacción a un hamiltoniano que se puede resolver de manera analítica, después se demostró el teorema de Bloch, que nos ayudó a calcular la relación de dispersión de un sistema periódico con barreras de potencial tipo Kronig-Penney y un sistema periódico con barreras de potencial delta de Dirac.

En el siguiente capítulo se calculará la relación de dispersión para un sistema más general donde las barreras de potencial delta de Dirac tienen distinta separación e intensidad entre ellas.

## Capítulo 3

# Sistemas finitos con desorden

Los sólidos se dividen en cristalinos, amorfos y cuasi-cristalinos, aunque la mayoría de los estudios son realizados en los cristales debido a que su periodicidad permite desarrollar modelos matemáticos más sencillos para describirlos. Sin embargo en la naturaleza esta estructura periódica se puede deformar sometiendo a los materiales ya sea por cambios de temperatura, presión, dislocación, entre otros que ocasionan impurezas en la composición o en la estructura de los materiales. Estas deformaciones pueden causar cambios en sus propiedades eléctricas, magnéticas, térmicas, ópticas o mecánicas. Dichas deformaciones se pueden simular a partir de un sistema ordenado periódico simple como el peine de Dirac a un sistema desordenado. Con el fin de estudiar si introducir desorden, propicia cambios en sus propiedades termodinámicas, en este capítulo se calcula la relación de dispersión en un potencial peine de Dirac para cuatro tipos de desorden.

### 3.1. Cuatro tipos de desorden

En el estudio del capítulo anterior, se calculó la relación de dispersión para un sistema ordenado, que consiste en mantener a todos los potenciales con la misma configuración, esto es que todos tengan la misma intensidad y la misma distancia entre cada uno de los potenciales, pero ¿qué ocurre si se introduce desorden al sistema? Una de las preguntas cruciales de esta tesis es analizar si el

hecho de introducir desorden al sistema, propicia una transición de fase, como por ejemplo hacia una fase condensada. Los tipos de desorden que se introdujeron al sistema son los siguientes:

1. Desorden composicional, consiste en variar aleatoriamente las intensidades de las barreras de potencial y manteniendo fija la distancia entre cada una de las barreras de potencial.
2. Desorden estructural, consiste en variar aleatoriamente la distancia entre las barreras de potencial en una cantidad pequeña de su posición y manteniendo fija la intensidad de todas las barreras de potencial.
3. Desorden total, consiste en introducir desorden composicional y desorden estructural (este caso no se presenta en los resultados de la tesis).
4. Vacancias, consisten en omitir algunas de las barreras de potencial anulando la intensidad de algunos de estos potenciales, que pueden ser de manera simétrica o aleatoria.

## 3.2. Potencial peine de Dirac para un sistema desordenado

En el capítulo anterior, se calculó la relación de dispersión para  $\mathcal{M}$  barreras de potencial delta de Dirac equidistante entre ellos, con la misma intensidad y contenidos en una caja de paredes infinitas. En esta sección se extenderá el análisis, considerando que existe desorden en el sistema, donde las posiciones de las barreras de potencial pueden no estar de manera periódica o con la misma intensidad. Dicha variación ya no permite emplear la matriz  $\mathbf{P}$  para obtener dos relaciones lineales entre los coeficientes  $\psi_0$  y  $\psi_{\mathcal{M}}$  de las  $\mathcal{M}$  barreras de potencial delta de Dirac, debido a la no periodicidad del sistema. Para este nuevo caso tenemos una matriz de transferencia generalizada, que proviene de resolver para cada una de las barreras de potencial, con su respectiva posición e intensidad y multiplicar cada una de estas matrices de transferencia, dando así, una nueva relación

de dispersión, de la cual podemos obtener el espectro de energía de una partícula confinada en un sistema más general.

Para una caja de longitud  $L_z = z_{\mathcal{M}+1}a$  de paredes infinitas en los extremos  $\Lambda_0$  y  $\Lambda_{\mathcal{M}+1}$ , que contiene  $\mathcal{M}$  barreras de potencial delta de Dirac, con intensidades  $\Lambda_1, \Lambda_2, \dots, \Lambda_{j-1}, \Lambda_j, \Lambda_{j+1}, \dots, \Lambda_{\mathcal{M}-1}, \Lambda_{\mathcal{M}}$ , y separación  $z = z_1a, z_2a, \dots, z_{j-1}a, z_ja, z_{j+1}a, \dots, z_{\mathcal{M}-1}a, z_{\mathcal{M}}a, z_{\mathcal{M}+1}a$  (ver Fig. 3.1).

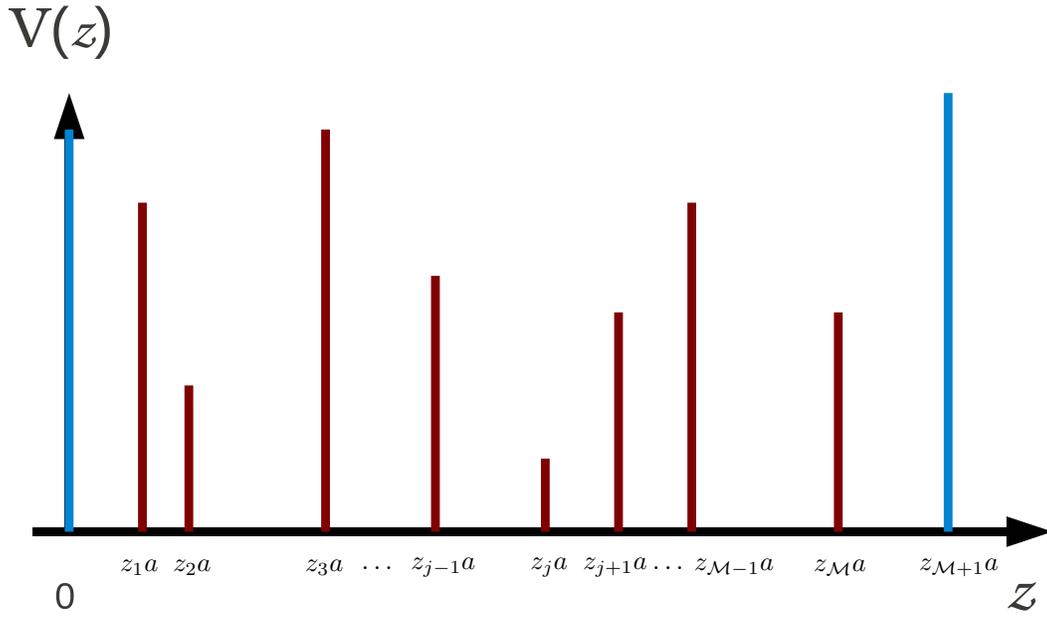


Figura 3.1:  $\mathcal{M}$  barreras de potencial delta de Dirac dentro de una caja de paredes infinitas.

La Ec. de Schrödinger independiente del tiempo donde la barrera de potencial delta de Dirac vale  $V(z) = 0$  en el intervalo  $z_ja \leq z \leq z_{j+1}a$ , es de la siguiente forma

$$\frac{d^2\psi_j(z)}{dz^2} + \frac{2mE\psi_j(z)}{\hbar^2} = 0 \quad (3.1)$$

y la función de onda está dada por

$$\psi_j(z) = A_j e^{i\alpha z} + B_j e^{-i\alpha z} \quad z_j a \leq z \leq z_{j+1} a, \quad j = 0, \dots, \mathcal{M}. \quad (3.2)$$

Aplicando en la Ec. (3.2), la propiedad de continuidad de la función de onda en  $z = z_{j+1} a$  y de la discontinuidad en su derivada como se vió en la sección 2.4.2

$$\psi_j(z_{j+1} a) = \psi_{j+1}(z_{j+1} a), \quad (3.3)$$

$$\psi'_{j+1}(z_{j+1} a) - \psi'_j(z_{j+1} a) = \frac{2m\Lambda_{j+1}}{\hbar^2} \lambda \psi_{j+1}(z_{j+1} a), \quad (3.4)$$

con  $\Lambda_j$  que corresponde a la intensidad de la barrera de potencial dada por la Ec. (2.58). Entonces, obtenemos las siguientes soluciones

$$\begin{aligned} A_j e^{i\alpha z_{j+1} a} + B_j e^{-i\alpha z_{j+1} a} &= A_{j+1} e^{i\alpha z_{j+1} a} + B_{j+1} e^{-i\alpha z_{j+1} a}, \\ A_j i\alpha e^{i\alpha z_{j+1} a} - B_j i\alpha e^{-i\alpha z_{j+1} a} &= A_{j+1} \left( \frac{i\hbar^2 \alpha - 2m\Lambda_{j+1}}{\hbar^2} \right) e^{i\alpha z_{j+1} a} - B_{j+1} \left( \frac{i\hbar^2 \alpha + 2m\Lambda_{j+1}}{\hbar^2} \right) e^{-i\alpha z_{j+1} a} \end{aligned}$$

reescrita en su forma matricial tenemos

$$\mathbb{T} \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = \mathbb{U} \begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

donde

$$\mathbb{T} = \begin{pmatrix} e^{iz_{j+1}a\alpha} & e^{-iz_{j+1}a\alpha} \\ i\alpha e^{iz_{j+1}a\alpha} & -i\alpha e^{-iz_{j+1}a\alpha} \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

y

$$\mathbb{U} = \begin{pmatrix} e^{iz_{j+1}a\alpha} & e^{-iz_{j+1}a\alpha} \\ \left( \frac{i\hbar^2 \alpha - 2m\Lambda_{j+1}}{\hbar^2} \right) e^{iz_{j+1}a\alpha} & - \left( \frac{i\hbar^2 \alpha + 2m\Lambda_{j+1}}{\hbar^2} \right) e^{-iz_{j+1}a\alpha} \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

La matriz inversa de  $\mathbb{T}$  está dada por

$$\mathbb{T}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}e^{iz_{j+1}a\alpha} & -i\frac{1}{2\alpha}e^{-iz_{j+1}a\alpha} \\ \frac{1}{2}e^{iz_{j+1}a\alpha} & i\frac{1}{2\alpha}e^{-iz_{j+1}a\alpha} \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Multiplicando ambos miembros de la Ec. (3.5) por  $\mathbb{T}^{-1}$  se obtiene

$$\begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + i\frac{m\Lambda_{j+1}}{\hbar^2\alpha} & i\frac{m\Lambda_{j+1}}{\hbar^2\alpha}e^{-2iz_{j+1}a\alpha} \\ -i\frac{m\Lambda_{j+1}}{\hbar^2\alpha}e^{2iz_{j+1}a\alpha} & 1 - i\frac{m\Lambda_{j+1}}{\hbar^2\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

de la cual podemos establecer relaciones entre los coeficientes  $A_j$  y  $B_j$  en función de  $A_{j+1}$  y  $B_{j+1}$ , de las funciones de onda  $\psi_j$  y  $\psi_{j+1}$  en términos de la matriz de transferencia de la siguiente manera

$$\mathbb{P}_{j+1}(\phi, z_{j+1}, P_{j+1}) = \begin{pmatrix} 1 + i\frac{P_{j+1}}{\phi} & i\frac{P_{j+1}}{\phi}e^{-2iz_{j+1}\phi} \\ -i\frac{P_{j+1}}{\phi}e^{2iz_{j+1}\phi} & 1 - i\frac{P_{j+1}}{\phi} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

de donde al término  $m\Lambda_{j+1}/\hbar^2\alpha$  se multiplicó por  $a/a$ , llamando a  $\phi = \alpha a$  y a  $P_{j+1} = m\Lambda_{j+1}a/\hbar^2$  que corresponde a la permeabilidad de las barreras de potencial.

Por simplicidad, renombré a cada entrada de la de matriz  $\mathbb{P}_{j+1}$ , de la siguiente forma

$$\mathbb{P}_{j+1}(\phi, z_{j+1}, P_{j+1}) = \begin{pmatrix} v & w \\ w^* & v^* \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

con

$$v = 1 + i\frac{P_{j+1}}{\phi}, \quad w = i\frac{P_{j+1}}{\phi}e^{-2iz_{j+1}\phi} \quad (3.12)$$

y

$$v^* = 1 - i\frac{P_{j+1}}{\phi}, \quad w^* = -i\frac{P_{j+1}}{\phi}e^{-2iz_{j+1}\phi}. \quad (3.13)$$

Al usar recursivamente la Ec. (3.9), se relacionan los coeficientes de las funciones de onda  $\psi_0(z)$  y  $\psi_{\mathcal{M}}(z)$  de las  $\mathcal{M}$  barreras de potencial delta de Dirac, explícitamente en la Ec. (3.9), con  $j = 0$ , la relación entre los coeficientes  $\psi_0(z)$  y  $\psi_1(z)$

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + i\frac{P_1}{\phi} & i\frac{P_1}{\phi}e^{-2iz_1\phi} \\ -i\frac{P_1}{\phi}e^{2iz_1\phi} & 1 - i\frac{P_1}{\phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \mathbb{P}_1(\phi, z_1, P_1) \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad (3.14)$$

con  $j = 1$ , la relación entre los coeficientes  $\psi_1(z)$  y  $\psi_2(z)$

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + i\frac{P_2}{\phi} & i\frac{P_2}{\phi}e^{-2iz_2\phi} \\ -i\frac{P_2}{\phi}e^{2iz_2\phi} & 1 - i\frac{P_2}{\phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \mathbb{P}_2(\phi, z_2, P_2) \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}, \quad (3.15)$$

con  $j = 2$ , la relación entre los coeficientes  $\psi_2(z)$  y  $\psi_3(z)$

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + i\frac{P_3}{\phi} & i\frac{P_3}{\phi}e^{-2iz_3\phi} \\ -i\frac{P_3}{\phi}e^{2iz_3\phi} & 1 - i\frac{P_3}{\phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \mathbb{P}_3(\phi, z_3, P_3) \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix}, \quad (3.16)$$

hasta  $j = \mathcal{M} - 1$ , la relación entre los coeficientes  $\psi_{\mathcal{M}-1}(z)$  y  $\psi_{\mathcal{M}}(z)$

$$\begin{pmatrix} A_{\mathcal{M}-1} \\ B_{\mathcal{M}-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + i\frac{P_{\mathcal{M}}}{\phi} & i\frac{P_{\mathcal{M}}}{\phi}e^{-2iz_{\mathcal{M}}\phi} \\ -i\frac{P_{\mathcal{M}}}{\phi}e^{2iz_{\mathcal{M}}\phi} & 1 - i\frac{P_{\mathcal{M}}}{\phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{\mathcal{M}} \\ B_{\mathcal{M}} \end{pmatrix} = \mathbb{P}_{\mathcal{M}}(\phi, z_{\mathcal{M}}, P_{\mathcal{M}}) \begin{pmatrix} A_{\mathcal{M}} \\ B_{\mathcal{M}} \end{pmatrix}, \quad (3.17)$$

de tal manera que sustituyendo concatenadamente las ecuaciones, por ejemplo la Ec. (3.15) en (3.14), relacionamos los coeficientes  $\psi_0(z)$  y  $\psi_1(z)$  y así recursivamente hasta llegar a relacionar los coeficientes  $\psi_0(z)$  y  $\psi_{\mathcal{M}}(z)$ . Esta relación puede expresarse como

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \mathbb{P}_1(\phi, z_1, P_1) \cdot \mathbb{P}_2(\phi, z_2, P_2) \cdot \dots \cdot \mathbb{P}_{\mathcal{M}}(\phi, z_{\mathcal{M}}, P_{\mathcal{M}}) \begin{pmatrix} A_{\mathcal{M}} \\ B_{\mathcal{M}} \end{pmatrix}. \quad (3.18)$$

Por otra parte, dado que para  $j = 0$  la Ec. (3.2) toma la forma

$$\psi_0(z) = A_0 e^{iaz} + B_0 e^{-iaz}, \quad 0 < z < z_1 a, \quad (3.19)$$

para  $j = \mathcal{M}$ , también la Ec. (3.2) puede reescribirse como

$$\psi_{\mathcal{M}}(z) = A_{\mathcal{M}}e^{i\alpha z} + B_{\mathcal{M}}e^{-i\alpha z}, \quad z_{\mathcal{M}}a < z < z_{\mathcal{M}+1}a \quad (3.20)$$

y debido a las condiciones a la frontera, dadas por  $\psi_0(0) = \psi_{\mathcal{M}}(z_{\mathcal{M}+1}a) = 0$ , las funciones de onda  $\psi_0(z)$  y  $\psi_{\mathcal{M}}(z)$  se pueden expresar como

$$\psi_0(z) = A_0e^{i\alpha z} - A_0e^{-i\alpha z} = A_0(e^{i\alpha z} - e^{-i\alpha z}) \quad (3.21)$$

y

$$\psi_{\mathcal{M}}(z) = A_{\mathcal{M}}e^{i\alpha z} - A_{\mathcal{M}}e^{2i\alpha z_{\mathcal{M}+1}a}e^{-i\alpha z} = A_{\mathcal{M}}(e^{i\alpha z} - e^{i\alpha(2z_{\mathcal{M}+1}a - z)}). \quad (3.22)$$

Comparando las dos ecuaciones anteriores, notamos que  $B_0 = -A_0$  y que  $B_{\mathcal{M}} = -A_{\mathcal{M}}e^{2iz_{\mathcal{M}+1}a}$ , entonces, podemos reescribir a la Ec. (3.18) como

