



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS
INSTITUTO DE FÍSICA

**CONDENSACIÓN BOSE EINSTEIN EN CRISTALES CON
VACANCIAS**

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:
JUAN GARCÍA NILA

TUTOR PRINCIPAL
MIGUEL ÁNGEL SOLÍS ATALA
INSTITUTO DE FÍSICA

COMITÉ TUTOR
DR. FRANCISCO JAVIER SEVILLA PÉREZ (IF)
DR. MANUEL DE LLANO DE LA GARZA (IIM)

CIUDAD UNIVERSITARIA, CDMX, ENERO DE 2019



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

JURADO ASIGNADO:

Dr. Miguel Ángel Solís Atala

Dr. Fernando Álvarez Ramírez

Dr. Elías Castellanos Alcántara

Dr. Jorge Amin Seman Harutinian

Dr. Ricardo Méndez Fragoso

Dedicatoria

A mis padres, que todos los días de mi vida me han dado su apoyo incondicional y han estado presentes para escucharme en los momentos de euforia y melancolía, me han aconsejado para tomar las decisiones necesarias para madurar e incluso proveerme en los momentos de escasez, a veces sacrificando sus propias necesidades. Quiero agradecer a mis abuelos que en paz descansen, a mi abuela Gloria, a mis tíos y primos, los cuales también me han apoyado y aconsejado, además de tener recuerdos hermosos de infancia con ellos. Esta tesis la dedico también a cada uno de mis profesores, desde los que estuvieron conmigo en la educación elemental hasta los profesores de la licenciatura y el posgrado.

Quiero dedicarla a cada miembro del Grupo de Muchos Cuerpos Cuánticos encabezado por el Dr. Miguel Ángel Solís, conformado por el Dr. Mauricio Fortes, la Dra. Patricia Salas y los estudiantes Omar Rodríguez, Guillermo Martínez y Emilio Guerrero.

Entre mis amigos quiero agradecer primero a Guillermo Martínez, ya que diversas partes del presente trabajo fueron realizadas en conjunto con él. Agradezco a mis amigas Giovanna Sánchez, Alejandra Flores y Mariana Lagunas, que me han ofrecido su amistad y que me han enseñado grandes lecciones de vida.

Quiero agradecer también a amigos que he convivido en estos momentos de entusiasmo y de frustración debido a que se encuentran o encontraron en el proceso de titulación del posgrado: a Francisco Alejandre, Erik Jiménez, Alain Acevedo, Yadira Salazar y Gabriel Mercado. A mis grandes amigos de licenciatura, con quien compartía las mismas asignaturas, almorzábamos juntos mientras e incluso realizábamos tareas: a Eduardo Padilla, Izamar Tapia, Edgar Fuentes, Mitzi Ordoñez, Ángel Escarcega y Ricardo Cayetano. Quiero agradecer a mis amigos que no hablan español, Akarsh Kolekar, Ipsita Mohanty y Rohith Unnikrishnan. También quiero agradecer a mis compañeros y profesores del curso de Japonés.

A los doctores: Dr. Jorge Seman, Dr. Elías Castellanos, Dr. Ricardo Méndez y Dr. Fernando Álvarez; les agradezco su interés en el trabajo y su responsabilidad al leer con detalle el texto, así como su ayuda y sus preguntas que me han servido para profundizar el tema.

Agradezco al programa de Posgrado en Ciencias Físicas, en donde expandí mi conocimiento y obtuve apoyo económico por beca de Conacyt. Así también, el apoyo de los proyectos PAPIIT-DGAPA-UNAM IN-107616 y CONACyT 221030 para presentar trabajos en congresos.

Agradezco a mis alumnos, a cada uno de ustedes les agradezco por permitirme hablarles un poco de los temas que me apasionan, espero que se emocionen y que vivan su vida académica al máximo. Un último agradecimiento al lector, ya que convierte este escrito en una idea útil. Es gracias a todos ustedes que es posible el presente trabajo.

Agradecimientos

Agradezco al Instituto de Física, UNAM, las facilidades que me brindó como estudiante asociado durante la realización de mi servicio social y mis estudios de Maestría.

Agradecemos el apoyo de los proyectos PAPIIT-DGAPA-UNAM IN-107616 y CONACyT 221030.

Declaración de autenticidad

Por la presente declaro que, salvo cuando se haga referencia específica al trabajo de otras personas, el contenido de esta tesis es original y no se ha presentado total o parcialmente para su consideración para cualquier otro título o grado en esta o cualquier otra Universidad. Esta tesis es resultado de mi propio trabajo y no incluye nada que sea el resultado de algún trabajo realizado en colaboración, salvo que se indique específicamente en el texto.

Juan García Nila. Ciudad Universitaria, CDMX, Enero de 2019

Resumen

En esta tesis estudiamos los efectos que una vacancia ocasiona sobre el comportamiento termodinámico de un gas ideal de bosones inmerso en un cristal unidimensional imperfecto.

Los cristales perfectos los generamos aplicando al gas un potencial externo del tipo Kronig-Penney (KP) en el límite de deltas de Dirac. Para generar una imperfección agregamos una delta más en la posición de la delta central del cristal perfecto. La imperfección se convierte en una vacancia cuando la intensidad de la delta agregada es de igual magnitud, pero de signo contrario al del resto de las deltas.

Empezamos calculando el espectro de energías de las partículas usando los métodos de matrices de transferencia y de dispersión, así como con el uso de la función de Green. En el espectro de energías observamos que el efecto de tener una imperfección en el cristal, es decir una delta diferente en el potencial KP, es producir una serie de estados permitidos, conocidos como estados impuros, dentro de las bandas prohibidas del espectro del cristal perfecto.

Reportamos la temperatura crítica de condensación Bose-Einstein (BEC) del gas como función del parámetro de red (separación entre las deltas) y como función del factor de impenetrabilidad de la delta diferente. Entre otras propiedades termodinámicas, graficamos los calores específicos isocórico e isobárico, como función de la temperatura. También, mostramos los potenciales termodinámicos.

Observamos que la presencia de una vacancia en el cristal genera una brecha energética entre el estado base y el primer estado excitado del espectro de energía. Ésta brecha tiene consecuencias inesperadas sobre la magnitud de la temperatura crítica de CBE tal como la existencia de CBE a temperatura finita para el gas de Bose dentro del cristal unidimensional imperfecto lo cual no sucede cuando el cristal es perfecto o el gas es libre. La transición de fase se observa inequívocamente en los calores específico isocórico e isobárico que muestran un salto en sus magnitudes al pasar por la temperatura crítica.

Generalizamos los cálculos para describir los efectos de una imperfección estructural cuando los gases bosónicos se encuentran dentro de estructuras periódicas imperfectas bidimensionales tales como multicintas o multicuadros, y tridimensionales como multiplanos, multitubos o multicubos.

Dado la íntima conexión entre la CBE y el fenómeno de la superfluidez, esperamos que los resultados aquí reportados inspiren y ayuden a los experimentalistas a encontrar nuevos sistemas superfluidos con temperaturas críticas cada vez más altas.

Publicaciones y Congresos

Publicaciones como resultado del trabajo de esta tesis:

- J. G. Martínez-Herrera, J. García-Nila y M. A. Solís, “Bose gas with generalized dispersion relation plus an energy gap”. Disponible el texto completo en arXiv: <https://arxiv.org/pdf/1711.10100.pdf>. Enviado para su publicación.
- J. García-Nila, J. G. Martínez-Herrera, M. Fortes, P. Salas y M. A. Solís, “Raising the Bose-Einstein condensation critical temperature using vacancies”. En proceso.

Congresos donde se presentaron resultados parciales:

- “Gas de Bose con relación de dispersión generalizada más brecha energética”. LIX Congreso Nacional de Física 2016, León, Gto, México.
- “Surface states and Bose-Einstein Condensation”. International Symposium on Quantum Fluids and Solids 2017.
- “Boundary condition effects on the energy spectrum of an one dimensional imperfect crystal”. March Meeting 2018, LA, California, EUA.
- “Efecto de las condiciones de frontera en el espectro energético de una partícula en un cristal unidimensional imperfecto”. Congreso de estudiantes Posgrado en Ciencias Físicas 2017, CDMX, México.
- “Boosting the BEC critical temperature of a bose gas within imperfect periodic structures”. 28th International Conference on Low Temperature Physics, Gothenburg, Sweden.
- “Condensación Bose Einstein en un cristal unidimensional imperfecto”. LX Congreso Nacional de Física 2017, Monterrey, Nuevo León.
- “Condensación Bose-Einstein en sistemas cristalinos Kronig-Penney con una vacancia”. LXI Congreso Nacional de Física 2018, Puebla, Puebla.

Nomenclatura

Símbolo	Descripción	Dimensión
Capítulo 2		
d	Dimensión del sistema	1
\mathbf{k}	Vector de onda	L^{-1}
k	Norma del vector de onda	L^{-1}
m	Masa de la partícula	M
s	Exponente del vector de onda	1
ε	Energía del sistema	ML^2T^{-2}
ε_0	Energía del estado base	ML^2T^{-2}
c_s	Constante de proporcionalidad energía-momento generalizada	$ML^{s+2}T^{-2}$
Δ	Brecha energética entre el estado base y el primer estado excitado	ML^2T^{-2}
N	Número de partículas total	1
N_0	Número de partículas en el estado base	1
n_ε	Número de partículas con energía ε	1
μ	Potencial químico	ML^2T^{-2}
$\beta = 1/k_B T$	Beta termodinámica	$M^{-1}L^{-2}T^2$
T	Temperatura	Θ
L	Longitud del sistema	L
$n = N/L^d$	Densidad total de partículas	L^{-d}
$\Gamma(x)$	Función Gamma en x	1
$\ln(x)$	Función logaritmo natural en x	1
$g_n(x)$	Función de Bose de orden n en x	1
T_c	Temperatura crítica	Θ
$T_{0c} = \Delta_0/k_B$	Temperatura crítica cuando la brecha energética es Δ_0	Θ
$\Delta_0 = k_B T_{0c}$	Brecha energética a una temperatura crítica T_{0c}	ML^2T^{-2}
z_1	Fugacidad dependiente de la brecha energética Δ	1
$z_{0c} \equiv e^{-\frac{\Delta}{k_B T_c}}$	Exponencial de $-\Delta/k_B T_c$	1
T_c^\pm	Límite por la derecha + (izquierda -) de la temperatura crítica	$ML^2T^{-2}\Theta^{-1}$
P	Presión	$ML^{d-2}T^{-2}$
$V = L^d$	Volumen	L^d
U	Energía Interna	ML^2T^{-2}
C_V	Calor específico a volumen constante por partícula	$ML^2T^{-2}\Theta^{-1}$
F	Energía libre de Helmholtz	ML^2T^{-2}
S	Entropía	$ML^2T^{-2}\Theta^{-1}$
H	Entalpía	ML^2T^{-2}
G	Energía libre de Gibbs	ML^2T^{-2}

κ_T	Compresibilidad isotérmica	$M^{-1}L^{-1}T^2$
ΔC_V	Salto del calor específico isocórico	$ML^2T^{-2}\Theta^{-1}$
C_P	Calor específico a presión constante por partícula	$ML^2T^{-2}\Theta^{-1}$
ΔC_P	Salto del calor específico isobárico	$ML^2T^{-2}\Theta^{-1}$
$\gamma = C_P/C_V$	Coefficiente gamma termodinámico	1

Capítulo 3		
x	Posición en el eje de abscisas	L
$V(x)$	Potencial externo en x	ML^2T^{-2}
v_0	Intensidad de las deltas del cristal , energía por longitud	ML^3T^{-2}
$\delta(x)$	Distribución Delta de Dirac en x	L^{-1}
a	Longitud de separación entre los dispersores delta	L
$\frac{d^2}{dx^2}$	Segunda derivada respecto a la posición de las abscisas	L^{-2}
E	Energía, eigenvalor de Schrödinger	ML^2T^{-2}
$\delta(x - x_0)$	Distribución de delta de Dirac, centrada en x_0	L^{-1}
$\kappa = \frac{\sqrt{2m E }}{\hbar}$	Momento entre \hbar	L^{-1}
k	Cuasimomento de Bloch	L^{-1}
$\psi(x)$	Amplitud de probabilidad	L^{-1}
A_i	Amplitud de la onda desplazándose a la derecha	L^{-1}
B_i	Amplitud de la onda desplazándose a la izquierda	L^{-1}
$u(x)$	Función periódica de Bloch	L^{-1}
P	Impermeabilidad de la delta	1
x'	Variable de posición de abscisa distinta a x	L
$G(x, x')$	Función de Green	L
$G(K, x')$	Transformada de Fourier de la función de Green	L
$G(x, x')$	Función de Green	L
K	Variable momento de la transformada de Fourier	L^{-1}
$z = x - x'$	Diferencia de posición	L
n	Número de la celda	1
$[x]$	Función piso en x	—
\mathcal{S}	Matriz de dispersión	—
S_{ij}	Componente $\{i, j\}$ de la matriz de dispersión \mathcal{S}	1
I	Matriz identidad	—
\mathcal{R}	Matriz de transferencia de un solo dispersor	—
R_{ij}	Componente $\{i, j\}$ de la matriz de transferencia \mathcal{R}	1
A_i^\pm	Amplitud de la onda desplazándose a la izquierda después (antes) de cruzar la delta	1
B_i^\pm	Amplitud de la onda desplazándose a la derecha después (antes) de cruzar la delta	1
\mathcal{T}	Matriz de traslación	—
$\mathcal{P} = \mathcal{R}^{-1}\mathcal{T}^{-1}$	Matriz de transferencia de una celda entre dos deltas	—
$\xi = \frac{1}{2}Tr(\mathcal{P})$	Mitad de la traza de la matriz \mathcal{P}	1
v_0	Intensidad de una delta distinta	ML^3T^{-2}
Ψ	Onda de Kronig-Penney (KP), amplitud de probabilidad solución del potencial KP	L^{-1}
C^\pm	Amplitud de la onda de KP desplazándose a la izquierda después (antes) de cruzar la delta	1

0. Nomenclatura

D^\pm	Amplitud de la onda de KP desplazándose a la derecha después (antes) de cruzar la delta	1
P'	Impermeabilidad de la delta diferente	1
$W(x)$	Wronskiano	—
η	Parte imaginaria del cuasimomento de Bloch	L^{-1}
l	Número de celdas unitarias que separan dos imperfecciones	1
\mathcal{M}	Matriz producto de M matrices de transferencia	—
<hr/> Capítulo 4 <hr/>		
$v_{0,j}$	Intensidad de la j -ésima delta distinta	ML^3T^{-2}
P_j	Impermeabilidad de la j -ésima delta distinta	1
\mathcal{P}_j	Matriz de transferencia de una delta con impermeabilidad P_j	—
ξ_j	Mitad de la traza de la matriz de transferencia \mathcal{P}_j	1
$\theta = \cos^{-1}(\xi)$	Cuasimomento discreto de Bloch	1
$U_N(x)$	Polinomio de Chebyshev de segundo orden de grado N en x	1
$M_{i,j}$	Componente i, j de la matriz de transferencia \mathcal{M}	1
P'	Impermeabilidad de la delta distinta	1
\mathcal{P}'	Matriz de transferencia \mathcal{P} de la delta con impermeabilidad P'	—
ξ'	Mitad de la traza de la matriz de transferencia \mathcal{P}'	1
N	Número de deltas antes de la delta imperfecta	1
M	Número de deltas después de la delta imperfecta	1
<hr/> Capítulo 5 <hr/>		
T_0	Temperatura crítica de un gas de bosones en una caja tridimensional	Θ
λ_0	Longitud de onda térmica en la temperatura crítica T_0 de un gas de bosones tridimensional	L
$\rho_0 = \zeta(\frac{3}{2})/\lambda_0^3$	Densidad de un gas de bosones tridimensional	L^{-3}
$a_0 \equiv a/\lambda_0$	Razón entre la longitud de separación entre las deltas a y la longitud de onda térmica λ_0	1
$P_0 \equiv P/a_0$	Impenetrabilidad de la delta sin dependencia en a_0	1
$P'_0 \equiv P'/a_0$	Impenetrabilidad de la delta imperfecta no dependiente de a_0	1
N_b	Número total de bandas	1
$\varepsilon_n(k)$	Energía del momento k de la n -ésima banda	ML^2T^{-2}
$\varepsilon_{I,n}$	Energía del estado impuro n -ésima banda	ML^2T^{-2}
$\zeta(x)$	Función zeta de Riemann en x	1
$\varepsilon_{n,j}$	Energía del estado j -ésimo de la n -ésima banda	ML^2T^{-2}
β_c	Beta termodinámica en la temperatura crítica	$M^{-1}L^{-2}T^2$
<hr/> Capítulo 6 <hr/>		
T_0	Temperatura crítica de un gas de bosones en caja 3D	Θ
x	Componente x de la posición	L
y	Componente y de la posición	L
z	Componente z de la posición	L
r_i	Componente i -ésima de la posición	L
ε	Energía solución del hamiltoniano	ML^2T^{-2}
ε_x	Energía solución del hamiltoniano eje x	ML^2T^{-2}
ε_y	Energía solución del hamiltoniano eje y	ML^2T^{-2}
ε_z	Energía solución del hamiltoniano eje z	ML^2T^{-2}

λ_T	Longitud de onda térmica a una temperatura T	L
k_x	Componente x del vector de onda	L^{-1}
k_y	Componente y del vector de onda	L^{-1}
k_z	Componente z del vector de onda	L^{-1}
L_x	Longitud de la componente x de la caja	L
L_y	Longitud de la componente y de la caja	L
L_z	Longitud de la componente z de la caja	L
M	Número de deltas en el eje x de la misma intensidad	1
M'	Número de deltas en el eje y de la misma intensidad	1
M''	Número de deltas en el eje z de la misma intensidad	1
b	Longitud de separación entre deltas en el eje y	L
$b_0 = b/\lambda_0$	Longitud entre deltas normalizada en el eje y	1
c	Longitud de separación entre deltas en el eje z	L
$c_0 = c/\lambda_0$	Longitud entre deltas normalizada en el eje z	1
i	Índice de la i -ésima banda del espectro de energía ε_x	1
j	Índice de la j -ésima delta en la caja	1
n	Índice de la n -ésima banda del espectro de energía ε_y	1
m	Índice de la m -ésima delta en la caja	1
p	Índice de la p -ésima banda del espectro de energía ε_z	1
q	Índice de la q -ésima delta en la caja	1
d_L	Número de dimensiones con energía de espectro libre	1
d_{KP}	Número de dimensiones con energía de Kronig-Penney	1
<hr/> Apéndice A <hr/>		
ρ	Densidad de masa	ML^{-3}
m^*	Masa efectiva	M
T_λ	Temperatura de transición lambda	Θ
ρ_e	Densidad de masa excitada	ML^{-3}
ρ_n	Densidad del fluido normal	ML^{-3}
<hr/> Apéndice C <hr/>		
U_0	Factor de interacción entre partículas	$ML^{2+d}T^{-2}$
a	Longitud de dispersión	L
$r_0 = \sqrt{\hbar/m\omega_0}$	Longitud característica de la trampa	L
ω_0	Frecuencia de la trampa	T^{-1}
$\bar{\omega} = (\omega_1\omega_2\omega_3)^{\frac{1}{3}}$	Frecuencia promedio geométrica de la trampa	T^{-1}
R	Región especial de la nube de la trampa	L
Π	Parámetro global de presión	$ML^{-1}T^{-2}$
\mathcal{V}	Parámetro global de volumen	L^3

Índice general

Publicaciones y Congresos	XI
Nomenclatura	XIII
Índice de figuras	XXIII
1. Introducción	1
2. Gas de bosones d-dimensional con relación de energía-momento generalizada $\varepsilon \propto k^s$ más una brecha energética $\Delta \neq 0$	9
2.1. Condensación de Bose-Einstein	10
2.1.1. Temperatura crítica	10
2.1.1.1. Fracción de condensado	12
2.1.2. Propiedades termodinámicas	13
2.1.2.1. Ecuación de estado	13
2.1.2.2. Longitud de onda térmica generalizada	14
2.1.2.3. Energía interna	15
2.1.2.4. Calor específico isocórico	16
2.1.2.5. Salto del calor específico isocórico	17
2.1.2.6. Calor específico isobárico	19
2.1.2.7. Salto del calor específico isobárico	22
2.1.2.8. Coeficiente $\gamma = C_P/C_V$	23
2.1.2.9. Entropía	25
2.1.2.10. Energía libre de Helmholtz	26
2.1.2.11. Entalpía	26
2.1.2.12. Energía libre de Gibbs	27
3. Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional infinito	29
3.1. Espectro de energía de una partícula en un cristal unidimensional perfecto	29
3.1.1. Solución usando condiciones de continuidad y discontinuidad	30
3.1.2. Solución usando función de Green	31
3.1.3. Solución usando matrices de traslación, transferencia y de dispersión	35
3.2. Cristal unidimensional infinito con una imperfección	41
3.3. Cristal unidimensional infinito con dos o más imperfecciones	45

3.4. Matriz de transferencia para M imperfecciones separadas igualmente . . .	48
4. Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional finito	51
4.1. Cristal con condiciones de frontera periódicas	53
4.1.1. Cadena cerrada, todas las deltas iguales	54
4.1.2. Cadena cerrada, una delta diferente	55
4.1.2.1. Límite de Dirichlet	58
4.1.3. Estados impuros	58
4.2. Cristal imperfecto con condiciones de frontera de Dirichlet	61
5. Gas de Bose en un cristal unidimensional	67
5.1. Espectro de energía como función de la separación entre las deltas	67
5.1.1. Efecto de la separación entre las deltas sobre el espectro de energía	68
5.1.2. Casos límite: separación entre deltas estrecha y amplia	70
5.1.3. Temperatura crítica de un gas de bosones como función de la separación entre deltas	71
5.2. Magnitud de la brecha energética como función de la impermeabilidad de la imperfección	73
5.3. Cristal finito en comparación con el cristal infinito unidimensional con una imperfección	75
5.3.1. Propiedades termodinámicas	75
5.3.1.1. Energía interna	77
5.3.1.2. Calor específico isocórico	78
5.3.1.3. Gran potencial	81
5.3.1.4. Calor específico isobárico	82
5.3.1.5. Entalpía	84
5.3.1.6. Entropía	85
5.3.1.7. Energía libre de Helmholtz	86
5.3.1.8. Energía libre de Gibbs	86
5.4. Dependencia de las propiedades termodinámicas respecto con la impermeabilidad de la imperfección	87
5.5. Dependencia de las propiedades termodinámicas respecto a la razón a_0 .	89
6. Gas de Bose en estructuras cristalinas bidimensionales y tridimensionales	93
6.1. Estructura bidimensional de multicintas	94
6.2. Estructura tridimensional de multiplanos	97
6.3. Estructura $(d + 1)$ -dimensional: una cristalina y las demás sin estructura	100
6.4. Estructura bidimensional de multicuadros	102
6.5. Estructura tridimensional de multitubos	105
6.6. Estructura tridimensional de multicubos	108
7. Conclusiones	113

A. Casos límite de gas de bosones reportados en la literatura	117
A.1. Gas de bosones en un sistema $d > 0$ dimensional con relación de energía momento generalizada $\varepsilon \propto k^s$ con $s > 0$ con razón $d/s > 1$ y sin brecha energética $\Delta = 0$	117
A.2. Gas bosónico tridimensional ($d = 3$) con energía proporcional al cuadrado del momento $s = 2$	122
A.2.1. Gas ideal $d = 3$ de bosones con $s = 2$ con brecha energética $\Delta > 0$	122
A.2.2. Propuesta de London para la superfluidez del He ⁴ [25].	124
B. Modelo de Kronig-Penney	127
C. Modelos de un gas de bosones con interacciones	131
C.1. Espectro semiclásico para gas diluido	131
C.2. Distribución de Bose radial	132
C.3. Corrimiento de la temperatura crítica	133
C.4. Aproximación de Thomas Fermi	136
C.5. Ecuación de Gross Pitaevskii con potencial de Kronig Penney	137
Referencias	141

Índice de figuras

2.1. Relación de dispersión generalizada para $s=2$, 1 más una brecha de energía.	10
2.2. Temperatura crítica T_c/T_{0c} como función de d/s para distintos valores de $\Delta/k_B T_{0c}$.	12
2.3. Fracción del condensado como función de la temperatura normalizada T/T_c con $\Delta = k_B T_{0c}$ para $d/s = 3, 2, 3/2, 1, 1/2$ y $1/10$.	13
2.4. Energía Interna $(U - N\varepsilon_0)/Nk_B T$ como función de la temperatura normalizada T/T_c con $\Delta/k_B T_{0c} = 1$.	14
2.5. Calor específico isocórico C_V/Nk_B como función de T/T_{0c} , para $\Delta/k_B T_{0c} = 1$ y $d/s = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, 3$.	17
2.6. Salto del calor específico isocórico en T_c como función de la razón d/s , para diferentes valores de $\Delta/k_B T_{0c}$.	18
2.7. Salto del calor específico isocórico en T_c como función de $\Delta/k_B T_{0c}$, para $d/s = 1/2, 1, 3/2, 2$ and 3 .	19
2.8. Calor específico isobárico C_P/Nk_B como función de la temperatura normalizada T/T_{0c} , para $\Delta/k_B T_{0c} = 1$ y $d/s = 0.1, 1/2, 1, 3/2, 2, 3$.	21
2.9. Salto del calor específico isobárico $[C_P(T_c^-) - C_P(T_c^+)]/Nk_B$ en la temperatura crítica T_c como función de $\Delta/k_B T_{0c}$, para $d/s = 1, 3/2, 2$ and 3 .	22
2.10. Salto del calor específico isobárico $[C_P(T_c^-) - C_P(T_c^+)]/Nk_B$ en T_c como función de d/s , para $\Delta = k_B T_{0c} = 0, 1$ y 2 .	23
2.11. Coeficiente gamma $\gamma = C_P/C_V$ como una función de T/T_{0c} para $\Delta/k_B T_{0c} = 1$ y diferentes valores de d/s .	24
2.12. Entropía $S/k_B T$ como función de la temperatura normalizada T/T_{0c} , para $\Delta/k_B T_{0c} = 1$ y $d/s = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, 3$.	25
2.13. Energía Libre de Helmholtz $(F - N\varepsilon_0)/(Nk_B T)$ como función de la temperatura T/T_{0c} , para $\Delta/k_B T_{0c} = 1$ and $d/s = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, 3$.	26
2.14. Entalpía como función de T/T_c , para $\Delta/k_B T_{0c} = 1$ y diferentes valores d/s .	27
2.15. Energía Libre de Gibbs $(G - N\varepsilon_0)/Nk_B T$ como función de T/T_{0c} , para $\Delta/k_B T_{0c} = 1$ y $d/s = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, 3$.	27
3.1. Diagrama de un dispersor delta, se muestran los coeficientes de la onda libre	36
3.2. Diagrama de dos dispersores delta donde se muestran los coeficientes de la onda libre	39

ÍNDICE DE FIGURAS

3.3.	Diagrama de un cristal infinito con dispersores delta iguales con excepción de una delta distinta donde se muestran los coeficientes de la onda de Bloch.	42
3.4.	Diagrama de un cristal infinito con dispersores delta iguales y dos deltas distintas donde se muestran los coeficientes de la onda de Bloch.	46
4.1.	(a) Potencial unidimensional \cos^2 que simula una red óptica con una superposición de un pulso gaussiano y (b) potencial de pulsos gaussianos con una vacancia.	51
4.2.	(a) Espectro de energía y (b) densidad de probabilidad del estado base con 11 deltas iguales $P'/P = 1$ con condiciones de frontera periódicas.	54
4.3.	Esquema de una cadena cerrada de deltas con una diferente.	55
4.4.	(a) Espectro de energía y (b) densidad de probabilidad del estado base con 10 deltas iguales y una distinta con impenetrabilidad relativa $P'/P = 0$.	56
4.5.	(a) Espectro de energía y (b) densidad de probabilidad del estado base con 10 deltas iguales y una distinta con impenetrabilidad relativa $P'/P = 1/2$ con condiciones de frontera periódicas.	57
4.6.	Densidad de probabilidad para el estado base con 11 deltas, 10 iguales y la delta que une es altamente impenetrable, problema de Dirichlet.	59
4.7.	Energía en función del momento de Bloch. En línea punteada (roja) es el caso libre, en puntos (naranjas) los niveles en el caso de 10 deltas iguales y una vacancia, en línea sólida (azul) el espectro de Kronig-Penney.	60
4.8.	Esquema de potencial en función de la posición, en el que se muestran el peine de Dirac en un pozo de potencial.	61
4.9.	Energía en función de la parte real del cuasimomento de Bloch para 51 deltas con la de enmedio removida, con condiciones de Dirichlet.	62
4.10.	Densidad de probabilidad del estado base con 9 deltas en una caja 1D con la de en medio removida en escala lineal (a) y en (b) escala logarítmica.	65
5.1.	Espectro de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ como función de a_0 y $1/a_0$ de un cristal unidimensional infinito con $P_0 = 10$ y una vacancia $P'_0 = 0$.	68
5.2.	Brecha entre el estado base y el primer estado excitado en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ como función de a_0 y $1/a_0$ de un cristal unidimensional infinito con $P_0 = 10$ y una vacancia $P'_0 = 0$.	69
5.3.	Espectro de energía en unidades de $k_B T_0$ como función de a_0 y $1/a_0$ de un cristal unidimensional infinito con $P_0 = 10$ y una vacancia $P'_0 = 10$.	70
5.4.	Brecha Δ entre el estado base y el primer estado excitado en unidades de k_B/T_0 como función de a_0 y $1/a_0$ de un cristal unidimensional infinito con $P_0 = 10$ y una vacancia $P'_0 = 0$.	70
5.5.	Interpretación de un sistema infinito de deltas donde la separación (a) es muy estrecha $a_0 \rightarrow 0$ y (b) la separación es muy grande $a_0 \rightarrow \infty$.	71
5.6.	Temperatura crítica T_c en unidades de T_0 como función de a_0 y $1/a_0$ de un cristal unidimensional infinito con una imperfección para $P_0 = 10$.	72
5.7.	Espectro de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ como función del factor de impermeabilidad de la imperfección P'_0 de un cristal unidimensional infinito con una imperfección con $P_0 = 10$.	73

5.8. Brecha energética entre el estado base impuro y el primer estado excitado en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ como función del factor de impermeabilidad de la imperfección P'_0 de un cristal unidimensional infinito con una imperfección con $P_0 = 10$	74
5.9. Temperatura crítica T_c en unidades de T_0 como función del factor de impermeabilidad de la imperfección P'_0 de un cristal unidimensional infinito con $P_0 = 10$ y una vacancia $P'_0 = 0$	74
5.10. Potencial químico $\mu/k_B T_0$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia ($P'_0 = 0$) para números finitos de deltas e infinito con $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$	76
5.11. Energía interna $(U - N\varepsilon_0)/Nk_B T$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia ($P'_0 = 0$) para números finitos de deltas e infinito con $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$	77
5.12. Derivada del potencial químico $\partial\mu/k_B \partial T$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia ($P'_0 = 0$) para números finitos de deltas e infinito con $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$	78
5.13. Calor específico isocórico C_V/Nk_B como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia ($P'_0 = 0$) para un número finito de deltas e infinito con $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$	79
5.14. Gran potencial $PV/Nk_B T$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia ($P'_0 = 0$) para números finitos de deltas e infinito con $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$	81
5.15. Calor específico isobárico C_P/Nk_B como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia ($P'_0 = 0$) para números finitos de deltas e infinito con $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$	82
5.16. Entalpía $H/Nk_B T$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia ($P'_0 = 0$) para números finitos de deltas e infinito con $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$	84
5.17. Entropía S/Nk_B como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia ($P'_0 = 0$) para números finitos de deltas e infinito con $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$	85
5.18. Energía libre de Helmholtz $(F - N\varepsilon_0)/Nk_B T$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia ($P'_0 = 0$) para números finitos de deltas e infinito con $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$	86
5.19. Potencial químico $\mu/k_B T_0$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una imperfección de diferentes impermeabilidades P'_0 para $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$	87
5.20. Energía interna $U/Nk_B T_0$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal con $P_0 = 10$ unidimensional con una imperfección de diferentes impermeabilidades P'_0 y $a_0 = 1$	88
5.21. Calor específico C_V/Nk_B como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una imperfección de diferentes impermeabilidades P'_0 para $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$	88

ÍNDICE DE FIGURAS

5.22. Potencial químico μ en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia de $P'_0 = 0$ para distintos valores de la razón a_0 con $P_0 = 10$	89
5.23. Energía Interna $U/Nk_B T_0$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia de $P'_0 = 0$ para distintos valores de a_0 con $P_0 = 10$	90
5.24. Calor específico isocórico C_V/Nk_B como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia de $P'_0 = 0$ para distintos valores de a_0 con $P_0 = 10$	90
6.1. Superficies de energía potencial de redes ópticas 1D, 2D y 3D. Los potenciales toman formas de una red 1D (a), cigarros en una red 2D (b), una red 3D cúbica simple (c) y(d). Imagen extraída [65].	93
6.2. Esquema de una estructura periódica de multicintas.	95
6.3. Calor específico isocórico de un gas de bosones en una estructura 2D de multicintas equidistantes.	96
6.4. Esquema de una estructura tridimensional de multiplanos equidistantes.	97
6.5. Calor específico isocórico de un gas de bosones en una estructura 3D de planos equidistantes	100
6.6. Esquema de una estructura bidimensional de multicuadros.	102
6.7. Calor específico isocórico de un gas de bosones en una estructura 2D de multicuadros.	104
6.8. Esquema de una estructura 3D de planos perpendiculares formando tubos.	105
6.9. Calor específico isocórico de un gas de bosones en una estructura 3D de multitubos.	106
6.10. Esquema de un estructura 3D de planos perpendiculares formando cubos.	108
6.11. Calor específico isocórico de un gas de bosones en una estructura 3D de multicubos.	111
A.1. (a) Potencial químico y (b) fracción del condensado como función de la temperatura normalizada T/T_0 sin brecha para $d/s = 13/10, 3/2, 2, 5/2, 3$	117
A.2. (a) Energía interna y (b) calor específico isocórico como función de la temperatura normalizada T/T_0 sin brecha para $d/s = 13/10, 3/2, 2, 5/2, 3$	118
A.3. (a) Calor específico isobárico y (b) factor γ como función de la temperatura normalizada T/T_0 sin brecha para $d/s = 13/10, 3/2, 2, 5/2, 3$	120
A.4. (a) Calor específico isobárico y (b) factor γ como función de la temperatura normalizada T/T_0 sin brecha para $d/s = 13/10, 3/2, 2, 5/2, 3$	121
A.5. (a) Energía libre de Helmholtz y (b) de Gibbs como función de la temperatura normalizada T/T_0 sin brecha para $d/s = 13/10, 3/2, 2, 5/2, 3$	122
A.6. (a) Concentración del fluido y (b) calor específico isocórico del He^4 . En línea punteada se muestra la curva teórica y en línea continua la curva experimental. Figura extraída [25].	125
B.1. Potencial de Kronig-Penney.	127

C.1. Estructura de bandas para los casos de interacción repulsiva: (a) débilmente interactuante $U_0 n = E_0$ y (b) fuertemente interactuante $U_0 n = 10E_0$. Las líneas punteadas muestran la estructura de bandas de KP. [12] 137

C.2. (a) Energía en función del cuasimomento para: (en línea punteada) un sistema libre no interactuante, (en línea punto- raya) un sistema periódico no interactuante y (en línea sólida) un sistema periódico fuertemente interactuante. (b) Analogía magnética que explica la optimización de la energía y su relación con la “Swallowtail”. 138

Introducción

Existen diferentes sistemas en la naturaleza que exhiben macroscópicamente el comportamiento cuántico de las partículas microscópicas que conforman a dichos sistemas, generalmente a temperaturas bajas. Las partículas se pueden clasificar en dos grupos básicos debido al valor de su proyección de espín cuántico: partículas con espín entero conocidas como bosones y partículas con espín semientero llamadas fermiones.

Las partículas bosónicas tienen la propiedad de que dos a más pueden compartir el mismo estado cuántico, a diferencia de los fermiones que sólo uno o quizá otros que tengan proyección de espín alineados de manera opuesta pueden ocupar el mismo estado. Esta propiedad de la estadística de bosones permite que a temperaturas bajas varias partículas puedan ocupar de manera abrupta y macroscópica el estado más bajo de energía, fenómeno conocido como condensación de Bose-Einstein.