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ -A_0 \end{pmatrix} = \mathbb{P}_1(\phi, z_1, P_1) \cdot \mathbb{P}_2(\phi, z_2, P_2) \cdot \cdots \cdot \mathbb{P}_{\mathcal{M}}(\phi, z_{\mathcal{M}}, P_{\mathcal{M}}) \begin{pmatrix} A_{\mathcal{M}} \\ -A_{\mathcal{M}}e^{2iz_{\mathcal{M}+1}a} \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

estas matrices  $\mathbb{P}_{\mathcal{M}}(\phi, z_{\mathcal{M}})$  son de la forma dada por la Ec. (2.71) y el determinante de cada matriz es igual a la unidad. Al hacer el producto entre matrices de transferencia se obtiene la matriz  $\mathbf{P}(\phi, z_1, z_2, \dots, z_{\mathcal{M}}, P_1, P_2, \dots, P_{\mathcal{M}})$  y conserva las propiedades de cada una de las matrices  $\mathbb{P}_1, \mathbb{P}_2, \dots, \mathbb{P}_{\mathcal{M}}$ , es decir

$$\mathbf{P}(\phi, z_1, z_2, \dots, z_{\mathcal{M}}, P_1, P_2, \dots, P_{\mathcal{M}}) = \begin{pmatrix} V_T & W_T \\ W_T^* & V_T^* \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

y

$$\det \mathbf{P}(\phi, z_1, z_2, \dots, z_{\mathcal{M}}, P_1, P_2, \dots, P_{\mathcal{M}}) = |V_T|^2 - |W_T|^2 = 1, \quad (3.25)$$

recordando que para cualquier matriz, se satisface

$$\det(\mathbb{M}_1\mathbb{M}_2) = \det \mathbb{M}_1 \det \mathbb{M}_2 \quad (3.26)$$

entonces cada una de las entradas de la matriz  $\mathbf{P}$ , corresponden al producto de los respectivos elementos de las  $N$  matrices de transferencia y además  $V_T = \Re(V_T) + i\Im(V_T)$  y  $W_T = \Re(W_T) + i\Im(W_T)$ . Sustituyendo la Ec. (3.24) en la Ec. (3.23), se tiene

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ -A_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_T & W_T \\ W_T^* & V_T^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{\mathcal{M}} \\ -A_{\mathcal{M}}e^{2iz_{\mathcal{M}+1}\phi} \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

al hacer el producto de las matrices tenemos

$$(V_T + W_T^*)A_{\mathcal{M}} - (W_T + V_T^*)A_{\mathcal{M}}e^{2iz_{\mathcal{M}+1}\phi} = 0 \quad (3.28)$$

y como  $A_{\mathcal{M}} \neq 0$ , podemos reescribir la ecuación anterior como

$$(V_T + W_T^*) - (V_T^* + W_T)e^{2iz_{\mathcal{M}+1}\phi} = 0 \quad (3.29)$$

multiplicando ambos miembros de la ecuación por  $e^{-iz_{\mathcal{M}+1}\phi}$  se obtiene

$$V_T e^{-iz_{\mathcal{M}+1}\phi} - V_T^* e^{iz_{\mathcal{M}+1}\phi} - W_T e^{iz_{\mathcal{M}+1}\phi} + W_T^* e^{-iz_{\mathcal{M}+1}\phi} = 0 \quad (3.30)$$

expresando a  $V_T$ ,  $V_T^*$ ,  $W_T$  Y  $W_T^*$  en su forma desarrollada y recordando que  $e^{\pm iz_{j+1}\phi} = \cos(z_{j+1}\phi) \pm i \operatorname{sen}(z_{j+1}\phi)$ , podemos desarrollar a la Ec. (3.30) y después simplificar obtenemos la relación de dispersión generalizada

$$\boxed{(\Re(V_T) + \Re(W_T)) \operatorname{sen}(z_{\mathcal{M}+1}\phi) + (\Im(W_T) - \Im(V_T)) \cos(z_{\mathcal{M}+1}\phi) = 0} \quad (3.31)$$

De la relación de dispersión anterior podemos encontrar el espectro de energías tanto para sistemas

ordenados como desordenados, con  $\mathcal{M}$  barreras de potencial confinados por una caja de paredes infinitas, de permeabilidad  $P_j$  y la distancia entre las barreras de potencial puede estar en su posición ordenada  $z_j a$  o desplazada de su posición ordenada una cantidad pequeña  $z_j a + \Delta a_i$  en el intervalo  $\Delta a_i \in [-\epsilon, \epsilon]$ . Por ejemplo, supongamos un sistema ordenado con una barrera de potencial de permeabilidad  $P = 10$  y localizada en  $z = z_1 a$ , donde  $a/\lambda_0 = 1$  y  $z_0 a = z_2 a$  son las posiciones de las paredes infinitas de la caja, de tal manera que la longitud de la caja será  $L_z = 2$ . Entonces para encontrar la expresión de la relación de dispersión de este sistema retomamos las Ecs. (3.12) y (3.13) con  $n = 0$ , que al sustituir en la Ec. (3.31) se obtiene

$$\left(1 + \frac{P_1}{\phi} \operatorname{sen}(2z_1\phi)\right) \operatorname{sen}(z_2\phi) + \frac{P_1}{\phi} (\cos(2z_1\phi) - 1) \cos(z_2\phi) = 0. \quad (3.32)$$

En este caso como solo se tiene una barrera de potencial, no se requirió hacer el producto entre las matrices de transferencia, pero se puede extender el cálculo si fijamos la longitud de la delta en  $a$  y damos valores aleatorios en  $\Delta a_i$  dentro de un intervalo no mayor al valor en  $a$ , cambiando las posiciones  $z_1, z_2, \dots, z_{\mathcal{M}}, z_{\mathcal{M}+1}$ . De forma semejante, con la permeabilidad de las barreras de potencial  $P_1, P_2, \dots, P_{\mathcal{M}}, P_{\mathcal{M}+1}$ , se hace variar de modo que al multiplicar las  $N$  matrices de transferencia de las  $\mathcal{M}$  barreras de potencial, encontramos las expresiones de  $V_T$  y  $W_T$ , que al sustituir en la Ec. (3.31), obtenemos la relación de dispersión para los valores dados. Los niveles de energía de dichos sistemas se calculan mediante un algoritmo en el lenguaje computacional  $C$ , que encuentra valores para  $\phi$  que satisfagan la ecuación de dispersión que nos da el espectro de energías.

Para un sistema ordenado con barreras de potencial de permeabilidad  $P = 10$  y separación entre las barreras de potencial  $a/\lambda_0 = 1$ , se puede observar que conforme se incrementa el tamaño del sistema, ya sea incrementando el número de barreras de potencial o que la separación entre las barreras de potencial sea grande, aparece la estructura de bandas, esto es, que en los niveles de energía se forman bandas de energía y cada una de estas bandas esta conformada de tal manera que para  $\mathcal{M}$  barreras de potencial hay  $\mathcal{M} + 1$  niveles y entre cada banda hay regiones prohibidas que la separan, como se muestra en la Fig. 3.2. Para una barrera de potencial hay dos niveles en

cada banda, para dos barreras de potencial hay tres niveles en cada banda y para 10 diez barreras de potencial hay 11 niveles en cada banda.

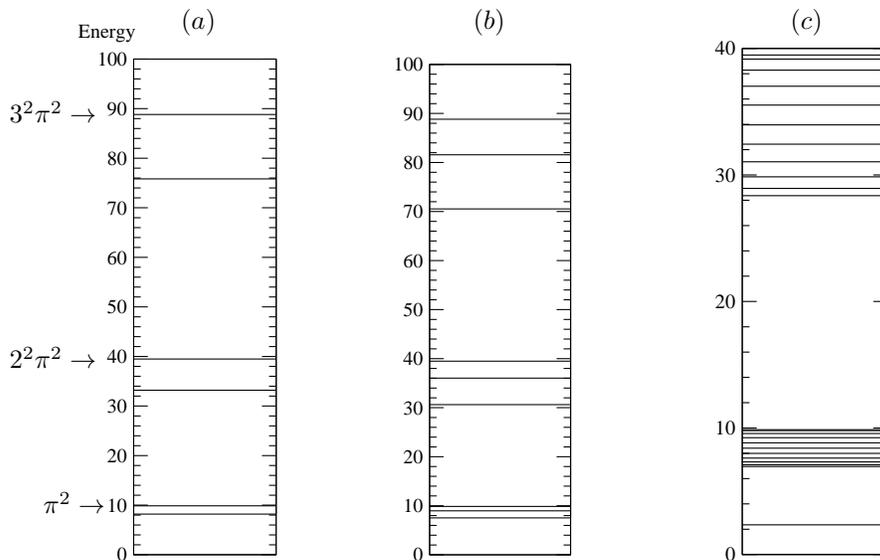


Figura 3.2: Niveles de energía en unidades de  $\hbar^2/2ma^2$  para una partícula dentro de una caja unidimensional con  $M$  potenciales delta, igualmente espaciadas una distancia  $a/\lambda_0 = 1$  e igual intensidad  $P = 10$ : (a)  $M = 1$  , (b)  $M = 2$  y (c)  $M = 10$ .

Conforme se aumenta la permeabilidad de las barreras de potencial, la formación de la estructura de bandas es más notoria y el ancho de las regiones prohibidas es mayor, como el que se muestra en la Fig. 3.3, que es un sistema con diez barreras de potencial y separación entre las barreras de potencial de  $a/\lambda_0 = 1$ , variando la permeabilidad en  $P = 1, 10, 100$ . Si consideramos el caso en que  $P \rightarrow \infty$  el ancho de banda que era continuo cuando  $P = 0$  (caso de una partícula confinada en una caja de ancho  $a$ ), se discretiza debido a que no se presenta tunelaje y los niveles de energía para bosones toma los valores dados por la Ec. (2.96), correspondientes a los de una partícula confinada en un pozo de potencial de ancho  $a$  y paredes infinitas. También se puede observar que hay niveles fijos como se mencionó en la sección 2.4.2 y están dados por la Ec. (2.96).

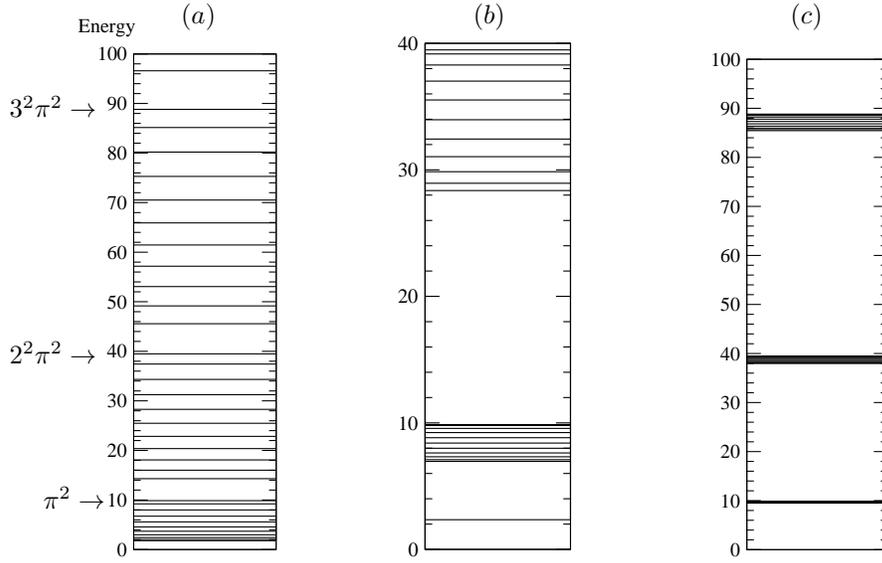


Figura 3.3: Niveles de energía en unidades de  $\hbar^2/2ma^2$  para una partícula dentro de una caja unidimensional con 10 potenciales delta, igualmente espaciadas una distancia  $a/\lambda_0 = 1$ . La intensidad de las deltas son: (a)  $P = 1$ , (b)  $P = 10$  y (c)  $P = 100$ .

Si se varía la posición entre las barreras de potencial, se mantiene el número de niveles de energía pero ya no hay niveles fijos y entre cada banda de energía aumenta el desorden. Por ejemplo, en la Fig. 3.4 se muestra un sistema con 10 barreras de potencial, de permeabilidad  $P = 10$  y se varía la distancia entre las barreras de potencial de su posición ordenada  $a/\lambda_0 = 1$  en un número aleatorio  $\Delta a_i$  dentro de los intervalos a)  $\Delta a_i \in [-0.001, 0.001]$ , b)  $\Delta a_i \in [-0.01, 0.01]$  y c)  $\Delta a_i \in [-0.1, 0.1]$ , que equivalen a una variación del 0.1, 1 y 10 por ciento respectivamente. Aquí se puede observar que mientras mayor es la variación alrededor de su posición ordenada, aumenta el desorden perdiendo entonces la estructura de bandas.

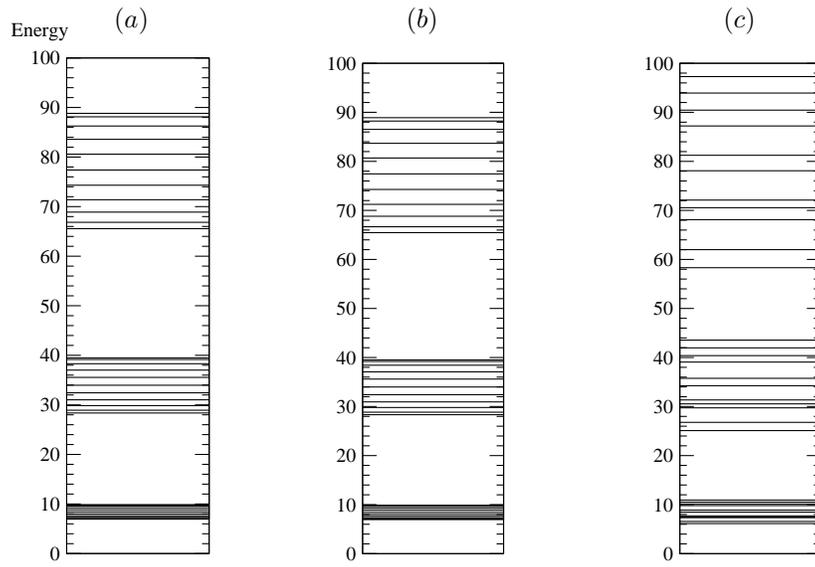


Figura 3.4: Niveles de energía en unidades de  $\hbar^2/2ma^2$  para un sistema con 10 barreras de potencial, permeabilidad de las barreras de potencial  $P = 10$  y variación de la distancia entre las barreras de potencial alrededor de su posición ordenada  $a/\lambda_0 = 1$  en los intervalos (a)  $\Delta a_i \in [-0.001, 0.001]$ , (b)  $\Delta a_i \in [-0.01, 0.01]$  y (c)  $\Delta a_i \in [-0.1, 0.1]$ .

## Capítulo 4

# Propiedades termodinámicas

En la primera sección de este capítulo presentaré de manera breve, cómo calcular algunos resultados ya reportados en la literatura de un gas ideal de bosones en tres dimensiones [34]-[36], como son: el número de partículas  $N$ , la temperatura crítica  $T_0$ , la energía interna  $U$ , el potencial químico  $\mu$  y el calor específico  $C_V$  en función de la temperatura.

En la segunda sección emplearé el mismo método, aplicándolo a nuestro sistema de  $N$  bosones sin interacción que están confinados por  $\mathcal{M}$  barreras de potencial de permeabilidad  $P$ , en una caja  $L_x \times L_y \times L_z$ , de longitud infinita en las direcciones  $L_x$  y  $L_y$  y de longitud  $L_z = (\mathcal{M} + 1)a$  en la dirección  $z$ , análogo a los trabajos teóricos realizados por R. K. Pathria y colaboradores, en un gas ideal de Bose confinado en geometrías de “películas delgadas” [37]-[39].

### 4.1. Generalidades de un gas ideal de bosones en 3D

En el ensamble del gran canónico la termodinámica de un sistema dado, se deriva a partir de la gran función de partición, donde el gran potencial termodinámico es

$$\Omega = \Omega(T, \mu, V) \quad (4.1)$$

$$= -PV = -k_B T \ln Z \quad (4.2)$$

donde la gran función de partición  $Z$  esta definida como

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta(H - \mu N)}, \quad (4.3)$$

con  $\mu$  el potencial químico y la constante  $\beta = 1/k_B T$ .

Consideremos el caso ideal con el siguiente Hamiltoniano

$$H_0 = \sum_k^{\infty} \varepsilon_k b_k^\dagger b_k, \quad (4.4)$$

con  $b_k^\dagger$  y  $b_k$  los operadores de creación y aniquilación en el estado  $k$  respectivamente y  $|n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle$  son eigenestados de  $H_0$ :

$$H_0 |n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \varepsilon_i n_i, \quad (4.5)$$

aquí  $\varepsilon_i$  es la energía del  $i$ -ésimo nivel de una partícula.

Por otra parte llamemos a

$$N = \sum_{k=1}^{\infty} b_k^\dagger b_k, \quad (4.6)$$

entonces  $N$  aplicada a los eigenestados

$$N |n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} n_k \quad (4.7)$$

de tal manera que la gran función de partición es

$$Z = \sum_{n_1 n_2 \dots n_\infty} \langle n_1 n_2 \dots n_k | e^{-\beta(H_0 - \mu N)} | n_1 n_2 \dots n_\infty \rangle \quad (4.8)$$

$$Z = \sum_{n_1 n_2 \dots n_\infty} \langle n_1 n_2 \dots n_k | e^{-\beta(\sum_k \varepsilon_k n_k - \mu \sum_k n_k)} | n_1 n_2 \dots n_\infty \rangle \quad (4.9)$$

$$= \sum_{n_1} \langle n_1 | e^{-\beta(\varepsilon_1 n_1 - \mu n_1)} | n_1 \rangle \dots \sum_{n_\infty} \langle n_\infty | e^{-\beta(\varepsilon_\infty n_\infty - \mu n_\infty)} | n_\infty \rangle \quad (4.10)$$

$$= \prod_k^{\infty} T_r e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)n_k} \quad (4.11)$$

para bosones  $n_k = 1, 2, \dots$

$$Z = \prod_{k=1}^{\infty} \sum_{n_k=0}^{\infty} e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)n_k} \quad (4.12)$$

$$Z = \prod_{k=1}^{\infty} (1 - e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)})^{-1}, \quad (4.13)$$

siempre que  $\varepsilon_k - \mu \geq 0 \forall k$ , con  $z = e^{\beta\mu}$  la fugacidad.

Entonces el gran potencial termodinámico es

$$\Omega = -k_B T \ln Z \quad (4.14)$$

$$= -k_B T \ln \prod_{k=1}^{\infty} (1 - e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)})^{-1} \quad (4.15)$$

$$= -k_B T \sum_{k=1}^{\infty} \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)})^{-1}, \quad (4.16)$$

$$(4.17)$$

a partir del cual podemos obtener la termodinámica del sistema, como el número de partículas, la energía interna, el calor específico, la fugacidad, entre otras.

Por ejemplo, el número de partículas se puede obtener a través de la siguiente relación:

$$N = z \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial z} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon_i} - 1}, \quad (4.18)$$

y dado que el número total  $N$  de bosones se conserva, podemos escribir al número de partículas como la suma de las partículas que se encuentran en el estado base  $N_0$  más las partículas que se encuentran en los estados excitados  $N_e$ , es decir,

$$N = N_0 + N_e = N_0 + \sum_{i \neq 0}^{\infty} \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon_i} - 1}. \quad (4.19)$$

El límite termodinámico (L. T.), donde la longitud del sistema  $L \rightarrow \infty$  y el número de partículas  $N \rightarrow \infty$ , tal que la densidad de número  $\frac{N}{L^3} \equiv \eta = cte$ , nos permite reemplazar la suma de la Ec. (4.19) mediante las siguientes integrales

$$N_e = \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3 \int dk_x \int dk_y \int dk_z \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon} - 1}, \quad (4.20)$$

En este caso, la energía  $\varepsilon$  se obtiene de resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en las tres direcciones, tras aplicar las condiciones de frontera apropiadas para una partícula libre en una caja de potencial impenetrable, dando

$$\varepsilon \equiv \varepsilon_k = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (4.21)$$

con

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L_y} n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L_z} n_z, \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots, \quad (4.22)$$

en el cual;  $k_x, k_y, k_z$  son tres números de onda independientes, de tal manera que al sustituir (4.21) en la Ec. (4.20) tenemos

$$N_e = \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3 \int dk_x \int dk_y \int dk_z \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)} - 1}. \quad (4.23)$$

Para evaluar la integral, el número de estados con vector de onda que se encuentran en el primer octante, dada la simetría esférica de (4.21), está dada por el volumen de la esfera de radio  $k$ ,

$$\begin{aligned}
 W &= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{4}{3}\pi |k|^3 \\
 &= \frac{L^3}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{3/2} \\
 &= \frac{V}{4\pi^2} \frac{2}{3} \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{3/2}, \tag{4.24}
 \end{aligned}$$

al derivar respecto a  $\varepsilon$  tenemos la densidad de estados de energía, es decir, el número de estados por unidad de energía

$$\rho(\varepsilon) = \frac{dW}{d\varepsilon} \tag{4.25}$$

$$\rho(\varepsilon) = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \varepsilon^{1/2}, \tag{4.26}$$

al sustituir en la Ec. (4.20), obtenemos la siguiente expresión para el número de partículas

$$N_e = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2}}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon, \tag{4.27}$$

con el siguiente el cambio de variable  $x \equiv \beta\varepsilon$ ,  $dx = \beta d\varepsilon$ , la ecuación anterior toma la siguiente

forma

$$N_e = \frac{V}{4\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} (k_B T)^{3/2} \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{z^{-1}e^x - 1} dx, \quad (4.28)$$

donde podemos identificar a la función de Bose definida por

$$g_\sigma(z) \equiv \frac{1}{\Gamma(\sigma)} \int_0^\infty \frac{x^{\sigma-1}}{z^{-1}e^x - 1} dx, \quad (4.29)$$

de este modo escribimos a  $N_e$  en términos de la función de Bose

$$N_e = \frac{V}{4\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} (k_B T)^{3/2} \Gamma(3/2) g_{3/2}(z). \quad (4.30)$$

Al enfriar el gas a temperaturas más bajas, el valor de  $z$  se incrementa gradualmente hasta que finalmente es igual a uno, en este punto el potencial químico  $\mu$  se convierte en cero. La temperatura a la que esto sucede define la temperatura crítica  $T_0$ , por lo tanto de la ecuación anterior podemos despejar a  $T_0$  obteniendo

$$k_B T_0 = \left( \frac{N}{\frac{V}{4\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \Gamma(3/2) g_{3/2}(1)} \right)^{2/3} = \frac{(2\pi)^{4/3} \hbar^2 \eta^{2/3}}{[\Gamma(3/2) \zeta(3/2)]^{2/3} 2m} \simeq 3.31 \hbar^2 \eta^{2/3} / m, \quad (4.31)$$

con  $\eta = N/V$  la densidad de número y  $\zeta(3/2) = g_{3/2}(1)$  la función Zeta de Riemann de  $3/2$ .

Pero, ¿qué ocurre debajo de la  $T_0$ ?, tan pronto el potencial químico  $\mu$  se hace cero, el número de partículas en el estado cuántico de mínima energía se hace infinito. Más precisamente, podemos decir que, de un total de  $N$  partículas en el gas, un número macroscópico  $N_0$  ocupan el estado cuántico con energía  $\varepsilon = 0$ . Por un número macroscópico queremos decir que  $N_0$  es proporcional al volumen del sistema, de modo que hay una fracción finita de todas las partículas,  $N_0/N$  que se

encuentran en el estado cuántico. Recordando que en el límite termodinámico  $V \rightarrow \infty$ , la distribución de Bose-Einstein predice una ocupación del estado  $\varepsilon = 0$  para el número de partículas en estado base como

$$N_0 = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1}. \quad (4.32)$$

Reescribiendo la ecuación anterior, obtenemos

$$\mu = -k_B T \ln\left(1 + \frac{1}{N_0}\right) \sim -k_B T \frac{1}{N_0}, \quad (4.33)$$

si una fracción finita de las partículas están en el estado base, entonces como  $V \rightarrow \infty$ , tendremos que  $N_0 \rightarrow \infty$ , de modo que  $\mu \rightarrow 0$ . Por lo tanto por debajo de la temperatura crítica  $T_0$  de la condensación Bose-Einstein, el potencial químico es cero, la fugacidad  $z = 1$  y debemos tomar a  $\varepsilon = 0$ , de tal manera que el número de partículas se cuenta separadamente de la siguiente forma

$$N = N_0 + \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} (k_B T_0)^{3/2} \Gamma(3/2) g_{3/2}(1). \quad (4.34)$$

La energía interna  $U$  para el gas ideal de bosones en 3D está dada por [35]

$$\begin{aligned} U &\equiv -\left(\frac{\partial}{\partial\beta} \ln \mathcal{Z}\right)_{z,V} \\ &= k_B T^2 \left\{ \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{PV}{k_B T} \right) \right\}_{z,V} \\ &= k_B T^2 V g_{5/2}(z) \left\{ \frac{d}{dT} \left( \frac{1}{\lambda^3} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (4.35)$$

entonces

$$U = \frac{3}{2} k_B T \frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z) \quad (4.36)$$

con  $\lambda = h/(2\pi m k_B T)^{1/2}$  la longitud de onda térmica .

Ahora bien, para obtener el calor específico a volumen constante se deriva la energía interna respecto a la temperatura,

$$C_V = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V. \quad (4.37)$$

Considere los siguientes dos casos: I) que la temperatura  $T$  es mayor a la temperatura crítica  $T_0$  y II) que la temperatura  $T$  es menor o igual a la temperatura crítica  $T_0$ . De la siguiente manera.

I)  $T > T_0 \Rightarrow N_0 = 0$

$$C_V = \frac{\partial}{\partial T} \left[ (3/2)V \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (k_B T)^{5/2} g_{5/2}(z) \right] \quad (4.38)$$

$$= (3/2)V \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \left[ (5/2)(k_B T)^{3/2} k_B g_{5/2}(z) + (k_B T)^{5/2} g_{3/2}(z) \frac{1}{z} \frac{\partial z}{\partial T} \right]. \quad (4.39)$$

El término de la derivada de la fugacidad respecto a  $T$ , se calcula al derivar la Ec. (4.30) respecto a  $T$  y como el número total de partículas es constante, entonces  $N$  no depende de  $T$ , por lo tanto  $\frac{\partial N}{\partial T} = 0$ , por lo que

$$0 = \frac{\partial N}{\partial T} = V \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \left[ 3/2(k_B T)^{1/2} k_B g_{3/2}(z) + (k_B T)^{3/2} g_{1/2}(z) \frac{1}{z} \frac{\partial z}{\partial T} \right], \quad (4.40)$$

de la ecuación anterior podemos despejar a

$$\frac{1}{z} \frac{\partial z}{\partial T} = \frac{(-1)(3/2)(k_B T)^{1/2} k_B g_{3/2}(z)}{(k_B T)^{3/2} g_{1/2}(z)}, \quad (4.41)$$

entonces al sustituir en la Ec. (4.39) y simplificar términos, podemos reescribir al calor específico como

$$\frac{C_V}{N_e k_B} = 3/2 \left[ 5/2 \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - 3/2 \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)} \right]. \quad (4.42)$$

II)  $T \leq T_0$ , como  $\mu = 0 \Rightarrow z = 1$

$$\begin{aligned}
C_V &= \frac{\partial}{\partial T} \left[ (3/2)k_B T g_{5/2}(1) \frac{V}{\lambda^3} \right] \\
&= (3/2)g_{5/2}(1) \left[ k_B \frac{V}{\lambda^3} + (3/2)k_B V \left( \frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{1/2} \left( \frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right) \right] \\
&= (3/2)g_{5/2}(1)k_B \left[ \frac{V}{\lambda^3} + (3/2) \frac{V}{\lambda^3} \right]
\end{aligned} \tag{4.43}$$

entonces

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= (15/4) \frac{V}{\lambda^3} \frac{g_{5/2}(1)}{\lambda_0^3 g_{3/2}(1)} \\
&= (15/4) \left( \frac{\lambda_0}{\lambda} \right)^3 \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)} \\
&= (15/4) \left( \frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)}.
\end{aligned} \tag{4.44}$$

En la Fig. 4.1 se muestra el calor específico  $C_V/Nk_B$  como función de la temperatura  $T/T_0$ , para un gas ideal de bosones en 3D (línea negra) y en 2D (línea roja), como podemos observar en el caso de 3D, hay una cúspide en  $T = T_0$  a esta temperatura ocurre una transición de fase conocida como Condensación Bose-Einstein (CBE) [15, 16], predicha por Einstein en 1925, la cual está definida como la ocupación macroscópica y espontánea de partículas al estado de mínima energía. Este estado nuevo de agregación de la materia ocurre en sistemas de partículas bosónicas con espín total múltiplo entero de  $\hbar$  [13] y cualquier número de ellas pueden ocupar alguno de sus niveles de energía [14]. También podemos observar que la cúspide separa a la gráfica en dos secciones:  $T \leq T_0$  con un crecimiento monótono de  $(T/T_0)^{3/2}$  y  $T > T_0$  disminuyendo monótonamente hacia el valor clásico de 3/2 como lo indica la Ec. (4.42)

En el caso de 2D, el número de partículas en el estado base para una temperatura crítica  $T_0 > 0$

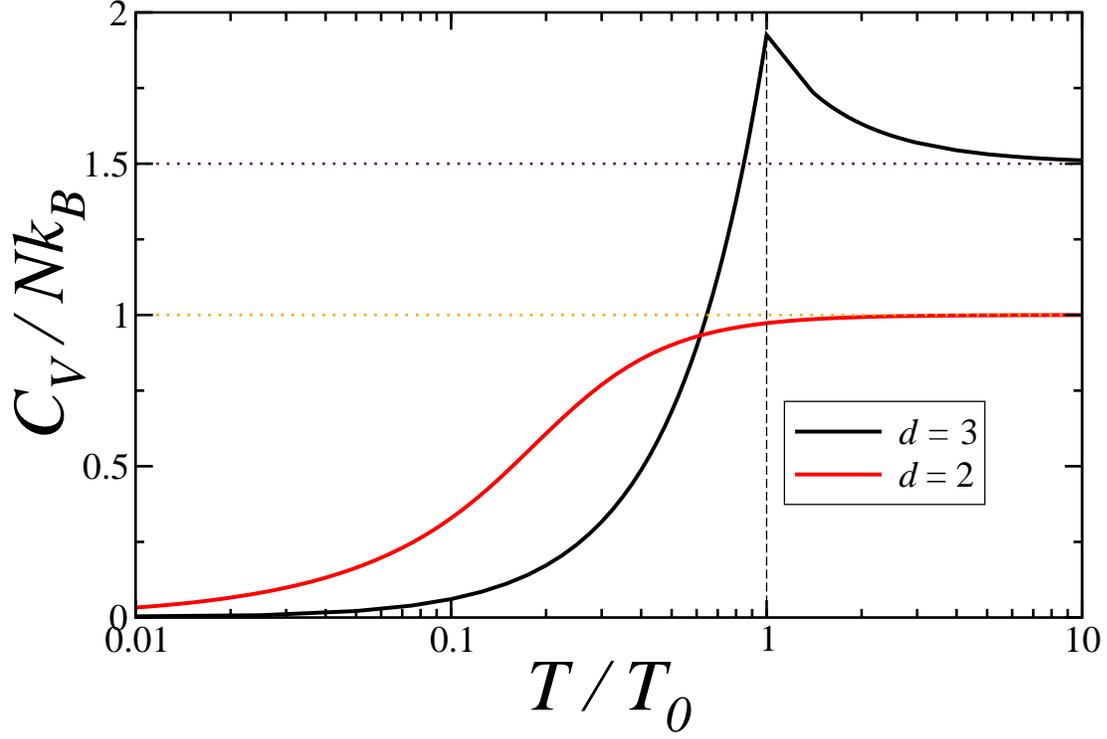


Figura 4.1: Calor específico de un gas ideal de bosones en 3D y 2D

es cero y  $\mu = 0$  para toda temperatura  $T \leq T_0$  y el número de partículas en los estados excitados está dada por la siguiente expresión

$$\begin{aligned}
 N &= N_e(T_0) \\
 &= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \int dk_x \int dk_y \frac{1}{e^{\beta_c(\varepsilon-\mu)} - 1} \\
 &= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \frac{2\pi m}{\hbar^2} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{1}{e^{\beta_c(\varepsilon-\mu)} - 1},
 \end{aligned} \tag{4.45}$$

de tal manera que la densidad de número viene dada por

$$\frac{N}{L^2} = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{2\pi m k_B T_0}{\hbar^2} \int_0^\infty \frac{dx}{e^x - 1}, \quad (4.46)$$

como se observa la integral diverge y la única forma de que  $N/L^2$  sea constante es que  $k_B T_0 = 0$  entonces no hay  $T_0 > 0$  y por lo tanto no existe la CBE.

## 4.2. Termodinámica de un gas ideal de bosones entre planos permeables dentro de una caja

De manera análoga a la sección anterior se calculará el calor específico  $C_V/Nk_B$  como función de la temperatura  $T/T_0$  para un sistema de  $N$  bosones sin interacción, confinados por una caja de longitud  $L = L_x \times L_y \times L_z$ . En la dirección  $x$  y  $y$  son infinitas y en la dirección  $z$  es de longitud  $L_z = (\mathcal{M} + 1)a$  con  $\mathcal{M}$  barreras de potencial que tienen intensidad  $P$ . Estas barreras de potencial pueden o no estar equidistantes entre ellas o se pueden simular vacancias al anular la intensidad de algunas de las barreras de potencial en el arreglo. En particular, nos interesa entender qué efecto causan estas vacancias en la dirección  $z$ , por ejemplo, si es que dichas vacancias propician una CBE, si es así a qué temperatura ocurre.