En un gas tridimensional ideal homogéneo de partículas bosónicas existe una temperatura crítica de condensación de Bose-Einstein T_c diferente de cero, tal que por debajo de dicha temperatura una fracción de todas las partículas están en el estado base, formando un *condensado de Bose-Einstein* (BEC) [1]. Sin embargo, este fenómeno no se presenta en gases ideales libres bidimensionales o unidimensionales espacialmente homogéneos [2], [3].

Setenta años después de que Einstein hiciera la predicción de la condensación, en 1995, Cornell, Wiemann y colaboradores en el Joint Institute for Laboratory Astrophysics (JILA), sintetizan el primer BEC de un gas diluido en átomos de rubidio ^{87}Rb [4]. Unos cuantos meses después Ketterle del Massachusetts Institute of Technology (MIT) crea un condensado con átomos de sodio ^{23}Na [5]. En el 2001, Cornell, Wiemann y Ketterle ganan el premio Nobel por su trabajo. Después de ellos varios grupos experimentales alrededor del mundo han sintetizado condensados de diferentes gases de átomos alcalinos bosónicos y fermiónicos.

Cabe mencionar que en México, en el LANMAC (Laboratorio Nacional de Materia Ultrafría) del Instituto de Física, se han podido crear gases ultrafríos de fermiones (^6Li) que presentan condensación.

Actualmente los sistemas BEC siguen en investigación básica y sus aplicaciones en la mayoría siguen confinadas a un laboratorio y no han sido explotados comercialmente.

Aún así, existe un gran interés en medición de precisión, ya que estos sistemas son sumamente sensibles a gradientes de gravedad por lo que son explotados para interferometría atómica [6], incluso se afirma que la curvatura espacio-tiempo puede ocasionar corrimientos de fase detectables en estos sistemas [7].

También se plantea usar sistemas BEC para ser usados en relojes atómicos de alta precisión ya que estos superan el límite clásico en los interferómetros atómicos [8], usando redes ópticas.

Una red óptica es una onda estacionaria de luz monocromática formada por la interferencia de dos o más haces láser contrapropagantes, creando un patrón de polarización periódico [9]. Este arreglo periódico unidimensional puede ser usado como potencial de atrapamiento de gases fríos, si se agregan más haces se pueden formar estructuras bi- o tridimensionales [10]. Estas redes se pueden simular teóricamente con potenciales periódicos, como un cristal de estado sólido. Estas redes tienen la ventaja de que la profundidad del potencial puede ser modulada, permitiendo jugar con la interacción entre los átomos [11].

Con el fin de hacer un estudio teórico se modelan dichas redes como potenciales periódicos en la ecuación no lineal de Schrödinger, usando el modelo sencillo de Kronig-Penney en lugar de potenciales sinusoidales [12]. Se ha presentado la deformación de la estructura de bandas y estudiado el espectro de excitaciones de estos sistemas interactuantes [13]. Esta ecuación no lineal se ha usado para hacer analogías en temas de Gravitación, Cosmología y Materia Oscura. Por ejemplo se ha hecho analogías de la ecuación de Klein-Gordon que estudia la dinámica de un campo escalar con la ecuación no lineal de Gross-Pitaevskii [14].

Por otra parte, un fenómeno frecuentemente relacionado con BEC es la superfluidez. Diversas teorías y técnicas experimentales han tratado de explicar la superfluidez helio líquido, sus propiedades termodinámicas, y en particular la discontinuidad del calor específico a una temperatura crítica conocida como transición lambda.

W. H. Keesom y A. P. Keesom [15] realizan en 1935 mediciones del calor específico bajo presión de vapor saturada y atribuyen la transición con la interacción entre átomos vecinos.

En 1937, H. Fröhlich [16] propuso que se puede describir dicha singularidad del calor específico como una transición de fase orden-desorden en la distribución de los átomos de helio entre dos mallas cristalinas iguales interpenetradas de manera que a bajas temperaturas solo una malla es ocupada por los átomos del helio y conforme se incrementa la temperatura se presenta la transición debido a que los átomos ocupan la otra malla de manera aleatoria hasta que su número se divide entre ambas mallas.

En 1938, Allen, Jones y Misener estudian experimentalmente el flujo del helio líquido con el fin de estudiar las propiedades de alta conductividad y el efecto fuente [17] y simultáneamente estudian también la extrema baja viscosidad y capilaridad [18]. Ellos se basan en el trabajo de Fröhlich para explicar el transporte de calor debido al flujo de desorden de los átomos ocupando la segunda malla debido a que tienen una longitud larga de camino libre medio al fluir.

Incluso en ese año de 1938, W. H. Keesom junto a K.W. Taconis [19] explican que el largo camino libre medio puede deberse a la estructura de forma hexagonal empaquetada (en forma de diamante) de los átomos de helio. Mientras que F. London [20] observa que la transición de un gas ideal de bosones con densidad y masa molecular del helio líquido es del mismo orden de magnitud que la del fenómeno de transición lambda, por lo que divide a las partículas condensadas con energía cinética cero y las no condensadas con energía cinética no cero, con la que obtiene un calor específico que a bajas temperaturas

es proporcional a la potencia $3/2$ con la temperatura.

Cabe mencionar a un importante personaje en este contexto, P. L. Kapitza, quien estudia la anormal viscosidad del helio II bajo la transición λ , para ello mide la caída de presión del fluido entre dos discos. Más adelante en agosto de 1941 [21] estudia la transferencia de calor del helio II en capilares y atribuye que el fluido se comporta termodinámicamente reversible a bajas temperaturas. Por su trabajo recibe admiración por parte del gobierno soviético y funda el Institute for Physical Problems, hasta que pierde la condescendencia de Stalin cuando se niega a trabajar en la construcción de armas nucleares. Tras la muerte de Stalin en 1955, lo restituyen como director del Instituto. En 1978 fue galardonado con el Premio Nobel de Física.

En julio de 1941, A. Bijl, J. de Boer y A. Michels [22] adaptan la teoría de condensación de Bose-Einstein para explicar la superfluididad del helio líquido añadiendo una energía de excitación la cual permite a algunas partículas moverse y diferenciarlas de las ya condensadas como en la teoría de London, además que ésta es análoga a la conducción iónica en las mallas descritas en la teoría de Fröhlich y Keesom. De esta manera, la energía de la partícula tiene la contribución de la energía cinética proporcional al cuadrado del momento de las partículas más un término adicional que representa la corrección debida a la *energía de excitación*.

Incluso los trabajos de T. Matsubara [23] y M. Toda [24] de 1951, los cuales estudian la teoría de un líquido con interacción molecular, introducen la energía de excitación como un término adicional al espectro de energía diferente al estado base y proponen que esta excitación toma un papel predominante en la transición lambda.

En 1954 antes de morir, F. London publica un libro sobre superfluididad [25], en el cual propone añadir una brecha energética entre la energía del estado base respecto a la energía del primer estado excitado donde la energía tiene una dependencia cuadrática respecto al momento, con lo cual las propiedades termodinámicas dependen de la magnitud de esta brecha, exhibiendo una discontinuidad en el calor específico y calculando explícitamente el orden del salto del calor específico, lo cual difiere con el comportamiento divergente observada en la temperatura crítica de la transición lambda, aún así obtiene que la temperatura crítica de transición es del orden de la temperatura de transición lambda del helio.

L. Tisza [26], ocupó la idea de London y propone un modelo de dos fluidos: una componente superfluida hecha de átomos condensados y una componente normal hecha de átomos no condensados. Los átomos condensados al estar en el estado base, no contribuyen con intercambio de momento, en cambio los no condensados serían responsables de la disipación, además predice que el radio de concentración superfluida obedece la misma ecuación que la fracción de condensado, incrementándose cuando la temperatura disminuye a cero (vease apéndice A).

Cuatro años más adelante, en 1959, Hugenholtz y Pines [27] estudian la depleción del estado base como una consecuencia de la interacción entre partículas utilizando un tratamiento de cuántica de campos, con lo que prueban que las bajas excitaciones no poseen una brecha energética.

En la literatura [28] también se ha propuesto una relación de dispersión, la energía en función del momento, para las excitaciones y no para las partículas del helio superfluido que depende de dos contribuciones: la fonónica y la rotónica. De manera que a bajas

energías la contribución fonónica predomina, de forma que la energía proporcional al momento. Sin embargo a energías ligeramente más elevadas, la parte rotónica se presenta con lo cual la energía depende de manera cuadrática con el momento más una *brecha energética*, explicando el mínimo local en la relación de dispersión.

En trabajos recientes ha aumentado el interés en el estudio de superfluidez en dimensiones menores como en el ^4He en bulto, como el trabajo del 2013 de N. Wada y colaboradores [29] han observado experimentalmente superfluidez del ^4He en láminas delgadas bidimensionales y en nanotubos unidimensionales al observar un corrimiento de fase en la frecuencia en un sistema de un oscilador torsional. El mismo grupo de N. Wada, ya había estudiado previamente en 2001 [30] fluidos bosónicos de ^4He en paredes porosas unidimensionales con un diámetro aproximado de 18 Å y observa que el calor específico a bajas temperaturas se comporta lineal con la temperatura, lo que atribuye al comportamiento fonónico.

Existen diferentes trabajos que establecen que no hay transición de fase a una temperatura finita en una o dos dimensiones en interacciones de corto alcance y potenciales homogéneos, por ejemplo: el teorema de 1966 de Mermin-Wagner [31], el cual establece la ausencia de (anti)ferromagnetismo en una o dos dimensiones; el argumento de 1958 de Landau-Lifshitz [32] que lo aplica a una malla unidimensional de L sitios los cuales pueden escoger entre dos estados distintos; el teorema de 1950 de van Hove [33] quien estudia la no existencia de transición de fase en modelos de fluidos homogéneos con interacción de esfera dura o el caso del trabajo de Heisenberg de 1967 [34] quien lo aplicó a sistemas de fermiones y bosones explotando las desigualdades de Bogoliubov [35]. Una prueba bastante simple e interesante se expone en la tesis de Irsigler [36].

Sin embargo, en la literatura existen modelos unidimensionales que exhiben una transición de fase. Esto se debe a que los sistemas que presentan los autores anteriores excluyen ciertos sistemas particulares como los modelos inhomogéneos, lo cual significa que excluyen los sistemas aperiódicos.

En la literatura con frecuencia se estudian los sistemas unidimensionales, ya que éstos son más amables de resolver mediante cálculos analíticos usando el espectro de energía y a partir de ellos en algunas ocasiones, se puede generalizar el problema a mayores dimensiones. Al resolver el modelo de Ising unidimensional por medio de matriz de transferencia se obtiene que existe un eigenvalor máximo y de multiplicidad uno por lo que en el límite termodinámico este eigenvalor es mucho mayor que cualquier otro por lo que no se presenta transición. En el trabajo de 2004 de J. A. Cuesta y A. Sánchez [37] se comparan distintos modelos unidimensionales que si presentan transición de fase como los modelos de Kittel [38] o el de Chui-Weeks y generalizan el teorema de Perron-Frobenius que establece que una matriz no negativa e irreducible tiene un único eigenvalor máximo (de multiplicidad uno) para determinar cuándo se presenta una transición de fase.

Diversos autores han podido observar la aparición de una brecha de energía en el espectro energético de las partículas sin interacción debido a la asimetría de la estructura de red compleja donde se encuentran. En ciertos sistemas se expone la presencia de una brecha de energía entre el estado base y el primer excitado para bosones confinados, por ejemplo: en el trabajo de Brunelli del 2001 que estudian una red óptica en forma de estrella [39], o el trabajo de Vidal del 2011 que estudia un grafo de rueda infinitamente

ramificado y un grafo estelar infinitamente ramificado [40] en los cuales se observa una transición de fase en una temperatura finita no cero debido al sitio central que une a todos los sitios de la periferia, o bien en el trabajo de Burioni del 2001 que estudia redes compuestas por cadenas lineales interconectadas [41] o el trabajo de Oliveira del 2013, el cual estudia una red apolúnea [42].

Por otra parte en 2012, Mullin. W y Sakhel A.R. [43] discuten sobre una condensación de Bose generalizada (GBEC), la cual se observa en ciertos sistemas que presentan un efecto de condensación simultánea en múltiples estados y la clasifican en tres tipos: en el tipo I existe un número discreto de estados cuánticos con ocupación macroscópica como en el caso de un potencial de oscilador armónico isotrópico; en el tipo 2 se tiene condensación en una banda continua de estados, cada uno con ocupación macroscópica, como en el caso de un potencial de canal (un potencial armónico en una dirección y libre en la dirección perpendicular); mientras que en el tipo 3 se tiene que una banda entera de estados tiene un número macroscópico de partículas pero cada estado tiene una ocupación microscópica como en el caso de un prisma de Casimir (una caja de longitud larga en comparación a su área transversal).

Además, se sabe que los potenciales externos pueden cambiar la dimensionalidad donde puede existir un condensado de Bose, así como la magnitud de su temperatura crítica. Tal es el caso del trabajo de V. Bagnato [44] que obtiene analíticamente la temperatura crítica y la magnitud del salto del calor específico para distintos potenciales externos uniformes con dependencia lineal o cuadrática (oscilador) en distintas dimensiones, o bien como M. Grether [45] quien analiza las propiedades termodinámicas de un gas de bosones o fermiones en d -dimensiones atrapado en potenciales mutuamente perpendiculares de oscilador armónico, o bien en sistemas bosónicos de redes ópticas unidimensionales y bidimensionales [10].

En esta tesis proponemos describir las propiedades de un gas ideal de bosones dentro de estructuras periódicas similares a una red óptica, al aplicar a las partículas del gas en un potencial externo tipo Kronig-Penney [46]. Para facilitar el cálculo analítico del espectro de energía de las partículas, usamos el potencial en el límite de deltas de Dirac. Aprovechamos el método de matrices de transferencia, cómo lo expone en 2001 D. J. Griffiths [47], el cual usa este método para resolver la propagación de una onda con la ecuación de Schrödinger en un medio periódico de N celdas idénticas. Análogamente se expone en esta tesis el método seguido por D. S. Saxon y R. A. Hutner de 1971 [48] quienes utilizan el método de matrices de transferencia, de traslación y de dispersión para resolver analíticamente el problema del peine de Dirac donde algunas de las deltas tienen intensidad distinta a las otras. Saxon y Hutner [48] reportan el espectro usual de bandas continuas de energía de Kronig-Penney, junto con la aparición de estados energéticos adicionales los cuales les llama estados impuros y a los cuales les corresponde un cuasimomento de Bloch complejo como lo expone M. Steslicka [49] en un trabajo de ese mismo año.

En el caso de la remoción de una delta a nuestro sistema periódico de deltas, el estado base del sistema es el estado impuro de energía más baja. Por lo que se puede aprovechar la brecha energética entre el estado base impuro y el primer estado excitado que corresponde a la energía más baja de la primera banda usual de Kronig-Penney, para promover la condensación de bosones a una temperatura finita no cero en un sistema

unidimensional. Asimismo, se puede aprovechar la combinación de los espectros para obtener sistemas de mayor dimensión.

Como antecedente a continuación mencionaremos algunos trabajos que se han realizado en nuestro grupo de Muchos Cuerpos Cuánticos. Por ejemplo, P. Salas y colaboradores [50], estudiaron un gas de bosones sin interacción en multicapas de superconductores de cupratos, para ello propone un modelo en una estructura tridimensional de multiplanos (multicapas) y obtuvieron la temperatura crítica y la variación de esta respecto a la separación entre las capas, además de encontrar expresiones explícitas para el calor específico isocórico.

Asimismo, dos años después, P. Salas [51] reporta las propiedades termodinámicas de un gas ideal de bosones confinado en una estructura en forma de tubos, donde el objetivo fue explicar por ejemplo la absorción de ^4He en canales intersticiales de nanotubos de carbono o bien en cables superconductores de Nb_3Sn . En otro trabajo [52] estudia el modelo de superconductividad Bosón Fermión en superconductores de cuprato bajo dopados usando un potencial similar y una mezcla de bosones con electrones apareados y no apareados.

En 2013, el estudiante O. A. Rodríguez [53] expuso el problema de un gas de bosones en una estructura de multibloques de ancho a y separados entre sí una distancia b y compara el comportamiento de la temperatura crítica de su sistema con el caso de multicapas.

En 2016, la estudiante G. Guijarro [55] reportó el calor específico de un gas de bosones en una estructura finita de cables en forma de multitubos. En el trabajo discute de que en el caso finito el máximo exhibe un comportamiento suave a diferencia que en el caso infinito el cual presenta un salto discontinuo.

En el mismo año V. Barragán [54] discutió un gas de bosones en sistemas de estructura multicapa tridimensional usando el modelo de peine de Dirac e introduce de manera aleatoria imperfecciones obteniendo un aumento en la temperatura crítica del gas de bosones respecto al gas libre sin estructura.

En este trabajo uso un modelo de un cristal con una vacancia, cuyo espectro de energía presenta una brecha energética entre la energía del estado base y el primer estado excitado, con el fin de aumentar la temperatura crítica de condensación de Bose-Einstein. Los resultados aquí reportados tienen la finalidad de inspirar a encontrar nuevos sistemas experimentales superfluidos.

A continuación, se expone la estructura de la tesis, ofreciendo ideas generales expuestas en cada capítulo.

En el Capítulo 2 se calcula analíticamente la temperatura crítica de condensación de Bose-Einstein de un gas d -dimensional de bosones de masa m y de espín cero con energía proporcional al momento elevado a un exponente $s > 0$ con una brecha energética adicional entre la energía del estado base y la del primer estado excitado. Se calculan analíticamente las propiedades termodinámicas como la longitud de onda térmica, la entropía, los potenciales termodinámicos: la energía interna, el gran potencial, la entalpía y las funciones libres de Gibbs y Helmholtz. También se estudian los calores específicos isocórico e isobárico y sus respectivos saltos dependientes de los factores d , s y de la brecha energética Δ .

En el Capítulo 3 se presenta el modelo de un cristal unidimensional con una imper-

fección generado por un potencial externo estilo Kronig Penney en el límite de deltas de Dirac, el cual presenta una brecha energética entre el estado más bajo de energía y el primer estado excitado. Aprovechamos los métodos de función de Green, así como de matrices de transferencia y dispersión para solucionar la ecuación de Schrödinger, con el fin de obtener la función de onda y el espectro de energía. Debido a la imperfección, en el espectro aparecen una serie de valores discretos de la energía en las bandas prohibidas del espectro del cristal perfecto.

En el Capítulo 4 se calcula analíticamente el espectro de energías para una partícula en un cristal finito de M deltas iguales con una distinta usando la matriz de transferencia e imponiendo condiciones de frontera periódicas y de Dirichlet. Se obtiene la energía como función del cuasimomento de Bloch y las funciones de onda correspondientes.

En el Capítulo 5 obtenemos las propiedades termodinámicas de un gas de bosones dentro de una caja unidimensional a la cual se le ha agregado un potencial de deltas con una imperfección en una caja. Además, se estudia la dependencia de la temperatura crítica y la brecha entre el estado más bajo y el primer excitado como función de la separación de los dispersores.

En el Capítulo 6, se obtienen las temperaturas críticas y el calor específico isocórico en función de la temperatura para un gas de bosones no interactuante en estructuras cristalinas bidimensionales con imperfecciones: estructura de multicintas y multicuadros; y en las estructuras tridimensionales: multiplanos, multitubos y multicubos.

Se presentan nuestras conclusiones en el Capítulo 7. En el apéndice A, usamos los resultados del Capítulo 2 para recuperar los casos límite del gas de bosones reportados en la literatura: las propiedades termodinámicas de un gas sin brecha energética y la propuesta de London para explicar la transición lambda del helio. En el Apéndice B se explica cómo obtener el espectro usual de Kronig Penney usando condiciones de continuidad. En el Apéndice C, se expone un gas de bosones débilmente interactuante con una brecha energética, asimismo queremos que esto sirva para proponer las perspectivas a futuro de este trabajo: añadir interacciones entre las partículas usando la ecuación de Gross Pitaevskii.

Gas de bosones d -dimensional con relación de energía-momento generalizada $\varepsilon \propto k^s$ más una brecha energética $\Delta \neq 0$

En este capítulo se exponen las propiedades termodinámicas de un gas de N bosones de masa m no interactuantes y sin espín, en d dimensiones (con $d > 0$) cuyas partículas tienen una relación energía-momento generalizada $\varepsilon = c_s k^s$ con $s > 0$ más una brecha energética Δ entre la energía del estado base y la energía del estado excitado de más baja energía, correspondiente al límite por la derecha $k = 0$,

$$\varepsilon = \begin{cases} \varepsilon_0 + \Delta + c_s k^s, & k > 0 \\ \varepsilon_0, & k = 0 \end{cases} \quad (2.1)$$

donde Δ es la brecha energética entre el estado base ε_0 y el primer estado excitado.

Esta expresión generaliza el modelo propuesto por V. C. Aguilera-Navarro, M. de Llano y M. A. Solís [56], los cuales obtienen las propiedades termodinámicas de un gas d -dimensional de bosones con una relación de energía-momento con exponente positivo $s > 0$, asimismo este modelo incluye la brecha energética, propuesto por F. London [25].

Esta inclusión de una brecha energética es aplicado por London para explicar el fenómeno de la transición lambda en el He^4 , para mayores detalles, favor de revisar el apéndice A.

En la figura 2.1 se muestra la relación de energía-momento dispersión generalizada $\varepsilon \propto k^s$ para $s = 2, 1$ más una brecha de energía Δ . En ambos casos el espectro energético es un continuo de energía, donde se tiene entre el estado más bajo de energía del espectro continuo y el estado base se encuentra una brecha energética. El caso con $s = 2$ es el usualmente reportado en la literatura, que expresa una relación de energía proporcional al cuadrado del momento y se reporta en el apéndice de éste trabajo.

En este capítulo demostraremos que este sistema sin interacciones con una brecha energética adicional presenta una transición de fase de segundo orden de condensación de Bose a una temperatura finita distinta de cero, incluso a dimensiones bajas. En el Apéndice A se reproducen casos reportados en la literatura de Física Estadística [2] y el reportado por London [25]. El caso sin brecha se discute de manera amplia en ese apéndice.

Usando la relación de dispersión con la brecha (2.1) junto con la distribución de

2. Gas de bosones d -dimensional con relación de energía-momento generalizada $\varepsilon \propto k^s$ más una brecha energética $\Delta \neq 0$

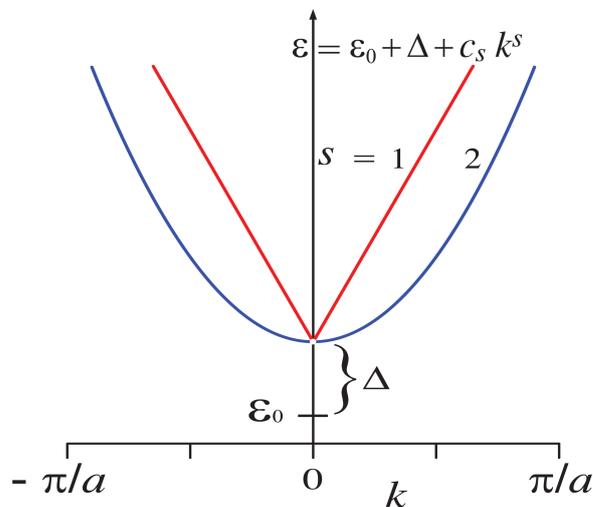


Figura 2.1: Relación de dispersión generalizada para $s=2, 1$ más una brecha de energía.

bosones se pueden encontrar las propiedades termodinámicas del gas como lo reporta la literatura [2].

2.1. Condensación de Bose-Einstein

2.1.1. Temperatura crítica

Para calcular la temperatura crítica de transición se comienza a partir de la ecuación de número de partículas bosónicas

$$N = N_0 + \sum_{\varepsilon \neq \varepsilon_0} n_\varepsilon \quad (2.2)$$

donde N_0 es el número de partículas en el estado base, $n_\varepsilon = 1/(e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1)$ es la distribución de Bose. Donde $\beta = 1/k_B T$, siendo k_B la constante de Boltzmann, T la temperatura y μ el potencial químico.

Suponga que el gas se encuentra en una caja d -dimensional cuya arista tiene longitud L . En el límite termodinámico se tiene que tanto el número de partículas $N \rightarrow \infty$ como el volumen del sistema $L^d \rightarrow \infty$ son infinitamente grandes aunque la densidad $n \equiv N/L^d$ se mantiene constante, pero el número de estados accesibles para cada partícula forma un espectro continuo, por lo que la suma se puede cambiar por una integral sobre el espacio Ω de momentos d -dimensional, $\sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} \rightarrow \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \int_{\Omega} d\mathbf{k}$.

$$N = N_0 + \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \int_{\Omega} \frac{d\mathbf{k}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1}, \quad (2.3)$$

donde la diferencial $d\mathbf{k}$ corresponde al elemento de área de la esfera d -dimensional de

momentos, al sustituir la ecuación de energía-momento (2.1) e integrar se obtiene

$$N = N_0 + \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \int_0^\infty \frac{k^{d-1} dk}{e^{\beta(\varepsilon(k)-\mu)} - 1}. \quad (2.4)$$

En términos de la función de Bose $g_n(x) = \sum_{k=1}^\infty x^k/k^n$

$$N = N_0 + \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \frac{2\pi^{d/2}(k_B T)^{d/s}}{s c_s^{d/s} \Gamma(d/2)} \Gamma(d/s) g_{\frac{d}{s}}(z_1) \quad (2.5)$$

donde $z_1 \equiv e^{\beta(\mu-\varepsilon_0-\Delta)}$ es la fugacidad dependiente de la brecha energética Δ .

A una temperatura crítica T_c el potencial químico μ toma el valor de la energía del estado base ε_0 y la fracción de condensado $N_0/N \approx 0$, con ayuda de (2.5) se determina dicha temperatura

$$T_c = \frac{c_s}{k_B} \left(\frac{s(2\pi)^d \Gamma(d/2) n}{2\pi^{d/2} \Gamma(d/s) g_{\frac{d}{s}} \left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T_c}} \right)} \right)^{s/d}. \quad (2.6)$$

De la ecuación (2.6) se observa que la temperatura crítica es independiente del estado base ε_0 , pero es dependiente del valor Δ , que difiere del caso usual con $\Delta = 0$.

Debido a que los parámetros Δ y T_c debemos escoger una cantidad para normalizar nuestras ecuaciones. Para analizar el caso en que $0 < d/s \leq 1$ se debe escoger una temperatura diferente de cero para normalizar a la temperatura crítica T_c , por lo que se escoge una temperatura T_{0c} que sea la crítica en el caso que $\Delta(T_{0c}) = \Delta_0 \equiv k_B T_{0c}$.

De la ecuación (2.6), vemos que la T_{0c} cumple que

$$T_{0c} = \frac{c_s}{k_B} \left(\frac{s(2\pi)^d \Gamma(d/2) n}{2\pi^{d/2} \Gamma(d/s) g_{\frac{d}{s}}(e^{-1})} \right)^{s/d}. \quad (2.7)$$

Tomando el cociente entre ambas temperaturas (2.6) y (2.7) nos da una expresión válida para $d/s > 0$.

$$\frac{T_c}{T_{0c}} = \left(\frac{g_{\frac{d}{s}}(e^{-1})}{g_{\frac{d}{s}} \left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T_{0c}} \frac{T_{0c}}{T_c}} \right)} \right)^{s/d}. \quad (2.8)$$

En la figura 2.2 se muestra la gráfica de la temperatura crítica como función de d/s para diferentes valores de $\Delta/k_B T_{0c}$, se observa que para $d \gg 1$ (y/o si $s \ll 1$) el valor de la fracción $T_c/T_{0c} \approx 1$, por lo que la temperatura crítica es independiente de la brecha. Sin embargo, la temperatura crítica se hace cero para valores $d/s \leq 1$ si la brecha energética es cero $\Delta = 0$, lo que indica que no hay condensación de Bose a temperatura finita distinta de cero, corroborándose el teorema de Mermin-Wagner [31].

2. Gas de bosones d -dimensional con relación de energía-momento generalizada $\varepsilon \propto k^s$ más una brecha energética $\Delta \neq 0$

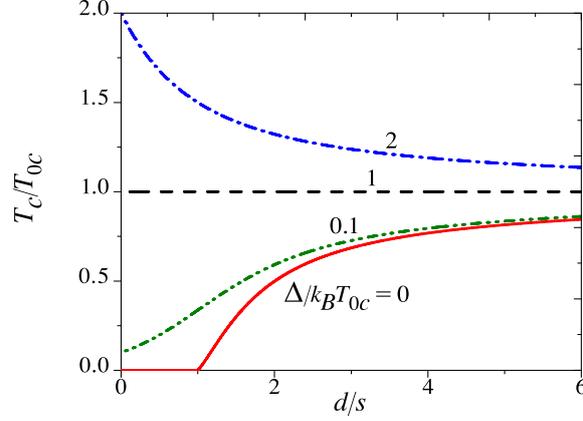


Figura 2.2: Temperatura crítica T_c/T_{0c} como función de d/s para distintos valores de $\Delta/k_B T_{0c}$.

2.1.1.1. Fracción de condensado

De la expresión (2.5) y (2.6) se puede escribir la fracción de condensado como

$$N_0/N = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{d/s} \frac{g_{\frac{d}{s}}(z_1)}{g_{\frac{d}{s}}\left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T_c}}\right)}. \quad (2.9)$$

Se tiene entonces que para $T > T_c$ la fracción de condensado $N_0/N \approx 0$ es cero. Para temperaturas menores que la crítica $T < T_c$ el potencial químico es igual a la energía del estado base, por lo que

$$\frac{N_0}{N} = 1 - (T/T_c)^{d/s} \frac{g_{\frac{d}{s}}\left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}}\right)}{g_{\frac{d}{s}}\left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T_c}}\right)}, \quad (2.10)$$

debido a que la fugacidad $z_1(T \leq T_c) = e^{-\frac{\Delta}{k_B T}}$.

En la figura 2.3 se muestra que el comportamiento de la fracción del condensado como función de la temperatura normalizada T/T_c decrece monóticamente en el intervalo $0 < T/T_c < 1$, salvo que no está definido con $\Delta = 0$ para $d/s < 1$. Observe que la fracción de condensado crece en su concavidad conforme d/s crece. Para temperaturas mayores que la crítica $T/T_c > 1$, la fracción N_0/N es cero.

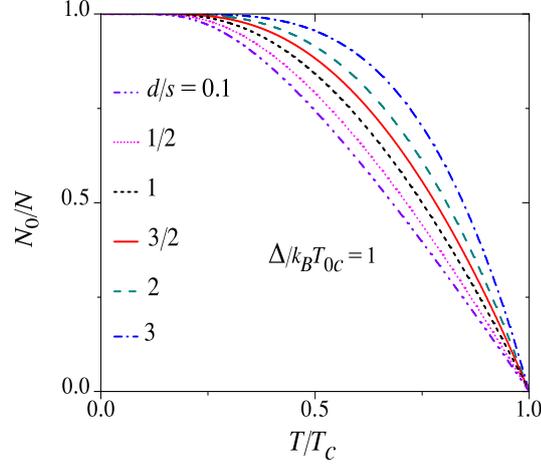


Figura 2.3: Fracción del condensado como función de la temperatura normalizada T/T_c con $\Delta = k_B T_{0c}$ para $d/s = 3, 2, 3/2, 1, 1/2$ y $1/10$.

2.1.2. Propiedades termodinámicas

En este apartado calculamos explícitamente las potenciales termodinámicos y los calores específicos. Aunque en cualquiera de ellos se puede observar un comportamiento peculiar en la temperatura crítica T_c , por ejemplo en los potenciales termodinámicos en función de la temperatura son continuos en T_c pero con un cambio abrupto en la derivada, lo que ocasiona que los calores específicos tengan un salto discontinuo en T_c .

2.1.2.1. Ecuación de estado

La ecuación de estado relaciona las variables intensivas del gas como la presión y la temperatura con las extensivas como el número de partículas, el potencial químico y el volumen. Esta ecuación se puede obtener partiendo del ensamble gran canónico, en el límite termodinámico la suma sobre las energías se vuelve una integral sobre el espacio de momentos, obteniendo

$$\begin{aligned} \frac{PV}{k_B T} &= - \sum_{\epsilon} \ln \left(1 - e^{-\beta(\epsilon - \mu)} \right) \\ &= - \ln \left(1 - e^{-\beta(\epsilon_0 - \mu)} \right) - \left(\frac{L}{2\pi} \right)^d \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \int_0^{\infty} \ln \left(1 - e^{-\beta(\epsilon - \mu)} \right) k^{d-1} dk \end{aligned}, \quad (2.11)$$

resolviendo la integral por partes y ocupando la ecuación de número (2.4) obtenemos la ecuación de estado

$$\frac{PV}{N k_B T} = - \frac{\ln \left(1 - e^{-\beta(\epsilon_0 - \mu)} \right)}{N} + \left(\frac{T}{T_c} \right)^{d/s} \frac{g_{\frac{d}{s}+1}(z_1)}{g_{\frac{d}{s}} \left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T_c}} \right)} \quad (2.12)$$

2. Gas de bosones d -dimensional con relación de energía-momento generalizada $\varepsilon \propto k^s$ más una brecha energética $\Delta \neq 0$

El primer término puede ser escrito en términos del número de partículas en el estado base, $N_0 = 1/(e^{\beta(\varepsilon_0 - \mu)} - 1)$, de manera que

$$-\ln\left(1 - e^{-\beta(\varepsilon_0 - \mu)}\right)/N = \ln(N_0 + 1)/N \quad (2.13)$$

en el límite termodinámico $N \gg 1$, dicho término es despreciable, dejando

$$P = \frac{Nk_B T}{V} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{d/s} \frac{g_{\frac{d}{s}+1}(z_1)}{g_{\frac{d}{s}}\left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T_c}}\right)}. \quad (2.14)$$

A altas temperaturas $T/T_c \gg 1$ se recupera el límite clásico de la ecuación de estado de gas ideal $P = Nk_B T/V$.

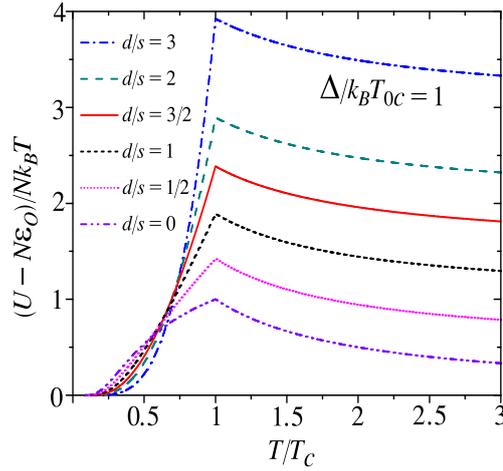


Figura 2.4: Energía Interna $(U - N\varepsilon_0)/Nk_B T$ como función de la temperatura normalizada T/T_c con $\Delta/k_B T_{0c} = 1$.

2.1.2.2. Longitud de onda térmica generalizada

La ecuación de estado (2.14) puede ser escrita en términos de una longitud de onda térmica λ de De Broglie como

$$P = \frac{k_B T}{\lambda^d} g_{\frac{d}{s}+1}(z_1) \quad (2.15)$$

donde el factor de longitud de onda térmica es

$$\lambda = \left(\frac{V}{N} g_{\frac{d}{s}} \left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T_c}} \right) \right)^{\frac{1}{d}} \left(\frac{T_c}{T} \right)^{\frac{1}{s}} \quad (2.16)$$

que al sustituir la expresión de la temperatura crítica (2.7) en función de la densidad de partículas $N/V = n$, se obtiene una expresión sin dependencia de la brecha

$$\lambda = 2\sqrt{\pi} \left(\frac{c_s}{k_B T} \right)^{\frac{1}{s}} \left(\frac{\Gamma(\frac{d}{2} + 1)}{\Gamma(\frac{d}{s} + 1)} \right)^{\frac{1}{d}}. \quad (2.17)$$

donde esta expresión es análoga a la obtenida por Z. Yan [57].

Esta última expresión de la longitud de onda térmica es independiente de la brecha Δ , aunque dependiente de los factores s y d , lo cual no ocurre con otras propiedades termodinámicas.

Además se observa que en el caso de haber tenido una relación de dispersión tal que la energía es proporcional al cuadrado del momento $s = 2$, entonces se recupera el caso $\lambda = 2\sqrt{\pi c_2/k_B T} = h/\sqrt{2\pi k_B T}$, con $c_2 = \hbar^2/2m$, el cual es también independiente del factor d de dimensión.