### 4.2.1. Número de partículas

El número total de partículas  $N$  está dado por la Ec. (4.18), considerando las tres direcciones tenemos la siguiente expresión para

$$N = \sum_{k_x=-\infty}^{\infty} \sum_{k_y=-\infty}^{\infty} \sum_{k_z=-\infty}^{\infty} \frac{1}{z^{-1} e^{\beta(\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_z})} - 1}, \quad (4.47)$$

análogamente podemos separar a las partículas que se encuentran en el estado base y las que se encuentran en los estados excitados, de la siguiente manera

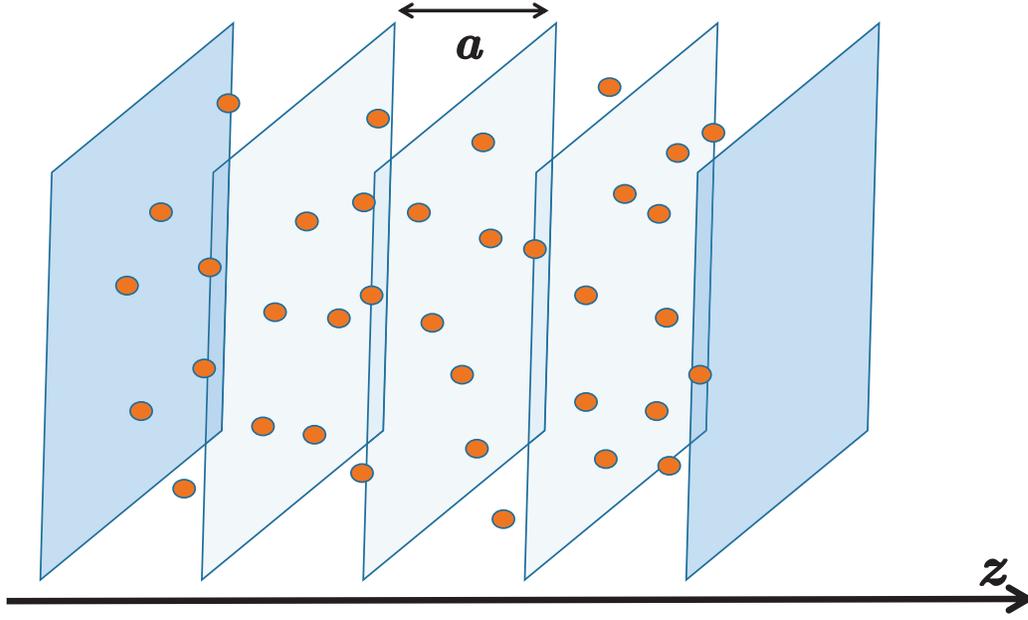


Figura 4.2: Barreras de potencial delta de Dirac en la dirección  $z$ , e infinito en las direcciones  $x$  y  $y$

$$\begin{aligned}
N &= \sum_{k_x=-\infty}^{\infty} \sum_{k_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta(\varepsilon_{k_x}+\varepsilon_{k_y}+\varepsilon_{k_{z0}})} - 1} + \sum_{k_x=-\infty}^{\infty} \sum_{k_y=-\infty}^{\infty} \sum_{k_z \neq 0}^{\infty} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta(\varepsilon_{k_x}+\varepsilon_{k_y}+\varepsilon_{k_z})} - 1} \\
&= \sum_{k_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta(\varepsilon_{k_{x0}}+\varepsilon_{k_y}+\varepsilon_{k_{z0}})} - 1} + \sum_{k_x \neq 0}^{\infty} \sum_{k_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta(\varepsilon_{k_x}+\varepsilon_{k_y}+\varepsilon_{k_{z0}})} - 1} \\
&+ \sum_{k_x=-\infty}^{\infty} \sum_{k_y=-\infty}^{\infty} \sum_{k_z \neq 0}^{\infty} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta(\varepsilon_{k_x}+\varepsilon_{k_y}+\varepsilon_{k_z})} - 1} \\
&= \frac{1}{z^{-1}e^{\beta(\varepsilon_{k_{x0}}+\varepsilon_{k_{y0}}+\varepsilon_{k_{z0}})} - 1} + \sum_{k_y \neq 0}^{\infty} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta(\varepsilon_{k_{x0}}+\varepsilon_{k_y}+\varepsilon_{k_{z0}})} - 1} + \sum_{k_x \neq 0}^{\infty} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta(\varepsilon_{k_x}+\varepsilon_{k_{y0}}+\varepsilon_{k_{z0}})} - 1} + \\
&\sum_{k_x \neq 0}^{\infty} \sum_{k_y \neq 0}^{\infty} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta(\varepsilon_{k_x}+\varepsilon_{k_y}+\varepsilon_{k_{z0}})} - 1} + \sum_{k_x=-\infty}^{\infty} \sum_{k_y=-\infty}^{\infty} \sum_{k_z \neq 0}^{\infty} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta(\varepsilon_{k_x}+\varepsilon_{k_y}+\varepsilon_{k_z})} - 1}. \tag{4.48}
\end{aligned}$$

Aquellas que se encuentran en el estado base tienen energía

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_{k_{x_0}} + \varepsilon_{k_{y_0}} + \varepsilon_{k_{z_0}}(P, a, \mathcal{M}), \quad (4.49)$$

donde la dirección  $x$  y  $y$  corresponden a la energía de una partícula libre y en la dirección  $z$  a una partícula en una caja unidimensional finita, que contiene un número finito  $\mathcal{M}$  de barreras de potencial de permeabilidad  $P \rightarrow P \pm \Delta P_i$ , donde  $\Delta P_i$  es un número aleatorio en el intervalo  $\Delta P_i \in [-\epsilon, \epsilon]$  que equivale a una variación en el desorden y espaciados entre ellos por  $a$  o variando en una pequeña cantidad de su respectiva posición ordenada  $z_j a \rightarrow a \pm \Delta a_i$ , donde  $\Delta a_i$  es un número aleatorio en el intervalo  $\Delta a_i \in [-\epsilon, \epsilon]$  que equivale a una variación en el desorden, modificando así su periodicidad.

Considerando el límite termodinámico (LT)

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \varepsilon_{k_{x_0}} = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\hbar^2}{2mL^2} (2\pi)^2 \rightarrow 0, \quad (4.50)$$

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \varepsilon_{k_{y_0}} = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\hbar^2}{2mL^2} (2\pi)^2 \rightarrow 0 \quad (4.51)$$

por lo que sólo  $\varepsilon_{k_{z_0}}(P, a, \mathcal{M})$  contribuye a  $\varepsilon_0$ .

Para obtener la densidad de número, dividimos entre el volumen ( $V = L^2(\mathcal{M} + 1)a$ ) y retomando el L. T., hacemos tender las sumas a integrales de la siguiente forma  $\sum_k \xrightarrow{LT} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk$ , en la Ec.

(4.48), los tres primeros términos valen cero, entonces

$$\begin{aligned} \frac{N}{V} &= \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{(\mathcal{M}+1)a} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta(\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_{z_0}})} - 1} dk_x dk_y \right. \\ &\quad \left. + \sum_{k_z \neq 0} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta(\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_{z_0}})} - 1} dk_x dk_y \right] \end{aligned} \quad (4.52)$$

$$= \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{(\mathcal{M}+1)a} \left[ \sum_{k_z=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta(\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_z})} - 1} dk_x dk_y \right]. \quad (4.53)$$

haciendo uso de coordenadas polares circulares, podemos evaluar las integrales en las direcciones  $k_x$  y  $k_y$ , de la siguiente forma

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{(\mathcal{M}+1)a} \sum_{k_z=0}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{k_{\perp} dk_{\perp} d\theta}{z^{-1}e^{\beta\hbar^2 k_{\perp}^2/2m} - 1} \quad (4.54)$$

definiendo a  $k_{\perp}^2 = k_x^2 + k_y^2$  y  $\tan \theta = k_y/k_x$ ,

efectuando el siguiente cambio de variable

$$u \equiv \frac{\beta\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m}, \quad du = \frac{\beta\hbar^2 k_{\perp}}{m} dk_{\perp}, \quad (4.55)$$

la expresión (4.54) puede escribirse como

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{(\mathcal{M}+1)a} 2\pi \left( \frac{m}{\hbar^2\beta} \right) \sum_{k_z=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{du}{z^{-1}e^u - 1}, \quad (4.56)$$

donde la integral de la ecuación anterior tiene la forma de la función de Bose, dada por la Ec. (4.29),

de tal manera que podemos escribir a la Ec. (4.56) como

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{(\mathcal{M} + 1)a} \frac{2\pi m}{\hbar^2 \beta} \sum_{k_z=0}^{\infty} g_1(z) \Gamma(1) \quad (4.57)$$

$$= -\frac{1}{(\mathcal{M} + 1)a} \frac{m}{\hbar^2 \beta 2\pi} \sum_{k_z=0}^{\infty} \ln(1 - z), \quad (4.58)$$

con  $g_1(z) = -\ln(1 - z)$  y que  $\Gamma(1) = 1$ . Empleando la densidad de partículas para el caso de un gas ideal de bosones en 3D

$$\eta_{3D} = \frac{N}{L^2(\mathcal{M} + 1)a} = \frac{\zeta(3/2)}{\lambda_0^3}, \quad (4.59)$$

adimensionalizamos (4.58) reescribiéndola como

$$1 = -\frac{\lambda_0^3}{\zeta(3/2)(\mathcal{M} + 1)a} \frac{mk_B T}{2\pi \hbar^2} \sum_{k_z=0}^{\infty} \ln(1 - z) \quad (4.60)$$

o equivalentemente

$$1 = -\frac{\lambda_0}{\zeta(3/2)(\mathcal{M} + 1)a} \frac{T}{T_0} \sum_{k_z=0}^{\infty} \ln(1 - z), \quad (4.61)$$

recordando que la longitud de onda térmica en términos de la temperatura crítica está dada como

$$\lambda_0^2 = 2\pi \hbar^2 / mk_B T_0. \quad (4.62)$$

### 4.2.2. Energía interna

La energía interna está dada por

$$U = \sum_{k_x=-\infty}^{\infty} \sum_{k_y=-\infty}^{\infty} \sum_{k_z=0}^{\infty} \frac{\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_z}}{e^{\beta(\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_z} - \mu)} - 1}. \quad (4.63)$$

De la misma manera que en la sección anterior en la dirección  $k_x$  y  $k_y$  reemplazamos las sumas por

integrales, al dividir por el volumen y tomado el L. T., se obtiene

$$U = \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \left( \frac{L}{2\pi} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \frac{\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_z}}{e^{\beta(\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_z} - \mu)} - 1}. \quad (4.64)$$

Para evaluar la integral llamamos a  $k_{\perp}^2 = k_x^2 + k_y^2$  y reescribimos la energía interna como

$$U = \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \left( \frac{L}{2\pi} \right)^2 2\pi \int_0^{\infty} dk_{\perp} k_{\perp} \frac{\varepsilon_{k_{\perp}} + \varepsilon_{k_z}}{e^{\beta(\varepsilon_{k_{\perp}} + \varepsilon_{k_z} - \mu)} - 1}, \quad (4.65)$$

con el siguiente cambio de variable

$$\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} = \frac{\hbar^2}{2m} k_{\perp}^2, \quad d\varepsilon_{\perp} = \frac{\hbar^2}{m} k_{\perp} dk_{\perp} \quad (4.66)$$

tenemos

$$U = \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \frac{L^2}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2} \int_0^{\infty} d\varepsilon_{\perp} \frac{\varepsilon_{k_{\perp}} + \varepsilon_{k_z}}{e^{\beta(\varepsilon_{k_{\perp}} + \varepsilon_{k_z} - \mu)} - 1}, \quad (4.67)$$

tras aplicar otro cambio de variable,

$$x = \beta\varepsilon_{\perp}, \quad dx = \beta d\varepsilon_{\perp} \quad (4.68)$$

escribimos (4.67) como

$$U = \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \frac{L^2}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2} \left[ \frac{1}{\beta^2} \int_0^{\infty} dx \frac{x}{e^x e^{\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} - 1} + \frac{1}{\beta} \int_0^{\infty} dx \frac{\varepsilon_{k_z}}{e^x e^{\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} - 1} \right]. \quad (4.69)$$

entonces podemos reescribir a la Ec. (4.69) en términos de la función de Bose como

$$U = \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \frac{L^2}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2} \left[ (k_B T)^2 g_2 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \Gamma(2) + k_B T \varepsilon_{k_z} g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \Gamma(1) \right].$$

Multiplicando por  $1/Nk_B T$ , tenemos

$$\frac{U}{Nk_B T} = \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \frac{L^2 m}{2\pi\hbar^2 N} \left[ k_B T g_2 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) + \varepsilon_{k_z} g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \right]. \quad (4.70)$$

Consideremos nuevamente que la densidad de partículas de nuestro sistema corresponde a la de un gas de bosones libres en 3D, dada por la Ec. (4.59). Para ello, multiplicaremos el lado derecho de (4.70) por  $(\mathcal{M}+1)a/(\mathcal{M}+1)a$  y  $k_B T_0/k_B T_0$ , después de una serie de cálculos y agrupar términos semejantes tenemos

$$\begin{aligned} \frac{U}{Nk_B T} &= \frac{1}{\zeta(3/2)} \frac{\lambda_0}{(\mathcal{M}+1)a} \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \left[ \frac{T}{T_0} g_2 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) + \frac{\varepsilon_{k_z} - \mu}{k_B T_0} g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \right] \\ &= \frac{1}{\zeta(3/2)} \frac{\sqrt{4\pi}}{(\mathcal{M}+1)} \gamma^{1/2} \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \left[ \frac{T}{T_0} g_2 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) + \gamma g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \right] \\ &= \frac{1}{\zeta(3/2)} \frac{\sqrt{4\pi}}{(\mathcal{M}+1)} \gamma^{1/2} \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \left[ \frac{T}{T_0} g_2 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) + \gamma g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.71)$$

con

$$\gamma = \frac{1}{4\pi} \frac{\lambda_0^2}{a^2}. \quad (4.72)$$

### 4.2.3. Calor específico

Al derivar la Ec. (4.71) respecto a la temperatura  $T$  a volumen constante, obtenemos el calor específico

$$C_V = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V. \quad (4.73)$$

entonces

$$\begin{aligned}
C_V &= \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \frac{L^2 m}{2\pi \hbar^2} \left[ 2k_B^2 T g_2 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) + k_B \varepsilon_{k_z} g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \right. \\
&+ (k_B T)^2 g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \left( \frac{1}{k_B T^2} (\varepsilon_{k_z} - \mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \\
&\left. + \frac{\varepsilon_{k_z} T e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)}}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)}} \left( \frac{1}{k_B T^2} (\varepsilon_{k_z} - \mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \right], \tag{4.74}
\end{aligned}$$

donde reconocemos en el último sumando la función de Bose de orden cero, definida por

$$g_0 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) = \frac{e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)}}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)}}, \tag{4.75}$$

de modo que

$$\begin{aligned}
C_V &= \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \frac{L^2 m}{2\pi \hbar^2} \left[ 2k_B^2 T g_2 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) + k_B \varepsilon_{k_z} g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \right. \\
&+ (k_B T)^2 g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \left( \frac{1}{k_B T^2} (\varepsilon_{k_z} - \mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \\
&\left. + \varepsilon_{k_z} T g_0 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \left( \frac{1}{k_B T^2} (\varepsilon_{k_z} - \mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \right]. \tag{4.76}
\end{aligned}$$

Para adimensionalizar  $C_V$ , multiplicamos por  $1/Nk_B$  y el lado derecho de la ecuación anterior por  $a/a$ , obteniendo

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{aL^2 m}{aNk_B 2\pi \hbar^2} \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \left[ 2k_B^2 T g_2 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) + k_B \varepsilon_{k_z} g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \right. \\
&+ (k_B T)^2 g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \left( \frac{1}{k_B T^2} (\varepsilon_{k_z} - \mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \\
&\left. + \varepsilon_{k_z} T g_0 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \left( \frac{1}{k_B T^2} (\varepsilon_{k_z} - \mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \right], \tag{4.77}
\end{aligned}$$

retomando la Ec. (4.59) para tener la misma densidad de partículas

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{\lambda_0^3 m}{\zeta(3/2)(\mathcal{M}+1)k_B a 2\pi\hbar^2} \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \left[ 2k_B^2 T g_2 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) + k_B \varepsilon_{k_z} g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \right. \\
&+ (k_B T)^2 g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \left( \frac{1}{k_B T^2} (\varepsilon_{k_z} - \mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \\
&+ \left. \varepsilon_{k_z} T g_0 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \left( \frac{1}{k_B T^2} (\varepsilon_{k_z} - \mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \right] \quad (4.78)
\end{aligned}$$

o equivalentemente

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{1}{\zeta(3/2)(\mathcal{M}+1)} \frac{\lambda_0}{a} \frac{1}{T_0 k_B^2} \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \left[ 2k_B^2 T g_2 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) + k_B \varepsilon_{k_z} g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \right. \\
&+ (k_B T)^2 g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \left( \frac{1}{k_B T^2} (\varepsilon_{k_z} - \mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \\
&+ \left. \varepsilon_{k_z} T g_0 \left( \frac{1}{k_B T^2} (\varepsilon_{k_z} - \mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \right]. \quad (4.79)
\end{aligned}$$