2.1.2.3. Energía interna

La energía interna del sistema es la suma de las energías de cada partícula

$$U = N_0 \varepsilon_0 + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \varepsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} = N_0 \varepsilon_0 + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} - 1}, \quad (2.18)$$

donde en el límite termodinámico se reemplaza la suma sobre los momentos por la integral sobre la energía y usando la relación de dispersión (2.1), se obtiene

$$U = N_0 \varepsilon_0 + \left(\frac{L}{2\pi} \right)^d \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{s c_s^{\frac{d}{s}} \Gamma(d/2)} \int_{0^+}^{\infty} \frac{(\varepsilon + \varepsilon_0 + \Delta) \varepsilon^{\frac{d}{s} - 1} d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon + \varepsilon_0 + \Delta - \mu)} - 1}, \quad (2.19)$$

reemplazando N_0 por los términos de la ecuación de número (2.5) y siguiendo el álgebra correspondiente, la expresión anterior se reduce a

$$\frac{U - N \varepsilon_0}{N k_B T} = \frac{(T/T_c)^{\frac{d}{s}}}{g_{\frac{d}{s}} \left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T_c}} \right)} \left[\frac{d}{s} g_{\frac{d}{s} + 1}(z_1) + \frac{\Delta}{k_B T} g_{\frac{d}{s}}(z_1) \right]. \quad (2.20)$$

2. Gas de bosones d -dimensional con relación de energía-momento generalizada $\varepsilon \propto k^s$ más una brecha energética $\Delta \neq 0$

En términos del gran potencial PV (2.14) la expresión anterior se reescribe como

$$\frac{d}{s}PV = U - N \left[\varepsilon_0 + \left(1 - \frac{N_0}{N} \right) \Delta \right]. \quad (2.21)$$

que generaliza el caso clásico.

En la figura 2.4 se grafica la energía Interna $(U - N\varepsilon_0)/Nk_B T$ como función de la temperatura normalizada T/T_c con $\Delta/k_B T_{0c} = 1$. En ella se observa que para $T < T_c$ la fracción de energía $(U - N\varepsilon_0)/(Nk_B T)$ crece hasta llegar a un pico en la temperatura de transición, lo cual no sucede cuando no hay brecha. En cambio para altas temperaturas se recupera $U - N(\varepsilon_0 + \Delta) \rightarrow (d/s)Nk_B T$ el gas clásico.

2.1.2.4. Calor específico isocórico

Hay que tener cautela para encontrar la calor específico isocórico, debido a que tenemos dos casos a temperatura menor que la crítica $T < T_c$ y mayor o igual que la crítica $T \geq T_c$.

Para $T > T_c$ la fracción de condensado $N_0/N \simeq 0$ es despreciable y al derivar (2.5) encontramos

$$\left(\frac{\partial \ln(z_1)}{\partial T} \right)_{N,V} = -\frac{d}{s} \frac{1}{T} \frac{g_s^d(z_1)}{g_{s-1}^d(z_1)}. \quad (2.22)$$

Derivando la ecuación (2.20) y sustituyendo (2.22) tenemos

$$\frac{C_V}{Nk_B} = \frac{1}{Nk_B} \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{N,V} = \frac{d}{s} \left[\left(1 + \frac{d}{s} \right) \frac{g_{s+1}^d(z_1)}{g_s^d(z_1)} - \left(\frac{d}{s} \right) \frac{g_s^d(z_1)}{g_{s-1}^d(z_1)} \right]. \quad (2.23)$$

Para temperaturas muy altas $T \gg T_c$, recuperamos el caso de un gas ideal clásico $C_V/Nk_B = d/s$.

En $T \leq T_c$ se cumple que el potencial químico es igual a la energía del estado base $\mu = \varepsilon_0$ y tenemos que $z_1 = e^{-\frac{\Delta}{k_B T}}$, por lo que derivando (2.20) respecto de T tenemos

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{Nk_B} = \frac{d}{s} \left(1 - \frac{N_0}{N} \right) & \left[\left(1 + \frac{d}{s} \right) \frac{g_{s+1}^d \left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}} \right)}{g_s^d \left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}} \right)} \right. \\ & \left. + \frac{s}{d} \left(\frac{\Delta}{k_B T} \right) \left(\frac{d}{s} + \frac{\Delta}{k_B T} \frac{g_{s-1}^d \left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}} \right)}{g_s^d \left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}} \right)} \right) + \frac{\Delta}{k_B T} \right], \end{aligned} \quad (2.24)$$

donde se observa que a temperaturas bajas $T \ll \Delta/k_B$, i.e., $\Delta/k_B T \gg 1$ la función

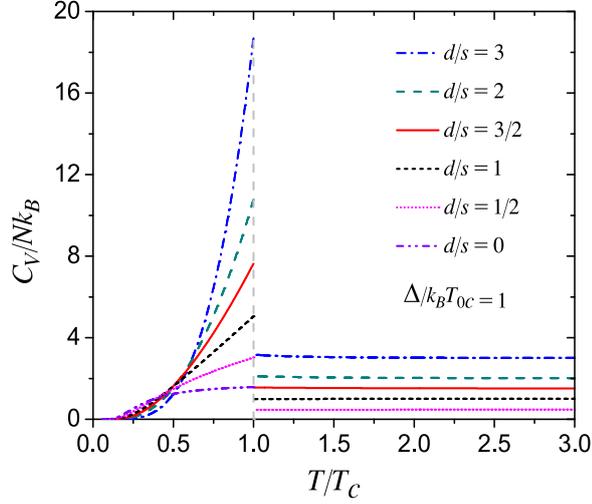


Figura 2.5: Calor específico isocórico C_V/Nk_B como función de T/T_c , para $\Delta/k_B T_{0c} = 1$ y $d/s = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, 3$.

$g_{\frac{d}{s}} \left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}} \right) \simeq e^{-\frac{\Delta}{k_B T}}$ para cualquier valor d/s , por lo que

$$\frac{C_V}{Nk_B} \simeq \frac{d}{s} \frac{(T/T_c)^{d/s}}{g_{\frac{d}{s}} \left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T_c}} \right)} \left[\left(1 + \frac{d}{s} \right) + \frac{s}{d} \left(\frac{\Delta}{k_B T} \right)^2 + \frac{2\Delta}{k_B T} \right] e^{-\frac{\Delta}{k_B T}} \quad (2.25)$$

que significa que a bajas temperaturas decae de manera exponencial.

En la figura 2.5 se observa el calor específico isocórico como función de T/T_c para $\Delta/k_B T_{0c} = 1$, se observa que comienza desde cero de manera exponencial y hace un salto en $T/T_c = 1$, característico de una transición de fase de segundo orden. A altas temperaturas tiende d/s al caso clásico.

2.1.2.5. Salto del calor específico isocórico

En la sección anterior mencionamos el comportamiento de la energía libre de Gibbs y del calor específico isocórico con el fin de estudiar el tipo de transición de fase. En nuestro caso con brecha energética $\Delta \neq 0$ siempre se presenta un salto para cualquier valor positivo de la razón d/s , a diferencia del caso sin brecha $\Delta = 0$ en el que se presenta un salto en el calor específico isocórico siempre que la razón $d/s > 2$ [56]. De hecho en el caso sin brecha $\Delta = 0$ y con $d/s > 2$, la discontinuidad del calor específico en ese caso es proporcional a la derivada del potencial químico como lo reporta Pethick [3], sin embargo para el caso tridimensional $d/s = 2$ el calor específico es continuo.

El salto ΔC_V en el calor específico isocórico en la temperatura crítica T_c se obtiene al restar la expresión (2.23) de la (2.24) evaluadas en $T = T_c$. La expresión analítica del

2. Gas de bosones d -dimensional con relación de energía-momento generalizada $\varepsilon \propto k^s$ más una brecha energética $\Delta \neq 0$

salto es

$$\frac{\Delta C_V}{Nk_B} \equiv \frac{C_V(T_c^-) - C_V(T_c^+)}{Nk_B} = \frac{g_s^d(z_{0c})}{g_s^{d-1}(z_{0c})} \left[\frac{d}{s} + \frac{\Delta}{k_B T_c} \frac{g_s^{d-1}(z_{0c})}{g_s^d(z_{0c})} \right]^2, \quad (2.26)$$

donde $z_{0c} \equiv e^{-\frac{\Delta}{k_B T_c}}$.

La expresión anterior muestra que para $d/s > 0$ habrá un salto del calor específico siempre que se cumpla que $\Delta > 0$. Es más, cuando $d/s \rightarrow 0$, el salto $\Delta C_V/Nk_B$ tiene al valor $e/(e-1)$.

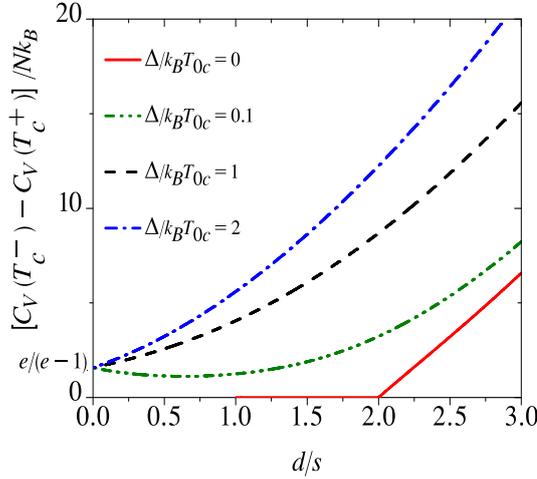


Figura 2.6: Salto del calor específico isocórico en T_c como función de la razón d/s , para diferentes valores de $\Delta/k_B T_{0c}$.

En la figura 2.6 se muestra el calor específico isocórico en T_c como función de la razón d/s , para diferentes valores de $\Delta/k_B T_{0c}$, el salto es diferente de cero siempre que $d/s > 2$, como es reportado en [56]. Como ya se menciona anteriormente, el salto en este caso es proporcional a la derivada del potencial químico como lo reporta Pethick [3].

Para $\Delta \neq 0$ existe un salto en el calor específico para $d/s > 0$, el cual crece monótonamente como una función de d/s para $\Delta/k_B T_{0c} = 1, 2$, pero presenta un mínimo para bajos valores de d/s , como en el caso de $\Delta/k_B T_{0c} = 0.1$. Para cualquier valor de $\Delta/k_B T_{0c} \neq 0$ el salto tiende al valor $e/(e-1)$ conforme d/s tiende a cero.

En la figura 2.7 se muestra que el salto del calor específico isocórico es monótonamente creciente con $\Delta/k_B T_{0c}$ para cualquier valor de $d/s > 0$.

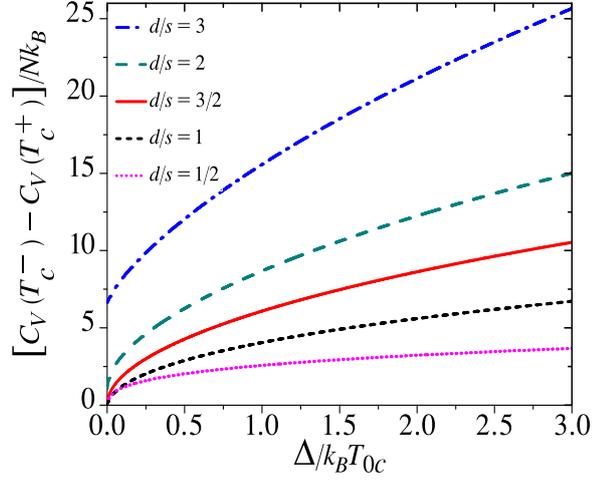


Figura 2.7: Salto del calor específico isocórico en T_c como función de $\Delta/k_B T_{0c}$, para $d/s = 1/2, 1, 3/2, 2$ and 3 .

2.1.2.6. Calor específico isobárico

Para calcular el calor específico a presión constante se utiliza la siguiente relación termodinámica

$$C_P = C_V + TV\kappa_T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{V,N}^2 \quad (2.27)$$

donde la variable κ_T representa la compresibilidad isotérmica

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_{T,N}. \quad (2.28)$$

Para calcular la compresibilidad isotérmica se necesita conocer el valor de la parcial de la presión respecto al volumen $(\partial P/\partial V)_{T,N}$.

De la ecuación de estado (2.14) tenemos a la presión como una función del volumen, la temperatura y el potencial químico $P = P(V, T, \mu)$. Para obtener la dependencia explícita de la presión con el número de partículas usaremos la regla de la cadena

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_{T,N} = \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_{T,\ln z_1} + \left(\frac{\partial P}{\partial \ln z_1} \right)_{T,V} \left(\frac{\partial \ln z_1}{\partial V} \right)_{T,N}. \quad (2.29)$$

De las ecuaciones (2.14) y (2.5) podemos deducir que $(\partial P/\partial V)_{T,\ln z_1} = 0$.

Luego la compresibilidad isotérmica es

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \frac{1}{(\partial P/\partial \ln z_1)_{T,V} (\partial \ln z_1/\partial V)_{T,N}}. \quad (2.30)$$

2. Gas de bosones d -dimensional con relación de energía-momento generalizada $\varepsilon \propto k^s$ más una brecha energética $\Delta \neq 0$

Para calcular $(\partial P/\partial \ln z_1)_{T,V}$ se deriva implícitamente la presión de la ecuación de estado (2.14) para obtener

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \ln z_1}\right)_{T,V} = \frac{N}{V} k_B T (T/T_c)^{d/s} \frac{g_s^d(z_1)}{g_s^d\left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T_c}}\right)}. \quad (2.31)$$

Para calcular $(\partial \ln z_1/\partial V)_{T,N}$ se usa la fracción de condensado dada por (2.5). Para $T > T_c$ la fracción de condensado del estado base $N_0/N \simeq 0$ es despreciable, mientras que para $T \leq T_c$ la fracción N_0/N es constante cuando T y N son también constantes, por lo que tendremos para toda T que

$$\left(\frac{\partial \ln z_1}{\partial V}\right)_{T,N} = -\frac{1}{V} \frac{g_s^d(z_1)}{g_{s-1}^d(z_1)}. \quad (2.32)$$

Tras sustituir las ecuaciones (2.31) y (2.32) en la expresión (2.30) y usando la relación (2.9) podemos obtener la siguiente relación para la compresibilidad isotérmica

$$\kappa_T = \left(\frac{1}{1 - N_0/N}\right) \frac{V}{N k_B T} \frac{g_{s-1}^d(z_1)}{g_s^d(z_1)}. \quad (2.33)$$

Para calcular $(\partial P/\partial T)_{V,N}$ derivamos a la presión con respecto a la temperatura de la expresión (2.21)

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{N,V} = \frac{1}{V} \frac{s}{d} \left[C_V + N \Delta \left(\frac{\partial N_0/N}{\partial T}\right)_{N,V} \right]. \quad (2.34)$$

Para $T > T_c$ la fracción de condensado $N_0/N \approx 0$ es despreciable y entonces se obtiene

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{V,N} = \frac{s}{d} \frac{C_V}{V} \quad (2.35)$$

Finalmente sustituyendo las ecuaciones (2.35) y (2.33) en la expresión (2.27) tenemos para el calor específico isobárico para $T > T_c$

$$C_P = C_V \left(1 + \left(\frac{s}{d}\right)^2 \frac{C_V}{N k_B} \frac{g_{s-1}^d(z_1)}{g_s^d(z_1)} \right). \quad (2.36)$$

Para $T \leq T_c$ se tiene de la expresión (2.9) que

$$T \left(\frac{\partial N_0/N}{\partial T} \right)_{N,V} = - \left(1 - \frac{N_0}{N} \right) \left[\frac{d}{s} + \frac{\Delta}{k_B T} \frac{g_{\frac{d}{s}-1} \left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}} \right)}{g_{\frac{d}{s}} \left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}} \right)} \right] \quad (2.37)$$

con esta última expresión se puede obtener $(\partial P/\partial T)_{V,N}$ y al substituir (2.33) en (2.27) se obtiene C_P para $T \leq T_c$.

$$\begin{aligned} \frac{C_P}{Nk_B} = \frac{C_V}{Nk_B} + \frac{g_{\frac{d}{s}-1} \left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}} \right)}{g_{\frac{d}{s}} \left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}} \right)} \left(\frac{1}{1 - N_0/N} \right) \left[\frac{s}{d} \frac{C_V}{Nk_B} \right. \\ \left. - \frac{\Delta}{k_B T} \left(1 - \frac{N_0}{N} \right) \left(1 + \frac{s}{d} \frac{\Delta}{k_B T} \frac{g_{\frac{d}{s}-1} \left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}} \right)}{g_{\frac{d}{s}} \left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}} \right)} \right) \right]^2 \end{aligned} \quad (2.38)$$

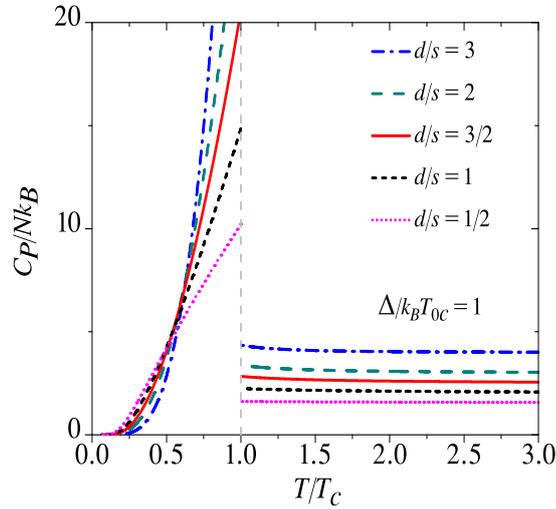


Figura 2.8: Calor específico isobárico C_P/Nk_B como función de la temperatura normalizada T/T_{0c} , para $\Delta/k_B T_{0c} = 1$ y $d/s = 0.1, 1/2, 1, 3/2, 2, 3$.

En la figura 2.8 se muestra el calor específico isobárico C_P/Nk_B como una función de la temperatura T/T_c para $\Delta/k_B T_{0c} = 1$ y diferentes valores de d/s . Se muestra que el calor específico isobárico tiene un salto en $T = T_c$ para todos los valores de d/s , además el salto crece mientras la razón d/s decrece.

2. Gas de bosones d -dimensional con relación de energía-momento generalizada $\varepsilon \propto k^s$ más una brecha energética $\Delta \neq 0$

Análogamente como el calor específico isocórico C_V , tiende a cero con un comportamiento exponencial a bajas temperaturas.

Es importante mencionar que en el caso sin brecha $\Delta = 0$, la capacidad calorífica diverge [58] en el caso donde la razón $1 < d/s < 2$ y para temperaturas menores o igual a la crítica, como se discute en el apéndice A, esto sucede debido al término $g_{d/s-1}(z)$. Se observa que en caso de tener la brecha energética presente $\Delta \neq 0$, siempre se tiene un salto donde los límites por la derecha e izquierda de la capacidad isobárica toman valores finitos.

2.1.2.7. Salto del calor específico isobárico

El salto ΔC_P en el calor específico isobárico en T_c se obtiene de la expresión (2.36) menos la ecuación (2.38), con lo que se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\Delta C_P}{Nk_B} \equiv \frac{C_P(T_c^-) - C_P(T_c^+)}{Nk_B} &= 2 \frac{g_{\frac{d}{s}-1}(z_{0c})}{g_{\frac{d}{s}}(z_{0c})} \left\{ \frac{\Delta C_V}{Nk_B} \left(1 + \frac{s}{d}\right) \frac{g_{\frac{d}{s}+1}(z_{0c})}{g_{\frac{d}{s}}(z_{0c})} \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{d}{s}\right) \frac{\Delta}{k_B T_c} \left(1 + \frac{s}{d} \frac{\Delta}{k_B T_c} \frac{g_{\frac{d}{s}-1}(z_{0c})}{g_{\frac{d}{s}}(z_{0c})}\right) \left[\left(1 + \frac{s}{d}\right) \frac{g_{\frac{d}{s}+1}(z_{0c})}{g_{\frac{d}{s}}(z_{0c})} - \frac{g_{\frac{d}{s}}(z_{0c})}{g_{\frac{d}{s}-1}(z_{0c})} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

donde $z_{0c} \equiv e^{-\Delta/k_B T_c}$.

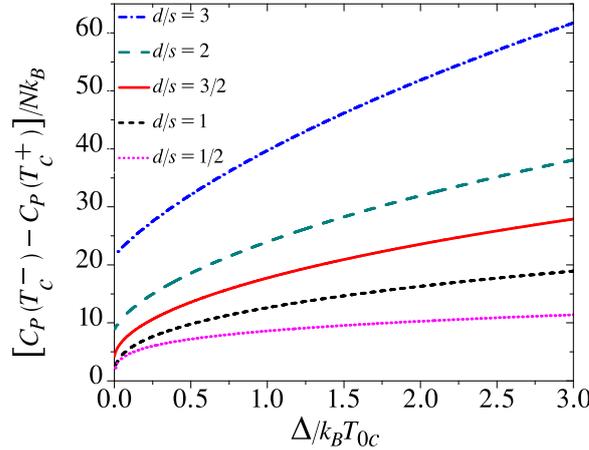


Figura 2.9: Salto del calor específico isobárico $[C_P(T_c^-) - C_P(T_c^+)]/Nk_B$ en la temperatura crítica T_c como función de $\Delta/k_B T_{0c}$, para $d/s = 1, 3/2, 2$ and 3 .

En la figura 2.9 mostramos el calor específico isobárico como una función de $\Delta/k_B T_{0c}$ para cuatro diferentes valores de d/s . El comportamiento de este salto isobárico ΔC_P crece de manera similar como el salto del calor específico ΔC_V . En la figura 2.10 se muestra el salto del calor específico como una función de d/s para $\Delta/k_B T_{0c} = 0, 0.1, 1$ y 2 . Estas gráficas muestran que para $\Delta = 0.1, 1$ y 2 el salto tiende al valor 5.65

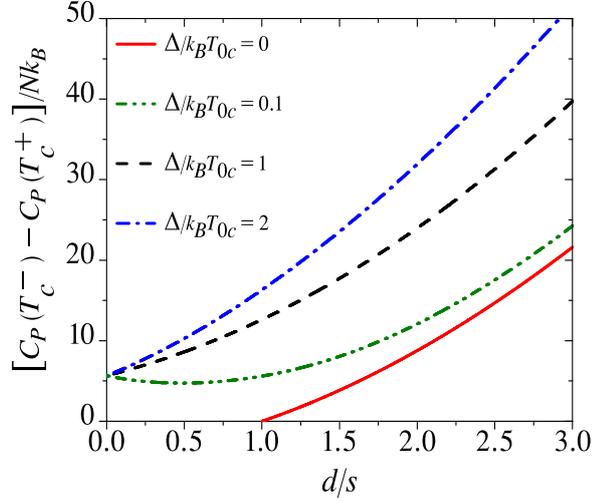


Figura 2.10: Salto del calor específico isobárico $[C_P(T_c^-) - C_P(T_c^+)]/Nk_B$ en T_c como función de d/s , para $\Delta = k_B T_{0c} = 0, 1$ y 2 .

conforme d/s tiende a cero.

2.1.2.8. Coeficiente $\gamma = C_P/C_V$

El coeficiente gamma termodinámico C_P/C_V para $T > T_c$ se obtiene directamente de la expresión del calor específico isobárico (2.36) de la cual se obtiene

$$\gamma \equiv \frac{C_P}{C_V} = 1 + \left(\frac{s}{d}\right)^2 \frac{C_V}{Nk_B} \frac{g_{\frac{d}{s}-1}(z_1)}{g_{\frac{d}{s}}(z_1)}. \quad (2.40)$$

Para $T \leq T_c$ el coeficiente gamma viene de la razón entre las ecuaciones (2.38) y (2.24),

$$\gamma = 1 + \frac{C_V}{Nk_B} \left(\frac{s}{d}\right)^2 \frac{g_{\frac{d}{s}-1}(z_1)}{g_{\frac{d}{s}}(z_1)} \left(\frac{1}{1 - N_0/N}\right) \times \left[1 - \frac{Nk_B}{C_V} \left(1 - \frac{N_0}{N}\right) \left(\frac{\Delta}{k_B T}\right) \left(\frac{d}{s} + \left(\frac{\Delta}{k_B T}\right) \frac{g_{\frac{d}{s}-1}(z_1)}{g_{\frac{d}{s}}(z_1)}\right)\right]^2 \quad (2.41)$$

2. Gas de bosones d -dimensional con relación de energía-momento generalizada $\varepsilon \propto k^s$ más una brecha energética $\Delta \neq 0$

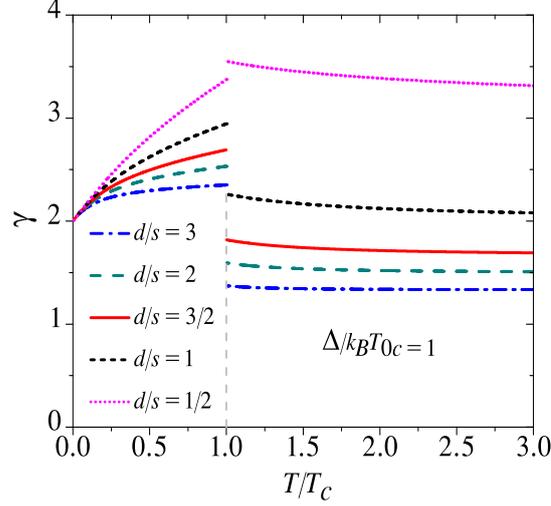


Figura 2.11: Coeficiente gamma $\gamma = C_P/C_V$ como una función de T/T_{0c} para $\Delta/k_B T_{0c} = 1$ y diferentes valores de d/s .

donde sustituyendo C_V para $T \leq T_c$ de la ecuación (2.24), se obtiene

$$\gamma = 1 + \frac{\frac{s}{d} \left[\left(1 + \frac{d}{s}\right) \frac{g_{\frac{d}{s}+1}(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}})}{g_{\frac{d}{s}}(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}})} + \frac{\Delta}{k_B T} \right]^2}{\left(1 + \frac{d}{s}\right) \frac{g_{\frac{d}{s}+1}(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}})}{g_{\frac{d}{s}-1}(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}})} + \frac{2\Delta}{k_B T} \frac{g_{\frac{d}{s}}(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}})}{g_{\frac{d}{s}-1}(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}})} + \frac{s}{d} \left(\frac{\Delta}{k_B T}\right)^2}. \quad (2.42)$$

Para muy bajas temperaturas, de manera que $\Delta/k_B T \gg 1$ la función de Bose $g_{\frac{d}{s}}\left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}}\right) \simeq e^{-\frac{\Delta}{k_B T}}$ para cualquier valor de d/s . Entonces, cuando la temperatura tiende a cero, de la ecuación (2.42) se observa que la razón γ tiende al valor 2 para cualquier valor no nulo de $\Delta/k_B T_{0c}$, es decir, el valor del calor específico isobárico es el doble del isocórico a extremas bajas temperaturas.

En la figura 2.11 se muestra el coeficiente gamma como función de T/T_c para $\Delta/k_B T_{0c} = 1$ y diferentes valores de d/s . Para la temperatura debajo de la temperatura el coeficiente γ empieza con el valor de 2 en temperatura extremadamente baja y se incrementa hasta alcanzar un valor finito en $T = T_c$, donde se presenta el salto característico.

El salto $\gamma(T_c^+) - \gamma(T_c^-)$ es tal que para $d \gg s$ es salto es positivo y para $s \gg d$ la magnitud del salto se vuelve negativa. Notamos que cuando d/s tiende a cero, el valor del coeficiente gamma por la izquierda de T_c^- es $1 + (e + (1 - e) \ln(e - 1))^2 \simeq 4.19742$, mientras que el valor del coeficiente por la derecha de T_c^+ tiende a infinito.

Para temperaturas altas $T \gg T_c$, el coeficiente tiende al valor $(s/d)(1 + d/s)$ usual de un gas clásico.

2.1.2.9. Entropía

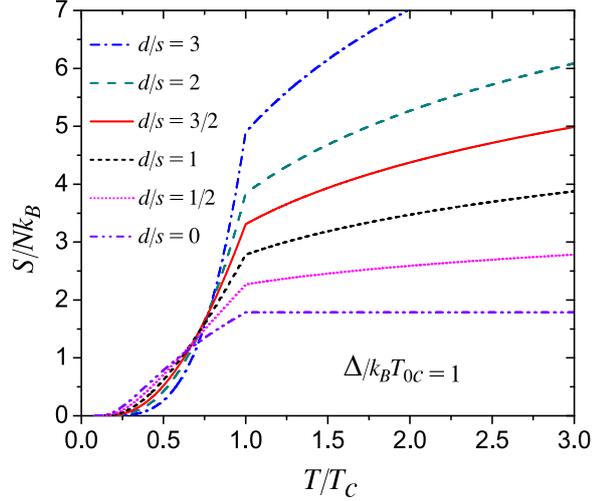


Figura 2.12: Entropía $S/k_B T$ como función de la temperatura normalizada T/T_{0c} , para $\Delta/k_B T_{0c} = 1$ y $d/s = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, 3$.

Usamos la relación de Euler $U = TS - PV + \mu N$, para obtener la entropía

$$\frac{S}{Nk_B} = \frac{U + PV}{Nk_B T} - \frac{\mu}{k_B T} = \frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} + \frac{PV}{Nk_B T} + \frac{\varepsilon_0 - \mu}{k_B T} \quad (2.43)$$

Sustituyendo (2.20), nos queda la relación

$$\frac{S}{Nk_B} = \frac{(T/T_c)^{d/s}}{g_{\frac{d}{s}} \left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T_c}} \right)} \left[\left(\frac{d}{s} + 1 \right) g_{\frac{d}{s}+1}(z_1) + \frac{\Delta}{k_B T} g_{\frac{d}{s}}(z_1) \right] + \frac{\varepsilon_0 - \mu}{k_B T}. \quad (2.44)$$

En la figura 2.12 se muestra la entropía como función de la temperatura para diferentes valores de d/s y $\Delta/k_B T_{0c} = 1$. En la figura se muestra como la entropía es una función monótona creciente, como se espera termodinámicamente, sin embargo, se ve un cambio abrupto no suave, con derivada discontinua en la temperatura crítica, característico de una transición de fase. Asimismo, se observa que conforme aumentamos la razón d/s la tasa de crecimiento de la curva también se incrementa.

2. Gas de bosones d -dimensional con relación de energía-momento generalizada $\varepsilon \propto k^s$ más una brecha energética $\Delta \neq 0$

2.1.2.10. Energía libre de Helmholtz

La energía libre de Helmholtz se obtiene de la expresión $F = U - TS$, usando las expresiones (2.43) y (2.14), se obtiene

$$\frac{F}{Nk_B T} = \frac{\mu}{k_B T} - (T/T_c)^{d/s} \frac{g_{\frac{d}{s}+1}(z_1)}{g_{\frac{d}{s}}\left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T_c}}\right)}. \quad (2.45)$$

En la figura 2.13 se grafica la energía libre de Helmholtz como función de la temperatura

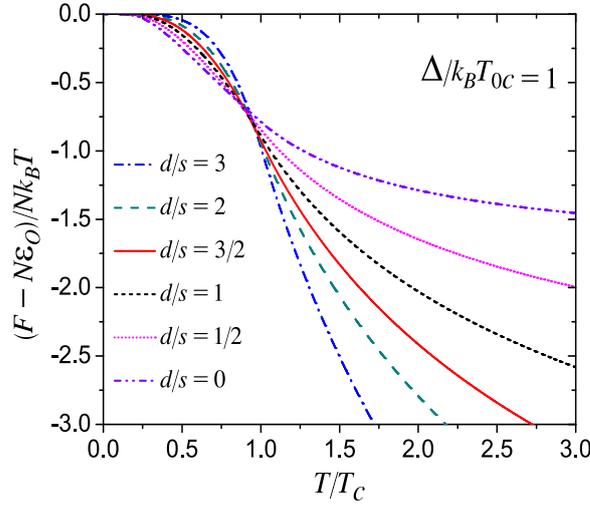


Figura 2.13: Energía Libre de Helmholtz $(F - N\varepsilon_0)/(Nk_B T)$ como función de la temperatura T/T_{0c} , para $\Delta/k_B T_{0c} = 1$ and $d/s = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, 3$.

normalizada T/T_{0c} para $\Delta/k_B T_{0c} = 1$. Se observa como la energía libre de Helmholtz empieza desde un múltiplo N del estado base y luego decae un monótonamente con la temperatura, sin embargo, en esta energía libre la curva siempre es suave, no tiene un cambio abrupto en la temperatura crítica y su derivada respecto a la temperatura es continua. Además, que conforme la razón d/s crece la caída de la curva es más abrupta.

2.1.2.11. Entalpía

La entalpía se calcula con la expresión termodinámica $H = U + PV$, obteniendo

$$\frac{H}{Nk_B T} = \frac{\varepsilon_0}{k_B T} + \frac{(T/T_c)^{d/s}}{g_{\frac{d}{s}}\left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T_c}}\right)} \left[\left(\frac{d}{s} + 1\right) g_{\frac{d}{s}+1}(z_1) + \frac{\Delta}{k_B T} g_{\frac{d}{s}}(z_1) \right]. \quad (2.46)$$

En la figura 2.14 se muestra a la entalpía $H/Nk_B T$ como función de T/T_c for $\Delta/k_B T_{0c} = 1$. Existe un cambio no suave en la temperatura crítica, además que para

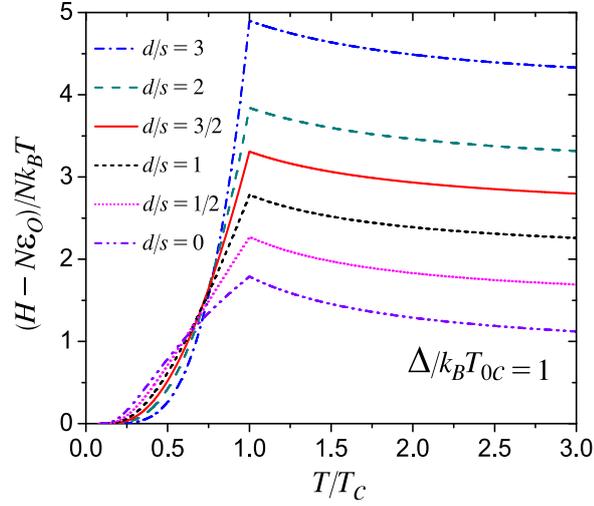


Figura 2.14: Entalpía como función de T/T_c , para $\Delta/k_B T_{0c} = 1$ y diferentes valores d/s .

valores d/s bajos la curva es cóncava para temperaturas menores que la crítica y es convexa para d/s mayores para $T > T_c$. La entalpía es similar a la energía interna, salvo que tiene mayores valores debido al término PV .

2.1.2.12. Energía libre de Gibbs

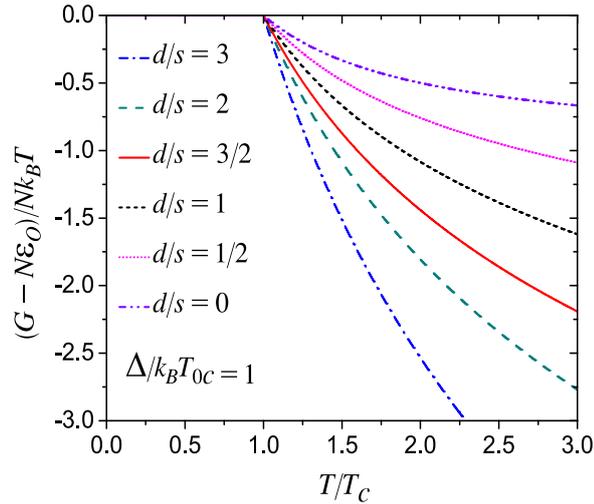


Figura 2.15: Energía Libre de Gibbs $(G - N\varepsilon_0)/Nk_B T$ como función de T/T_{0c} , para $\Delta/k_B T_{0c} = 1$ y $d/s = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, 3$.

La energía libre de Gibbs está dada por la expresión termodinámica $G = U + PV - TS = H - TS = \mu N$. En la figura 2.15 se muestra la energía libre de Gibbs para

2. Gas de bosones d -dimensional con relación de energía-momento generalizada $\varepsilon \propto k^s$ más una brecha energética $\Delta \neq 0$

temperatura T/T_c para $\Delta/k_B T_{0c} = 1$. Observe que para $T < T_c$ es cero y para $T \geq T_c$ tiende menos infinito recuperando el límite clásico.

Además, como $G = \mu N$, se observa que antes de la temperatura crítica el potencial químico se iguala al estado base y cuando sobrepasa la temperatura crítica decae monótonamente.

En el siguiente capítulo se presenta un modelo cristalino con imperfecciones que presenta una brecha entre el estado más bajo de energía y el siguiente excitado, mostrando los efectos en las propiedades termodinámicas que se han presentado hasta el momento.

En el apéndice A de este trabajo se expone lo reportado en la literatura [?] para el caso de no tener brecha energética o en el caso de tener una relación de energía proporcional con el cuadrado del momento en un sistema tridimensional. En dicho apéndice se comparan las gráficas entre el caso sin brecha con el caso con brecha reportado en este capítulo.

En los dos capítulos siguientes, buscaremos mostrar de manera analítica un sistema sencillo que simula una red óptica y cuyo espectro de energía, obtenido por medio de la ecuación de Schrödinger, sea análogo al de la expresión (2.1) para una partícula. Más adelante en el capítulo 5 obtendremos las propiedades termodinámicas del sistema, mostrando que tienen un comportamiento similar a los mostrados en este capítulo.

Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional infinito

Existen diversos trabajos teóricos y experimentales que investigan condensados de Bose-Einstein en redes ópticas sinusoidales periódicas. Por mencionar algunos trabajos, experimentalmente se han estudiado condensados Bose-Einstein de rubidio en redes ópticas bidimensionales [10], paquetes de ondas de materia de condensados de ^{87}Rb [59] e incluso estudian la inestabilidad de un condensado en una red óptica móvil unidimensional [11].

Sin embargo para tratar de resolver el problema de manera teórica, se usa un potencial que permite dar soluciones analíticas fáciles de manipular. Autores como Seaman [12] y Danshita [13] con el fin de simular una red óptica, plantean usar el potencial periódico de Kronig Penney, que obedece el teorema de Bloch, para poder interpretar mediante resultados analíticos el espectro de energía y las propiedades termodinámicas de una partícula inmersa en un potencial periódico.

En este capítulo y en el inmediato posterior se plantea encontrar analíticamente el espectro de energía para una partícula inmersa en un cristal periódico que se modela con un potencial de Kronig-Penney [46]. En el camino, encontraremos expresiones analíticas para el caso de una vacancia en la estructura y cuyo espectro energético lo conectaremos con el expuesto en el capítulo previo.

3.1. Espectro de energía de una partícula en un cristal unidimensional perfecto

En primer lugar, modelamos el cristal unidimensional con la aplicación de un potencial externo estilo Kronig Penney en el límite de deltas, es decir, obtenemos el espectro de energías de una partícula en un potencial externo

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} v_0 \delta(x - na) \quad (3.1)$$

donde v_0 es una cantidad con dimensiones de energía por longitud, mientras a representa la separación entre las deltas.

3. Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional infinito

En este capítulo se usan diferentes métodos para obtener el espectro de energía y las funciones de onda respectivas a partir de la ecuación de Schrödinger. Nuestro interés primordial es encontrar el espectro donde alguna de las deltas del potencial es de diferente intensidad $v'_0 \neq v_0$, mientras que las demás se mantienen con la misma intensidad v_0 . Sin embargo para resolver dicho problema necesitaremos usar los siguientes métodos aquí expuestos.

3.1.1. Solución usando condiciones de continuidad y discontinuidad

Para obtener el espectro de energías para una partícula dentro del potencial (3.1), resolvemos la ecuación de Schrödinger usando como primera técnica la relación entre los coeficientes de las funciones de onda antes y después de cruzar la primera delta.

Al considerar el intervalo $-a < x < a$ tenemos, al sustituir el potencial (3.1) en la ecuación de Schrödinger nos queda solo una delta, es decir,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + v_0\delta(x)\psi = E\psi. \quad (3.2)$$

Observe que para $x \neq 0$ se satisface la ecuación Schrödinger para una partícula libre de potencial $V(x) = 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \equiv \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}\psi. \quad (3.3)$$

Por lo que para $-a < x < 0$, se obtiene como solución

$$\psi(x) = A_1e^{i\kappa x} + B_1e^{-i\kappa x} = e^{ikx}u_1(x) \quad (3.4)$$

con la función

$$u_1(x) = A_1e^{i(\kappa-k)x} + B_1e^{-i(\kappa+k)x} \quad (3.5)$$

donde la variable k se le conoce como cuasimomento de Bloch. De hecho, como se verá más adelante, el teorema de Bloch, nos va a exigir que $u_i(x)$ sea una función periódica.

Análogamente se satisface que para $0 < x < a$ la solución

$$\psi(x) = A_2e^{i\kappa x} + B_2e^{-i\kappa x} = e^{ikx}u_2(x) \quad (3.6)$$

con la función

$$u_2(x) = A_2e^{i(\kappa-k)x} + B_2e^{-i(\kappa+k)x} \quad (3.7)$$

donde κ cumple (B.5).

La condición de continuidad en la frontera de la delta en $x = 0$ cumple que

$$0 = \psi(0^+) - \psi(0^-) = A_2 + B_2 - A_1 - B_1 \quad (3.8)$$

En cambio, al integrar (3.3) en una vecindad de radio η en la frontera de la delta $x = 0$ se obtiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\eta}^{\eta} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx + v_0 \int_{-\eta}^{\eta} \delta(x)\psi(x) dx = E \int_{-\eta}^{\eta} \psi(x) dx \quad (3.9)$$

donde el miembro derecho de la igualdad se anula y tras la integración

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d\psi}{dx}(\eta) - \frac{d\psi}{dx}(-\eta) \right) + v_0\psi(0) = 0 \quad (3.10)$$

tomando el límite $\eta \rightarrow 0$ nos queda

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dx}(0^+) - \frac{d\psi}{dx}(0^-) - \frac{2mv_0}{\hbar^2} \psi(0) = \\ i\kappa(A_2 - B_2 - A_1 + B_1) - \frac{2mv_0}{\hbar^2}(A_1 + B_1) = 0 \end{aligned} \quad (3.11)$$

y la condición de periodicidad de la función $u(x)$ y su derivada $u(x) = \frac{du}{dx}$ se cumple si

$$A_1 + B_1 = u_1(0^-) = u_2(a^-) = A_2 e^{i(\kappa-k)a} + B_2 e^{-i(\kappa+k)a} \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} i(\kappa - k)A_1 - i(\kappa + k)B_1 = u'_1(0^-) = u'_2(a^-) = \\ i(\kappa - k)A_2 e^{i(\kappa-k)a} - i(\kappa + k)B_2 e^{-i(\kappa+k)a} \end{aligned} \quad (3.13)$$

Resolviendo de manera simultánea las ecuaciones (3.8), (3.11), (3.12) y (3.13), nos da la relación de dispersión

$$\cos(ka) = \cos(\kappa a) + P \frac{\sin(\kappa a)}{\kappa a} \quad (3.14)$$

con el factor

$$P = \frac{mv_0 a}{\hbar^2} \quad (3.15)$$

a esta cantidad adimensional se conoce como impermeabilidad de las deltas.

3.1.2. Solución usando función de Green

El método anterior nos permite obtener de manera sencilla las energías en función del cuasimomento de Bloch para el potencial periódico, sin embargo, para resolver las eigenfunciones se necesitaría resolver cada coeficiente A_i y B_i . Uno de los métodos comunes para resolver un problema de ecuaciones diferenciales lineales es proponer una función de Green e imponer condiciones iniciales sobre la misma para determinar dicha función y finalmente mediante una transformación obtener, la solución a la ecuación diferencial. Saxon y Hutner [48] nos plantean en su artículo como aplicar este método en un cristal unidimensional y con ello se puede obtener una expresión para la función

3. Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional infinito

de onda que describe al sistema.

La ecuación estacionaria de Schrödinger (B.2) se puede reescribir como

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \kappa^2\right)\psi = \frac{2m}{\hbar^2}V(x)\psi \quad (3.16)$$

Definimos la función de Green $G = G(x, x')$ tal que

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \kappa^2\right)G = \delta(x - x') \quad (3.17)$$

De forma que aplicando la transformada de Fourier de esta última ecuación se tiene

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-iKx} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \kappa^2\right)G dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iKx} \delta(x - x') dx = e^{-iKx'} \quad (3.18)$$

El primer término de miembro izquierdo es

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-iKx} \frac{\partial^2 G}{\partial x^2} dx = e^{-iKx} \left(\frac{\partial G}{\partial x} + iKG\right) \Big|_{-\infty}^{\infty} - 2\pi K^2 \tilde{G} \quad (3.19)$$

donde \tilde{G} es la transformada de Fourier de la función de Green

$$\tilde{G}(K, x') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G e^{-iKx} dx \quad (3.20)$$

que al sustituir (3.19) en (3.18) nos queda la ecuación

$$e^{-iKx'} \left(\frac{\partial G}{\partial x} + iKG\right) \Big|_{-\infty}^{\infty} + 2\pi(\kappa^2 - K^2)\tilde{G} = e^{-iKx'} \quad (3.21)$$

que nos da por solución

$$\tilde{G}(K, x') = \frac{1}{2\pi} \frac{e^{-iKx'}}{\kappa^2 - K^2} \quad (3.22)$$

Invirtiendo (3.20) con la transformada de Fourier inversa y sustituyendo (3.23) nos queda

$$G(x, x') = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{G}(K, x') e^{iKx} dK = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{iK(x-x')}}{\kappa^2 - K^2} dK. \quad (3.23)$$

La función vectorial $G(x, x')$ se vuelve unidimensional $G(z)$ con un cambio de variable

$$G(x, x') = G(z) \quad z = x - x' \quad (3.24)$$

Esta integral puede resolverse con el teorema del residuo ya que

$$G(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{iKz}}{\kappa^2 - K^2} dK = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{iKz}}{2\kappa} \left(\frac{1}{K - \kappa} - \frac{1}{K + \kappa} \right) dK \quad (3.25)$$

tomando $z > 0$ tenemos un polo en $k = K$ dentro del contorno, por lo que aplicando el teorema del residuo tenemos

$$G(z) = -2\pi i \frac{1}{2\pi} \frac{e^{iKz}}{2\kappa} \frac{1}{K - \kappa} (K - \kappa) \Big|_{K=\kappa} = -\frac{ie^{i\kappa z}}{2\kappa} \quad (3.26)$$

Analogamente con $z < 0$ tenemos un polo en $k = -K$ dentro del contorno, por lo que

$$G(z) = -2\pi i \frac{1}{2\pi} \frac{e^{iKz}}{2\kappa} \frac{1}{K + \kappa} (K + \kappa) \Big|_{K=-\kappa} = -\frac{ie^{-i\kappa z}}{2\kappa} \quad (3.27)$$

que nos da como resultado

$$G(x, x') = -\frac{i}{2\kappa} e^{i\kappa|x-x'|} \quad (3.28)$$

Observe que la función de Green, ya no es una función de dos variables, sino depende únicamente de la norma de la distancia $|z| = |x - x'|$, haciendo con esto inmediata su integración.

Usaremos la segunda identidad de Green

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi \frac{\partial^2 G}{\partial x'^2} - G \frac{\partial^2 \psi}{\partial x'^2} \right) dx' = 0, \quad (3.29)$$

y sustituyendo (3.16) y (3.18) en la ecuación anterior nos queda

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\psi \left(\frac{\partial^2 G}{\partial x'^2} + \kappa^2 G \right) - \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x'^2} + \kappa^2 \psi \right) G \right] dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi(x') \delta(x' - x) - \frac{2m}{\hbar^2} V(x') \psi(x') G(x, x') \right) dx' \end{aligned} \quad (3.30)$$

Por lo que la función de onda en términos de la función de Green es

$$\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x') V(x') G(x, x') dx' \quad (3.31)$$

Hasta ahora, se ha deducido el método de Green para resolver cualquier potencial arbitrario $V(x)$, sin embargo, a partir de ahora explotaremos que el potencial de interés es periódico

$$V(x + na) = V(x) \quad (3.32)$$

3. Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional infinito

y con el uso del teorema de Bloch

$$\psi(x + na) = e^{ikna}\psi(x) \quad (3.33)$$

haremos que la función de onda $\psi(x)$ sea periódica con el periodo de $V(x)$. Por lo que la integral (3.31) escrita como la suma de las integrales sobre la celda unitaria es

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{2m}{\hbar^2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{na}^{(n+1)a} \psi(y)V(y)G(x, y)dy = \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_0^a \psi(x' + na)V(x' + na)G(x, x' + na)dx' \end{aligned} \quad (3.34)$$

Sustituyendo (3.32), (3.33) y (3.23) en (3.34) se tiene que

$$\begin{aligned} \psi(x) &= -\frac{im}{\hbar^2\kappa} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ikna} \int_0^a e^{i\kappa|x-x'-na|}\psi(x')V(x')dx' = \\ &= -\frac{im}{\hbar^2\kappa} \int_0^a \psi(x')V(x') \left(\sum_{n=-\infty}^{\lfloor (x-x')/a \rfloor} e^{i(k-\kappa)na} e^{i\kappa(x-x')} + \sum_{n=\lfloor (x-x')/a \rfloor + 1}^{\infty} e^{i(k+\kappa)na} e^{-i\kappa(x-x')} \right) dx' \end{aligned} \quad (3.35)$$

donde $\lfloor z \rfloor$ denota la función piso, la cual devuelve el máximo entero menor a z . Tras sumar, obtendremos

$$\psi(x) = -\frac{im}{\hbar^2\kappa} \int_0^a \psi(x')V(x') \left(\frac{e^{i(k-\kappa)a\lfloor (x-x')/a \rfloor} e^{i\kappa(x-x')}}{1 - e^{-i(k-\kappa)a}} + \frac{e^{i(k+\kappa)a(\lfloor (x-x')/a \rfloor + 1)} e^{-i\kappa(x-x')}}{1 - e^{i(k+\kappa)a}} \right) dx' \quad (3.36)$$

Haciendo el cambio de variable $u' = x - x' - a\lfloor (x - x')/a \rfloor$ nos queda una función de onda

$$\begin{aligned} \psi(x) &= -\frac{m}{\hbar^2\kappa} \int_0^a \psi(x')V(x') e^{ika\lfloor \frac{x-x'}{a} \rfloor} \\ &= \left(\frac{e^{ika} \sin(\kappa(x - x' - a\lfloor \frac{x-x'}{a} \rfloor)) - \sin(\kappa(x - x' - a\lfloor \frac{x-x'}{a} \rfloor - a))}{\cos(\kappa a) - \cos(ka)} \right) dx' \end{aligned} \quad (3.37)$$

pero este último resultado comprueba el teorema de Bloch ya que la cantidad $x - x' - a\lfloor \frac{x-x'}{a} \rfloor$ es periódica con el mismo periodo de potencial.

En el caso de que el potencial modelo sea el propuesto por Kronig Penney en límite de deltas de Dirac como dispersores (3.1), la ecuación se reduce al integrar sobre la celda unitaria

$$\psi(x) = -\frac{mv_0}{\hbar^2\kappa} \int_0^a \psi(x')\delta(x')e^{ika\left[\frac{x-x'}{a}\right]} \left(\frac{e^{ika} \sin(\kappa(x-x'-a\left[\frac{x-x'}{a}\right])) - \sin(\kappa(x-x'-a\left[\frac{x-x'}{a}\right]-a))}{\cos(\kappa a) - \cos(ka)} \right) dx' \quad (3.38)$$

Integrando, nos queda

$$\frac{\psi(x)}{\psi(0)} = -\frac{mv_0}{\hbar^2\kappa} e^{ika\left[\frac{x}{a}\right]} \left(\frac{e^{ika} \sin(\kappa(x-a\left[\frac{x}{a}\right])) - \sin(\kappa(x-a\left[\frac{x}{a}\right]-a))}{\cos(\kappa a) - \cos(ka)} \right) \quad (3.39)$$

Esta es la función de onda que describe al sistema periódico de una serie infinita de deltas, la cual es periódica, con periodo a , justo como lo justifica el teorema de Bloch.

Observe que si además esto se cumple para toda x , en particular cuando $x = 0$, nos dará una relación entre el vector de onda de la energía κ y el de la onda de Bloch k .

$$1 = \frac{\psi(0)}{\psi(0)} = -\frac{mv_0}{\hbar^2\kappa} \left(\frac{\sin(\kappa a)}{\cos(\kappa a) - \cos(ka)} \right) \quad (3.40)$$

De donde obtenemos de nuevo la ecuación (3.14)

$$\cos(ka) = \cos(\kappa a) + P \frac{\sin(\kappa a)}{\kappa a} \quad (3.41)$$

Sustituyendo (3.40) en (3.42) obtenemos la ecuación de onda

$$\frac{\psi(x)}{\psi(0)} = e^{ika\left[\frac{x}{a}\right]} \left(\frac{e^{ika} \sin(\kappa(x-a\left[\frac{x}{a}\right])) - \sin(\kappa(x-a\left[\frac{x}{a}\right]-a))}{\sin(\kappa a)} \right) \quad (3.42)$$

El método de la función de Green, permite encontrar la función de onda del sistema fácilmente y en una sección posterior la usaremos para resolver el sistema con una vacancia.

3.1.3. Solución usando matrices de traslación, transferencia y de dispersión

En esta sección analizaremos el sistema como un problema de dispersores, de forma que la función de onda se deforma al atravesar cada dispersor. Al ser la ecuación de Schrödinger lineal, se pueden obtener ecuaciones lineales para describir los coeficientes de la función de onda los cuales se pueden acomodar en forma de matrices.

3. Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional infinito

En nuestro sistema, el potencial externo está formado por una infinidad de dispersores delta de Dirac igualmente espaciadas.

Suponga por simplicidad el caso de un único dispersor descrito por una delta $v_0\delta(x)$ situada en el origen $x = 0$ y para cualquier otra posición $x \neq 0$ el potencial es cero. Cuando el potencial es cero, que sucede en toda $x \neq 0$, la función de onda solución de Schrödinger es una combinación lineal de dos ondas libres dirigida a la derecha y a la izquierda, tal que podemos denominar con A_0^- y A_0^+ a los coeficientes que se relacionan con la onda libre dirigida hacia la derecha del dispersor y por B_0^- y B_0^+ se relacionan con la onda libre hacia la izquierda, mientras que el superíndice $-$ o $+$ indica si los coeficientes pertenecen a la onda antes o después de dispersor, respectivamente.

$$\begin{aligned}\psi(x < 0) &= A_0^- e^{i\kappa x} + B_0^- e^{-i\kappa x} \\ \psi(x > 0) &= A_0^+ e^{i\kappa x} + B_0^+ e^{-i\kappa x}\end{aligned}\tag{3.43}$$

En la figura 3.1 se muestra el diagrama de un dispersor con forma de delta, se muestran los coeficientes de la onda libre descritos por las ecuaciones (3.43), observe que se puede interpretar a A_0^+ y B_0^- como los coeficientes de las ondas salientes y a A_0^- y B_0^+ los coeficientes de las ondas entrantes.

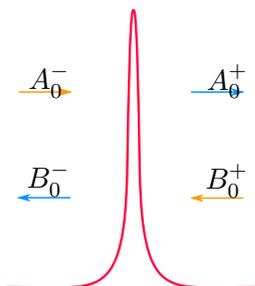


Figura 3.1: Diagrama de un dispersor delta, se muestran los coeficientes de la onda libre

Como la ecuación de Schrödinger es lineal, los coeficientes deben estar relacionados entre sí mediante ecuaciones lineales, existen dos matrices usualmente usadas en los cursos básicos de mecánica cuántica, la matriz de dispersión y la de transferencia.

La matriz de dispersión relaciona los coeficientes de las ondas entrantes al dispersor respecto de las salientes del mismo.

$$\begin{aligned}B_0^- &= S_{11}A_0^- + S_{12}B_0^+ \\ A_0^+ &= S_{21}A_0^- + S_{22}B_0^+\end{aligned}\tag{3.44}$$

o en forma matricial

$$\begin{pmatrix} B_0^- \\ A_0^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0^- \\ B_0^+ \end{pmatrix} = \mathcal{S} \begin{pmatrix} A_0^- \\ B_0^+ \end{pmatrix}\tag{3.45}$$

3.1 Espectro de energía de una partícula en un cristal unidimensional perfecto

Utilizando las condiciones de continuidad de la función de onda

$$A_0^- + B_0^- = A_0^+ + B_0^+ \quad (3.46)$$

y de la discontinuidad de la derivada de la función de onda en la posición de la delta, siguiendo el método análogo al de la ecuación (3.11) se tiene

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dx}(0^+) - \frac{d\psi}{dx}(0^-) - \frac{2mv_0}{\hbar^2}\psi(0) = \\ i\kappa (A_0^+ - B_0^+ - A_0^- + B_0^-) - \frac{2mv_0}{\hbar^2}(A_0^- + B_0^-) = 0 \end{aligned} \quad (3.47)$$

Las ecuaciones (3.46) y (3.47) pueden escribirse en forma matricial como

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 + 2i\frac{P}{\kappa a} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_0^- \\ A_0^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 - 2i\frac{P}{\kappa a} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0^- \\ B_0^+ \end{pmatrix} \quad (3.48)$$

Multiplicando por la matriz inversa, tenemos que la matriz de dispersión de una delta es

$$\mathcal{S} = \frac{1}{1 + i\frac{P}{\kappa a}} \begin{pmatrix} -i\frac{P}{\kappa a} & 1 \\ 1 & -i\frac{P}{\kappa a} \end{pmatrix} \quad (3.49)$$

Un resultado importante en mecánica cuántica es que la matriz de dispersión es unitaria, debido a la conservación de probabilidad de la función de onda

$$\mathcal{S}\mathcal{S}^\dagger = I \quad (3.50)$$

donde \mathcal{S}^\dagger representa la matriz transpuesta conjugada de la matriz \mathcal{S} e I la matriz identidad.

Además, como la función de onda conjugada cumple la misma ecuación de Schrödinger, salvo que las amplitudes están invertidas, se tiene que cumplir que \mathcal{S} es simétrica, por lo que la matriz \mathcal{S} es simétrica y unitaria.

Existe otra matriz que relaciona los coeficientes de manera distinta, relaciona los coeficientes antes y después de cruzar el dispersor.

$$\begin{aligned} A_0^+ &= R_{11}A_0^- + R_{12}B_0^- \\ B_0^+ &= R_{21}A_0^- + R_{22}B_0^- \end{aligned} \quad (3.51)$$

o en forma matricial

$$\begin{pmatrix} A_0^+ \\ B_0^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0^- \\ B_0^- \end{pmatrix} = \mathcal{R} \begin{pmatrix} A_0^- \\ B_0^- \end{pmatrix} \quad (3.52)$$

A esta matriz \mathcal{R} se le conoce como matriz de transferencia.

3. Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional infinito

A partir de las ecuaciones lineales (3.44) se puede llegar a una relación entre ambas matrices

$$\begin{aligned} A_0^+ - (S_{12} + S_{22})B_0^+ &= (S_{11} + S_{21})A_0^- - B_0^- \\ -A_0^+ - (S_{12} - S_{22})B_0^+ &= (S_{11} - S_{21})A_0^- - B_0^-. \end{aligned} \quad (3.53)$$

En forma matricial

$$\begin{pmatrix} 1 & -S_{12} - S_{22} \\ -1 & -S_{12} + S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0^+ \\ B_0^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} + S_{21} & -1 \\ S_{11} - S_{21} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0^- \\ B_0^- \end{pmatrix} \quad (3.54)$$

Invertiendo la matriz del miembro izquierdo y comparando con (3.58) nos queda

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{pmatrix} = \frac{1}{S_{12}} \begin{pmatrix} S_{12}^2 - S_{11}S_{22} & S_{22} \\ -S_{11} & 1 \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

Esta expresión para la matriz de transferencia es análoga a la usada en [47], la cual relaciona los coeficientes de las amplitudes de la función de onda antes y después de cruzar un dispersor.

En particular para nuestro problema tenemos

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} 1 - i\frac{P}{\kappa a} & -i\frac{P}{\kappa a} \\ i\frac{P}{\kappa a} & 1 + i\frac{P}{\kappa a} \end{pmatrix} \quad (3.56)$$

Análogamente podemos tomar la matriz inversa

$$\mathcal{R}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 + i\frac{P}{\kappa a} & i\frac{P}{\kappa a} \\ -i\frac{P}{\kappa a} & 1 - i\frac{P}{\kappa a} \end{pmatrix} \quad (3.57)$$

Por lo que

$$\begin{pmatrix} A_0^- \\ B_0^- \end{pmatrix} = \mathcal{R}^{-1} \begin{pmatrix} A_0^+ \\ B_0^+ \end{pmatrix} \quad (3.58)$$

Una última matriz es necesaria para completar la descripción, la cual se denomina matriz de traslación.

Cuando se quiere obtener la amplitud de la onda en un sistema trasladado, las amplitudes tan sólo se ven modificadas por una fase respectiva. Si denominamos por A_1^- y B_1^- las amplitudes de las ondas, dirigidas hacia la derecha y la izquierda respectivamente, antes de cruzar el dispersor situado en $x = a$, se cumple que

$$\begin{pmatrix} A_1^- \\ B_1^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0^+ \\ B_0^+ \end{pmatrix} = \mathcal{T} \begin{pmatrix} A_0^+ \\ B_0^+ \end{pmatrix} \quad (3.59)$$

En nuestro caso, como en la región $0 < x < a$ no hay potencial, la matriz de traslación

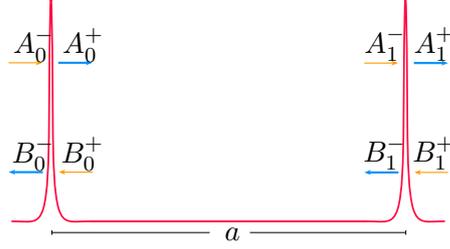


Figura 3.2: Diagrama de dos dispersores delta donde se muestran los coeficientes de la onda libre

es diagonal y está dada por

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} e^{i\kappa a} & 0 \\ 0 & e^{-i\kappa a} \end{pmatrix} \quad (3.60)$$

En la figura 3.2 se muestra un diagrama de dos dispersores delta donde se muestran los coeficientes de la onda libre, en la figura se observan los coeficientes A_0^- , B_0^- , A_0^+ , B_0^+ , correspondientes a los coeficientes antes y después de cruzar el primer dispersor respectivamente y de manera análoga los coeficientes A_1^- , B_1^- , A_1^+ , B_1^+ , correspondientes a los coeficientes del segundo dispersor.

Con esto se puede expresar la función de onda en cada región entre las deltas, en particular partiendo de (3.59) y (3.60) podemos relacionar los coeficientes que se muestran el diagrama

$$\begin{pmatrix} A_0^+ \\ B_0^+ \end{pmatrix} = \mathcal{T}^{-1} \begin{pmatrix} A_1^- \\ B_1^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1^- e^{-i\kappa a} \\ B_1^- e^{i\kappa a} \end{pmatrix} \quad (3.61)$$

sustituyendo en (3.43) el resultado de

$$\begin{aligned} \psi(0 < x < a) &= A_0^+ e^{i\kappa x} + B_0^- e^{-i\kappa x} = \\ &A_1^- e^{i\kappa(x-a)} + B_1^- e^{-i\kappa(x-a)} \end{aligned} \quad (3.62)$$

Ahora se hace uso de estas dos últimas matrices para determinar los siguientes coeficientes

$$\begin{pmatrix} A_2^- \\ B_2^- \end{pmatrix} = \mathcal{T} \begin{pmatrix} A_1^+ \\ B_1^+ \end{pmatrix} = \mathcal{T}\mathcal{R} \begin{pmatrix} A_1^- \\ B_1^- \end{pmatrix} \quad (3.63)$$

O bien, haciendo uso de la inversa del producto de matrices

$$\begin{pmatrix} A_1^- \\ B_1^- \end{pmatrix} = \mathcal{R}^{-1}\mathcal{T}^{-1} \begin{pmatrix} A_2^- \\ B_2^- \end{pmatrix} = \mathcal{P} \begin{pmatrix} A_2^- \\ B_2^- \end{pmatrix} \quad (3.64)$$

3. Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional infinito

donde se define la matriz de transferencia

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} (1 + i\frac{P}{\kappa a})e^{-i\kappa a} & i\frac{P}{\kappa a}e^{i\kappa a} \\ -i\frac{P}{\kappa a}e^{-i\kappa a} & (1 - i\frac{P}{\kappa a})e^{i\kappa a} \end{pmatrix} \quad (3.65)$$

que será de bastante utilidad.

Se define la cantidad ξ como la mitad de la traza de la matriz \mathcal{P} de forma que

$$\xi \equiv \frac{1}{2} \text{Tr}(\mathcal{P}) = \cos \kappa a + \frac{P}{\kappa a} \sin \kappa a \quad (3.66)$$

Hasta ahora, el procedimiento anterior ha sido lo bastante general, para incluir un número finito de deltas como dispersores, separadas una distancia a .

Ahora consideremos el teorema de Bloch donde, en este caso, establece una conexión entre los coeficientes, nos dice que la función de onda está desfasada a lo más por una onda libre caracterizada por el momento k de Bloch, en particular

$$\begin{pmatrix} A_1^- \\ B_1^- \end{pmatrix} = e^{-ika} \begin{pmatrix} A_2^- \\ B_2^- \end{pmatrix} \quad (3.67)$$

que comparando con la ecuación matricial (3.64), nos queda una ecuación de eigenvalores

$$e^{-ika} \begin{pmatrix} A_2^- \\ B_2^- \end{pmatrix} = \mathcal{P} \begin{pmatrix} A_2^- \\ B_2^- \end{pmatrix} \quad (3.68)$$

donde se tiene que satisfacer la condición

$$\det(\mathcal{P} - e^{-ika}I) = 0 \quad (3.69)$$

O bien, para una matriz cuadrada de 2×2 , es

$$0 = e^{-2ika} - e^{-ika} \text{Tr} \mathcal{P} + \det \mathcal{P} = e^{-2ika} - 2e^{-ika}\xi + \det \mathcal{P} \quad (3.70)$$

Pero una de las propiedades de las matrices \mathcal{R} , \mathcal{T} y \mathcal{P} es que su determinante es uno. Por lo que la ecuación (3.70) se vuelve

$$\cos \kappa a + \frac{P}{\kappa a} \sin \kappa a = \xi = \frac{e^{-2ika} + 1}{2e^{-ika}} = \cos(ka) \quad (3.71)$$

que es la relación de dispersión de Kronig-Penney (3.14).

Donde las amplitudes de la función de onda pueden obtenerse con

$$\frac{B_2^-}{A_2^-} = \frac{e^{-ika} - P_{11}}{P_{12}} \quad (3.72)$$

Al momento de diagonalizar la matriz \mathcal{P} , nos damos cuenta que los eigenvalores cumplen la ecuación característica

$$\lambda^2 - \lambda \text{Tr } \mathcal{P} + 1 = 0 \quad (3.73)$$

dando por resultado

$$\lambda = \xi \pm \sqrt{\xi^2 - 1} = e^{\pm ika} \quad (3.74)$$

Por lo que la matriz diagonalizada de \mathcal{P} es

$$\mathcal{F} = \begin{pmatrix} e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix} \quad (3.75)$$

pero esta matriz se puede interpretar como una matriz de traslación sobre el espacio del momento k de Bloch.

3.2. Cristal unidimensional infinito con una imperfección

Supongamos ahora que hay una imperfección, que se modela como un dispersor delta adicional en el cristal en la posición $x = x'$, tal que el potencial puede expresarse como la suma del potencial periódico tipo peine de Dirac $V(x)$ es dado por (3.1) más la delta que describe la imperfección

$$V(x) + (v'_0 - v_0)\delta(x - x') \quad (3.76)$$

Observe que si $x' = Na$ con N algún entero entonces una delta con intensidad v'_0 sustituye una delta del potencial periódico sirve como imperfección.

$$V(x) + (v'_0 - v_0)\delta(x - Na) = \sum_{n=-\infty}^{N-1} v_0\delta(x - na) + v'_0\delta(x - Na) + \sum_{n=N+1}^{\infty} v_0\delta(x - na) \quad (3.77)$$

Al sustituir el potencial anterior para un valor arbitrario de x' en la ecuación de Schrödinger, la ecuación (3.16) sufre una modificación

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \kappa^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V(x) \right) \psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (v'_0 - v_0)\delta(x - x')\psi(x) \quad (3.78)$$

donde el potencial $V(x)$ es dado por (3.1).

Observe que podemos tratar a la imperfección como el problema de un dispersor, ya que para $x \neq x'$ la ecuación (3.78) satisface la ecuación de Schrödinger (3.16), la cual

3. Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional infinito

tiene como solución (3.39).

La solución tiene el término de la onda con el vector de Bloch k , entonces tanto la función de onda con k y $-k$ satisface la ecuación de Schrödinger (3.16), esto es consecuencia de que la ecuación diferencial es lineal, por lo que la función ψ y su conjugado $\tilde{\psi}$ son solución, por lo que una combinación lineal de ambas, también lo es.

Para $x < x'$, la solución es

$$\Psi(x) = C^- \frac{\psi(x)}{\psi(x')} + D^- \frac{\tilde{\psi}(x)}{\tilde{\psi}(x')} \quad (3.79)$$

y si $x > x'$, la solución es

$$\Psi(x) = C^+ \frac{\psi(x)}{\psi(x')} + D^+ \frac{\tilde{\psi}(x)}{\tilde{\psi}(x')} \quad (3.80)$$

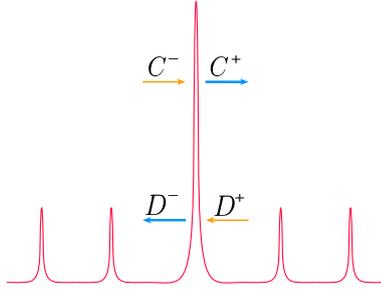


Figura 3.3: Diagrama de un cristal infinito con dispersores delta iguales con excepción de una delta distinta donde se muestran los coeficientes de la onda de Bloch.

En la figura 3.3 se muestra el diagrama de un cristal infinito con dispersores delta iguales con excepción de una delta distinta, se muestran los coeficientes de la onda libre descritos por las ecuaciones (3.79) y (3.80), observe que se puede interpretar a C^+ y D^- como los coeficientes de las ondas salientes y a C^- y D^+ los coeficientes de las ondas entrantes.

La condición de continuidad en $x = x'$ de la función de onda exige que

$$C^- + D^- = \Psi(x'^-) = \Psi(x'^+) = C^+ + D^+ \quad (3.81)$$

Integrando la ecuación (3.78) alrededor de una vecindad $x = x'$ nos queda

$$\begin{aligned} C^+ \frac{d\psi}{dx}(x'^+) + D^+ \frac{d\tilde{\psi}}{dx}(x'^+) - C^- \frac{d\psi}{dx}(x'^-) - D^- \frac{d\tilde{\psi}}{dx}(x'^-) = \\ \frac{d\psi}{dx}(x'^+) - \frac{d\Psi}{dx}(x'^-) = \frac{2m}{\hbar^2} [(v'_0 - v_0) + v_0 \delta_{x',na}] (C^- + D^-), \end{aligned} \quad (3.82)$$

donde

$$\delta_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (3.83)$$

representa la delta de Kronecker. En caso de que no existiera la imperfección, entonces la condición de discontinuidad de la derivada es

$$\frac{d\psi}{dx}(x'^+) - \frac{d\psi}{dx}(x'^-) = \frac{2m}{\hbar^2} v_0 \psi(x') \delta_{x',na} \quad (3.84)$$

y para su complejo conjugado

$$\frac{d\tilde{\psi}}{dx}(x'^+) - \frac{d\tilde{\psi}}{dx}(x'^-) = \frac{2m}{\hbar^2} v_0 \tilde{\psi}(x') \delta_{x',na} \quad (3.85)$$

Sustituyendo (3.84) y (3.85) en (3.82) nos queda

$$\begin{aligned} (C^+ - C^-) \frac{\frac{d\psi}{dx}(x'^+)}{\psi(x')} + (D^+ - D^-) \frac{\frac{d\tilde{\psi}}{dx}(x'^+)}{\tilde{\psi}(x')} &= \\ = \frac{2m}{\hbar^2} (v'_0 - v_0) (C^- + D^-) &= \frac{2}{a} (P' - P) (C^- + D^-) \end{aligned} \quad (3.86)$$

En forma matricial, la ecuación se escribe como

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ \frac{\frac{d\tilde{\psi}}{dx}(x')}{\tilde{\psi}(x')} + \frac{2}{a}(P' - P) & -\frac{\frac{d\psi}{dx}(x')}{\psi(x')} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D^- \\ C^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -\frac{\frac{d\psi}{dx}(x')}{\psi(x')} - \frac{2}{a}(P' - P) & \frac{\frac{d\tilde{\psi}}{dx}(x')}{\tilde{\psi}(x')} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C^- \\ D^+ \end{pmatrix} \quad (3.87)$$

Por lo que la matriz de dispersión es

$$S = \frac{1}{W + \frac{2}{a}(P' - P)\psi\tilde{\psi}} \begin{pmatrix} -\frac{2}{a}(P' - P)\psi\tilde{\psi} & W \\ W & -\frac{2}{a}(P' - P)\psi\tilde{\psi} \end{pmatrix} \quad (3.88)$$

donde $W(x') = \frac{d\tilde{\psi}}{dx}\psi - \frac{d\psi}{dx}\tilde{\psi}$ es el wronskiano de la ecuación diferencial.