Desarrollando los cálculos y agrupando términos tenemos

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{1}{\zeta(3/2)(\mathcal{M}+1)} \frac{\lambda_0}{a} \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \left[ 2 \frac{T}{T_0} g_2 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) + \frac{\varepsilon_{k_z}}{k_B T_0} g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \right. \\
&+ \frac{\varepsilon_{k_z}}{k_B T_0} g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) + \frac{\varepsilon_{k_z}^2}{k_B^2 T T_0} g_0 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \\
&+ \left. \left( \frac{1}{k_B T_0} g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) + \frac{\varepsilon_{k_z}}{k_B^2 T T_0} g_0 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} \right) \right) \left[ T \frac{\partial \mu}{\partial T} - \mu \right] \right]. \quad (4.80)
\end{aligned}$$

Donde el factor adimensional

$$\frac{\varepsilon_{k_z}}{k_B T_0} = \frac{1}{k_B T_0} \frac{\hbar}{2ma^2} \bar{\varepsilon} = \gamma \bar{\varepsilon} \quad (4.81)$$

y la Ec. (4.72), conduce a:

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{1}{\zeta(3/2)(\mathcal{M}+1)} \sum_{k_z=0}^{\mathcal{M}+1} \left[ 2\sqrt{4\pi}\gamma^{1/2} \frac{T}{T_0} g_2 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)} \right) + 2\sqrt{4\pi}\gamma^{3/2} \bar{\varepsilon} g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)} \right) \right. \\
&+ \sqrt{4\pi}\gamma^{5/2} \bar{\varepsilon}^2 \frac{T_0}{T} g_0 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)} \right) \\
&+ \left. \left[ T \frac{\partial \mu}{\partial T} - \mu \right] \left( \frac{\sqrt{4\pi}\gamma^{1/2}}{k_B T_0} g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)} \right) + \frac{\sqrt{4\pi}\gamma^{3/2} \bar{\varepsilon}}{k_B T} g_0 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)} \right) \right) \right].
\end{aligned} \tag{4.82}$$

El término que contiene al potencial químico se adimensionaliza al multiplicar  $\mu$  por  $\frac{2ma^2}{\hbar^2}$

$$\frac{2ma^2}{\hbar^2} \left[ T \frac{\partial \mu}{\partial T} - \mu \right] = \left[ T \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial T} - \bar{\mu} \right], \tag{4.83}$$

entonces

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{1}{\zeta(3/2)(\mathcal{M}+1)} \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \left[ 2\sqrt{4\pi}\gamma^{1/2} \frac{T}{T_0} g_2 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)} \right) + 2\sqrt{4\pi}\gamma^{3/2} \bar{\varepsilon} g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)} \right) \right. \\
&+ \sqrt{4\pi}\gamma^{5/2} \bar{\varepsilon}^2 \frac{T_0}{T} g_0 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)} \right) \\
&+ \left. \left[ T \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial T} - \bar{\mu} \right] \left( \sqrt{4\pi}\gamma^{3/2} g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)} \right) + \sqrt{4\pi}\gamma^{5/2} \frac{T_0}{T} \bar{\varepsilon} g_0 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)} \right) \right) \right],
\end{aligned}$$

usando la Ec. (4.61) podemos reescribir a

$$\sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \sqrt{4\pi}\gamma^{3/2} g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)} \right) \equiv \gamma \frac{T_0}{T}, \tag{4.84}$$

dando la siguiente expresión

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{1}{\zeta(3/2)(\mathcal{M}+1)} \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \left[ 2\sqrt{4\pi}\gamma^{1/2} \frac{T}{T_0} g_2 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)} \right) + 2\sqrt{4\pi}\gamma^{3/2} \bar{\varepsilon} g_1 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)} \right) \right. \\
&+ \sqrt{4\pi}\gamma^{5/2} \bar{\varepsilon}^2 \frac{T_0}{T} g_0 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)} \right) + \left. \left[ T \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial T} - \bar{\mu} \right] \left( \gamma \frac{T_0}{T} + \sqrt{4\pi}\gamma^{5/2} \bar{\varepsilon} g_0 \left( e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)} \right) \right) \right].
\end{aligned}$$

Los términos que están en el argumento de las funciones de Bose los adimensionalizamos de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)} &= e^{\frac{(\varepsilon_{k_z} - \mu)}{k_B T}} = e^{\frac{(\varepsilon_{k_z} - \mu)}{k_B T} \frac{k_B T_0}{k_B T_0}} = e^{-\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{1}{k_B T_0} \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})} \\
&= e^{-\frac{2\pi}{4\pi} \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{1}{k_B T_0} \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})} = e^{-\frac{\lambda_0^2}{4\pi a^2} \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})} = e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})}, \tag{4.85}
\end{aligned}$$

así el calor específico queda como

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{\sqrt{4\pi}}{\zeta(3/2)} \frac{1}{(\mathcal{M} + 1)} \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \left[ 2\gamma^{1/2} \frac{T}{T_0} g_2 \left( e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})} \right) + 2\gamma^{3/2} \bar{\varepsilon} g_1 \left( e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})} \right) \right. \\
&\quad \left. + \gamma^{5/2} \bar{\varepsilon}^2 \frac{T_0}{T} g_0 \left( e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})} \right) + \left[ T \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial T} - \bar{\mu} \right] \left( \frac{\gamma}{\sqrt{4\pi}} \frac{T_0}{T} + \gamma^{5/2} \bar{\varepsilon} g_0 \left( e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})} \right) \right) \right]. \tag{4.86}
\end{aligned}$$

A partir de la expresión anterior, obtenemos la Fig. 4.3 que muestra el  $C_V/Nk_B$  vs  $T/T_0$  para un sistema de 100 barreras de potencial de permeabilidad  $P = 10$  y distancia entre ellas  $a/\lambda_0 = 1$ .

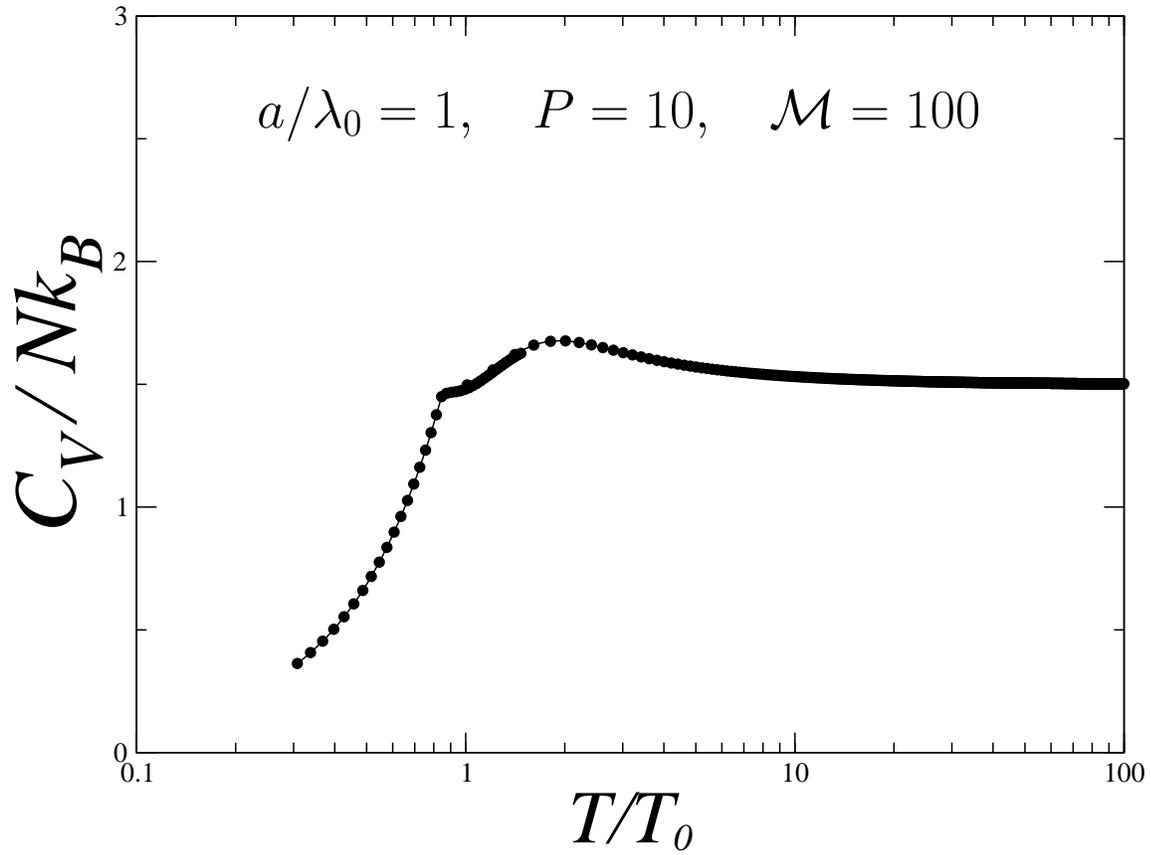


Figura 4.3:  $C_V/Nk_B$  vs  $T/T_0$  para un gas ideal en una caja con 100 barreras de potencial de permeabilidad  $P = 10$  y distancia entre ellas  $a/\lambda_0 = 1$ .

Para evaluar (4.86) necesitamos  $T \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial T} - \bar{\mu}$ , la cual puede calcularse a partir de (4.61), que en esta notación puede escribirse como

$$1 = -\frac{\lambda_0}{a} \frac{T}{T_0} \frac{1}{\zeta(3/2)(\mathcal{M}+1)} \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \ln[1 - e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})}]. \quad (4.87)$$

Si derivamos (4.87) con respecto a la temperatura tenemos

$$\begin{aligned} 0 &= -\frac{\lambda_0}{a} \frac{1}{T_0} \frac{1}{\zeta(3/2)(\mathcal{M}+1)} \left[ \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \ln(1 - e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})}) - T \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \frac{e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})}}{1 - e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})}} \left( \frac{1}{k_B T^2} (\varepsilon_{k_z} - \mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \right] \\ 0 &= \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \ln(1 - e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})}) - \frac{1}{k_B T} \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \frac{1}{e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})} - 1} \left[ \varepsilon_{k_z} - \mu + T \frac{\partial \mu}{\partial T} \right] \\ &- \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \ln(1 - e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})}) = \frac{-1}{k_B T} \left[ \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \frac{\varepsilon_{k_z}}{e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})} - 1} + \left[ T \frac{\partial \mu}{\partial T} - \mu \right] \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \frac{1}{e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})} - 1} \right], \end{aligned}$$

de donde despejamos el término de la derivada del potencial químico respecto a la temperatura

$$\left[ T \frac{\partial \mu}{\partial T} - \mu \right] = \frac{k_B T \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \ln(1 - e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})}) - \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \frac{\varepsilon_{k_z}}{e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})} - 1}}{\sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \frac{1}{e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})} - 1}}, \quad (4.88)$$

este término es adimensional al multiplicar por la constante  $2ma^2/\hbar^2$ , obteniendo

$$\begin{aligned} \left[ T \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial T} - \bar{\mu} \right] &= \frac{2ma^2}{\hbar^2} \left[ T \frac{\partial \mu}{\partial T} - \mu \right] \\ &= \frac{\sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} k_B T \frac{2ma^2}{\hbar^2} \left[ \ln(1 - e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})}) - \frac{\varepsilon_{k_z}}{e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})} - 1} \right]}{\sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \frac{1}{e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})} - 1}} \end{aligned} \quad (4.89)$$

finalmente multiplicando la ecuación anterior por  $T_0/T_0$  obtenemos:

$$\begin{aligned} \left[ T \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial T} - \bar{\mu} \right] &= \frac{\sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \left[ \frac{1}{\gamma} \frac{T_0}{T} \ln(1 - e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})}) - \frac{\bar{\varepsilon}}{e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})} - 1} \right]}{\sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \frac{1}{e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})} - 1}} \\ &= \frac{\frac{\zeta(3/2)}{\sqrt{4\pi} \gamma^{3/2}} - \sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} \bar{\varepsilon} g_0(e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})})}{\sum_{k_z=1}^{\mathcal{M}+1} g_0(e^{-\gamma \frac{T_0}{T} (\bar{\varepsilon} - \bar{\mu})})}. \end{aligned} \quad (4.90)$$

#### 4.2.4. Ecuación de estado

La ecuación de estado está dada por

$$PV = -k_B T \ln Z, \quad (4.91)$$

entonces

$$PV = -k_B T \frac{L^2}{(2\pi)^2} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} 2\pi \int_0^\infty dk \quad k \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)}) \quad (4.92)$$

$$= k_B T \frac{L^2}{(2\pi)^2} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} \sum_l^\infty \frac{z^l e^{-(\beta \varepsilon_{k_z} l)}}{l} \int_0^\infty dk \quad k e^{-\beta(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} l)} \quad (4.93)$$

$$= (k_B T)^2 \frac{L^2}{2\pi} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} \sum_l^\infty \frac{z^l}{l} e^{-\beta \varepsilon_{k_z} l} \frac{m}{\hbar^2 l} \int_0^\infty du e^u \quad (4.94)$$

con el siguiente cambio de variable

$$u = \frac{l\beta\hbar^2 k^2}{2m}, \quad du = \frac{l\beta\hbar^2 k}{m} dk \quad (4.95)$$

$$PV = (k_B T)^2 \frac{L^2}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} \frac{z^l e^{-\beta \varepsilon_{k_z}}}{l^2} \quad (4.96)$$

$$= (k_B T)^2 \frac{L^2}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} g_2(e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)}) \quad (4.97)$$

multiplicando por  $\frac{1}{Nk_B T}$  y  $\frac{T_0 a}{T_0 a}$

$$\frac{PV}{Nk_B T} = \frac{mk_B T L^2 a}{2\pi\hbar^2 N} \frac{1}{a} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} g_2(e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)}), \quad (4.98)$$

y como tenemos la misma densidad de partículas como en la Ec. (4.59), entonces

$$\frac{PV}{Nk_B T} = \frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \frac{\lambda_0^3}{\zeta(3/2)} \frac{1}{a} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} g_2(e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)}), \quad (4.99)$$

recordando la Ec. (4.62) y multiplicando el lado derecho de la ecuación anterior por  $T_0/T_0$ , tenemos

$$\frac{PV}{Nk_B T} = \frac{T}{T_0} \frac{\lambda_0}{a} \frac{1}{\zeta(3/2)} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} g_2(e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)}), \quad (4.100)$$

de la Ec. (4.72) podemos reescribir la ecuación anterior como

$$\frac{PV}{Nk_B T} = \frac{T}{T_0} \frac{\gamma^{1/2} \sqrt{4\pi}}{\zeta(3/2)} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} g_2(e^{-\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)}), \quad (4.101)$$

el término dentro de la función de Bose está dado por la Ec. (4.85), de tal forma que podemos reescribirla a la ecuación de estado como

$$\frac{PV}{Nk_B T} = \frac{T}{T_0} \frac{\gamma^{1/2} \sqrt{4\pi}}{\zeta(3/2)} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} g_2(e^{-\gamma \frac{T_0}{T} \varepsilon - \bar{\mu}}). \quad (4.102)$$

### 4.2.5. Entropía

Para calcular la entropía, empleamos la ecuación de estado de la siguiente manera

$$\frac{S}{k_B} = \frac{1}{k_B} \left( \frac{\partial PV}{\partial T} \right)_{V, \mu} \quad (4.103)$$

entonces

$$\frac{S}{k_B} = \frac{2k_B T}{2\pi} \frac{L^2}{\hbar^2} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} g_2(e^{-\beta\varepsilon_{k_z}-\mu}) + \frac{k_B T^2 L^2 m}{2\pi\hbar^2} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} g_1(e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)}) \left(\frac{1}{k_B T^2} (\varepsilon_{k_z} - \mu)\right) \quad (4.104)$$

$$= \frac{2k_B T}{2\pi} \frac{L^2}{\hbar^2} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} g_2(e^{-\beta\varepsilon_{k_z}-\mu}) + \frac{L^2 m}{2\pi\hbar^2} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} \varepsilon_{k_z} g_1(e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)}) \quad (4.105)$$

$$- \frac{L^2 m}{2\pi\hbar^2} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} \mu g_1(e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)}) \quad (4.106)$$

multiplicando por  $1/N$ , al primer término del lado derecho de la ecuación anterior por  $T_0 a/T_0 a$ , al tercer término por  $a/a$  y empleando la Ec. (4.59), podemos reescribir a la ecuación anterior como

$$\frac{S}{Nk_B} = \frac{2k_B T_0}{2\pi\hbar^2} \frac{1}{a} \frac{T}{T_0} \frac{L^2 a}{N} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} g_2(e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)}) + \frac{1}{2ma^2} \frac{m}{2\pi a} \frac{L^2 a}{N} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} \bar{\varepsilon} g_1(e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)}) \quad (4.107)$$

$$- \frac{L^2 m}{2\pi\hbar} \mu \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} g_1(e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)})$$

$$= \frac{2}{\lambda_0^2} \frac{\lambda_0^3}{\zeta(3/2)} \frac{T}{T_0} \frac{1}{a} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} g_2(e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)}) + \frac{1}{\zeta(3/2)} \frac{\lambda_0^3}{a^3} \frac{1}{2\pi} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} \bar{\varepsilon} g_1(e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)})$$

$$- \frac{L^2 m}{2\pi\hbar^2} \frac{T_0}{T} \frac{\zeta(3/2)}{N} \frac{a}{\lambda_0} \mu$$

$$= \frac{2}{\zeta(3/2)} \frac{\lambda_0}{a} \frac{T}{T_0} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} g_2(e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)}) + \frac{1}{2\zeta(3/2)} \frac{1}{2\pi} \frac{\lambda_0^3}{a^3} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} \bar{\varepsilon} g_1(e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)}) - \frac{1}{k_B T} \mu$$

$$= \frac{2}{\zeta(3/2)} \gamma^{1/2} \sqrt{4\pi} \frac{T}{T_0} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} g_2(e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)}) + \gamma^{3/2} \sqrt{4\pi} \sum_{\varepsilon_{k_z}}^{\mathcal{M}+1} \bar{\varepsilon} g_1(e^{-\beta(\varepsilon_{k_z}-\mu)}) - \frac{1}{k_B T} \mu$$

### 4.3. Resultados

En el presente capítulo analizamos el calor específico  $C_V/Nk_B$  como función de la temperatura  $T/T_0$ , para estudiar si los efectos de introducir desorden composicional, estructural y vacancias simétricas o aleatorias a un sistema ordenado, aportan criterios para distinguir la existencia de una fase condensada, ya que como se mencionó en la primera sección de generalidades de un gas ideal de bosones en tres dimensiones, se sabe, que a determinada temperatura crítica  $T = T_0$  ocurre la

condensación de Bose-Einstein. Además obtenemos el espectro de energías, del cual nos auxiliamos para entender el comportamiento de los máximos que aparecen a determinada temperatura en el  $C_V/Nk_B$  vs  $T/T_0$ .