Para determinar el wronskiano se usa la ecuación de la función de onda (3.42) obtenida por el método de Green, lo que da

$$W(x') = \frac{-2i\kappa\psi^2(0)}{\sin^2(\kappa a)} \sin(ka) \sin(\kappa a) = \frac{-2i\kappa\psi^2(0)}{\sin(\kappa a)} \sin(ka) \quad (3.89)$$

3. Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional infinito

Y análogamente se obtiene el factor

$$\begin{aligned} \psi(x')\tilde{\psi}(x') &= \frac{\psi^2(0)}{\sin^2(\kappa a)} \left[\sin^2 \left(\kappa \left(x' - \left\lfloor \frac{x'}{a} \right\rfloor \right) \right) + \sin^2 \left(\kappa \left(x' - \left\lfloor \frac{x'}{a} \right\rfloor - a \right) \right) \right. \\ &\quad \left. - 2 \cos(ka) \sin \left(\kappa \left(x' - \left\lfloor \frac{x'}{a} \right\rfloor \right) \right) \sin \left(\kappa \left(x' - \left\lfloor \frac{x'}{a} \right\rfloor - a \right) \right) \right] \end{aligned} \quad (3.90)$$

Obviamente como la impureza se localiza en alguna de las posiciones de una delta $x' = na$, entonces el factor $x' - \left\lfloor \frac{x'}{a} \right\rfloor = 0$ se anula, quedando

$$\psi(x')\tilde{\psi}(x') = \psi^2(0) \quad (3.91)$$

Las componentes de la matriz de dispersión \mathcal{S} son

$$S_{11} = S_{22} = \frac{(P' - P) \sin \kappa a}{-i\kappa a \sin ka + (P' - P) \sin \kappa a} \quad (3.92)$$

$$S_{12} = S_{21} = \frac{-i\kappa a \sin ka}{-i\kappa a \sin ka + (P' - P) \sin \kappa a} \quad (3.93)$$

Justo la matriz \mathcal{S} presentará una divergencia si ocurre que

$$W(x') + \frac{2}{a}(P' - P)\psi(x')\tilde{\psi}(x') = 0 \quad (3.94)$$

Sustituyendo (3.89) y (3.91) en (3.94), para obtener

$$-2i\kappa \sin(ka) + \frac{2}{a}(P' - P) \sin(\kappa a) = 0 \quad (3.95)$$

Se propone una k compleja de forma que su parte real siempre esté en el límite de la primera zona de Brillouin, de la forma

$$k = m \frac{\pi}{a} + i\eta \quad (3.96)$$

con m algún valor entero y η un valor real, que es la parte imaginaria de k , que al ser sustituido en (3.14), nos queda

$$(-1)^m \cosh(\eta a) = \cos \kappa a + \frac{P}{\kappa a} \sin(\kappa a) \quad (3.97)$$

Sustituyendo (3.96) en (3.95)

$$(-1)^m \sinh(\eta a) = -\frac{P' - P}{\kappa a} \sin(\kappa a) \quad (3.98)$$

a estas ecuaciones se les conoce como relaciones de dispersión de Kronig Penney complejas [49].

Utilizando la identidad pitagórica en las dos anteriores ecuaciones nos queda

$$\cot(\kappa a) = \frac{\kappa a}{2P} \left[1 - \frac{P^2 - (P' - P)^2}{(\kappa a)^2} \right] \quad (3.99)$$

o bien,

$$\kappa a \cot(\kappa a) = \frac{(\kappa a)^2 + P'^2}{2P} - P' \quad (3.100)$$

A los factores P' y P les llamaremos impermeabilidad de la imperfección e impermeabilidad del cristal, respectivamente.

Observe que en el caso particular de que $P' = 0$, es decir, en el caso en que una de las deltas fue removida del arreglo, la ecuación se reduce a

$$\kappa a \tan(\kappa a) = 2P \quad (3.101)$$

3.3. Cristal unidimensional infinito con dos o más imperfecciones

A partir de las componentes de la matriz de dispersión (3.93) y (3.92) la cual une dos ondas de Bloch mediante una imperfección, se puede construir la matriz de transferencia usando (3.55), obteniéndose

$$\mathcal{R}_i = \begin{pmatrix} 1 - i \frac{(P' - P) \sin \kappa a}{\kappa a \sin \kappa a} & -i \frac{(P' - P) \sin \kappa a}{\kappa a \sin \kappa a} \\ i \frac{(P' - P) \sin \kappa a}{\kappa a \sin \kappa a} & 1 + i \frac{(P' - P) \sin \kappa a}{\kappa a \sin \kappa a} \end{pmatrix} \quad (3.102)$$

De hecho, uno puede obtener la matriz de dispersión a través de los elementos de la de transferencia

$$\mathcal{S} = \frac{1}{R_{22}} \begin{pmatrix} -R_{21} & 1 \\ R_{11}R_{22} - R_{12}R_{21} & R_{12} \end{pmatrix}. \quad (3.103)$$

Se observa que la matriz de dispersión es singular cuando $R_{22} = 0$.

Por ejemplo, en el caso de una sola imperfección ocurre para

$$(P' - P) \sin \kappa a = i \kappa a \sin \kappa a \quad (3.104)$$

que es la condición (3.95).

3. Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional infinito

En el caso más general, si tenemos una imperfección con factor P_1 entonces las amplitudes de las ondas antes y después de cruzar la imperfección es

$$\begin{pmatrix} C_1^+ \\ D_1^+ \end{pmatrix} = \mathcal{R}_1 \begin{pmatrix} C_1^- \\ D_1^- \end{pmatrix} \quad (3.105)$$

Ahora, supongamos que nos trasladamos l celdas unitarias se puede aprovechar el uso de una traslación sobre el espacio del momento de Bloch, al usar la matriz de traslación (3.75) y multiplicarlas l veces

$$\mathcal{T}^l = \begin{pmatrix} e^{ilka} & 0 \\ 0 & e^{-ilka} \end{pmatrix} \quad (3.106)$$

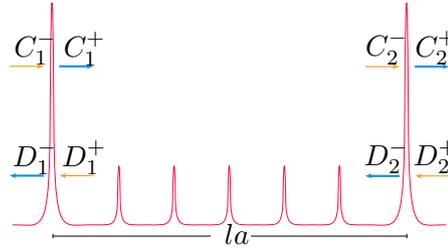


Figura 3.4: Diagrama de un cristal infinito con dispersores delta iguales y dos deltas distintas donde se muestran los coeficientes de la onda de Bloch.

En la figura 3.4 se muestra un diagrama de un cristal infinito con dispersores delta iguales y dos deltas distintas, se observan los coeficientes C_1^- , D_1^- , C_1^+ , D_1^+ , correspondientes a los coeficientes antes y después de cruzar el primer dispersor diferente respectivamente; y de manera análoga los coeficientes C_2^- , D_2^- , C_2^+ , D_2^+ , correspondientes a los coeficientes del segundo dispersor diferente.

Con ello, se puede aprovechar para encontrar las amplitudes entre dos imperfecciones de coeficientes P_1 y P_2 separados l_1 celdas unitarias de ancho a

$$\begin{pmatrix} C_2^+ \\ D_2^+ \end{pmatrix} = \mathcal{R}_2 \begin{pmatrix} C_2^- \\ D_2^- \end{pmatrix} = \mathcal{R}_2 \mathcal{T}^{l_1} \begin{pmatrix} C_1^+ \\ D_1^+ \end{pmatrix} = \mathcal{R}_2 \mathcal{T}^{l_1} \mathcal{R}_1 \begin{pmatrix} C_1^- \\ D_1^- \end{pmatrix} \quad (3.107)$$

En general para un número de M imperfecciones separadas entre sí un número l_j de celdas de ancho a entre sí, para $1 \leq j \leq M - 1$, se tiene

$$\begin{pmatrix} C_M^+ \\ D_M^+ \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} C_1^- \\ D_1^- \end{pmatrix} \quad (3.108)$$

con la matriz

$$\mathcal{M} = \mathcal{R}_M \prod_{j=1}^{M-1} \mathcal{T}^{l_j} \mathcal{R}_j \quad (3.109)$$

observe que la matriz de dispersión es singular cuando $M_{22} = 0$.

En el caso de que se tienen dos impurezas iguales de forma que $\mathcal{R}_1 = \mathcal{R}_2$, se puede determinar el termino diagonal M_{22} de la matriz $\mathcal{M} = \mathcal{R}_2 \mathcal{T}^{l_1} \mathcal{R}_1 = \mathcal{R}_1 \mathcal{T}^{l_1} \mathcal{R}_1$

$$0 = M_{22} = x^{-2} e^{-il_1 ka} \left[x^2 + 2ix - (1 - e^{2il_1 ka}) \right] \quad (3.110)$$

cuya solución es

$$x = -i(1 \pm e^{il_1 ka}) \quad (3.111)$$

donde

$$x \equiv \frac{\kappa a \sin ka}{(P' - P) \sin \kappa a} \quad (3.112)$$

o bien, sustituyendo (3.112) en (3.111) tenemos

$$\frac{i \sin ka}{1 \pm e^{il_1 ka}} = (P' - P) \frac{\sin \kappa a}{\kappa a} \quad (3.113)$$

Haciendo uso de la ecuación (3.14) se observa que se puede escribir

$$\cos \kappa a + \frac{P}{P' - P} \frac{i \sin ka}{1 \pm e^{il_1 ka}} = \cos ka \quad (3.114)$$

Ahora imponiendo el momento de la onda de Bloch complejo $ka = m\pi + i\eta a$ sobre la ecuación (3.113) se obtiene.

$$- \frac{(-1)^m \sinh \eta a}{1 \pm (-1)^{ml_1} e^{-l_1 \eta a}} = (P' - P) \frac{\sin \kappa a}{\kappa a} \quad (3.115)$$

En cambio si se impone sobre la ecuación (3.114) se obtiene

$$\cos \kappa a = (-1)^m \left[\cosh \eta a + \frac{P}{P' - P} \frac{\sinh \eta a}{1 \pm (-1)^{ml_1} e^{-\eta l_1 a}} \right] \quad (3.116)$$

Por otra parte, si se utiliza (3.97) y se sustituye en (3.113) se obtiene por ecuación

$$\kappa a \cot \kappa a = \frac{(\kappa a)^2 + (P' - P)^2 (1 \pm (-1)^{ml_1} e^{-\eta l_1 a})^2 - P^2}{2P} \quad (3.117)$$

Observe de la ecuación anterior que cuando $l_1 \rightarrow \infty$ y $\eta > 0$, se obtiene la condición para una sola imperfección (3.95).

Esto se interpreta como, cuando dos imperfecciones están lo suficientemente alejadas una de otra, no hay acoplamiento entre los efectos de ambas, por lo que el espectro se asemeja al de una sola imperfección.

3. Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional infinito

En el caso de tener un defecto donde $P' = 0$, las dos últimas ecuaciones son

$$\cos \kappa a = (-1)^m \left(\cosh \eta a - \frac{\sinh \eta a}{1 \pm (-1)^{ml_1} e^{-\eta l_1 a}} \right) \quad (3.118)$$

$$\kappa a \cot \kappa a = \frac{(\kappa a)^2 + P^2 [(1 \pm (-1)^{ml_1} e^{-\eta l_1 a})^2 - 1]}{2P} \quad (3.119)$$

Ocupando la ecuación simultánea

$$(-1)^m \cosh(\eta a) = \cos \kappa a + \frac{P}{\kappa a} \sin(\kappa a) \quad (3.120)$$

Estos importantes resultados fueron obtenidos en el trabajo de Saxon y Hutner [48].

3.4. Matriz de transferencia para M imperfecciones separadas igualmente

De la ecuación (3.109), la cual describe la matriz de transferencia para un conjunto de M vacancias se tiene que

$$\mathcal{M} = \mathcal{R}_M \prod_{j=1}^{M-1} \left(\mathcal{F}^{l_j} \mathcal{R}_j \right) \quad (3.121)$$

En el caso que suponemos que las imperfecciones son iguales la matriz de transferencia de cada imperfección cumple que

$$\mathcal{R}_j = \mathcal{R}' \quad \text{con } j = 1, 2, \dots, M \quad (3.122)$$

Si además las imperfecciones se encuentran igualmente espaciadas

$$l_j = l \quad \text{con } j = 1, 2, \dots, M \quad (3.123)$$

A partir de ello, trabajemos con la diagonalización de la siguiente matriz

$$\mathcal{M} = \prod_{j=1}^M \left(\mathcal{F}^{l_j} \mathcal{R}_j \right) = \left(\mathcal{F}^l \mathcal{R}' \right)^M \quad (3.124)$$

En forma explícita la matriz $\mathcal{F}^l \mathcal{R}'$ es

$$\mathcal{F}^l \mathcal{R}' = \begin{pmatrix} R'_{11} e^{ilk a} & R'_{12} \\ R'_{21} & R'_{22} e^{-ilk a} \end{pmatrix} \quad (3.125)$$

Los eigenvalores resultantes de $\mathcal{T}^l \mathcal{R}'$ son

$$\lambda_{\pm} = \Re(R'_{11} e^{ilka}) \pm \sqrt{(\Re(R'_{11} e^{ilka}))^2 - 1} \quad (3.126)$$

donde

$$\begin{aligned} \Re(R'_{11} e^{ilka}) &= \cos lka + \frac{1}{x} \sin lka \\ \Im(R'_{11} e^{ilka}) &= \sin lka - \frac{1}{x} \cos lka \end{aligned} \quad (3.127)$$

y x viene dado por la expresión (3.112).

En este caso, para determinar la divergencia de la matriz de dispersión, tenemos que usar que la entrada diagonal es $M_{22} = 0$, que es equivalente a

$$\lambda_+^M y_+ x_- = \lambda_-^M y_- x_+ \quad (3.128)$$

que es equivalente a

$$\frac{\lambda_+ - R'_{11} e^{ilka}}{\lambda_- - R'_{11} e^{ilka}} = \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^M \quad (3.129)$$

sustituyendo explícitamente

$$\begin{aligned} & - \frac{\sqrt{(\Re(R'_{11} e^{ilka}))^2 - 1} - i\Im(R'_{11} e^{ilka})}{\sqrt{(\Re(R'_{11} e^{ilka}))^2 - 1} + i\Im(R'_{11} e^{ilka})} \\ &= \left(\frac{\Re(R'_{11} e^{ilka}) - \sqrt{(\Re(R'_{11} e^{ilka}))^2 - 1}}{\Re(R'_{11} e^{ilka}) + \sqrt{(\Re(R'_{11} e^{ilka}))^2 - 1}} \right)^M \end{aligned} \quad (3.130)$$

O bien,

$$\begin{aligned} & - \frac{(\sqrt{(\Re(R'_{11} e^{ilka}))^2 - 1} - i\Im(R'_{11} e^{ilka}))^2}{(\Im(R'_{11} e^{ilka}))^2 - (\Re(R'_{11} e^{ilka}))^2 + 1} \\ &= \left(\Re(R'_{11} e^{ilka}) - \sqrt{(\Re(R'_{11} e^{ilka}))^2 - 1} \right)^{2M} \end{aligned} \quad (3.131)$$

Consideremos los siguientes factores

$$(\Re(R'_{11} e^{ilka}))^2 - 1 = \left(\frac{1}{x^2} - 1 \right) \sin^2 lka - \frac{1}{x} \sin 2lka \quad (3.132)$$

$$(\Im(R'_{11} e^{ilka}))^2 - (\Re(R'_{11} e^{ilka}))^2 + 1 = 1 + \left(\frac{1}{x^2} - 1 \right) \cos 2lka \quad (3.133)$$

3. Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional infinito

Proponiendo un vector de Bloch complejo $k = m\pi + \eta a$, donde m es un número entero, en las expresiones (3.127) obtenemos que

$$\begin{aligned}\Re(R'_{11}e^{ilka}) &= (-1)^{ml} \left(\cosh l\eta a + \frac{1}{x} \sinh l\eta a \right) \\ \Im(R'_{11}e^{ilka}) &= (-1)^{ml} \left(\sinh l\eta a - \frac{1}{x} \cosh l\eta a \right)\end{aligned}\tag{3.134}$$

y sustituyendo k compleja en los factores (3.132) nos queda

$$\begin{aligned}(\Re(R'_{11}e^{ilka}))^2 - 1 &= -\left(\frac{1}{x^2} - 1\right) \sinh^2 l\eta a - i\frac{1}{x} \sinh 2l\eta a \\ (\Im(R'_{11}e^{ilka}))^2 - (\Re(R'_{11}e^{ilka}))^2 + 1 &= 1 + \left(\frac{1}{x^2} - 1\right) \cos 2l\eta a\end{aligned}\tag{3.135}$$

En el caso en que la separación entre las deltas sea grande $l \rightarrow \infty$ tenemos que

$$\begin{aligned}\Re(R'_{11}e^{ilka}) &= (-1)^{ml} \frac{e^{l\eta a}}{2} \left(1 + \frac{1}{x} \right) \\ \Im(R'_{11}e^{ilka}) &= (-1)^{ml} \frac{e^{l\eta a}}{2} \left(1 - \frac{1}{x} \right)\end{aligned}\tag{3.136}$$

y los factores se convierten en

$$\begin{aligned}(\Re(R'_{11}e^{ilka}))^2 - 1 &= -\left(\frac{1}{x} + i\right)^2 \frac{e^{2l\eta a}}{4} \\ (\Im(R'_{11}e^{ilka}))^2 - (\Re(R'_{11}e^{ilka}))^2 + 1 &= 1 + \left(\frac{1}{x^2} - 1\right) \frac{e^{2l\eta a}}{2}\end{aligned}\tag{3.137}$$

cuya solución trivial es que

$$x = -i\tag{3.138}$$

la cual corresponde a la solución de una sola imperfección (3.95), es decir cuando las imperfecciones están muy separadas entre sí ($l \rightarrow \infty$), prácticamente se degenera al caso de una sola imperfección, ya que no hay acoplamiento entre imperfecciones.

Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional finito

En el capítulo anterior se expuso con detalle los métodos de función de Green, matriz de transferencia y de dispersión para encontrar la solución de un potencial de Kronig Penney con una imperfección en el caso de un número infinito de dispersores delta.

En este capítulo se propone estudiar el caso de un número finito de dispersores delta encerradas en una caja (condiciones de frontera de Dirichlet) o bien, en un anillo simulando un cilindro que confine al gas (condiciones periódicas). Con esto queremos confirmar que en el laboratorio pueden ser creados estos potenciales para simular el límite termodinámico al usar un número grande de dispersores.

En la figura 4.1a se muestra un potencial cosenoidal $V(x) = \cos^2(x)$ en el que se le superpuso un pulso gaussiano. El potencial periódico cosenoidal sin imperfección es usado para simular una red óptica [11].

Nuestra propuesta es que un pulso en superposición con esta red anula una de las crestas, creando la vacancia.

En la figura 4.1b se observa una aproximación al sencillo modelo que proponemos, tratando de simular los máximos cosenoidales como pulsos gaussianos y la vacancia como una remoción de uno de estos pulsos. Se recuerda al lector que en el límite en que su desviación cuadrática tiende a cero, el pulso se convierte en una distribución delta de Dirac.

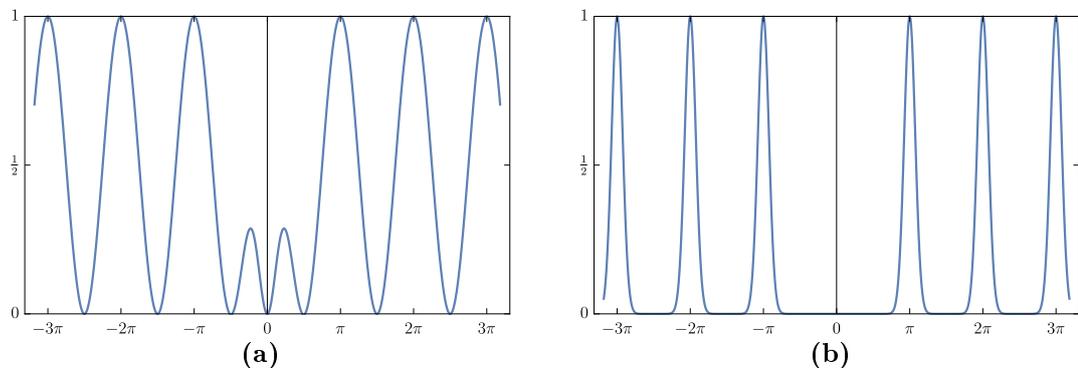


Figura 4.1: (a) Potencial unidimensional \cos^2 que simula una red óptica con una superposición de un pulso gaussiano y (b) potencial de pulsos gaussianos con una vacancia.

4. Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional finito

El potencial unidimensional con un número finito M de deltas igualmente espaciadas, cada una con un coeficiente de normalización de energía por longitud $v_{0,j}$ para $1 \leq j \leq M$, es

$$V(x) = \sum_{j=1}^M v_{0,j} \delta(x - ja) \quad (4.1)$$

En general, la función de onda entre dos deltas contiguas tiene por ecuación

$$\psi_n(x) = A_n e^{i\kappa(x-na)} + B_n e^{-i\kappa(x-na)} \quad (4.2)$$

donde $0 \leq (n-1)a \leq x \leq na \leq L = Ma$.

Comparando con la expresión de la función de onda (3.62), se puede aprovechar el uso de (3.65) la matriz de transferencia \mathcal{P} entre cada dispersor delta separado una distancia a es

$$\mathcal{P}_j = \begin{pmatrix} (1 + i\frac{P_j}{\kappa a})e^{-i\kappa a} & i\frac{P_j}{\kappa a}e^{i\kappa a} \\ -i\frac{P_j}{\kappa a}e^{-i\kappa a} & (1 - i\frac{P_j}{\kappa a})e^{i\kappa a} \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

donde

$$P_j = \frac{mv_{0,j}a}{\hbar^2} \quad (4.4)$$

en analogía con (3.15). Así también, podemos definir

$$\xi_j = \frac{1}{2} \text{Tr}(\mathcal{P}_j) = \cos \kappa a + \frac{P_j}{\kappa a} \sin \kappa a \quad (4.5)$$

Empecemos suponiendo un potencial formado por conjunto de N primeras deltas iguales.

Por simplicidad para $P_j = P$, definimos

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} (1 + i\frac{P}{\kappa a})e^{-i\kappa a} & i\frac{P}{\kappa a}e^{i\kappa a} \\ -i\frac{P}{\kappa a}e^{-i\kappa a} & (1 - i\frac{P}{\kappa a})e^{i\kappa a} \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

Utilizando la matriz de transferencia \mathcal{P} (4.6) se tiene que

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \mathcal{P}^N \begin{pmatrix} A_{N+1} \\ B_{N+1} \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

Se define la cantidad θ como

$$\xi = \frac{1}{2} \text{Tr}(\mathcal{P}) = \cos \kappa a + \frac{P}{\kappa a} \sin \kappa a \equiv \cos(\theta). \quad (4.8)$$

Observe que el factor θ

$$\theta = \kappa a \quad (4.9)$$

es el producto del cuasimomento de Block k por la distancia de separación a entre las deltas.

Por otro lado, para cualquier matriz \mathcal{P} (de 2×2) su ecuación característica es

$$\lambda^2 - \lambda \text{Tr}(\mathcal{P}) + \det \mathcal{P} = 0. \quad (4.10)$$

Luego, por el teorema de Cayley-Hamilton el cual afirma que cualquier matriz cuadrada satisface su propia ecuación característica se tiene para \mathcal{P} la ecuación

$$\mathcal{P}^2 - 2\mathcal{P}\xi + I = 0 \quad (4.11)$$

donde se ha utilizado que $\det \mathcal{P} = 1$ y $\xi \equiv \frac{1}{2}\text{Tr}(\mathcal{P})$.

De acuerdo con Mason [60], esto puede ser expresado en términos de los polinomios de Chevyshev de segundo orden,

$$\mathcal{P}^2 = U_1(\xi)\mathcal{P} - U_0(\xi)I \quad (4.12)$$

donde $U_N(\xi)$ son los polinomios de Chevyshev de segundo orden grado N en ξ . De manera que $U_0(\xi) = 1$ y $U_1(\xi) = 2\xi$.

Usando la regla de recursión de los polinomios de Chevyshev

$$U_N(\xi) = 2\xi U_{N-1}(\xi) - U_{N-2}(\xi) \quad (4.13)$$

con $n \geq 2$, es posible mostrar por inducción que cualquier potencia de \mathcal{P} puede reducirse a una combinación lineal de \mathcal{P} y la matriz identidad I , así

$$\mathcal{P}^N = \mathcal{P}U_{N-1}(\xi) - IU_{N-2}(\xi). \quad (4.14)$$

Los polinomios de Chevyshev se pueden expresar en su forma trigonométrica

$$U_N(\cos \theta) = \frac{\sin [(N+1)\theta]}{\sin \theta}. \quad (4.15)$$

4.1. Cristal con condiciones de frontera periódicas

En el caso de tener condiciones de frontera periódicas, se tiene una conexión entre los coeficientes de la última función $\psi_{M+1}(x)$ y la primera $\psi_1(x)$ de forma que

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \prod_{j=1}^M \mathcal{P}_j \begin{pmatrix} A_{M+1} \\ B_{M+1} \end{pmatrix} = \left(\prod_{j=1}^M \mathcal{P}_j \right) \mathcal{P} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

Por lo que los coeficientes (A_1, B_1) es eigenvector de $\mathcal{R}\mathcal{P}$ una ecuación con eigenvalor uno.

4. Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional finito

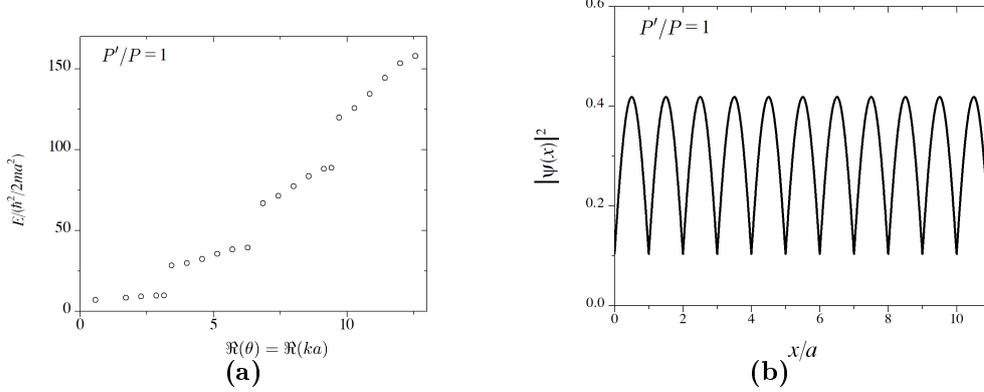


Figura 4.2: (a) Espectro de energía y (b) densidad de probabilidad del estado base con 11 deltas iguales $P'/P = 1$ con condiciones de frontera periódicas.

4.1.1. Cadena cerrada, todas las deltas iguales

En el caso de tener una cadena de N deltas con el mismo factor de impermeabilidad, se tiene la siguiente condición

$$(\mathcal{P}^{N+1} - I) \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = 0 \quad (4.17)$$

Usando la relación de Cayley mostrada (4.14) y la relación (4.8) junto con $|P_{11}|^2 - |P_{12}|^2 = 1$. La ecuación secular de este problema se reduce a

$$U_N^2(\xi) + (1 + U_{N-1}(\xi))^2 - 2\xi U_N(\xi)(1 + U_{N-1}(\xi)) = 0 \quad (4.18)$$

Haciendo a la variable $\cos(\theta) = \xi$, expresando a los polinomios de Chevyshev (4.15) en su forma trigonométrica, excluyendo la raíz del denominador $\sin(\theta) = 0$ y usando diversas relaciones trigonométricas nos queda la siguiente ecuación

$$2 \sin(\theta)^2 [1 - \cos((N+1)\theta)] = 0 \quad (4.19)$$

Excluyendo el caso $\sin(\theta) = 0$, las soluciones son

$$\cos((N+1)\theta) = 1 \quad (4.20)$$

O bien,

$$\theta = \frac{2n\pi}{N+1} \quad \text{con } n \in \mathbf{Z} = \{0, \pm 1, \pm 2, \dots\} \quad (4.21)$$

que en el caso límite de tener un gran número de deltas se vuelve al caso continuo de Kronig-Penney.

En la figura 4.2a se muestra la relación de dispersión, la energía E en función de

la parte real del factor $\theta = ka$, para un anillo unidimensional de 11 deltas iguales. Se observan valores discretos de energía, los cuales forman parte de las usuales bandas de Kronig-Penney del cristal perfecto.

Estas energías discretas hacen que las funciones de onda cumplan Las condiciones de frontera, en este caso, satisfacen la condición de frontera periódica (4.16), además tenemos tantas energías por cada banda como número de deltas en el anillo tengamos, por lo que cuando el número de deltas crece la banda adquiere más niveles de energía. En el límite de tener una infinidad de dispersores delta, se recupera el caso del espectro continuo de bandas de Kronig-Penney que modela a un cristal perfecto.

En la figura 4.2b se muestra la densidad de probabilidad del estado base con 11 deltas iguales $P'/P = 1$ con condiciones de frontera periódicas. En ella se muestra que la densidad de probabilidad es periódica con el mismo periodo del potencial, en este caso, es la distancia a de separación entre las deltas.

Observe que en las posiciones donde se encuentran las deltas, la densidad de probabilidad alcanza mínimos con derivada discontinua. En este caso de condiciones de frontera periódicas la función de onda de la última celda se conecta con la primera.

4.1.2. Cadena cerrada, una delta diferente

En la figura 4.3 se muestra un esquema de una cadena cerrada de deltas con el mismo factor de impenetrabilidad de color amarillo y una de impenetrabilidad diferente, marcada con un color rojo.

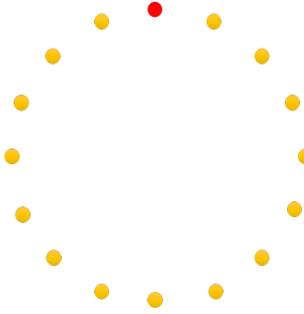


Figura 4.3: Esquema de una cadena cerrada de deltas con una diferente.

Suponiendo que la última celda se conecta a la primer celda por medio de una delta con diferente valor de impermeabilidad. La ecuación para una delta diferente queda

$$\begin{pmatrix} A_{N+1} \\ B_{N+1} \end{pmatrix} = \mathcal{P}' \begin{pmatrix} A_{N+2} \\ B_{N+2} \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

donde \mathcal{P}' es la matriz de transferencia para una delta dada por

$$\mathcal{P}' = \begin{pmatrix} (1 + i\frac{P'}{\kappa a})e^{-i\kappa a} & i\frac{P'}{\kappa a}e^{i\kappa a} \\ -i\frac{P'}{\kappa a}e^{-i\kappa a} & (1 - i\frac{P'}{\kappa a})e^{i\kappa a} \end{pmatrix} \quad (4.23)$$

4. Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional finito

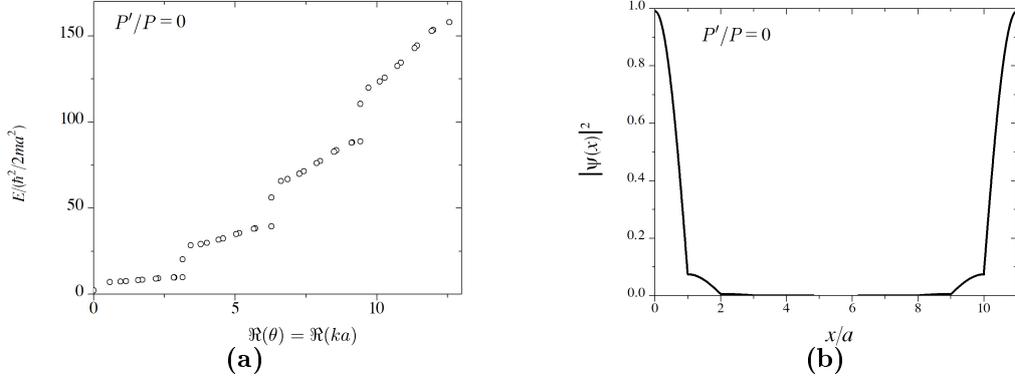


Figura 4.4: (a) Espectro de energía y (b) densidad de probabilidad del estado base con 10 deltas iguales y una distinta con impenetrabilidad relativa $P'/P = 0$.

Por la simetría de la cadena tenemos que ocupar la matriz ($\mathcal{M} = \mathcal{P}'\mathcal{P}^M$) donde tenemos que la primera delta es la vacancia (delta distinta) y después todas las M deltas siguientes son iguales. La ecuación secular es

$$\begin{aligned} 0 &= (M_{11} - 1)(M_{22} - 1) - M_{12}M_{21} \\ &= 1 - (M_{11} + M_{22}) + |M_{11}|^2 - |M_{12}|^2 \end{aligned} \quad (4.24)$$

Debido a que la matriz es unimodular entonces se cumple que $|M_{11}|^2 = 1 + |M_{12}|^2$. Luego, la ecuación se reduce a

$$M_{11} + M_{22} = 2 \quad (4.25)$$

Por otra parte, usando la relación

$$P'_{11}P_{22} + P'_{22}P_{11} - P'_{12}P_{21} - P'_{21}P_{12} = 2 \quad (4.26)$$

Por lo que al sustituir (4.8) y (4.26) en (4.25) nos queda

$$\begin{aligned} M_{11} + M_{22} &= (P'_{11}P_{11} + P'_{22}P_{22} + P'_{12}P_{21} + P'_{21}P_{12})U_{M-1}(\xi) \\ &- (P'_{11} + P'_{22})U_{M-2}(\xi) = (4\xi\xi' - 2)U_{M-1}(\xi) - 2\xi'U_{M-2}(\xi) \\ &= 2\xi'(2\xi U_{M-1}(\xi) - U_{M-2}(\xi)) - 2U_{M-1}(\xi) = 2\xi'U_M(\xi) - 2U_{M-1}(\xi) \end{aligned} \quad (4.27)$$

La cual sustituyendo en la ecuación (4.25) y reduciendo mediante la relación trigonométrica (4.15) nos da

$$\sin[\theta] = \xi' \sin[(M+1)\theta] - \sin[M\theta] \quad (4.28)$$

La cual en el caso particular en que $\xi = \xi' = \cos[\theta]$ nos regresa a la ecuación (4.21) con deltas iguales.

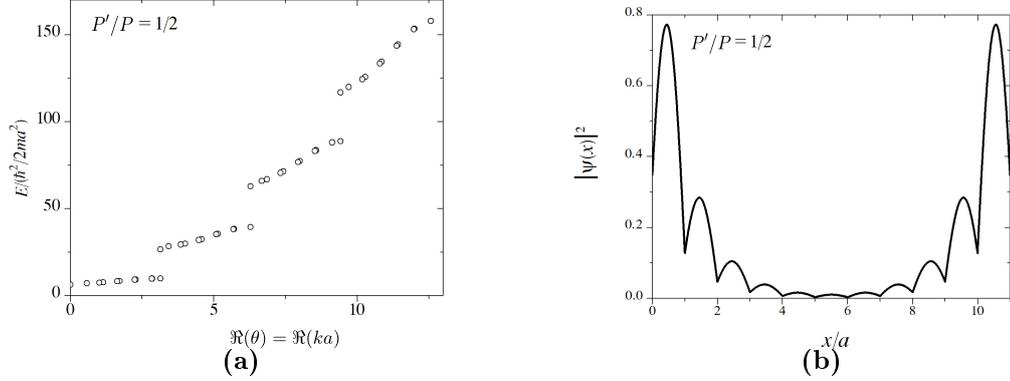


Figura 4.5: (a) Espectro de energía y (b) densidad de probabilidad del estado base con 10 deltas iguales y una distinta con impenetrabilidad relativa $P'/P = 1/2$ con condiciones de frontera periódicas.

En la figura 4.4a se muestra la relación de dispersión, la energía E en función de la parte real del factor $\theta = ka$, para un anillo unidimensional de 11 deltas de la misma impermeabilidad con excepto de una la cual se ha removido, es decir una delta distinta con impenetrabilidad cero.

Se observan 10 valores discretos de energía por cada banda los cuales forman parte de las usuales bandas de Kronig-Penney del cristal perfecto, sin embargo, unas energías que no forman parte de las bandas permitidas del espectro usual del cristal perfecto.

Estas energías que no forman parte de las bandas permitidas del cristal perfecto les corresponden un valor de $\theta = ka$ complejo, tal que su parte real se encuentra en los bordes de la primera zona de Brillouin, es decir, $\Re(\theta) = m\pi$ con m un entero. Entonces, estos estados corresponden a los estados impuros, descritos en el capítulo anterior.

En el límite de tener una infinidad de dispersores delta, se recupera el caso del espectro continuo de bandas de Kronig-Penney que modela a un cristal perfecto, con excepción de unas energías discretas en las bandas prohibidas, las cuales le corresponden un cuasimomento complejo.

En la figura 4.4b se muestra la densidad de probabilidad del estado base con 10 deltas con impenetrabilidad igual $P = 10$ y una delta adicional removida con impenetrabilidad $P' = 0$ con condiciones de frontera periódicas. En ella se muestra que la densidad de probabilidad se distorsiona respecto al caso del cristal perfecto, de hecho, la densidad de probabilidad se concentra en la vacancia y decae exponencialmente fuera de la vacancia.

De manera análoga, en la figura 4.5a se muestra la relación de dispersión, la energía E en función de la parte real del factor $\theta = ka$, para un anillo unidimensional de 11 deltas de la misma impermeabilidad $P = 10$ con excepción de una, la cual tiene la mitad del valor de impermeabilidad.

A pesar de la imperfección, se observan 10 valores discretos de energía por cada banda del cristal perfecto, y débilmente separados, los valores discretos que no forman parte de las bandas permitidas. Se necesita disminuir más el valor de impenetrabilidad para que se pueda observar la separación de los estados impuros de las bandas.

En la figura 4.5b se muestra la densidad de probabilidad del estado base con 10 deltas

con impenetrabilidad igual $P = 10$ y una adicional con la mitad de la impenetrabilidad de las demás $P' = P/2 = 5$ con condiciones de frontera periódicas. En ella se muestra que la densidad de probabilidad se concentra cerca de las celdas que comparten la celda imperfecta y decae exponencialmente en las demás celdas, difiere del caso de la delta vacante, en que, en este caso al tener una delta de menor impenetrabilidad, también hay un cambio no suave en la posición de la delta, debido a la discontinuidad de la derivada de la función de onda.

Es por esta razón que a P , se conoce como factor de impermeabilidad, debido a que permite el paso de la densidad de probabilidad y entre mayor sea el valor de la impenetrabilidad decae la probabilidad de que la partícula atraviese el dispersor delta.

4.1.2.1. Límite de Dirichlet

Cuando la impenetrabilidad de la delta diferente tiende a infinito no hay transmisión de la probabilidad, en este caso el sistema se interpreta como el problema de una pared rígida. De la ecuación (4.8) tenemos que cuando la impermeabilidad P' de la delta distinta es muy grande comparada con la intensidad de las otras deltas tenemos como límite $\lim_{P' \rightarrow \infty} \frac{\xi'}{P'} = \frac{\sin(ka)}{ka}$.

Dividiendo entre P' la ecuación secular (4.28) para la cadena cerrada y tomando el límite anterior nos queda

$$\frac{\sin(\kappa a)}{\kappa a} \sin[(M+1)\theta] = 0 \quad (4.29)$$

Se obtiene la ecuación trivial del caso de un pozo de potencial de ancho a con $\kappa = \frac{n\pi}{a}$. Y la otra solución con M deltas iguales en una caja

$$\theta = \frac{n\pi}{M+1} \quad (4.30)$$

con n un número entero.

En la figura 4.6 se muestra la densidad de probabilidad para el estado base con deltas iguales, donde la delta diferente que une el anillo periódico es altamente impenetrable $P' \rightarrow \infty$, por lo cual se observa como paredes impenetrables, lo que se convierte en un problema con condiciones de frontera de Dirichlet.

En este caso la densidad de probabilidad se anula debido a la delta impenetrable, como si fuera análogo al problema de una caja con paredes de potencial infinito.

4.1.3. Estados impuros

Usando la identidad trigonométrica $\sin(a) + \sin(b) = 2 \sin((a+b)/2) \cos((a-b)/2)$ y $\sin(\arccos(\xi)) = \sqrt{1-\xi^2}$ se reduce la ecuación (4.28) y eliminando el término $2 \sin((M+1)/2)\theta$

$$2 \cos \left[\frac{M-1}{2} \theta \right] = 2\xi' \cos \left[\frac{M+1}{2} \theta \right] \quad (4.31)$$

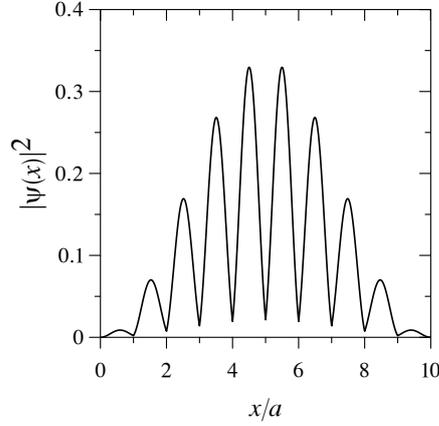


Figura 4.6: Densidad de probabilidad para el estado base con 11 deltas, 10 iguales y la delta que une es altamente impenetrable, problema de Dirichlet.

Usando que $\sin(\arccos(\xi)) = \sqrt{1 - \xi^2}$ entonces

$$\begin{aligned} \cos\left[\frac{M-1}{2}\theta\right] &= \cos\left[\frac{M+1}{2}\theta\right]\cos(\theta) + \sin\left[\frac{M+1}{2}\theta\right]\sin(\theta) \\ &= \xi \cos\left[\frac{M+1}{2}\theta\right] + \sqrt{1-\xi^2} \sin\left[\frac{M+1}{2}\theta\right] \end{aligned} \quad (4.32)$$

Entonces sustituyendo la ecuación (4.32) dentro de (4.31) dejandonos

$$(\xi' - \xi) \cos\left[\frac{M+1}{2}\theta\right] = \sqrt{1-\xi^2} \sin\left[\frac{M+1}{2}\theta\right] \quad (4.33)$$

Existen diversas formas de expresar esta ecuación

$$\tan\left[\frac{M+1}{2}\theta\right] = \frac{\xi' - \xi}{\sqrt{1-\xi^2}} \quad (4.34)$$

$$\sin^2\left[\frac{M+1}{2}\theta\right] = \frac{(\xi' - \xi)^2}{1 - \xi^2 + (\xi' - \xi)^2} \quad (4.35)$$

$$\cos^2\left[\frac{M+1}{2}\theta\right] = \frac{1 - \xi^2}{1 - \xi^2 + (\xi' - \xi)^2} \quad (4.36)$$

De estas ecuaciones se siguen que cuando $\xi = \xi'$ se tiene que

$$\frac{M+1}{2}\theta = n\pi \quad \text{con } n \in \mathbf{Z} = \{0, \pm 1, \pm 2, \dots\} \quad (4.37)$$

4. Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional finito

Vamos a ver que ocurre con las asíntotas de las ecuaciones (4.36) y (4.35)

$$1 - \xi^2 + (\xi' - \xi)^2 = 0 \quad (4.38)$$

que sustituyendo explícitamente en términos de P y P' entonces

$$\kappa a \cot(\kappa a) = \frac{(\kappa a)^2 + P'^2}{2P} - P' \quad (4.39)$$

que es exactamente el resultado obtenido por Saxon y Steslicka [48], [49]. Esta nos permite conocer las energías permitidas “impuras” entre las brechas antes prohibidas.

De hecho, sustituyendo $\cos(\theta) = \xi$ en (4.38), nos queda

$$\xi' = \cos(\theta) + i \sin(\theta) = e^{i\theta} \quad (4.40)$$

Entonces tomando un θ complejo, de manera que

$$\theta = m\pi + i\eta a \quad \eta > 0 \quad (4.41)$$

Usando que $\cos(\theta) = \xi$ entonces tenemos las ecuaciones de Kronig-Penney complejas (3.98) y (3.97)

$$\xi = \cos \kappa a + P \frac{\sin \kappa a}{\kappa a} = (-1)^m \cosh \eta a \quad (4.42)$$

$$-(P' - P) \frac{\sin \kappa a}{\kappa a} = (-1)^m \sinh \eta a \quad (4.43)$$

que son las ecuaciones para la imperfección sustitucional.

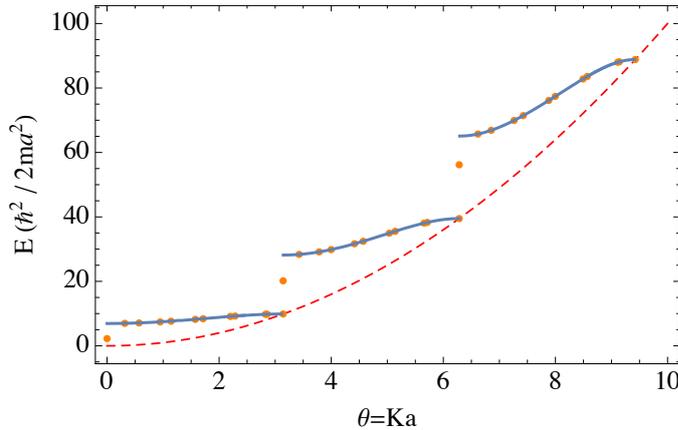


Figura 4.7: Energía en función del momento de Bloch. En línea punteada (roja) es el caso libre, en puntos (naranjas) los niveles en el caso de 10 deltas iguales y una vacancia, en línea sólida (azul) el espectro de Kronig-Penney.

En la figura 4.7 se muestra la relación de dispersión, es decir, la energía como función de la parte real del momento de Bloch. En línea punteada roja se muestra el espectro libre con dispersión cuadrática, en puntos naranja los niveles en el caso de 10 deltas iguales y una vacancia, en línea sólida azul el espectro de Kronig-Penney. De esta figura se observa que los puntos que satisfacen $(n - 1)\pi < \theta < n\pi$ cumplen la ecuación de Kronig-Penney, mientras que los puntos cuya parte real de θ se encuentran en los múltiplos de π representan a los estados impuros, que satisfacen la ecuación (4.39).

Por lo que podemos decir que en el límite en el cual tenemos una infinidad de deltas, donde una se ha removido, tendremos el espectro continuo de bandas de Kronig-Penney, pero se añaden estados permitidos entre las brechas antes prohibidas, los cuales satisfacen (4.39).

4.2. Cristal imperfecto con condiciones de frontera de Dirichlet

Para un cristal unidimensional con una imperfección encerrado en una caja de potencial de ancho L , modelado por el modelo de Kronig-Penney en el límite de deltas, se propone un potencial con N primeras deltas con intensidad v_0 , una distinta con intensidad v'_0 y otras M deltas con intensidad v_0 de la forma

$$V(x) = \begin{cases} \sum_{n=1}^N v_0 \delta(x - na) + v'_0 \delta(x - (N + 1)a) + \sum_{n=N+2}^{N+M+2} v_0 \delta(x - na) & \text{si } 0 < x < L \\ \infty & \text{si } x \leq 0 \text{ ó } x \geq L \end{cases} \quad (4.44)$$

donde $L = (N + M + 2)a$ y a es la separación entre las deltas.

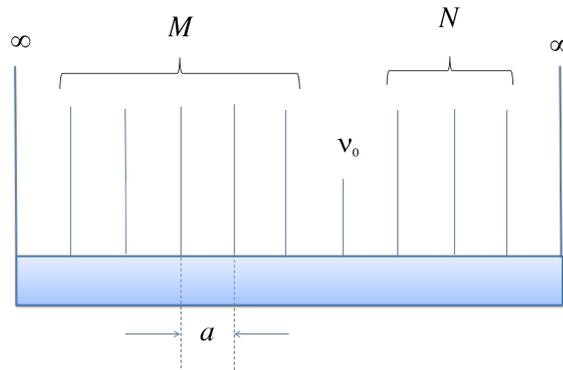


Figura 4.8: Esquema de potencial en función de la posición, en el que se muestran el peine de Dirac en un pozo de potencial.

La función de onda entre dos deltas contiguas, para el problema de dispersión dado este potencial se puede escribir como

4. Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional finito

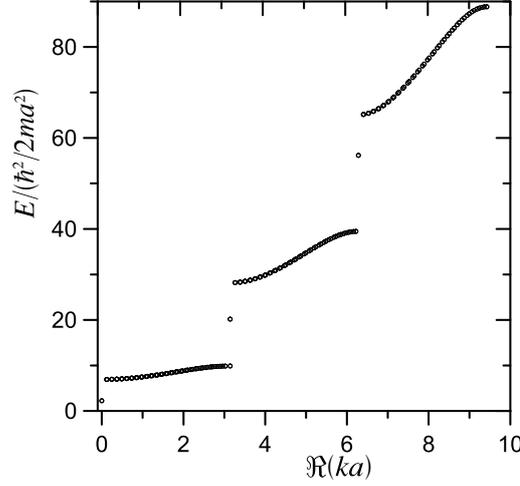


Figura 4.9: Energía en función de la parte real del cuasimomento de Bloch para 51 deltas con la de enmedio removida, con condiciones de Dirchlet.

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_n(x) = A_n e^{i\kappa(x-na)} + B_n e^{-i\kappa(x-na)} & \text{si } (n-1)a \leq x \leq na \\ 0 & \text{si } x \leq 0 \text{ ó } x \geq L \end{cases} \quad (4.45)$$

con $n = 1, 2, 3, \dots, N + M + 2$.

Utilizando matrices de transferencia para las N primeras deltas se tiene

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \mathcal{P}^N \begin{pmatrix} A_{N+1} \\ B_{N+1} \end{pmatrix} \quad (4.46)$$

donde \mathcal{P} es la matriz de transferencia para una delta dada por (4.6) La ecuación para la delta diferente queda

$$\begin{pmatrix} A_{N+1} \\ B_{N+1} \end{pmatrix} = \mathcal{P}' \begin{pmatrix} A_{N+2} \\ B_{N+2} \end{pmatrix} \quad (4.47)$$

donde \mathcal{P}' es la matriz de transferencia para una delta dada por (4.23)

La ecuación para las últimas M deltas es

$$\begin{pmatrix} A_{N+2} \\ B_{N+2} \end{pmatrix} = \mathcal{P}^M \begin{pmatrix} A_{N+M+2} \\ B_{N+M+2} \end{pmatrix}. \quad (4.48)$$

De esta forma la ecuación matricial para todas las deltas queda

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} A_{N+M+2} \\ B_{N+M+2} \end{pmatrix} \quad (4.49)$$

donde $\mathcal{M} = \mathcal{P}^N \mathcal{P}' \mathcal{P}^M$ es una matriz 2×2 .

Utilizando las condiciones de frontera $\psi(0) = e^{-i\kappa a} A_1 + e^{i\kappa a} B_1 = 0$ y $\psi(L) =$

$A_{N+M+2} + B_{N+M+2} = 0$ se tiene

$$\begin{pmatrix} e^{-i\kappa a} & e^{i\kappa a} & 0 & 0 \\ -1 & 0 & M_{11} & M_{12} \\ 0 & -1 & M_{21} & M_{22} \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \\ A_{N+M+2} \\ B_{N+M+2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.50)$$

con M_{ij} los elementos de la matriz \mathcal{M} donde $i, j = 1, 2$.

Para que exista solución no trivial debe cumplirse

$$\begin{vmatrix} e^{-i\kappa a} & e^{i\kappa a} & 0 & 0 \\ -1 & 0 & M_{11} & M_{12} \\ 0 & -1 & M_{21} & M_{22} \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{vmatrix} = 0. \quad (4.51)$$

Realizando el determinante y usando que \mathcal{M} es matriz de transferencia ($M_{11} = M_{22}^*$ y $M_{12} = M_{21}^*$) la condición para que exista solución no trivial es

$$\Im(e^{-i\kappa a}(M_{11} - M_{12})) = 0, \quad (4.52)$$

donde $\Im(x)$ representa la parte imaginaria de x .

Para calcular el resultado de $M_{11} - M_{12}$ se resolverá la multiplicación matricial por partes.

Definiendo $\mathcal{R} \equiv \mathcal{P}'\mathcal{P}^M$ se tiene

$$\begin{aligned} R_{11} &= P'_{11} [P_{11}U_{M-1}(\xi) - U_{M-2}(\xi)] + P'_{12}P_{12}^*U_{M-1}(\xi) \\ R_{12} &= P'_{11}P_{12}U_{M-1}(\xi) + P'_{12} [P_{11}^*U_{M-1}(\xi) - U_{M-2}(\xi)]. \end{aligned} \quad (4.53)$$

De la misma forma $\mathcal{M} = \mathcal{P}^N\mathcal{R}$ y por tanto

$$\begin{aligned} M_{11} &= R_{11} [P_{11}U_{N-1}(\xi) - U_{N-2}(\xi)] + R_{12}^*P_{12}U_{N-1}(\xi) \\ M_{12} &= R_{12} [P_{11}U_{N-1}(\xi) - U_{N-2}(\xi)] + R_{11}^*P_{12}U_{N-1}(\xi). \end{aligned} \quad (4.54)$$

Usando las ecuaciones (4.53) y (4.54) se obtiene

$$\begin{aligned} M_{11} - M_{12} &= U_{M-2}(\xi) \left\{ U_{N-2}(\xi)\bar{P}' - U_{N-1}(\xi) (\bar{P}'P_{11} - \bar{P}'^*P_{12}) \right\} \\ &+ U_{M-1}(\xi) \left\{ U_{N-1}(\xi) \left[P_{11} (P'_{11}\bar{P} - P'_{12}\bar{P}^*) - P_{12} (P'_{11}^*\bar{P}^* - P'_{12}^*\bar{P}) \right] \right. \\ &\left. - U_{N-2}(\xi) [P'_{11}\bar{P} - P'_{12}\bar{P}^*] \right\}, \end{aligned} \quad (4.55)$$

donde $\bar{P}' \equiv P'_{11} - P'_{12}$ y $\bar{P} \equiv P_{11} - P_{12}$.

De esta forma, usando la expresión anterior (4.8) podemos reescribir \bar{P} y \bar{P}' como

$$\begin{aligned} \bar{P} &= (1 + i\frac{P}{\kappa a})e^{-i\kappa a} - i\frac{P}{\kappa a}e^{i\kappa a} = 2\xi - e^{i\kappa a} \\ \bar{P}' &= 2\xi' - e^{i\kappa a} \end{aligned} \quad (4.56)$$

4. Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional finito

con $\xi' = \cos \kappa a + v' \operatorname{sinc} \kappa a$.

Luego, usando las expresiones (4.56) y después de un poco de algebra se tiene

$$\begin{aligned} P'_{11}\bar{P} - P'_{12}\bar{P}^* &= 2\xi\bar{P}' - 1 \\ P_{11}\bar{P}' - P_{12}\bar{P}'^* &= 2\xi'\bar{P} - 1 \end{aligned} \quad (4.57)$$

Por otro lado, usando la siguiente relación para los polinomios de Chebyshev

$$U_M(\xi)U_N(\xi) = \sum_{k=0}^N U_{M-N+2k}(\xi), \text{ si } M \geq N,$$

se puede demostrar fácilmente que

$$\begin{aligned} U_{M-2}(\xi)U_{N-2}(\xi) &= U_{M-1}(\xi)U_{N-1}(\xi) - U_{M+N-2}(\xi) \\ U_{M-2}(\xi)U_{N-1}(\xi) &= U_{M-1}(\xi)U_{N-2}(\xi) + U_{M-N-1}(\xi) \end{aligned}$$

Utilizando estas relaciones para los polinomios de Chebyshev y las expresiones (4.56) y (4.57) la expresión (4.55) se reduce a

$$\begin{aligned} M_{11} - M_{12} &= U_{M-1}(\xi)U_{N-1}(\xi) \left[\bar{P}' - \bar{P} + 2\xi(2\xi'\bar{P} - 1) \right] + U_{M-1}(\xi)U_{N-2}(\xi) \left[-2\xi\bar{P}' - 2\xi'\bar{P} + 2 \right] \\ &\quad - U_{M+N-2}(\xi)\bar{P}' - U_{M-N-1}(\xi)(2\xi'\bar{P} - 1), \end{aligned} \quad (4.58)$$

De esta expresión podemos usar la relación de recurrencia (4.13), junto con la relación

$$U_{M-1}(\xi)U_N(\xi) = U_{M-N-1}(\xi) + U_{M+N-1}(\xi) + U_{M-1}(\xi)U_{N-2}(\xi) \quad (4.59)$$

para obtener

$$\begin{aligned} M_{11} - M_{12} &= U_{M-1}(\xi)U_{N-1}(\xi) \left[\bar{P}' - \bar{P} \right] + U_{M-1}(\xi)U_{N-2}(\xi) \left[2\xi'\bar{P} - 2\xi\bar{P}' \right] \\ &\quad + U_{M+N-1}(\xi)(2\xi'\bar{P} - 1) - U_{M+N-2}(\xi)\bar{P}', \end{aligned} \quad (4.60)$$

Notemos que si $\mathcal{P}' = \mathcal{P}$ entonces $\bar{P}' = \bar{P}$ y $\xi = \xi'$, la expresión se reduce al caso $\mathcal{M} = \mathcal{P}^{N+M+1}$, donde todas las deltas son iguales.

Sustituyendo las expresiones (4.56), (4.60) en (4.52) y realizando un poco de álgebra se obtiene

$$\sin \kappa a \left[2\xi'U_{M+N}(\xi) - U_{M+N-1}(\xi) + 2(\xi - \xi')U_{M-1}(\xi)U_{N-1}(\xi) \right] = 0, \quad (4.61)$$

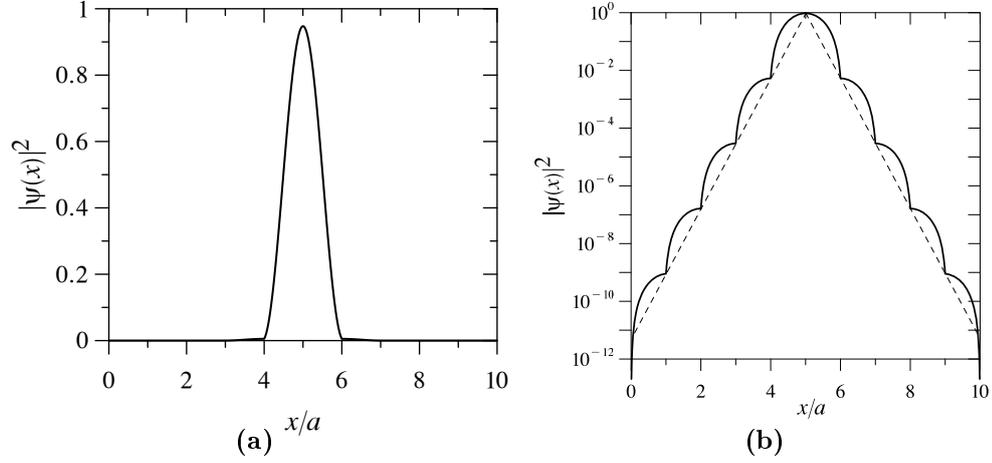


Figura 4.10: Densidad de probabilidad del estado base con 9 deltas en una caja 1D con la de en medio removida en escala lineal (a) y en (b) escala logarítmica.

La solución trivial a esta ecuación es

$$\kappa a = n\pi, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

la cual corresponde a los estados de energía para una caja vacía de ancho a .

Las soluciones no triviales estarían dadas por

$$2\xi' U_{M+N}(\xi) - U_{M+N-1}(\xi) + 2(\xi - \xi') U_{M-1}(\xi) U_{N-1}(\xi) = 0 \quad (4.62)$$

y expresando los polinomios de Chebyshev en su forma trigonométrica (4.15) se tiene la siguiente ecuación trascendental para θ

$$\boxed{\sin[(M+N)\theta] = 2\xi' \sin[(M+N+1)\theta] + 2(\xi' - \xi) \frac{\sin(M\theta) \sin(N\theta)}{\sin(\theta)}} \quad (4.63)$$

donde $\xi = \cos \theta$.

Para el caso de deltas iguales $\xi' = \xi = \cos \theta$ y usando la identidad

$$2 \cos \theta \sin[(M+N+1)\theta] = \sin[(M+N)\theta] + \sin[(M+N+2)\theta],$$

la expresión (4.63) se reduce a

$$\sin(M+N+2)\theta = 0$$

cuya solución es

$$\theta = \frac{n\pi}{N+M+2}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

4. Espectro de energía para una partícula en un cristal unidimensional finito

la cual lleva a la relación de dispersión para $N + M + 1$ deltas iguales

$$\cos(\kappa a) + \frac{P}{\kappa a} \sin(\kappa a) = \cos\left(\frac{n\pi}{N + M + 2}\right). \quad (4.64)$$

En la figura 4.9 se muestra tres bandas del espectro de la energía en función de la parte real del cuasimomento de Bloch para 51 deltas con la de en medio removida, en una estructura con condiciones de Dirichlet. Por cada banda hay 50 valores de energía discretos que forman parte de las bandas permitidas del espectro del cristal perfecto, sin embargo, se observan los usuales estados impuros que les corresponden a cuasimomentos de Bloch con la parte real múltiplo de π y con valores de energía real encontradas en las bandas prohibidas del cristal perfecto. Se observa en particular que el estado más bajo de energía, conocido como el estado base, corresponde al primer estado impuro. Asimismo, con la ecuación (4.63) se puede obtener numéricamente los valores de las energías correspondientes a los estados impuros.

En la figura 4.10a se muestra la densidad de probabilidad del estado base con 9 deltas en una caja 1D con la de en medio removida en escala lineal y en escala logarítmica 4.10b. Se observa que la densidad de probabilidad se anula en las paredes debido a las condiciones de frontera de Dirichlet. La densidad de probabilidad se concentra fuertemente en la vacancia, de hecho, en la escala logarítmica se muestra que la densidad de probabilidad es simétrica respecto a la vacancia y decae de manera exponencial, por lo que se anula rápidamente fuera de la vacancia. A este efecto se le conoce como localización fuerte y se ha observado previamente en la función de onda electrónica del modelo de Anderson [61].

En el siguiente capítulo analizaremos las propiedades termodinámicas de un gas de bosones en estas estructuras y se aprovechara que existe una brecha energética entre la energía del estado base, correspondiente al primer estado impuro, y el primer estado excitado, la energía más baja de la primera banda permitida del cristal perfecto.

Gas de Bose en un cristal unidimensional

En éste capítulo se exponen las propiedades termodinámicas de un gas ideal de bosones de masa m no interactuantes sujetos en un potencial externo que modela una estructura cristalina unidimensional, usando los espectros de energía para una partícula descritos en los dos capítulos anteriores.

Debido a que el espectro de un cristal con una vacancia discutido en capítulos previos presenta una brecha de energía entre la energía del estado base y la del primer excitado, este sistema unidimensional se puede aprovechar para obtener una condensación de bosones en el estado impuro de más baja energía a una temperatura finita no cero, de manera análoga al sistema mostrado en el Capítulo 2.

Con el propósito de analizar las propiedades de nuestro sistema de interés, se busca adimensionalizar tres cantidades: la longitud, la energía y la temperatura.

5.1. Espectro de energía como función de la separación entre las deltas

Se toma como sistema de referencia el gas ideal de bosones libres cuyas propiedades están reportadas usualmente en la literatura [2] y que presenta la condensación Bose-Einstein a una temperatura diferente de cero. La conexión entre nuestros sistemas bosónicos y el gas ideal libre será la densidad de partículas que consideraremos iguales y que mantenemos constante.

Por lo que se ocupan como cantidades para normalizar a la temperatura crítica de un gas de bosones T_0 en una caja tridimensional, la longitud de onda térmica del gas asociada a dicha temperatura λ_0 y como energía el producto de la constante de Boltzmann por la temperatura $k_B T_0$.

De esta forma, se define la variable a_0 como la razón entre el espaciamiento de la delta y la longitud de onda térmica en la temperatura crítica T_0 , que cumple que su cuadrado es

$$a_0^2 \equiv \left(\frac{a}{\lambda_0} \right)^2 = \frac{2\pi m a^2}{\hbar^2} \frac{k_B T_0}{4\pi^2} \quad (5.1)$$

Con esta cantidad se puede normalizar el factor de impermeabilidad (3.15) para

5. Gas de Bose en un cristal unidimensional

remover la dependencia en el valor de a .

$$P = P_0 a_0 \quad \text{con} \quad P_0 \equiv \frac{mv_0 \lambda_0}{\hbar^2} \quad (5.2)$$

Análogamente se puede normalizar el factor de impenetrabilidad de una delta que describa a una imperfección como

$$P' = P'_0 a_0 \quad \text{con} \quad P'_0 \equiv \frac{mv'_0 \lambda_0}{\hbar^2} \quad (5.3)$$

Con la normalización de los parámetros se puede elegir un valor específico de P_0 y P'_0 ,

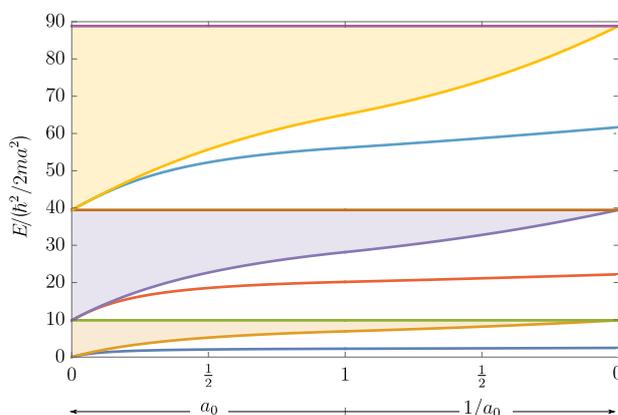


Figura 5.1: Espectro de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ como función de a_0 y $1/a_0$ de un cristal unidimensional infinito con $P_0 = 10$ y una vacancia $P'_0 = 0$.

en particular, para nuestras siguientes gráficas se toma el valor $P_0 = 10$, que describe al factor de impenetrabilidad normalizado de las deltas iguales.

5.1.1. Efecto de la separación entre las deltas sobre el espectro de energía

En la figura 5.1 se muestra el espectro de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ como función de a_0 , donde se observan tres bandas en regiones coloreadas junto con sus respectivos estados impuros para un cristal unidimensional infinito con una imperfección con $P_0 = 10$, obtenidas por las ecuaciones (3.14) y (3.101). Se observa que el borde superior de la n -ésima banda corresponde a la energía $(n\pi)^2$ en unidades de $\hbar^2/2ma^2$, independientemente del valor de a_0 . En el límite $a_0 \rightarrow 0$ se obtiene un espectro continuo sin bandas, mientras que en el límite en que $a_0 \rightarrow \infty$ cada n -ésima banda se estrecha en el mismo valor $(n\pi)^2$, mientras que el n -ésimo estado impuro corresponde a $((n - \frac{1}{2})\pi)^2$. Observe que el intervalo de a_0 se divide en dos regiones: para $a_0 \leq 1$ se grafica la energía en función de a_0 , mientras que para $a_0 > 1$ se grafica en función de $1/a_0$, cubriéndose

un intervalo de cero a infinito. Esta esquema generaliza las figuras obtenidas por G. Guijarro [55].

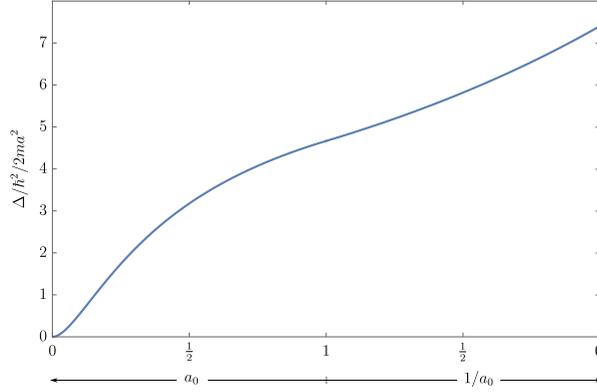


Figura 5.2: Brecha entre el estado base y el primer estado excitado en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ como función de a_0 y $1/a_0$ de un cristal unidimensional infinito con $P_0 = 10$ y una vacancia $P'_0 = 0$.

En la figura 5.2 se muestra la brecha Δ entre el estado base y el primer estado excitado en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ como función de a_0 y $1/a_0$ de un cristal unidimensional infinito con una imperfección para $P_0 = 10$. En el límite $a_0 \rightarrow 0$ la brecha tiende a cero de forma cuadrática $\Delta/\hbar^2/2ma^2 \approx (P_0 a_0)^2 \rightarrow 0$, mientras que en el límite en que $a_0 \rightarrow \infty$ el valor de la brecha tiende a un valor finito $\Delta/\hbar^2/2ma^2 \rightarrow \frac{3}{4}\pi^2$.

Sin embargo, esta normalización no es conveniente para encontrar la dependencia explícita de la energía como función de a_0 , ya que la normalización $\hbar^2/2ma^2$ depende del valor de a . De esta manera se elige normalizar la energía en función de la energía térmica $k_B T_0$ de la siguiente forma

$$\varepsilon = \frac{1}{4\pi a_0^2} \left(\frac{\varepsilon}{\hbar^2/2ma^2} \right) k_B T_0 \quad (5.4)$$

La figura 5.3 muestra el espectro de energía en unidades de $k_B T_0$ como función de a_0 , donde se observan cuatro bandas en regiones coloreadas junto con sus respectivos estados impuros para un cristal unidimensional infinito con una imperfección con $P_0 = 10$, obtenidas por las ecuaciones (3.14), (3.101) y la normalización (5.4).

En el límite en que $a_0 \rightarrow \infty$ la distancia entre las deltas es grande en comparación con la interacción entre los bosones, por lo que tiene al espectro de energía de gas ideal libre, lo cual se muestra con la unión de todas las bandas se colapsan en un punto.

En la figura 5.4 se muestra que la brecha entre el estado base y el primer estado excitado en unidades de $k_B T_0$ es decreciente como función de a_0 con $P_0 = 10$. En el límite cuando $a_0 \rightarrow \infty$ se tiene un espectro continuo de gas ideal libre donde la brecha tiende a cero, en cambio se observa que cuando $a_0 \rightarrow 0$, la brecha tiende a un valor finito $\Delta/k_B T_0 \rightarrow P_0^2/4\pi$, en particular para $P_0 = 10$ el límite es $25/\pi$.

5. Gas de Bose en un cristal unidimensional

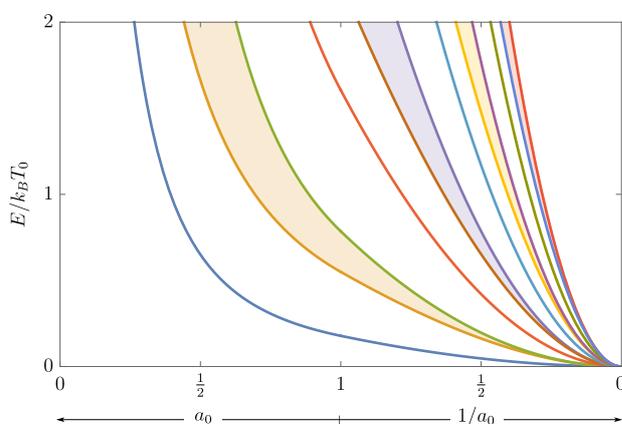


Figura 5.3: Espectro de energía en unidades de $k_B T_0$ como función de a_0 y $1/a_0$ de un cristal unidimensional infinito con $P_0 = 10$ y una vacancia $P'_0 = 10$.

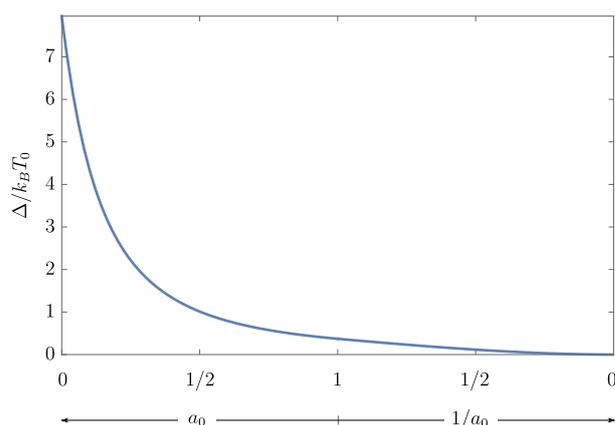


Figura 5.4: Brecha Δ entre el estado base y el primer estado excitado en unidades de k_B/T_0 como función de a_0 y $1/a_0$ de un cristal unidimensional infinito con $P_0 = 10$ y una vacancia $P'_0 = 0$.