Cuando graficamos  $C_V/Nk_B$  vs  $T/T_0$ , introducimos los tres tipos de desorden para distintas tiradas aleatorias, de tal manera, que se pudiese hacer un promedio entre las tiradas. En la Fig. 4.4, se efectuaron cuatro tiradas para un sistema con desorden composicional de 10 barreras de potencial espaciadas entre cada delta por  $a/\lambda_0 = 1$ , pero la permeabilidad de las barreras de potencial  $P = 10$  puede variar cómo  $P \rightarrow 10 + \Delta P_i$ , en un número aleatorio  $\Delta P_i$  en el intervalo  $\Delta P_i \in [-9, 9]$ , que equivale a una variación del 90 por ciento del desorden. En la Fig. 4.5 se efectuaron cuatro tiradas para un sistema con desorden estructural de 10 barreras de potencial e intensidad  $P = 10$ , pero la distancia entre las barreras de potencial dada su posición ordenada  $a/\lambda_0 = 1$  puede variar cómo  $a/\lambda_0 \rightarrow 1 + \Delta a_i$ , en un número aleatorio  $\Delta a_i$  en el intervalo  $\Delta a_i \in [-0.1, 0.1]$ , que equivale a una variación del 10 por ciento del desorden. En estos casos el calor específico si muestra variaciones con el desorden, pero al promediar diferentes tiradas aleatorias, el efecto de desorden se cancela.

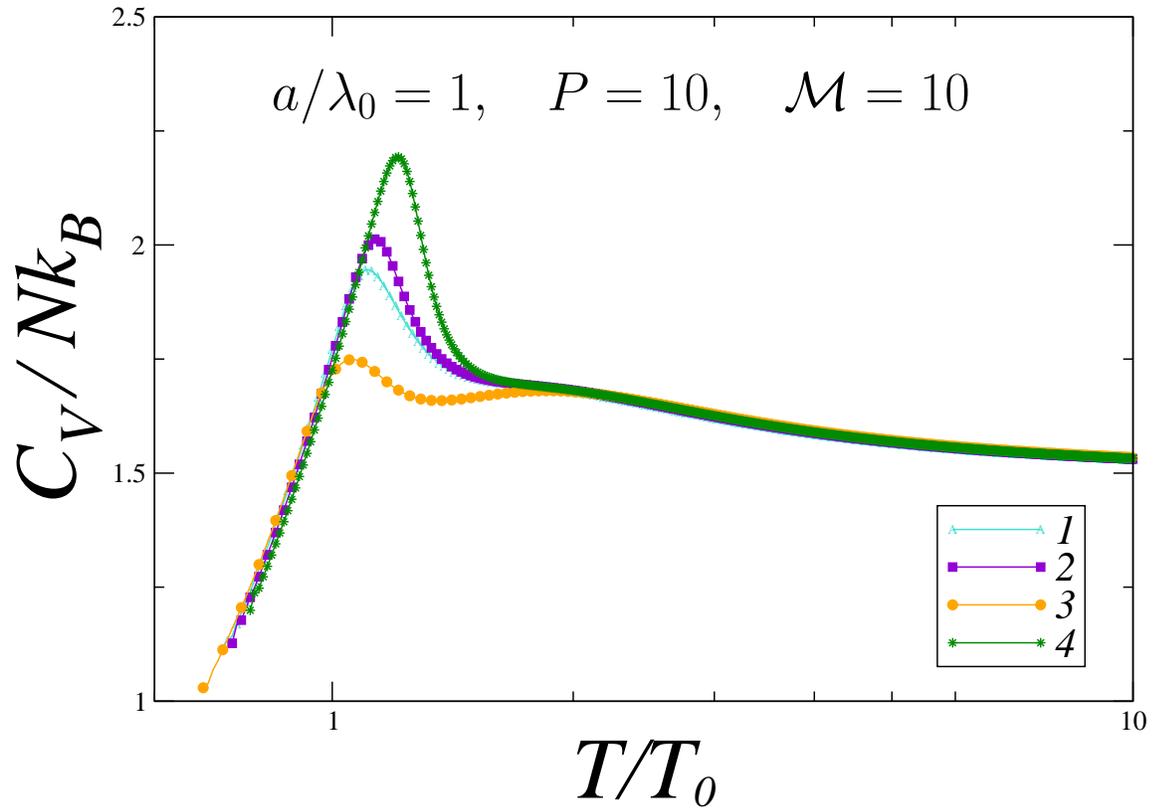


Figura 4.4:  $C_V/Nk_B$  vs  $T/T_0$  para partículas en una caja con 10 barreras de potencial de permeabilidad  $P = 10$ , distancia entre ellas  $a/\lambda_0 = 1$  y desorden composicional, para las tiradas aleatorias 1, 2, 3 y 4, en un número aleatorio  $\Delta P_i$ , en el intervalo  $\Delta P_i \in [-9, 9]$ , que equivale a una variación del 90 por ciento del desorden.

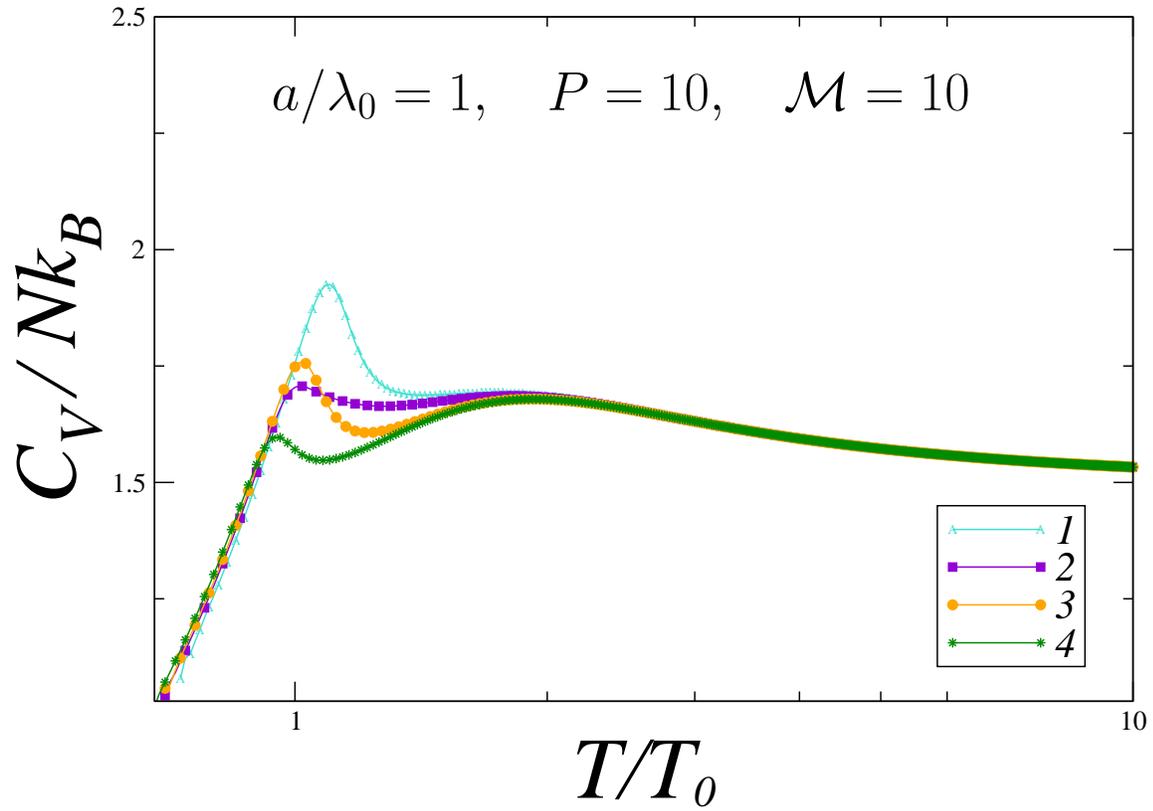


Figura 4.5:  $C_V/Nk_B$  vs  $T/T_0$  para partículas en una caja con 10 barreras de potencial de permeabilidad  $P = 10$ , distancia entre ellas  $a/\lambda_0 = 1$  y desorden estructural, para las tiradas aleatorias 1, 2, 3 y 4, en un número aleatorio  $\Delta a_i$ , en el intervalo  $\Delta a_i \in [-0.1, 0.1]$ , que equivale a una variación del 10 por ciento del desorden.

Si introducimos vacancias en el sistema, los niveles de energía se desplazan disminuyendo su valor de energía. Estos desplazamientos son hacia las regiones prohibidas y dependiendo del número de vacancias es el número de niveles de energía que se desplazan, como se ve en la Fig. 4.11, cuando eliminamos una barrera de potencial se desplaza un nivel, cuando eliminamos dos barreras de potencial se desplazan dos niveles y así sucesivamente para  $\mathcal{M}$  barreras de potencial eliminadas se desplazan  $\mathcal{M}$  niveles. Es importante destacar que en algunos casos las soluciones a la relación de dispersión las raíces son dobles, por ejemplo, cuando se omiten las barreras de potencial  $\{1,10\}$ , el nivel más bajo es una raíz doble y al graficar el espectro de energía, no se puede observar que allí existen dos niveles puesto que están degenerados.

Los niveles de energía desplazados tienen una correlación con el aumento del máximo del calor específico, que ocurre cuando el nivel de energía mas bajo se desplaza hacia valores mínimos. Como se observa en la Fig. 4.6, para un sistema de 10 barreras de potencial espaciadas entre ellas por  $a/\lambda_0 = 1$  e permeabilidad  $P = 10$ , introducimos las vacancias en los sitios  $\{1,2\}$ ,  $\{1,3\}$ ,  $\{1,7\}$ ,  $\{1,10\}$ , comparadas con un sistema ordenado y un gas ideal. Aquí, podemos observar que el máximo más pronunciado ocurre cuando el valor del calor específico y temperatura son mayores, al eliminar las barreras de potencial  $\{1,2\}$ , si comparamos con el inciso b) de la Fig. 4.7, observamos que hay una correlación con el espectro de energías, donde el nivel más bajo desplazado es cuando se eliminan las barreras de potencial  $\{1,2\}$ .

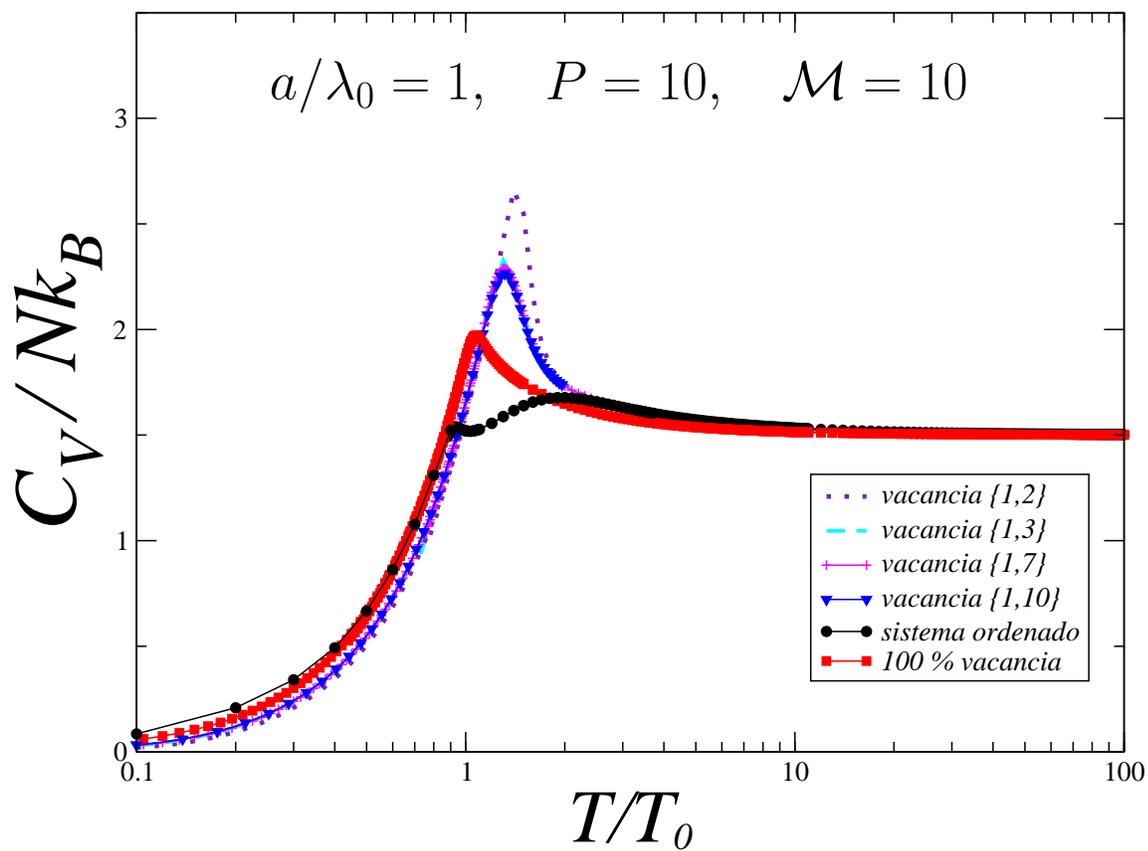


Figura 4.6:  $C_V/Nk_B$  vs  $T/T_0$  para partículas en una caja con 10 barreras de potencial de permeabilidad  $P = 10$  y distancia entre ellas  $a/\lambda_0 = 1$ , introduciendo vacancias en los sitios:  $\{1,2\}$ ,  $\{1,3\}$ ,  $\{1,7\}$ ,  $\{1,10\}$ , comparadas con un sistema ordenado y un gas ideal.

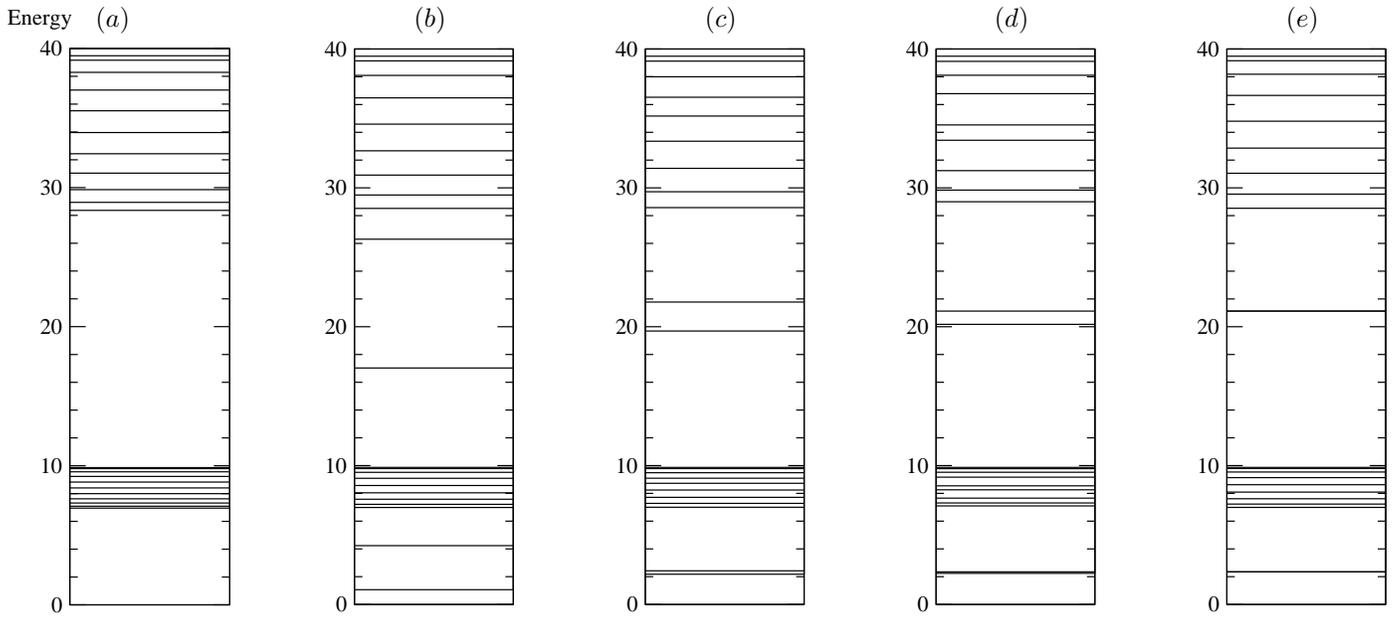


Figura 4.7: Niveles de energía en unidades de  $\hbar^2/2ma^2$  para sistemas con 10 deltas. Las distancias entre ellas es  $a/\lambda_0 = 1$  e permeabilidad de las barreras de potencial  $P = 10$ . (a) sistema ordenado, (b) vacancias  $\{1,2\}$ , (c) vacancias  $\{1,3\}$ , (d) vacancias  $\{1,7\}$ , (e) vacancias  $\{1,10\}$ .