5.1.2. Casos límite: separación entre deltas estrecha y amplia

En la figura 5.5 se muestran dos límites en el sistema infinito de deltas, una donde la separación entre las deltas es muy estrecha $a_0 \rightarrow 0$ y otra en donde la separación es muy grande $a_0 \rightarrow \infty$.

En el caso cuando $a_0 \rightarrow 0$, la separación entre las deltas disminuye, de manera que los dispersores en forma de deltas se concentran densamente entre sí de forma que queda un potencial residual constante, salvo una de ellas que es la imperfección. Sin embargo, la física del sistema no cambia si se le resta un potencial constante, de manera que si se resta dicho potencial residual se anula la contribución de todos los dispersores salvo el de la imperfección, lo cual se convierte en el problema de un solo dispersor en forma de delta atractiva (con una impermeabilidad negativa). Este es un problema clásico de

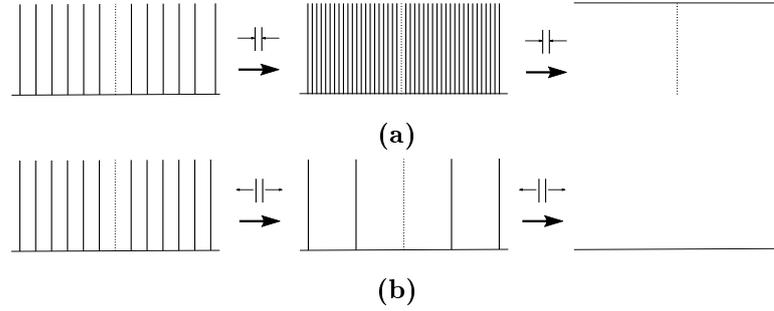


Figura 5.5: Interpretación de un sistema infinito de deltas donde la separación (a) es muy estrecha $a_0 \rightarrow 0$ y (b) la separación es muy grande $a_0 \rightarrow \infty$.

los libros de Cuántica [62] para tratar el problema de estados ligados.

El problema a tratar sería el de un potencial de la forma $V(x) = -|v_0|\delta(x)$, que representa un dispersor δ de Dirac atractivo. El problema está resuelto en diversos textos, en los cuales dividen las soluciones para la energía en dos casos. Para $E > 0$ se tienen estados de dispersión en el que se puede tomar cualquier energía positiva (desde 0 hasta infinita) y por las condiciones de frontera del dispersor se pueden obtener coeficientes de reflexión y transmisión de tunelamiento. En cambio para el energía negativas $E < 0$, se obtiene un *único estado ligado*, al cual le corresponde una energía de

$$E = -\frac{mv_0^2}{2\hbar^2} \quad (5.5)$$

y que en este caso sería el estado con energía más baja, el estado base.

Debido a que la energía para el primer estado excitado es cero, entonces la brecha energética sería el valor absoluto de la energía ligada, esto justifica el valor finito de la brecha en la figura 5.4 en el límite $a \rightarrow 0$.

En el caso contrario, el límite nos conduce al espectro continuo de una partícula libre unidimensional, de manera que su energía es cuadrática respecto al momento de la misma, este sistema corresponde a uno sin transición de fase.

5.1.3. Temperatura crítica de un gas de bosones como función de la separación entre deltas

A partir de este momento, nos concentraremos en obtener las propiedades termodinámicas de un gas de bosones sin interacciones en estructuras cuasiperiódicas descritas por el modelo presentado en los capítulos anteriores.

La distribución de Bose-Einstein expresa el número de bosones en cada estado energético. El número total de partículas bosónicas en la estructura se obtiene sumando el número de partículas en cada posible energía del espectro para cada banda desde la

5. Gas de Bose en un cristal unidimensional

primera hasta el número total de bandas N_b .

$$N = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{I,1}-\mu)} - 1} + \sum_{n=1}^{N_b} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{I,n}-\mu)} - 1} + \frac{L}{\pi a} \sum_{n=1}^{N_b} \int_0^\pi \frac{d(ka)}{e^{\beta(\varepsilon_n(k)-\mu)} - 1} \quad (5.6)$$

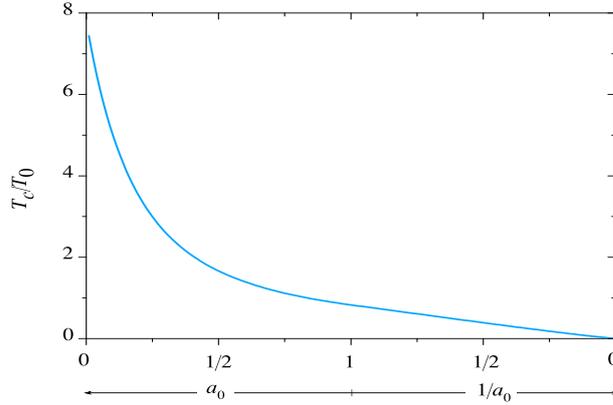


Figura 5.6: Temperatura crítica T_c en unidades de T_0 como función de a_0 y $1/a_0$ de un cristal unidimensional infinito con una imperfección para $P_0 = 10$.

Observe que en la suma separamos la contribución de las energías correspondientes a los estados impuros entre cada n -ésima banda (3.101) $\varepsilon_{I,n}$ de la suma de las integrales sobre la primera zona de Brillouin (PZB) de los estados $\varepsilon_n(k)$ con energía dada por la relación de Kronig Penney (3.14), y a su vez separamos la contribución del estado base correspondiente al primer estado impuro $\varepsilon_{I,1}$. Además en el último término se encuentra la longitud de nuestro sistema unidimensional L , por lo que por consistencia, podemos normalizar la densidad unidimensional N/L con la densidad ρ_0 de un gas tridimensional de bosones

$$\frac{N}{L} = \rho_0^{1/3} = \frac{\zeta(\frac{3}{2})^{\frac{1}{3}}}{\lambda_0} \quad (5.7)$$

Por lo que la ecuación de número se reduce a

$$1 = \frac{1}{N} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{I,1}-\mu)} - 1} + \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N_b} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{I,n}-\mu)} - 1} + \frac{1}{\pi \zeta(\frac{3}{2})^{\frac{1}{3}} a_0} \sum_{n=1}^{N_b} \int_0^\pi \frac{d(ka)}{e^{\beta(\varepsilon_n(k)-\mu)} - 1} \quad (5.8)$$

Justo por encima de una temperatura, conocida como temperatura crítica T_c , los dos primeros términos son despreciables ya que las partículas prefieren estar en los estados excitados correspondientes a las bandas de energía. Además en esta temperatura el potencial químico alcanza su máximo y es igual numéricamente al estado base, en este caso el estado impuro con energía más baja $\varepsilon_{I,1}$.

$$1 = \frac{1}{\pi\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{1}{3}}a_0} \sum_{n=1}^{N_b} \int_0^\pi \frac{d(ka)}{e^{\beta_c(\varepsilon_n(k)-\varepsilon_{I,1})} - 1} \quad \text{con} \quad \beta_c \equiv \frac{1}{k_B T_c} \quad (5.9)$$

De esta ecuación, como existe una brecha entre la energía del estado más bajo de la primera banda y el estado base correspondiente al primer estado impuro, entonces tenemos una situación similar al caso del segundo capítulo (2.5), el cual presentaba una temperatura crítica distinta de cero aún en sistemas dimensión menor a 3.

La figura 5.6 muestra la temperatura crítica T_c como función de a_0 para un cristal unidimensional de impermeabilidad infinito $P_0 = 10$ con una vacancia con $P'_0 = 0$. Se muestra que es la temperatura crítica es decreciente conforme a_0 crece, y alcanza un valor finito para $a_0 \rightarrow 0$, teniendo un comportamiento análogo a la brecha energética que se muestra en la figura 5.4.

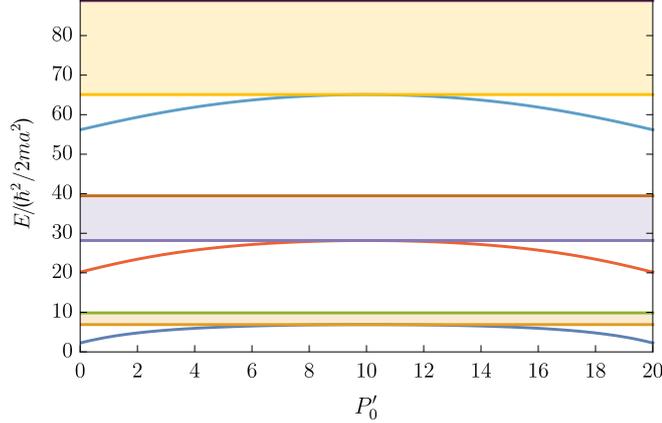


Figura 5.7: Espectro de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ como función del factor de impermeabilidad de la imperfección P'_0 de un cristal unidimensional infinito con una imperfección con $P_0 = 10$.

5.2. Magnitud de la brecha energética como función de la impermeabilidad de la imperfección

En la sección anterior calculamos las propiedades tomando que la imperfección, la delta con factor de impermeabilidad P'_0 diferente a la impermeabilidad del cristal P_0 , es una vacancia, es decir $P'_0 = 0$.

Sin embargo, si se quiere generalizar el problema, se ocupa la ecuación para los estados impuros que depende del factor de impermeabilidad P'_0 de la imperfección (3.100) junto con el modelo estándar de Kronig-Penney (3.14) para determinar la dependencia del espectro con respecto a la impermeabilidad P'_0 .

La figura 5.7 muestra el espectro de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ como función del factor de impermeabilidad de la imperfección $P'_0 > 0$ de un cristal unidimensional infinito con una imperfección con $P_0 = 10$, el intervalo en la figura marca desde que la razón de impermeabilidades P'_0/P_0 es cero hasta dos. Se observa que cuando las

5. Gas de Bose en un cristal unidimensional

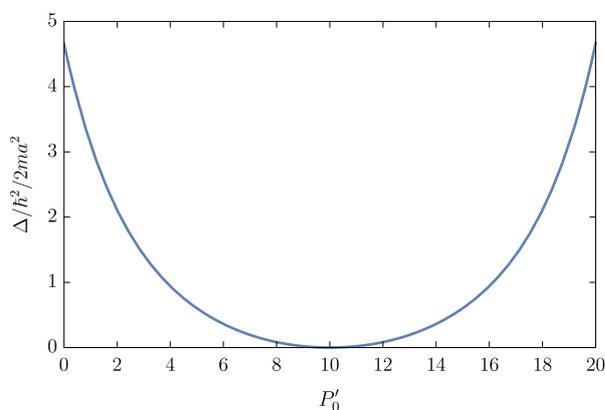


Figura 5.8: Brecha energética entre el estado base impuro y el primer estado excitado en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ como función del factor de impermeabilidad de la imperfección P'_0 de un cristal unidimensional infinito con una imperfección con $P_0 = 10$.

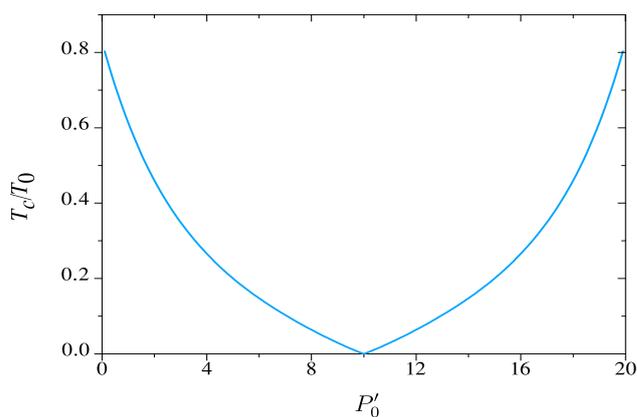


Figura 5.9: Temperatura crítica T_c en unidades de T_0 como función del factor de impermeabilidad de la imperfección P'_0 de un cristal de un cristal unidimensional infinito con $P_0 = 10$ y una vacancia $P'_0 = 0$.

impermeabilidades son iguales $P'_0 = P_0$ entonces los estados impuros se pegan al borde inferior de las bandas, es decir desaparecen estos estados impuros debido a que el cristal se vuelve periódico nuevamente.

La figura 5.8 muestra la brecha energética entre el estado base impuro y el primer estado excitado como función del factor de impermeabilidad de la imperfección P'_0 , se muestra que alcanza un mínimo justo cuando $P'_0 = P_0$, lo cual es lógico, puesto que desaparecen los estados impuros. Esta brecha se refleja en la figura 5.9, la cual muestra la temperatura crítica T_c como función de P'_0 , la cuál presenta un mínimo en el mismo valor $P'_0 = P_0$. Observe que la temperatura crítica es cero justo en el momento en que no hay imperfección, ya que se recupera el caso periódico unidimensional el cual no

presenta transición de fase.

Es por esta razón que nuestros cálculos posteriores, sin perder generalidad, se utilizará de manera preferencial valores específicos de $a_0 = 1$ y de $P'_0 = 0$.

5.3. Cristal finito en comparación con el cristal infinito unidimensional con una imperfección

Hasta ahora hemos analizado el comportamiento de la temperatura crítica donde se presenta la transición de fase de condensación en el caso de un cristal infinito, ya que el cristal finito no presenta una transición de fase de manera estricta, ya que su espectro está formado por niveles discretos de energía como se presentó en el capítulo anterior. Sin embargo, el cristal infinito es una construcción teórica, por lo que en este capítulo se muestra que en el límite de colocar una gran cantidad de dispersores en el sistema finito podemos llegar a un comportamiento similar en las propiedades termodinámicas de un sistema infinito.

5.3.1. Propiedades termodinámicas

El potencial químico para un gas de bosones dentro del cristal infinito puede obtenerse a partir de la ecuación de número (5.6), de hecho en el caso infinito debido al límite termodinámico, para temperaturas por debajo de la temperatura crítica $T < T_c$ el potencial químico toma la energía más baja, en este caso la energía del primer estado impuro. Mientras que para temperaturas mayores que la crítica $T > T_c$ se puede obtener el potencial químico se obtiene por medio de

$$N = \frac{L}{\pi a} \sum_{n=1}^{N_b} \int_0^\pi \frac{d(ka)}{e^{\beta(\varepsilon_n(k)-\mu)} - 1} \quad (5.10)$$

donde se desprecian el número de partículas correspondientes a los estados impuros. En términos de la normalización se convierte

$$1 = \frac{1}{\pi \zeta(\frac{3}{2})^{\frac{1}{3}} a_0} \sum_{n=1}^{N_b} \int_0^\pi \frac{d(ka)}{e^{\beta(\varepsilon_n(k)-\mu)} - 1} \quad \text{con } T > T_c \quad (5.11)$$

Mientras que para el sistema de un cristal finito con M deltas con misma impermeabilidad P_0 y espaciadas igualmente, más una vacancia centrada en medio de las mismas con condiciones de frontera de Dirichlet, tenemos por ecuación de número

$$N = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{1,1}-\mu)} - 1} + \sum_{n=2}^{N_b} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{n,1}-\mu)} - 1} + \sum_{n=1}^{N_b} \sum_{j=2}^{M+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{n,j}-\mu)} - 1} \quad (5.12)$$

Se denota por $\varepsilon_{n,j}$ a la energía del nivel discreto j -ésimo correspondiente a la n -ésima banda obtenidos por la relación de dispersión (4.28) del cristal finito. Las energías $\varepsilon_{1,j}$ con $j = 1, \dots, N_b$ denotan los niveles de energía que corresponden a los estados impuros, los cuales no forman parte de las bandas del modelo de Kronig-Penney.

5. Gas de Bose en un cristal unidimensional

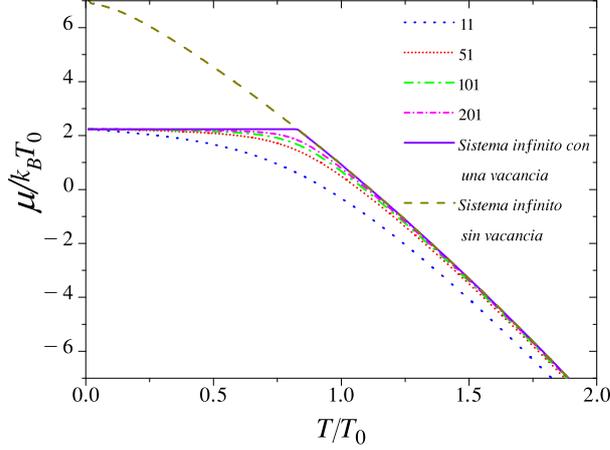


Figura 5.10: Potencial químico $\mu/k_B T_0$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia ($P'_0 = 0$) para números finitos de deltas e infinito con $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$.

Por cada banda de energía hay $M + 1$ niveles discretos de energía del cristal finito, mientras más dispersores se colocan dentro del cristal las bandas se poblan densamente formando en el límite el comportamiento de un cristal infinito que obedece la relación de dispersión de Kronig-Penney, esto se debe reflejar en las propiedades termodinámicas del cristal finito.

Nuevamente normalizaremos la densidad del sistema con la densidad ρ_0 de un gas tridimensional de bosones

$$\frac{N}{(M + 1)a} = \rho_0^{1/3} = \frac{\zeta(\frac{3}{2})^{1/3}}{\lambda_0} \quad (5.13)$$

ya que consideramos que la longitud de nuestro sistema finito es $(M + 1)a$. Con lo que la ecuación de número (5.12) se reduce a

$$1 = \frac{1}{\zeta(\frac{3}{2})^{1/3}(M + 1)a_0} \left(\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{1,1}-\mu)} - 1} + \sum_{n=1}^{N_b} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{n,1}-\mu)} - 1} + \sum_{n=1}^{N_b} \sum_{j=2}^{M+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{n,j}-\mu)} - 1} \right) \quad (5.14)$$

Con esta ecuación podemos obtener el potencial químico μ para cada temperatura T . Nuestro estado base ε_0 corresponde al primer nivel de energía, por lo que denotamos por simplicidad al estado base como

$$\varepsilon_0 \equiv \varepsilon_{1,1} \quad (5.15)$$

En la figura 5.10 se muestra el potencial químico en función de la temperatura normalizada T/T_0 de un sistema cristalino unidimensional en diferentes condiciones. En línea punteada color olivo se muestra el caso del cristal con un número infinito de deltas perfecto (sin vacancias), en línea sólida color violeta se muestra el caso con una infinidad de deltas con una removida (una vacancia), las otras curvas corresponden al caso de un cristal con número finito de deltas en una caja (condiciones de frontera de Dirichlet).

Se observa que en el caso infinito sin vacancias, no hay condensación, de hecho siempre tiene un comportamiento monótono decreciente, partiendo desde la energía del estado base correspondiente a la energía más baja de la primera banda de energía de Kronig Penney perfecto. En cambio para el caso infinito con una vacancia se observa el cambio brusco de pendiente correspondiente a la transición de fase en la temperatura crítica $T/T_0 \approx 0.82793$. Para temperatura menor que la crítica, el potencial químico toma el valor de la energía del primer estado impuro, correspondiente al estado base.

En el caso del cristal con un número finito de deltas, el cual puede ser sintetizado en un laboratorio, observamos que el potencial químico parte desde la energía del primer estado impuro y decrece lentamente, aunque el sistema en sí no presenta una transición de fase, podemos aproximarnos al caso infinito con una imperfección.

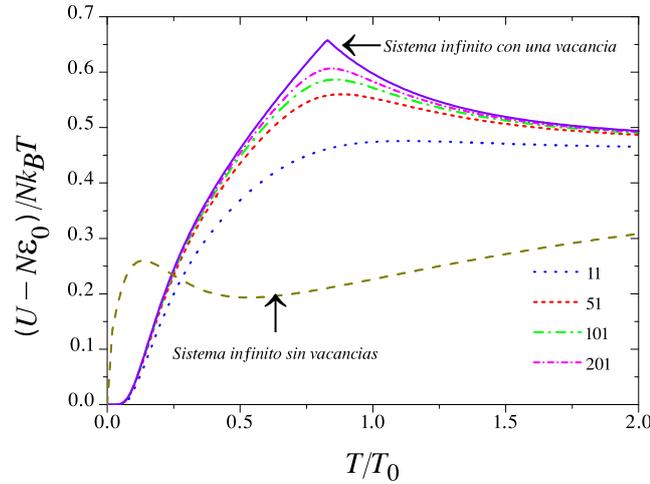


Figura 5.11: Energía interna $(U - N\varepsilon_0)/Nk_B T$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia ($P' = 0$) para números finitos de deltas e infinito con $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$.

5.3.1.1. Energía interna

La energía interna menos el producto del número de partículas por el estado base $U - N\varepsilon_0$ en unidades de $Nk_B T$ para el cristal finito usando la normalización anterior queda como

$$\frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} = \frac{1}{\zeta(3/2)^{1/3}(M+1)a_0} \left(\sum_{j=1}^{N_b} \frac{\beta(\varepsilon_{n,1} - \varepsilon_0)}{e^{\beta(\varepsilon_{n,1} - \mu)} - 1} + \sum_{n=1}^{N_b} \sum_{j=2}^{M+1} \frac{\beta(\varepsilon_{n,j} - \varepsilon_0)}{e^{\beta(\varepsilon_{n,j} - \mu)} - 1} \right) \quad (5.16)$$

En el límite del cristal infinito, la contribución del primer término correspondiente a los estados impuros es despreciable en comparación con el segundo término debido a que las bandas se llenan densamente de niveles de energía formando una banda continua, de manera que la suma sobre los niveles de energía por banda se vuelve una integral sobre las energías de la relación de dispersión de Kronig Penney (3.14).

$$\frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} = \frac{1}{\zeta(3/2)^{1/3}\pi a_0} \left(\sum_{n=1}^{N_b} \int_0^\pi \frac{\beta(\varepsilon_n(k) - \varepsilon_0)}{e^{\beta(\varepsilon_n(k) - \mu)} - 1} \right) \quad (5.17)$$

En la figura 5.11 se muestra la energía interna $(U - N\varepsilon_0)/Nk_B T$ como función de la temperatura de un cristal unidimensional con una imperfección. En esta gráfica se observa que a temperaturas bajas $T/T_0 \rightarrow 0$ la energía interna toma el múltiplo del número de partículas por estado base $U \rightarrow N\varepsilon_0$, luego la función es creciente conforme la temperatura crece hasta llegar a un valor máximo en la temperatura crítica $T = T_c$. Después de cruzar la temperatura crítica la función decrece y a temperaturas altas tiende a un valor constante $1/2$ característico de un gas ideal clásico unidimensional, con un comportamiento similar a la figura 2.4.

5.3.1.2. Calor específico isocórico

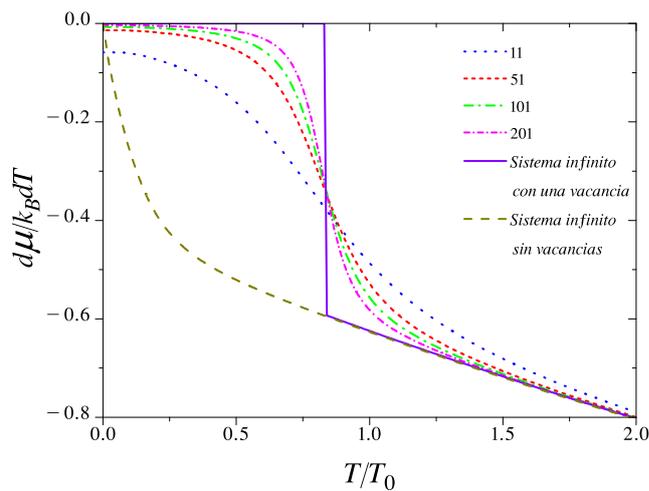


Figura 5.12: Derivada del potencial químico $\partial\mu/k_B\partial T$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia ($P'_0 = 0$) para números finitos de deltas e infinito con $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$.

5.3 Cristal finito en comparación con el cristal infinito unidimensional con una imperfección

Con la finalidad de estudiar más a detalle la transición de fase, estudiamos el calor específico y para ello necesitamos la derivada del potencial químico. El potencial químico del cristal infinito es continuo, pero no es suave en la temperatura crítica, entonces su derivada es discontinua en $T = T_c$. En cambio, el potencial del cristal finito es siempre suave y continuo.

Para encontrar la derivada del potencial químico del cristal finito debemos derivar implícitamente la ecuación de número (5.14), luego su resultado es el cociente entre los siguientes dos términos: el numerador

$$num = - \sum_{n=1}^{N_b} \sum_{j=1}^{M+1} \frac{e^{\beta(\varepsilon_{n,j}-\mu)} \beta(\varepsilon_{n,j}-\mu)}{(e^{\beta(\varepsilon_{n,j}-\mu)} - 1)^2} \quad (5.18)$$

y el denominador

$$den = \sum_{n=1}^{N_b} \sum_{j=1}^{M+1} \frac{e^{\beta(\varepsilon_{n,j}-\mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_{n,j}-\mu)} - 1)^2} \quad (5.19)$$

tal que la derivada del potencial químico respecto a la temperatura es

$$\frac{1}{k_B} \frac{\partial \mu}{\partial T} = \frac{num}{den} \quad (5.20)$$

la cual es válida para toda temperatura.

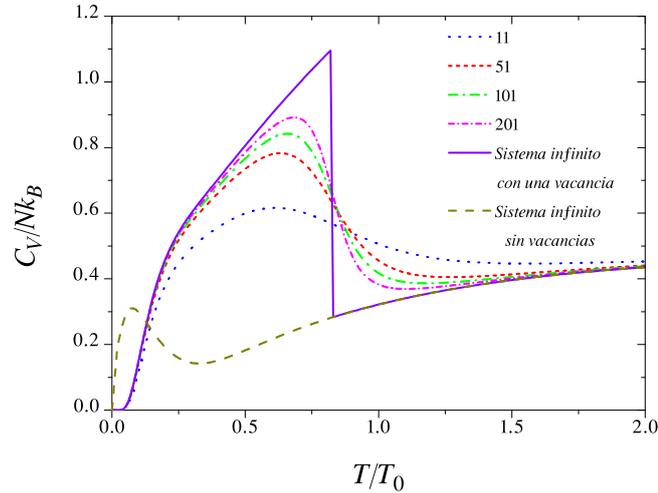


Figura 5.13: Calor específico isocórico C_V/Nk_B como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia ($P'_0 = 0$) para un número finito de deltas e infinito con $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$.

En cambio en el caso del cristal infinito, para temperaturas menores que la crítica el potencial químico toma la energía del estado base, además los términos (5.18) y (5.19) se convierten en la suma de integrales.

5. Gas de Bose en un cristal unidimensional

Al derivar implícitamente respecto a la temperatura podemos obtener la parcial del potencial químico respecto a la temperatura, la cual nos queda una división entre dos factores, siendo

$$num = - \sum_{n=1}^{N_b} \int_0^\pi \frac{e^{\beta(\varepsilon_n(k)-\mu)} \beta(\varepsilon_n(k) - \mu)}{(e^{\beta(\varepsilon_n(k)-\mu)} - 1)^2} \quad (5.21)$$

el numerador y el factor

$$den = \sum_{n=1}^{N_b} \int_0^\pi \frac{e^{\beta(\varepsilon_n(k)-\mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_n(k)-\mu)} - 1)^2} \quad (5.22)$$

el denominador, con lo que la derivada del potencial químico respecto a la temperatura queda como

$$\frac{1}{k_B} \frac{\partial \mu}{\partial T} = \begin{cases} 0 & \text{si } T \leq T_c \\ \frac{num}{den} & \text{si } T > T_c \end{cases} \quad (5.23)$$

En la figura 5.12 se muestra la derivada del potencial químico respecto a la temperatura normalizada.

En la figura se observa como esta función es siempre decreciente en el caso de un número finito de deltas. Se observa que el caso de un cristal sin vacancias la curva siempre es concava, en cambio si se introduce una imperfección al sistema, la curva cambia de concavidad en una vecindad de la temperatura crítica, de hecho entra mayor número de deltas se coloque al sistema, la curva tendera a la característica curva discontinua en la temperatura crítica T_c .

A partir de la derivada del potencial químico respecto a la temperatura, se puede obtener directamente el calor específico a volumen constante, que es el resultado de derivar la energía interna respecto a la temperatura

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{Nk_B} = & \frac{1}{\zeta(3/2)^{\frac{1}{3}}(M+1)a_0} \left(\sum_{n=1}^{N_b} \frac{e^{\beta(\varepsilon_{n,1}-\mu)} \beta(\varepsilon_{n,1} - \varepsilon_0) [\beta(\varepsilon_{n,1} - \mu) + \frac{d\mu}{k_B dT}]}{(e^{\beta(\varepsilon_{n,1}-\mu)} - 1)^2} \right. \\ & \left. + \sum_{n=1}^{N_b} \sum_{j=2}^{M+1} \frac{e^{\beta(\varepsilon_{n,j}-\mu)} \beta(\varepsilon_{n,j} - \varepsilon_0) [\beta(\varepsilon_{n,j} - \mu) + \frac{d\mu}{k_B dT}]}{(e^{\beta(\varepsilon_{n,j}-\mu)} - 1)^2} \right) \end{aligned} \quad (5.24)$$

En el caso del cristal infinito el segundo término se convierte en la suma de integrales sobre la primera zona de Brillouin.

$$\frac{C_V}{Nk_B} = \frac{1}{\zeta(3/2)^{\frac{1}{3}} \pi a_0} \left(\sum_{n=1}^{N_b} \int_0^\pi \frac{e^{\beta(\varepsilon_n(k)-\mu)} \beta(\varepsilon_n(k) - \varepsilon_0) [\beta(\varepsilon_n(k) - \mu) + \frac{d\mu}{k_B dT}]}{(e^{\beta(\varepsilon_n(k)-\mu)} - 1)^2} \right) \quad (5.25)$$

En la figura 5.13 se observa el comportamiento del calor específico isocórico C_V/Nk_B como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$ formado por deltas con una de ellas representando vacancia, es decir $P'_0 = 0$, para un número finito de deltas: 11, 51, 101 y 201, además se muestra el caso de un número infinito de deltas. Las curvas del caso de un número finito de deltas tienden al caso de la curva discontinua de un número infinito, además se observa un cambio de concavidad en las curvas a temperaturas bajas, de hecho se presenta un comportamiento similar al calor específico mostrado en la figura 2.5 para $d/s = 1/2$. En el caso de un número infinito de deltas con una vacancia se presenta una discontinuidad en una temperatura crítica alrededor de $T_c/T_0 = 0.82$ la cual no se presenta en el caso de un cristal perfecto. A temperaturas muy altas las curvas tienden a $d/s = 1/2$, representando el caso de un gas ideal unidimensional.

5.3.1.3. Gran potencial

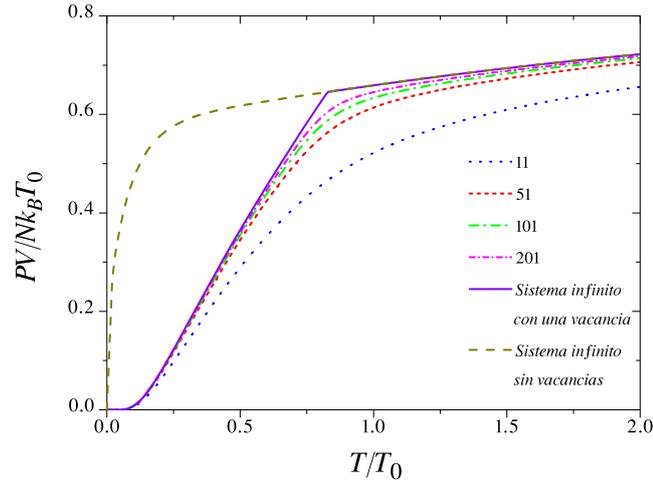


Figura 5.14: Gran potencial $PV/Nk_B T$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia ($P'_0 = 0$) para números finitos de deltas e infinito con $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$.

Otro potencial termodinámico de importancia en el ensamble gran canónico es el gran potencial, en el caso de un cristal finito es

$$\frac{PV}{Nk_B T} = \frac{1}{\zeta(3/2)^{\frac{1}{3}}(M+1)a_0} \left[- \sum_{n=1}^{N_b} \sum_{j=1}^{M+1} \ln \left(1 - e^{-\beta(\varepsilon_{n,j} - \mu)} \right) \right] \quad (5.26)$$

5. Gas de Bose en un cristal unidimensional

en el caso de un cristal infinito se vuelve la suma de integrales

$$\frac{PV}{Nk_B T} = \frac{1}{\zeta(3/2)^{\frac{1}{3}} \pi a_0} \left[- \sum_{n=1}^{N_b} \int_0^{\pi} \ln \left(1 - e^{-\beta(\varepsilon_n(k) - \mu)} \right) \right] \quad (5.27)$$

Otros potenciales termodinámicos se pueden obtener a partir de los anteriores.

En la figura 5.13 se observa el comportamiento del gran potencial $PV/Nk_B T$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con $a_0 = 1$ formado por deltas con impermeabilidad $P_0 = 10$ y con una de ellas representando una vacancia ($P'_0 = 0$) para un número finito de deltas: 11, 51, 101 y 201 y un número infinito de deltas en el caso perfecto y con una de ellas distinta (con vacancia). Se observa un comportamiento similar al de la energía interna de la figura se presenta un cambio no suave (con derivada discontinua) en una temperatura crítica alrededor de $T_c/T_0 = 0.82$.

5.3.1.4. Calor específico isobárico

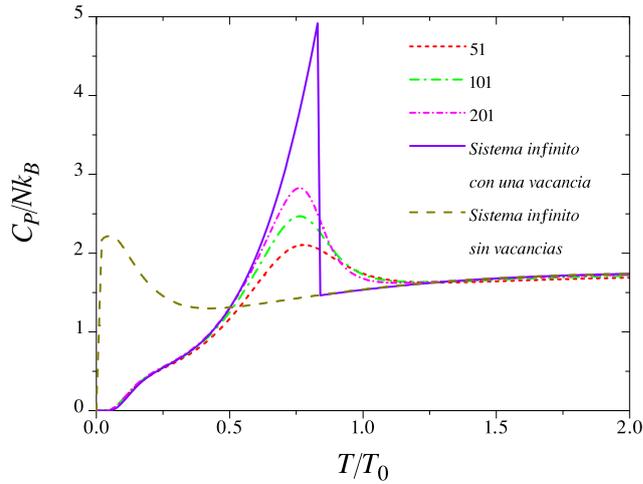


Figura 5.15: Calor específico isobárico C_P/Nk_B como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia ($P'_0 = 0$) para números finitos de deltas e infinito con $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$.

La compresibilidad isotérmica κ_T es

$$\kappa_T = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T \quad (5.28)$$

Con el fin de obtener la compresibilidad isotérmica, se usa primero la derivada de la presión respecto al logaritmo de la fugacidad a temperatura y volumen constante, la

cual se obtiene al derivar implícitamente la expresión (5.26), obteniéndose

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \ln z_1}\right)_{T,V} = \frac{-Nk_B T}{V\zeta(3/2)^{\frac{1}{3}}(M+1)a_0} \sum_{n=1}^{N_b} \sum_{j=1}^{M+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{n,j}-\mu)} - 1} \quad (5.29)$$

La derivada del logaritmo de la fugacidad respecto al volumen a temperatura y número de partículas constante, se obtiene al derivar implícitamente la expresión (5.12)

$$\left(\frac{\partial \ln z_1}{\partial V}\right)_{T,N} = \frac{1}{V} \frac{\sum_{n=1}^{N_b} \sum_{j=1}^{M+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{n,j}-\mu)} - 1}}{\sum_{n=1}^{N_b} \sum_{j=1}^{M+1} \frac{e^{\beta(\varepsilon_{n,j}-\mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_{n,j}-\mu)} - 1)^2}} \quad (5.30)$$

Sustituyendo estas derivadas en la expresión (5.28) al usar regla de la cadena, se obtiene

$$\kappa_T = \zeta(3/2)^{\frac{1}{3}}(M+1)a_0 \frac{V}{Nk_B T} \frac{\sum_{n=1}^{N_b} \sum_{j=1}^{M+1} \frac{e^{\beta(\varepsilon_{n,j}-\mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_{n,j}-\mu)} - 1)^2}}{\left(\sum_{n=1}^{N_b} \sum_{j=1}^{M+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{n,j}-\mu)} - 1}\right)^2} \quad (5.31)$$

La derivada de la presión respecto a la temperatura a número de partículas y volumen constante, la cual se obtiene al derivar implícitamente la expresión (5.26), obteniéndose

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{N,V} = & -\frac{Nk_B}{V\zeta(3/2)^{\frac{1}{3}}(M+1)a_0} \left[\sum_{n=1}^{N_b} \sum_{j=1}^{M+1} \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_{n,j}-\mu)}) \right. \\ & \left. - \sum_{n=1}^{N_b} \sum_{j=1}^{M+1} \frac{\beta(\varepsilon_{n,j}-\mu) + \frac{1}{k_B} \frac{\partial \mu}{\partial T}}{e^{\beta(\varepsilon_{n,j}-\mu)} - 1} \right] \end{aligned} \quad (5.32)$$

Finalmente el calor específico a presión constante se obtiene de sustituir las derivadas anteriores en la siguiente expresión

$$C_P = C_V + TV\kappa_T \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)^2 \quad (5.33)$$

En la figura 5.15 se observa el comportamiento del calor específico C_P/Nk_B como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con $a_0 = 1$ formado por deltas con impermeabilidad $P_0 = 10$ y con una de ellas representando una vacancia ($P'_0 = 0$) para un número finito de deltas: 11, 51, 101 y 201 y un número infinito de deltas en el caso perfecto y con una vacancia.