La Fig. 4.8 muestra el  $C_V/Nk_B$  vs  $T/T_0$ , para un sistema de 10 barreras de potencial espaciadas entre ellas por  $a/\lambda_0 = 1$  e permeabilidad  $P = 10$ , con vacancias en los sitios  $\{2,1\}$ ,  $\{2,3\}$ ,  $\{2,5\}$ ,  $\{2,9\}$  y  $\{2,10\}$ , comparadas con un gas ideal y un sistema ordenado. Aquí se puede corroborar que los máximos más pronunciados ocurren cuando el nivel más bajo se desplaza hacia valores mínimos. Como podemos observar esto ocurre en los casos  $\{2,1\}$  y  $\{2,3\}$ , correspondientes al espectro de energía de la Fig. 4.9 inciso (b) y (c) respectivamente y son los niveles de energía más bajos comparados con  $\{2,5\}$ ,  $\{2,9\}$  y  $\{2,10\}$ .

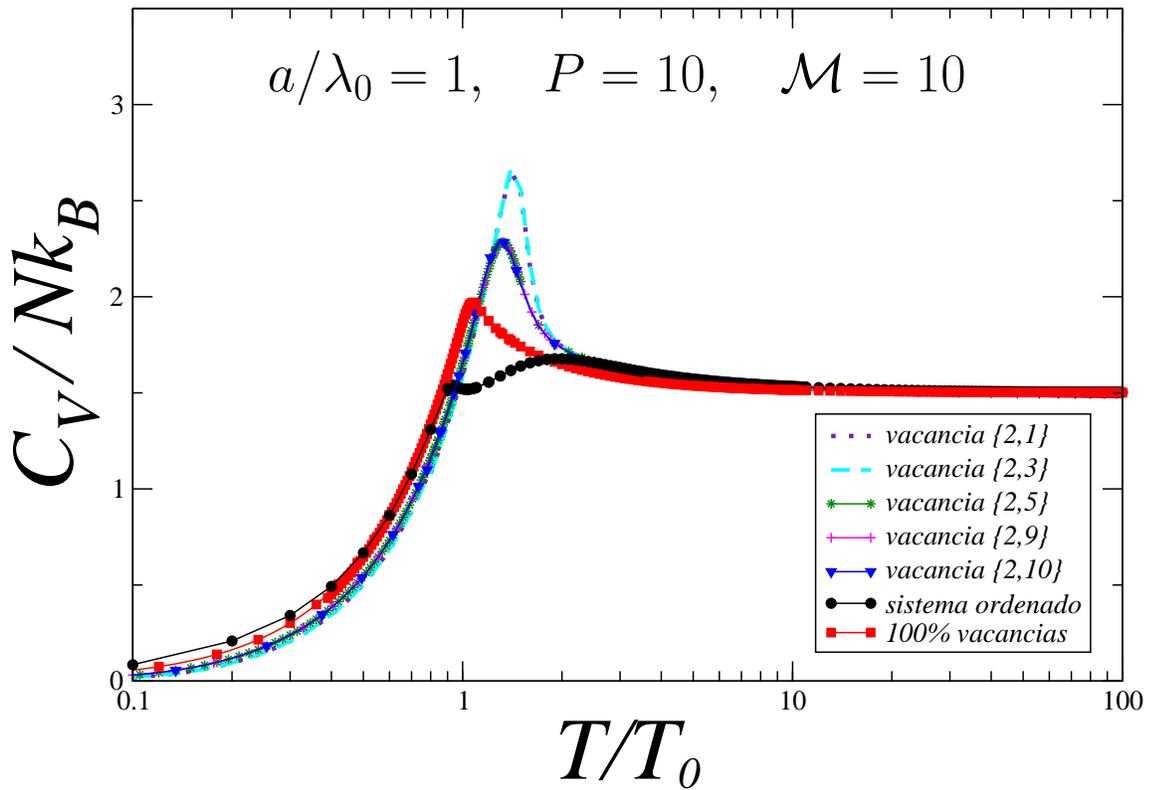


Figura 4.8:  $C_V/Nk_B$  vs  $T/T_0$  para partículas en una caja con 10 barreras de potencial de permeabilidad  $P = 10$  y distancia entre ellas  $a/\lambda_0 = 1$ , introduciendo vacancias en los sitios:  $\{2,1\}$ ,  $\{2,3\}$ ,  $\{2,5\}$ ,  $\{2,9\}$ ,  $\{2,10\}$ , comparadas con un sistema ordenado y un gas ideal.

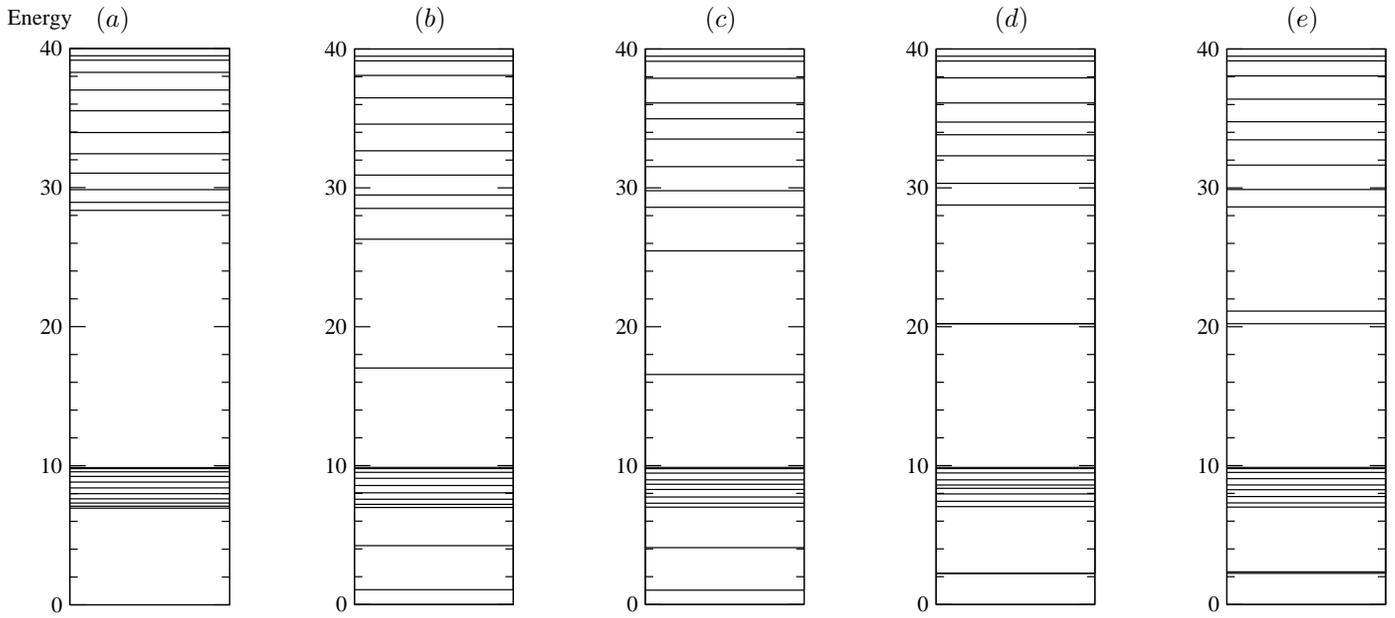


Figura 4.9: Niveles de energía en unidades de  $\hbar^2/2ma^2$  para sistemas ordenados con 10 barreras de potencial  $a/\lambda_0 = 1$ ,  $P = 10$ , omitiendo las barreras de potencial (a) sistema ordenado, (b) vacancias  $\{2,1\}$ , (c) vacancias  $\{2,3\}$ , (d) vacancias  $\{2,9\}$ , (e) vacancias  $\{2,10\}$ .

En la Fig. 4.10, se muestra el  $C_V/Nk_B$  vs  $T/T_0$  de un sistema de 10 barreras de potencial espaciadas entre ellas cada  $a/\lambda_0 = 1$ , permeabilidad  $P = 10$  e implementando las vacancias  $\{1\}$ ,  $\{1,2\}$ ,  $\{1, 2, 10\}$ ,  $\{1, 2, 3, 10\}$ , comparadas con un sistema ordenado. Se puede observar que en este caso también ocurre que para determinado número de vacancias hay un máximo más pronunciado en el calor específico que ocurre a mayor temperatura. Este máximo ocurre cuando se omiten las barreras de potencial por un 20 por ciento, esto es cuando se omite la delta  $\{1,2\}$ . Si observamos en el espectro de energía de la Fig. 4.11, este caso corresponde al inciso c) que tiene el valor mas bajo de energía. También podemos observar que el número de vacancias, es el número de niveles desplazados en su valor de energía como se mencionó anteriormente.

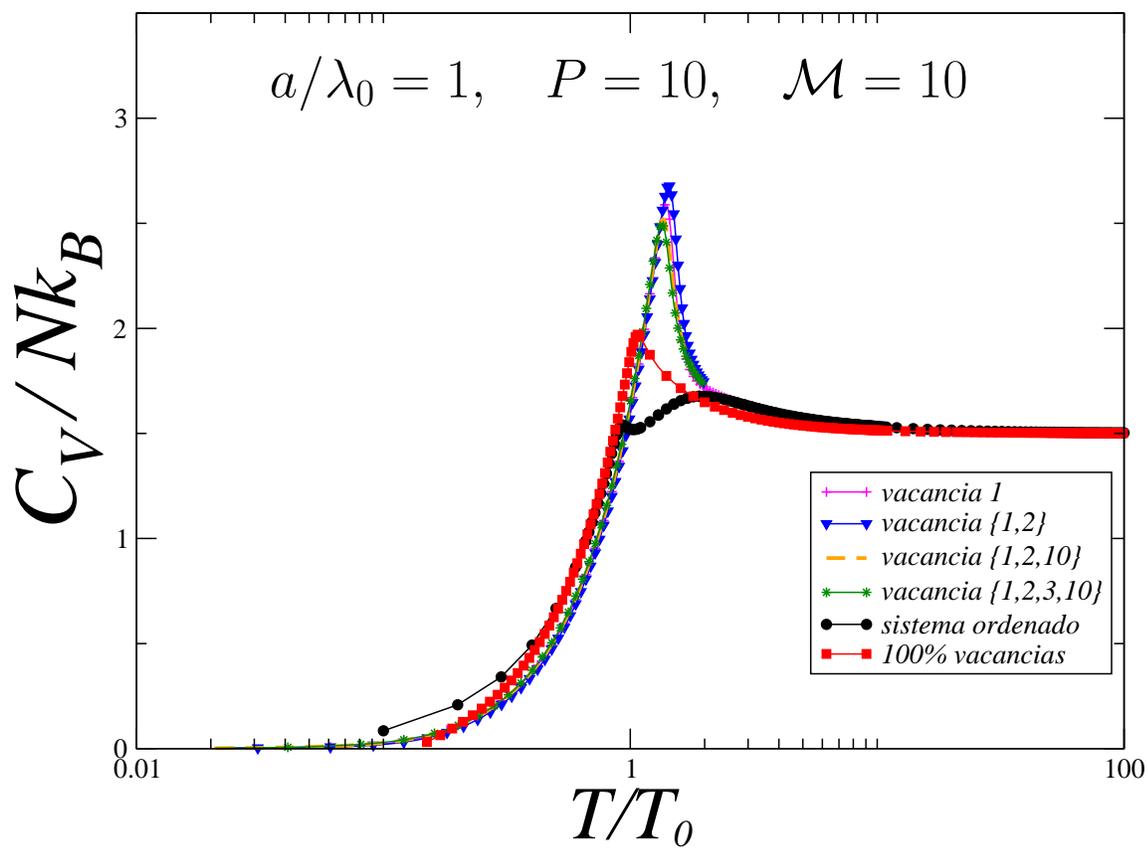


Figura 4.10:  $C_V/Nk_B$  vs  $T/T_0$  para partículas en una caja con 10 barreras de potencial de permeabilidad  $P = 10$  y distancia entre ellas  $a/\lambda_0 = 1$ , introduciendo vacancias en los sitios:  $\{1\}$ ,  $\{1,2\}$ ,  $\{1, 2, 10\}$ ,  $\{1, 2, 3, 10\}$ , comparadas un sistema ordenado y un gas ideal.

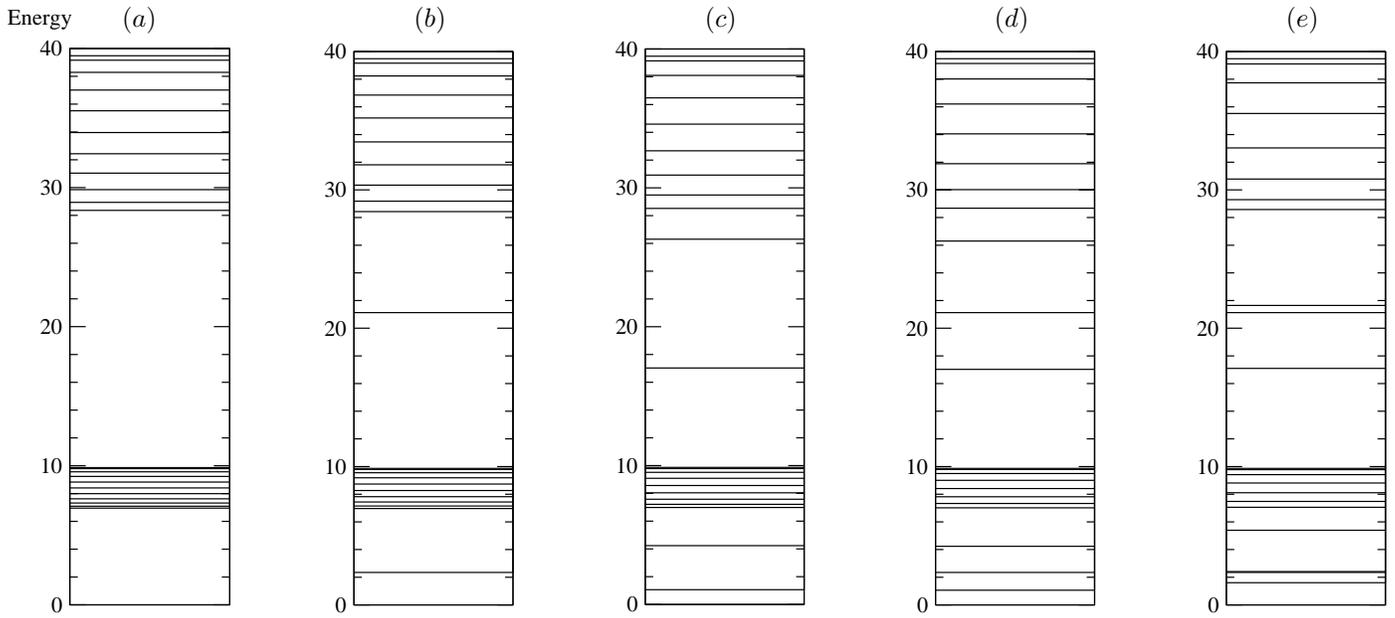


Figura 4.11: Niveles de energía en unidades de  $\hbar^2/2ma^2$  para sistemas con 10 barreras de potencial  $a/\lambda_0 = 1$ ,  $P = 10$ , omitiendo las barreras de potencial (a) sistema ordenado, (b) vacancias {1}, (c) vacancias {1,2}, (d) vacancias {1, 2, 10}, (e) vacancias {1, 2, 3, 10}.

En las Figs. 4.6, 4.8 y 4.10 las curvas rojas corresponden a una caja de longitud  $L_z = 11$ , donde se omiten todas las barreras de potencial, al aumentar el sistema a una caja de longitud  $L_z = 101$  el máximo se agudiza como se observa en la Fig. 4.12, de tal forma que si la longitud de la caja tiende a infinito  $L_z \rightarrow \infty$  reproducimos el caso en tres dimensiones y el máximo se convierte en el pico característico de la condensación Bose-Einstein (ver Fig. 4.1).

En la Fig. 4.12 se gráfica el  $C_V/Nk_B vs T/T_0$  para un sistema de 100 barreras de potencial,  $a/\lambda_0 = 1$ ,  $P = 10$  e implementando las vacancias de manera porcentual y simétrica en un 10, 20, 30 y 40 por ciento, en este caso se observa que el máximo más pronunciado ocurre cuando se eliminan las barreras de potencial en un 20 por ciento. Al aumentar el tamaño del sistema, los efectos son más notorios, ya que los máximos se agudizan observando que hay una tendencia hacia una fase condensada, comparado con sistemas ordenados. También se observa que conforme se aumenta el número de vacancias, el máximo también aumenta pero hasta determinado valor, del orden del 20 por ciento.

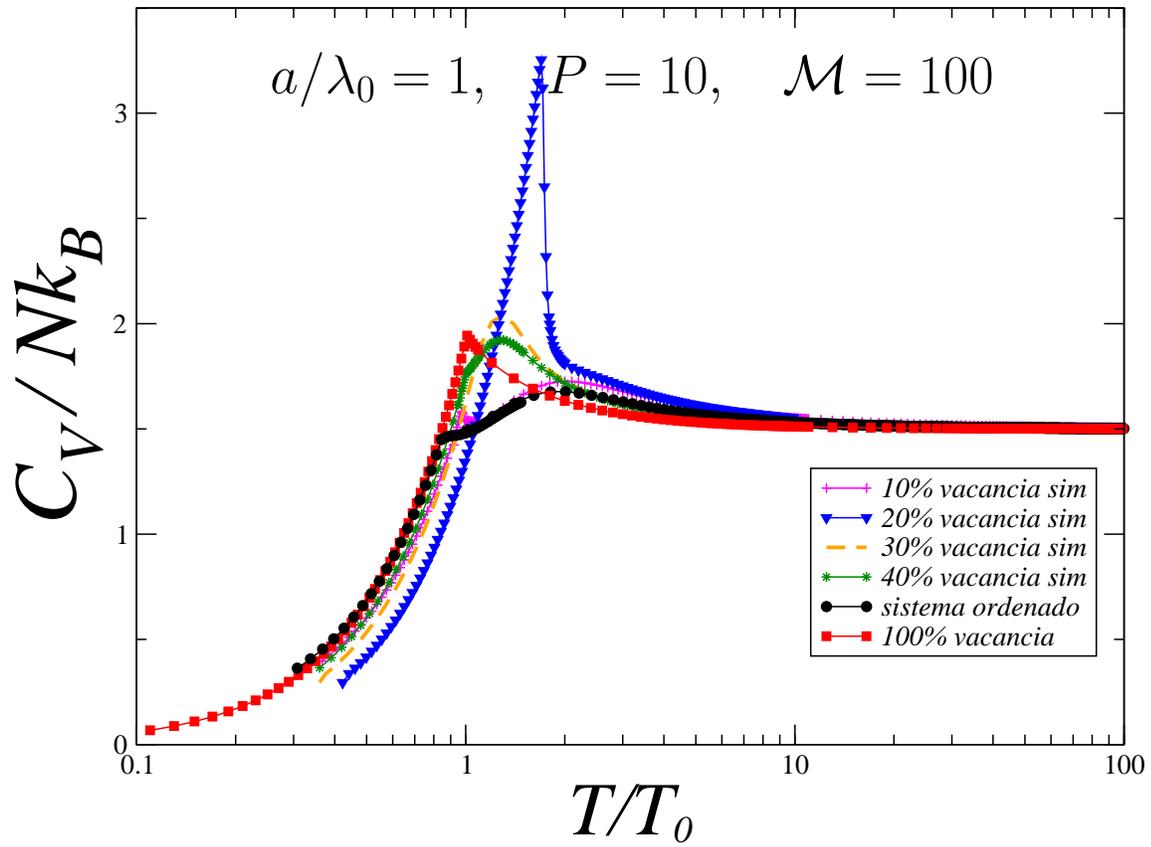


Figura 4.12:  $C_V/Nk_B$  vs  $T/T_0$  para partículas en una caja con 100 barreras de potencial de permeabilidad  $P = 10$  y distancia entre ellas  $a/\lambda_0 = 1$ . Introduciendo 10, 20, 30 y 40 por ciento de vacancias en los sitios de manera simétrica, comparadas con un sistema ordenado y un gas ideal.

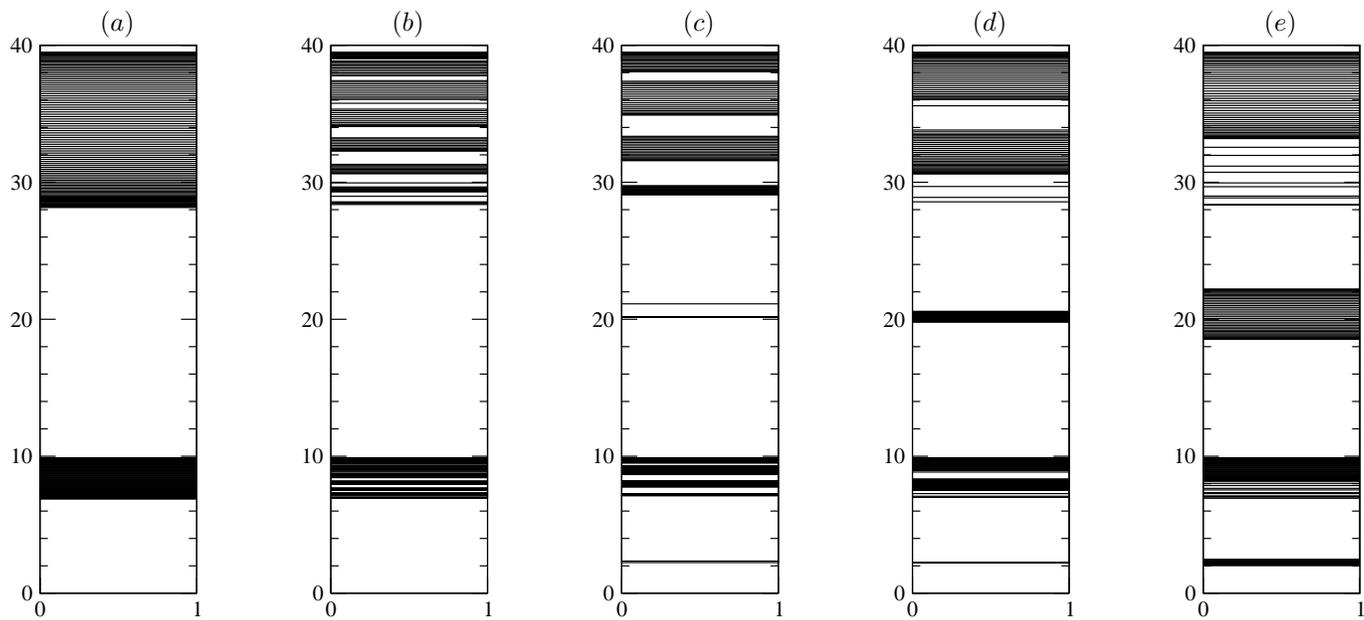


Figura 4.13: Niveles de energía en unidades de  $\hbar^2/2ma^2$  para sistemas ordenados con 100 barreras de potencial  $a/\lambda_0 = 1$ ,  $P = 10$ , omitiendo las barreras de potencial de manera simétrica y porcentual (a) sistema ordenado, (b) vacancia 10 , (c) vacancia 20, (d) vacancia 30, (e) vacancia 40.

## Capítulo 5

# Conclusiones

En este trabajo estudiamos los efectos en el espectro de energías y el calor específico ocasionados al introducir desorden estructural, composicional o vacancias en un gas ideal de bosones confinado por una caja infinita en las direcciones  $x$  y  $y$ , y finita en la dirección  $z$ , dividida con  $\mathcal{M}$  planos representados por potenciales delta de Dirac de permeabilidad variable  $P$  y separados por una distancia  $a$ .

Cuando el sistema es ordenado, el espectro de energías muestra que conforme se aumente el sistema al incrementar el número de barreras de potencial, se forma una estructura de bandas y cada una de estas bandas está conformada de tal manera que para  $\mathcal{M}$  barreras de potencial hay  $\mathcal{M} + 1$  niveles separados por regiones prohibidas. En particular mostramos los casos para 10 barreras de potencial con 11 niveles y 100 barreras de potencial con 101 niveles, también observamos que hay niveles fijos dados por la Ec. (2.96) y sobre estos hay otros niveles que comienzan a concentrarse hacia los fijos conforme se aumenta la intensidad de las deltas, esto es, que el ancho de las regiones prohibidas aumenta, de tal manera que la formación de la estructura de bandas es más notoria.

Encontramos que al introducir desorden estructural variando la distancia entre las barreras de potencial de su posición ordenada  $a/\lambda_0 = 1$  en  $a/\lambda_0 \rightarrow 1 + \Delta a_i$ , con  $\Delta a_i$  un número aleatorio en el intervalo  $\Delta a_i \in [-0.1, 0.1]$ , que equivale a una variación del 10 por ciento de desorden e permeabil-

idad fija  $P = 10$ , se pierden los niveles fijos y la estructura de bandas como se muestra en la Fig. 3.4.

Para introducir vacancias de planos eliminamos barreras de potencial en los sistemas de 10 y 100 barreras de potencial. Los niveles de energía se desplazan en su valor de energía hacia las regiones prohibidas y dependiendo de los porcentajes 10, 20, 30 y 40 por ciento, es el número de niveles desplazados. Estos niveles desplazados desempeñan un papel muy importante, ya que el primer nivel de energía que es el más bajo contribuye en el comportamiento del máximo correspondiente al calor específico.

El calor específico, muestra variaciones con desorden composicional para 10 barreras de potencial espaciadas por  $a/\lambda_0 = 1$ , variando su permeabilidad como  $P \rightarrow 10 + \Delta P_i$ , con  $\Delta P_i$  un número aleatorio en el intervalo  $\Delta P_i \in [-9, 9]$  que equivale a una variación del 90 por ciento de desorden y con desorden estructural de permeabilidad fija  $P = 10$ , variando de su posición ordenada  $a/\lambda_0 = 1$  como  $a/\lambda_0 \rightarrow 1 + \Delta a_i$ , con  $\Delta a_i$  un número aleatorio en el intervalo  $\Delta a_i \in [-0.1, 0.1]$  que equivale a una variación del 10 por ciento de desorden. Pero al promediar diferentes tiradas aleatorias, el efecto de desorden composicional y estructural se cancela.

Cuando simulamos vacancias, en un sistema de 10 barreras de potencial de manera simétrica o aleatoria, observamos que se modifica la posición del máximo en el calor específico a  $C_V/Nk_B > 2$  y eleva la temperatura del máximo a  $T/T_0 > 1$ , comparado con sistemas ordenados cuyas temperaturas de las posiciones del máximo del calor específico son  $T/T_0 \leq 1$  y el calor específico  $C_V/Nk_B \leq 2$  para toda temperatura. Se observa que existe un número crítico de vacancias, para el cual el máximo del calor específico tiene un máximo. Este valor crítico es del orden de un 20 por ciento de vacancias. También al aumentar el tamaño del sistema a 100 barreras de potencial, los efectos son más notorios, ya que los máximos se agudizan y puede interpretarse como una aproximación hacia la fase condensada, considerando que la dirección  $z \rightarrow \infty$  de tal forma que se retoma el caso en tres dimensiones ya estudiado en la literatura.

En este trabajo no consideramos la interacción entre partículas con el objetivo de analizar cuáles son los efectos que causa el potencial confinante, encontrando que simulando vacancias en un sistema semi infinito ordenado, con barreras de potencial delta de Dirac en la dirección finita, se podría modelar un caso que conlleve a una fase condensada sin estar estrictamente en un sistema infinito en las tres dimensiones. En trabajos futuros pretendemos introducir interacción entre los bosones, con la finalidad de ampliar el estudio del modelo presentado en esta tesis.

# Bibliografía

- [1] L. J. Challis, “Physics in less than three dimensions”, Contemporary Press, **33** (2), 111 (1992).
- [2] E. Corcoran, G. Zorpette, “Diminishing dimensions”, Scientific American, **263** (5), 74 (1990).
- [3] L. Jeroen, W. G. Wildöer, L. C. Venema, A. G. Rinzler, R. E. Smalley y C. Dekker, “Electronic structure of atomically resolved carbon nanotubes”, Nature **391**, 1 (1998).
- [4] M. A. Kastner, “Artificial atoms”, Physics Today, **46** (1), 24 (1993).
- [5] P. Yam, “Dot’s incredible”, Scientific American **269** (5), 7 (1993).
- [6] M. A. Reed, “Quantum dots”, Scientific American **268** (1), 118 (1993).
- [7] F. London, “On Bose-Einstein condensation”, Phys. Rev. **54**, 947 (1938).
- [8] F. London, “The phenomenon of liquid helium and the Bose-Einstein degeneracy”, Nature **141**, 643 (1938).
- [9] F. London, “On the nature of the superconducting state,” Phys. Rev. **51**, 678 (1937).
- [10] F. London, “Zur theorie magnetischer felder im superleiter”, Physica **3**, 450 (1936).
- [11] E. M. Lifshitz, “Superfluidity”, Scientific American, junio (1988).
- [12] I. Bloch, J. Dalibard, W. Zwerger, “Many-body physics with ultracold gases”, Rev. Mod. Phys. **80**, 885 (2008).
- [13] W. Pauli, “The connection between spin and statistics” Phys. Rev. **58**, 716 (1940).

- [14] L. de la Peña, *Introducción a la Mecánica Cuántica*, (Fondo de Cultura Económica, México, 1991).
- [15] A. Einstein, “Quantentheorie des einatomigen idealen gas 2”, *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften*, 3-14 (1925).
- [16] S. N. Bose, “Plancks gesetz and lichtquantenypothese”, *Zeitschrift für Physik*, **26**, 178-181 (1924).
- [17] F. J. Owens, C. P. Poole, *The new superconductors*, (Plenum Press, N. Y., 1996.)
- [18] M. Bretz, J. G. Dash, D. C. Hickernell, E. O. McLea, O. E. Vilches, “Phases of He<sup>3</sup> and He<sup>4</sup> monolayer films adsorbed on basal-plan oriented graphite”, *Phys. Rev. A*, **8**, 1589 (1973).
- [19] M. Modugno, “Exponential localization in one-dimensional quasi-periodic optical lattices”, *New J. of Phys.* **11**, 033023 (2009).
- [20] P. G. Harper, “Single band motion of conduction electrons in a uniform magnetic field”, *Proc. Phys. Lond., A* **68**, 874 (1955).
- [21] S. Aubry y G. Andr, *Ann. Isr. Phys. Soc.*, **3**, 33 (1980).
- [22] M. Kohmoto, “Metal-insulator transition and scaling for incommensutare systems”, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 1198 (1983).
- [23] S. Ya Jitomirskaya , “Metal-insulator transition for the almost Mathieu operator”, *Ann. Math.* **150**, 1159 (1999).
- [24] P. W. Anderson, “Absence of diffusion in certain random lattice”, *Phys. Rev.* **109**, 1492-1505 (1985).
- [25] P. A. Lee y T. V. Ramakrishnan, “Disordered electronic systems”, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287-337 (1985).
- [26] G. Roati, C. D’Errico, L. Fallani, M. Fattori, C. Fort, M. Zaccanti, G. Modugno y M. Inguscio “Anderson localization of a non-interacting Bose-Einstein condensate”, *Nature* **141**, 453 (2008).

- [27] R. de L. Kronig, W. G. Penney, “Quantum mechanics of electrons in crystal lattices”, *Proc. R. Soc., (Lond.)A* **130**, 499 (1931).
- [28] F. Dalfovo, S. Giorgini, L.P. Pitaevskii, S. Stringari, “Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases”, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 463 (1999).
- [29] N. N. Bogoliubov, “The many-body problem”, *J. Phys.*, **11** (23), (1947).
- [30] D. A. Mc Quarrie, “A single lecture illustrating the band structure of solids”, *Chem. Educator* **1**, 1 (1996).
- [31] N. Ashcroft y D. Mermin, *Solid State Physics*, (HRW International Editions, N. Y., 1976.)
- [32] D. J. Griffiths y C.A. Steinkke, “Waves in locally periodic media”, *Am. J. Phys.* **69** (2), 137-154 (2001).
- [33] G. Arfken y H. Weber, *Mathematical methods foy physicists*, (Elsevier, Academic Press, 2005).
- [34] R. K. Pathria, “Bose-Einstein condensation in thin films”, *Phys. Rev. A.* **5**, 1451 (1972).
- [35] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*, (Pergamon Press, N. Y. 1985.)
- [36] S. Greenspoon y R. K. Pathria, “Comment on the specific heat of a Bose gas confined to a thin film geometry”, *Phys. Rev. A* **8**, 1657 (1973).
- [37] S. Greenspoon y R. K. Pathria, “Effects of boundary conditions on finite Bose-Einstein assemblies”, *Phys. Rev. A* **11**, 1080 (1975).
- [38] H.R. Pajkowski y R.K. Pathria, “Criteria for the onset of Bose-Einstein condensation in ideal systems confined to restricted geometries”, *J. Phys. A: Math. Gen.* **10** (4), 561 (1977).
- [39] M.N. Barber y M.E. Fisher, “Specific heat of an ideal boson film of finite thickness”, *Phys. Rev. A* **8**, 1124 (1973).