Se observa un cambio de concavidad a temperaturas bajas en el caso de tener una estructura con una vacancia y de hecho el calor específico isobárico tiene un crecimiento más abrupto conforme tiende a la temperatura crítica comparándola con su homóloga

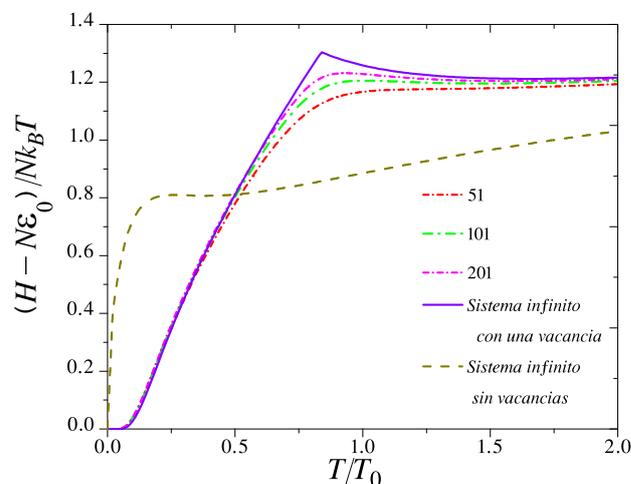


Figura 5.16: Entalpía $H/Nk_B T$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia ($P'_0 = 0$) para números finitos de deltas e infinito con $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$.

isocórica.

De hecho, esta curva es de mayor importancia, debido a que los autores experimentales, prefieren usar el calor específico a presión constante, como por ejemplo M. N. Khlopkin [63] quien estudió la transición en superconductores de Nb_3Sn ante un campo magnético intenso.

Se observa además que en el caso perfecto, a pesar de tener un máximo a temperaturas bajas, no se presenta una discontinuidad característica de la transición lambda, que el caso infinito imperfecto con una vacancia si posee.

5.3.1.5. Entalpía

La entalpía se calcula con la expresión termodinámica $H = U + PV$, obteniendo

$$\frac{H - N\varepsilon_0}{Nk_B T} = \frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} + \frac{PV}{Nk_B T} \quad (5.34)$$

En la figura 5.16 se observa el comportamiento de la entalpía $(H - N\varepsilon_0)/Nk_B T$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con $a_0 = 1$ formado por deltas con impermeabilidad $P_0 = 10$ y con una de ellas representando una vacancia ($P'_0 = 0$) para un número finito de deltas: 11, 51, 101 y 201 y un número infinito de deltas en el caso perfecto y con una vacancia.

La entalpía tiene un comportamiento similar a la energía interna de la figura 5.11. En esta gráfica se observa que a temperaturas extremadamente bajas $T/T_0 \rightarrow 0$ la entalpía toma el múltiplo del número de partículas por estado base $H \rightarrow N\varepsilon_0$, luego la función es creciente hasta llegar a un máximo en la temperatura crítica $T = T_c$. Después de cruzar la temperatura crítica la función decrece y a temperaturas altas tiende a un

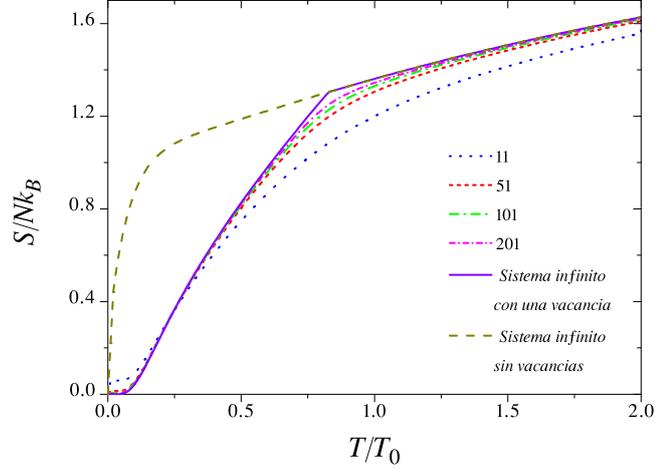


Figura 5.17: Entropía S/Nk_B como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia ($P'_0 = 0$) para números finitos de deltas e infinito con $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$.

valor constante, con un comportamiento similar a la figura 2.14.

5.3.1.6. Entropía

Usamos la relación de Euler $U = TS - PV + \mu N$, para obtener la entropía

$$\frac{S}{Nk_B} = \frac{U + PV}{Nk_B T} - \frac{\mu}{k_B T} = \frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} + \frac{PV}{Nk_B T} + \frac{\varepsilon_0 - \mu}{k_B T} \quad (5.35)$$

En la figura 5.17 se observa de la entropía S/Nk_B como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con $a_0 = 1$ formado por deltas con impermeabilidad $P_0 = 10$ y con una de ellas representando una vacancia ($P'_0 = 0$) para un número finito de deltas: 11, 51, 101 y 201 y un número infinito de deltas en el caso perfecto y con una vacancia.

La entropía tiene un comportamiento similar a la curva de entropía de la figura 2.12. Se observa un comportamiento monótono creciente. En esta gráfica se observa que a temperaturas bajas hay un cambio de concavidad en la curva en las curvas correspondientes al cristal con una imperfección, en cambio en el caso perfecto la función no cambia de concavidad, siempre es cóncava. Además la curva tiene un comportamiento no suave, su derivada es discontinua, en la temperatura crítica en la curva correspondiente al caso infinito con una imperfección, lo que caracteriza a la transición de fase.

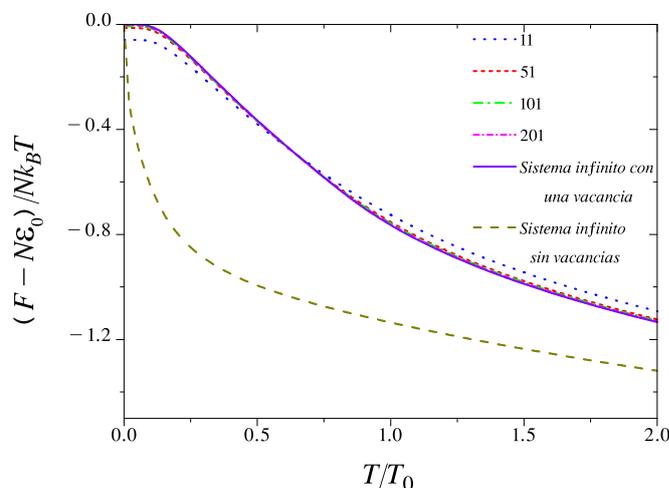


Figura 5.18: Energía libre de Helmholtz $(F - N\varepsilon_0)/Nk_B T$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia ($P'_0 = 0$) para números finitos de deltas e infinito con $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$.

5.3.1.7. Energía libre de Helmholtz

La energía libre de Helmholtz se obtiene de la expresión $F = U - TS$, se obtiene con

$$\frac{F - N\varepsilon_0}{Nk_B T} = \frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} - \frac{S}{Nk_B} \quad (5.36)$$

En la figura 5.18 se observa de la energía libre de Helmholtz $(F - N\varepsilon_0)/Nk_B$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con $a_0 = 1$ formado por deltas con impermeabilidad $P_0 = 10$ y con una de ellas representando una vacancia ($P'_0 = 0$) para un número finito de deltas: 11, 51, 101 y 201 y un número infinito de deltas en el caso perfecto y con una vacancia.

La energía libre de Helmholtz tiene un comportamiento similar a la curva de entropía de la figura 2.13. Se observa un comportamiento monótono decreciente, además a temperaturas bajas hay un cambio de concavidad en la curva en las curvas correspondientes al cristal con una imperfección, en cambio en el caso perfecto la función no cambia de concavidad, siempre es convexa.

En temperaturas extremadamente bajas $T/T_0 \rightarrow 0$ la energía libre de Helmholtz toma el múltiplo del número de partículas por estado base $F \rightarrow N\varepsilon_0$,

5.3.1.8. Energía libre de Gibbs

La energía libre de Gibbs está dada por la expresión termodinámica $G = U + PV - TS = H - TS = \mu N$.

5.4. Dependencia de las propiedades termodinámicas respecto con la impermeabilidad de la imperfección

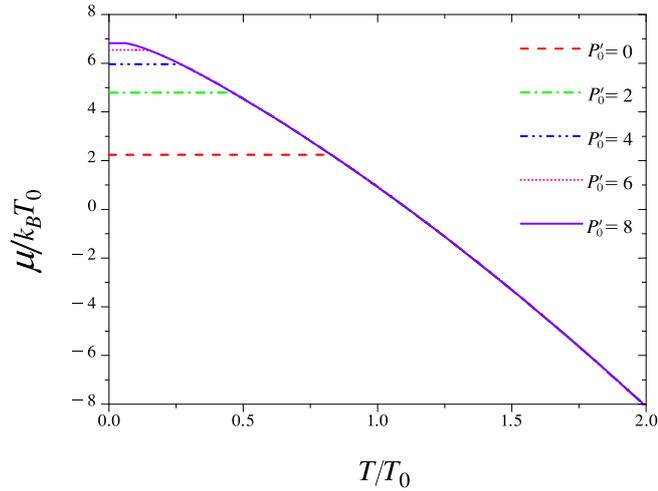


Figura 5.19: Potencial químico $\mu/k_B T_0$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una imperfección de diferentes impermeabilidades P'_0 para $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$.

En la figura 5.9 se observa la dependencia de la temperatura crítica T_c como función del factor de impermeabilidad de la imperfección P'_0 al mantener fija la impermeabilidad del cristal $P_0 = 10$. En esta sección se analizan las propiedades termodinámicas para distintos valores de impermeabilidad de la imperfección P'_0 con el fin de comparar el comportamiento de las mismas alrededor de su temperatura crítica.

Con el fin de que el análisis sea breve, se escogen algunas propiedades termodinámicas para analizar, en particular se escogen aquellas que tienen un cambio abrupto alrededor de la temperatura crítica.

En la figura 5.19 se muestra el potencial químico $\mu/k_B T_0$ como función de la temperatura de un cristal unidimensional para diferentes valores de impermeabilidad P'_0 de la imperfección.

Debido a que para toda temperatura menor que la temperatura crítica el potencial químico toma el valor de la energía del estado base, donde esta energía corresponde a la energía del estado impuro más bajo y cuyo comportamiento se evidencia en la figura 5.7, mientras que para temperaturas mayores que la temperatura crítica todas las curvas se superponen.

Se observa que la energía del estado base es cada vez mayor conforme la impermeabilidad de la imperfección se aproxima al del cristal, al mismo tiempo que la temperatura crítica disminuye, se lo cual se concluye que conforme el cristal se hace perfecto, la temperatura crítica es cero. A partir de la ecuación (5.17) se puede obtener la energía normalizada $U/Nk_B T$ en función de la temperatura, como se muestra en la figura 5.20, la cual muestra la energía interna para diferentes valores de impermeabilidad P'_0 de la imperfección. Las curvas presentan un máximo abrupto para distintos valores de

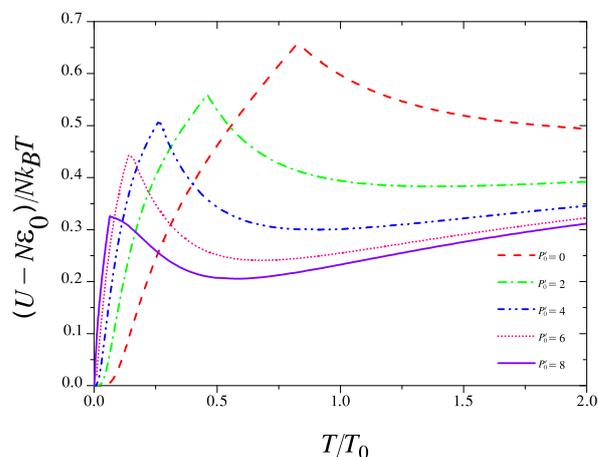


Figura 5.20: Energía interna $U/Nk_B T_0$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal con $P_0 = 10$ unidimensional con una imperfección de diferentes impermeabilidades P'_0 y $a_0 = 1$.

temperatura, correspondientes a su valor de temperatura crítica. Se observa además el comportamiento cóncavo de la función para temperaturas mayores que la crítica y como tienden a un valor asintótico a temperaturas altas, además que se obtienen valores mayores de energía para valores menores de impermeabilidad P'_0 .

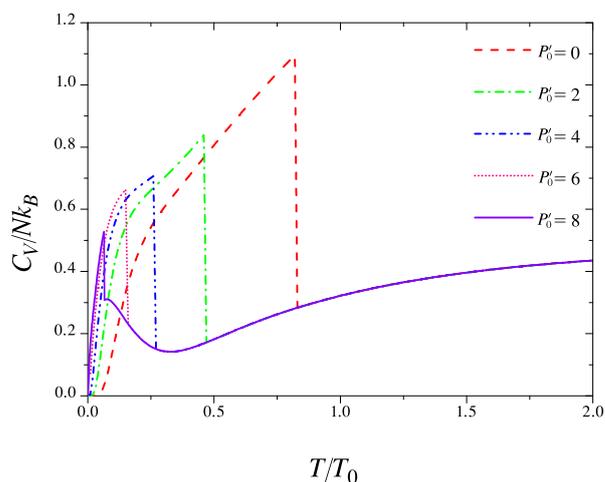


Figura 5.21: Calor específico C_V/Nk_B como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una imperfección de diferentes impermeabilidades P'_0 para $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$.

En estas figuras comparamos el comportamiento para diferentes valores de impermeabilidad P'_0 de la imperfección, entre 0 hasta el valor de P_0 , donde observamos que la temperatura crítica es mayor en el caso de tener $P'_0 = 0$, una vacancia. Por lo que

a partir de este momento, calcularemos las propiedades termodinámicas para sistemas cristalinos con una vacancia.

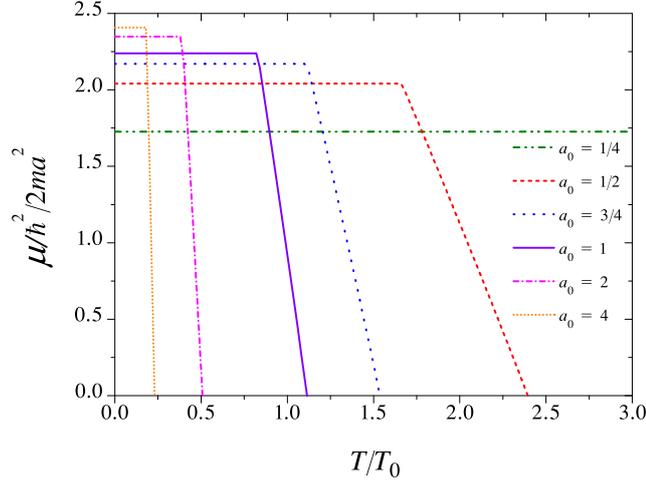


Figura 5.22: Potencial químico μ en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia de $P'_0 = 0$ para distintos valores de la razón a_0 con $P_0 = 10$.

5.5. Dependencia de las propiedades termodinámicas respecto a la razón a_0

En la figura 5.6 se muestra que la temperatura crítica T_c es decreciente conforme la razón de la separación entre los dispersores entre la longitud de onda térmica de un gas tridimensional a_0 , de hecho alcanza su valor máximo cuando $a_0 \rightarrow 0$.

En esta sección se analizan las propiedades termodinámicas del cristal unidimensional infinito para distintos valores de a_0 para comparar el comportamiento de las mismas alrededor de su temperatura crítica. Como en la sección previa, se escogen algunas propiedades termodinámicas las cuales tienen un cambio abrupto alrededor de la temperatura crítica.

En la figura 5.22 se muestra el potencial químico $\mu/\hbar^2/2ma^2$ como función de la temperatura de un cristal unidimensional con una vacancia de $P'_0 = 0$ en función de la razón a_0 . Nuevamente a temperatura menor que la crítica el potencial químico toma el valor de la energía del estado base del estado impuro más bajo, el cual aumenta conforme a_0 aumenta y cuyo comportamiento se muestra en la figura 5.1, donde se observa que cuando $a_0 \rightarrow \infty$ tiende a $(\frac{\pi}{2})^2$, al mismo tiempo que la temperatura crítica tiende a cero.

Este comportamiento se observa en la figura, ya que para temperaturas mayores que la crítica la función del potencial químico decae abruptamente conforme a_0 aumenta. En el otro límite $a_0 \rightarrow 0$ la energía del estado base es cero, por lo que el potencial químico es cero para temperaturas menor que la crítica, la cual es una temperatura finita distinta de cero.

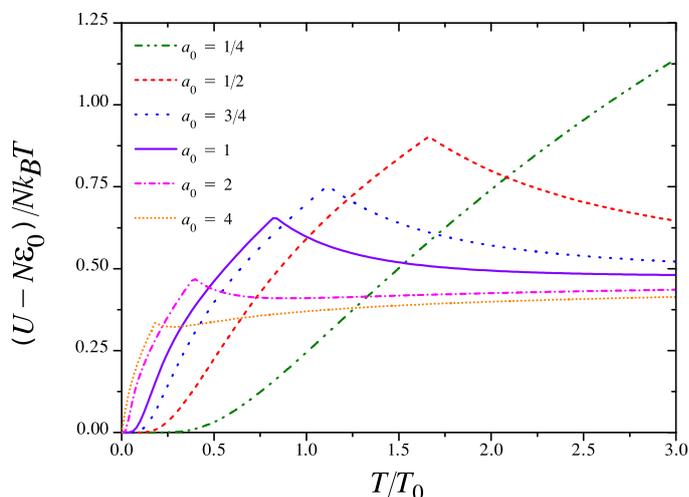


Figura 5.23: Energía Interna $U/Nk_B T_0$ como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia de $P'_0 = 0$ para distintos valores de a_0 con $P_0 = 10$.

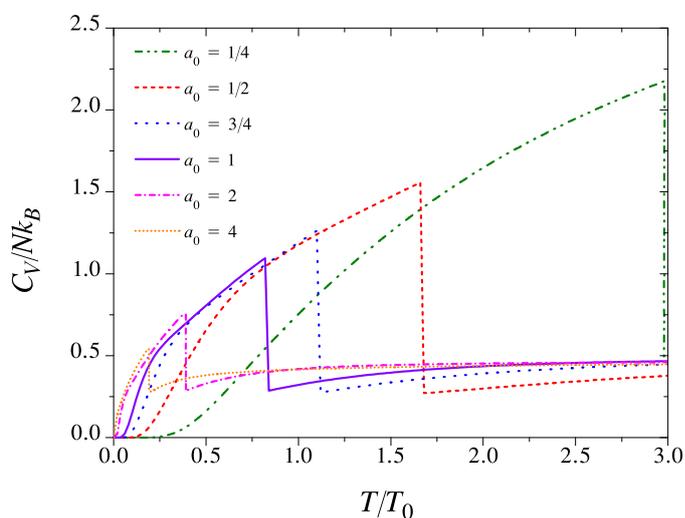


Figura 5.24: Calor específico isocórico C_V/Nk_B como función de la temperatura normalizada T/T_0 de un cristal unidimensional con una vacancia de $P'_0 = 0$ para distintos valores de a_0 con $P_0 = 10$.

De la ecuación (5.17) se obtiene la energía normalizada $U/Nk_B T$ en función de la temperatura, como lo muestra en la figura 5.23 como función de la razón a_0 . Las curvas tienen su máximo abrupto a diferentes temperaturas críticas, la cual aumenta conforme

a_0 disminuye.

Se observa que las curvas tienen al mismo valor asintótico a temperaturas altas. Sin embargo, observe que a valores mayores de a_0 para temperaturas mayores que la crítica la función cambia de concavidad debido a que tiene que crecer más para alcanzar el valor asintótico, a diferencia de valores menores de a_0 donde la función es siempre decreciente para temperaturas mayores a la crítica.

En la figura 5.24 se muestra el calor específico como función de la temperatura de un cristal unidimensional con una vacancia en función de la razón a_0 . Las curvas tienden al mismo valor asintótico, sin embargo a diferencia de la figura 5.21, a temperaturas mayores que la crítica las curvas no coinciden.

A temperaturas menores que la crítica se mantiene la misma concavidad en las curvas, salvo que alcanza valores mayores conforme a_0 decrece.

En estas figuras comparamos el comportamiento para diferentes valores de la razón del espaciamiento de las deltas con respecto a la longitud de onda térmica del gas tridimensional a_0 y se observa que las figuras mantienen su forma salvo que la transición del condensado ocurre a distintas temperaturas.

Por lo que, sin pérdida de generalidad, se elige un valor particular de la razón a_0 para las figuras de la siguiente sección para calcular las propiedades termodinámicas para sistemas cristalinos con una vacancia en dimensiones mayores a uno.

Gas de Bose en estructuras cristalinas bidimensionales y tridimensionales

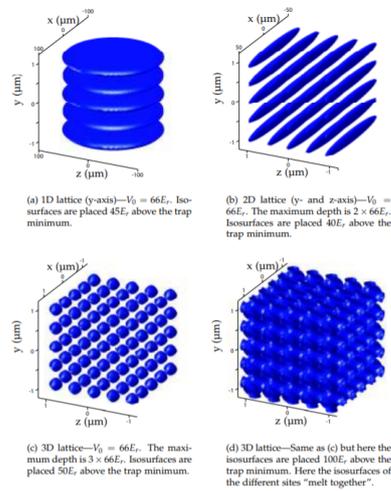


Figura 6.1: Superficies de energía potencial de redes ópticas 1D, 2D y 3D. Los potenciales toman formas de una red 1D (a), cigarrillos en una red 2D (b), una red 3D cúbica simple (c) y (d). Imagen extraída [65].

En este capítulo generalizamos el sistema unidimensional de un gas bosónico con una vacancia a sistemas en dos y tres dimensiones. Sin pérdida de generalidad nos enfocaremos por facilidad en sistemas cuyos potenciales de varias dimensiones sean separables en sistemas unidimensionales, con ello el Hamiltoniano que describe al sistema es separable y el espectro de energías que describe al sistema es la suma de las energías obtenidas con la ecuación lineal de Schrödinger unidimensional.

Estos potenciales externos pueden ser creados artificialmente por medio de haces de láser que se interfieren entre sí para formar una red periódica que atrapa a las partículas por medio de efecto Stark, comúnmente conocidos como redes ópticas. Nuestra propuesta es utilizar interferencia destructiva en algunos puntos de los picos sinusoidales de las redes ópticas con el fin de crear vacancias en estas estructuras periódicas. En la figura 6.1 se muestra diferentes superficies de energía potencial de redes ópticas unidimensionales, bidimensionales y tridimensionales, que pueden ser creados por medio de interferencia de haces láser, esta imagen es resultado de una simulación a partir de expresiones explícitas de la referencia [65].

Asimismo existen ciertas estructuras naturales como canales intersticiales de nano-

tubos de carbono [64], [66] o cables superconductores de Nb_3Sn [63] que pueden crear patrones en forma de tubos similares a los propuestos en este trabajo. O bien, en el estudio de superconductividad de alta temperatura, por ejemplo un gas de bosones en una estructura cristalina de superconductores de cuprato dopados [67], [68] los cuales se pueden simular como planos paralelos periódicos.

Sin pérdida de generalidad, en todas las figuras de esta sección tomaremos el caso $a_0 = a/\lambda_0 = 1$, que se interpreta como el caso donde la separación entre nuestros dispersores es del orden la longitud de onda térmica de nuestras partículas bosónicas e la temperatura crítica de una caja tridimensional con espectro de energía continua. Cualquier otro caso para esta razón a_0 puede ser explicado con lo expuesto en el capítulo anterior 5.1.3 donde se menciona la dependencia de la temperatura crítica de un gas de bosones unidimensional con el espacio entre los dispersores.

En cuanto al factor de impenetrabilidad usado en los cálculos es de $P_0 = 10$ para el caso del cristal perfecto. Para el caso de una vacancia, se toma el factor de impenetrabilidad de la delta distinta como $P'_0 = 0$.

6.1. Estructura bidimensional de multicintas

Si el potencial externo bidimensional en coordenadas cartesianas es separable $V(x, y) = V(x) + V(y)$, entonces el Hamiltoniano que describe al sistema es separable, como en nuestro caso, el espectro de energías que describe al sistema bidimensional es la suma de las energías obtenidas con la ecuación lineal de Schrödinger unidimensional, entonces

$$\varepsilon(k_x, k_y) = \varepsilon_x + \varepsilon_y \quad (6.1)$$

En el caso de un gas de bosones en un potencial bidimensional en forma de líneas equidistantes formando multicintas con un potencial externo descrito en la forma

$$V(x, y) = \sum_{n=1}^{M+1} v_{0,n} \delta(x - na) \quad (6.2)$$

En este caso los valores de energía que toma ε_x corresponden al espectro de bandas de Kronig Penney, mientras que ε_y corresponde al espectro continuo correspondiente a la relación de dispersión cuadrática de una partícula libre de potencial.

En la figura ?? se muestra un esquema de la estructura bidimensional periódica de multicintas de ancho a , la línea central punteada representa la imperfección del sistema.

La ecuación de número de partículas se puede escribir en el límite termodinámico como la suma de la contribución al estado base N_0 y la de los demás estados excitados

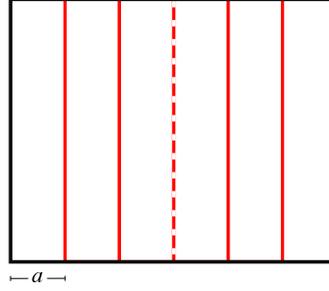


Figura 6.2: Esquema de una estructura periódica de multicintas.

N_e , como

$$\begin{aligned} N &= N_0 + \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} = N_0 + \sum_{\varepsilon_x} \frac{L_y}{\pi} \int_0^\infty \frac{dk_y}{e^{\beta(\varepsilon(k_x, k_y) - \mu)} - 1} \\ &= \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_0 - \mu)} - 1} + \frac{L_y}{\pi} \sum_{\varepsilon_x} \int_0^\infty \frac{dk_y}{e^{\beta(\varepsilon_x - \mu)} e^{\beta\varepsilon_y} - 1} \end{aligned} \quad (6.3)$$

y usando la expresión de la energía de una partícula libre $\varepsilon_y = \hbar^2 k_y^2 / 2m$, se reduce a

$$N = N_0 + N_e = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_0 - \mu)} - 1} + \frac{L_y}{\pi} \sum_{\varepsilon_x} \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2}} \int_0^\infty \frac{\varepsilon_y^{-1/2} d\varepsilon_y}{e^{\beta(\varepsilon_x - \mu)} e^{\beta\varepsilon_y} - 1} = N_0 + \frac{L_y}{\lambda_T} \sum_{\varepsilon_x} g_{1/2}(z_1) \quad (6.4)$$

donde la fugacidad es $z_1 = e^{\beta(\mu - \varepsilon_x)}$, la longitud de onda térmica es $\lambda_T = h / \sqrt{2\pi m k_B T}$ y $g_n(x)$ representa la función de Bose de orden n .

El área de nuestro sistema bidimensional es $L_y(M+1)a$, se puede normalizar utilizando la densidad ρ_0 de un gas tridimensional de bosones

$$\frac{N}{L_y(M+1)a} = \rho_0^{2/3} = \frac{\zeta(\frac{3}{2})^{\frac{2}{3}}}{\lambda_0^2} \quad (6.5)$$

donde λ_0 es la longitud de onda térmica en T_0 la temperatura crítica del gas tridimensional libre. Usando la normalización anterior, la ecuación (6.4) se reduce a

$$0 = -1 + \frac{1}{\zeta(3/2)^{2/3} (M+1)a_0} \sqrt{\frac{T}{T_0}} \times \sum_{\varepsilon_x} g_{1/2}(z_1) \quad (6.6)$$

donde se supone que para temperaturas mayores que la crítica $N_0/N \approx 0$.

6. Gas de Bose en estructuras cristalinas bidimensionales y tridimensionales

La energía interna U es

$$U = N\varepsilon_0 + \frac{L_y}{\lambda_T} \left[\sum_{\varepsilon_x} (\varepsilon_x - \varepsilon_0) g_{1/2}(z_1) + \frac{k_B T}{2} \sum_{\varepsilon_x} g_{3/2}(z_1) \right] \quad (6.7)$$

Usando la normalización del área y dividiendo entre el factor $1/\beta = k_B T$

$$\frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} = \frac{1}{\zeta(3/2)^{2/3}(M+1)a_0} \sqrt{\frac{T}{T_0}} \sum_{\varepsilon_x} \left[\beta(\varepsilon_x - \varepsilon_0) g_{1/2}(z_1) + \frac{1}{2} g_{3/2}(z_1) \right] \quad (6.8)$$

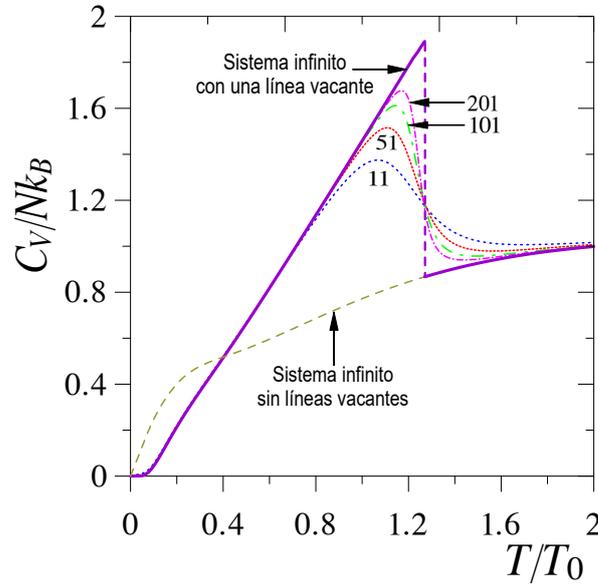


Figura 6.3: Calor específico isocórico de un gas de bosones en una estructura 2D de multicintas equidistantes.

Derivando la última expresión para la energía interna respecto a la temperatura, nos queda el calor específico isocórico

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{Nk_B} = & \frac{1}{\zeta(3/2)^{2/3}(M+1)a_0} \sqrt{\frac{T}{T_0}} \sum_{\varepsilon_x} \left[\frac{3}{4} g_{3/2}(z_1) + \frac{1}{2} g_{1/2}(z_1) \left(\frac{(\varepsilon_x - \varepsilon_0) - (\mu - \varepsilon_x)}{k_B T} + \frac{1}{k_B} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \right. \\ & \left. + g_{-1/2}(z_1) \beta(\varepsilon_x - \varepsilon_0) \left(-\frac{\mu - \varepsilon_x}{k_B T} + \frac{1}{k_B} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \right] \end{aligned} \quad (6.9)$$

donde la derivada del potencial químico se obtiene al derivar implícitamente respecto a la temperatura la ecuación de número (6.4)

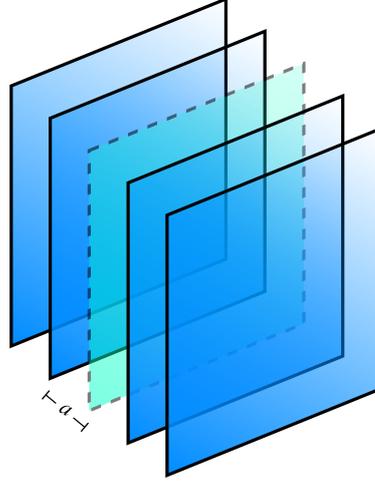


Figura 6.4: Esquema de una estructura tridimensional de multiplanos equidistantes.

$$\frac{1}{k_B} \frac{\partial \mu}{\partial T} = \frac{\sum_{\varepsilon_x} g_{-\frac{1}{2}}(z_1) \beta(\mu - \varepsilon_x) - \frac{1}{2} \sum_{\varepsilon_x} g_{\frac{1}{2}}(z_1)}{\sum_{\varepsilon_x} g_{-\frac{1}{2}}(z_1)} \quad (6.10)$$

En la figura 6.3 se muestra el calor específico para una estructura bidimensional de multicintas formadas por líneas equidistantes para el caso de un número finito de ellas (11, 51, 101 y 201) con la central removida. La curva continua violeta y la punteada de color olivo muestran el caso de un número infinito de líneas con una vacante y sin líneas vacantes respectivamente.

Se observa que conforme se va colocando un número mayor de deltas a la estructura finita de multicintas con una línea vacante eventualmente tiende al caso infinito con vacancia, el cual presenta una discontinuidad característica de una transición de fase a una temperatura crítica 1.26072 veces mayor que la temperatura crítica de un gas de bosones en una caja tridimensional con la misma densidad. Observe, sin embargo, que en la estructura infinita sin vacancias (curva punteada de color olivo) no hay discontinuidad, ni transición de fase.

A altas temperaturas todas las curvas tienden al valor característico del gas ideal bidimensional $2/2 = 1$.

6.2. Estructura tridimensional de multiplanos

En el caso de un gas de bosones en estructura tridimensional de multiplanos generado por un potencial externo descrito en la forma

$$V(x, y, z) = V(x) = \sum_{n=1}^{M+1} v_{0,n} \delta(x - na) \quad (6.11)$$

En la figura 6.4 se muestra la estructura tridimensional periódica de multiplanos

6. Gas de Bose en estructuras cristalinas bidimensionales y tridimensionales

equidistantes a una distancia a . Se muestra en línea punteada el borde del plano que sirve de imperfección en el sistema. En los cálculos posteriores, dicho plano se ha removido.

Se pueden obtener las propiedades termodinámicas a partir de la ecuación de número de partículas en el límite termodinámico como la suma de la contribución al estado base N_0 y la de los demás estados excitados N_e , como

$$\begin{aligned} N &= N_0 + N_e = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_0 - \mu)} - 1} + \sum_{\varepsilon_x} \frac{L_y L_z}{\pi \pi} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{dk_y dk_z}{e^{\beta(\varepsilon(k_x, k_y) - \mu)} - 1} \\ &= N_0 + \sum_{\varepsilon_x} \frac{A}{\lambda_T^2 \sqrt{\pi}} \int_0^\infty g_{\frac{1}{2}}(z_1 e^{-y}) y^{-1/2} dy \end{aligned} \quad (6.12)$$

donde el área de nuestro sistema es $A = L_x L_y$, la fugacidad es $z_1 = e^{\beta(\mu - \varepsilon_x)}$. Usando el desarrollo en serie de la función de Bose $g_\nu = \sum_{l=1}^\infty \frac{z_1^l}{l^\nu}$, podemos resolver la integral anterior

$$\int_0^\infty g_{\frac{1}{2}}(z_1 e^{-y}) y^{-1/2} dy = \sum_{l=1}^\infty \frac{z_1^l}{l} \int_0^\infty x^{-1/2} e^{-x} dx = \Gamma(1/2) g_1(z_1) \quad (6.13)$$

con lo que nos da como resultado para la ecuación de número

$$N = N_0 + \frac{A}{\lambda_T^2} \sum_{\varepsilon_x} g_1(z_1) \quad (6.14)$$

El volumen de nuestro sistema tridimensional $A(M+1)a$ puede normalizarse usando la densidad ρ_0 de un gas tridimensional de bosones

$$\frac{N}{A(M+1)a} = \frac{\zeta(\frac{3}{2})}{\lambda_0^3} \quad (6.15)$$

Usando la normalización anterior, la ecuación (6.14) se reduce a

$$0 = -1 + \frac{1}{\zeta(3/2)(M+1)a_0} \frac{T}{T_0} \sum_{\varepsilon_x} g_1(z_1). \quad (6.16)$$

Además podemos obtener la energía interna

$$U = N_0 \varepsilon_0 + \sum_{\varepsilon_x} \frac{L_x}{\pi} \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2}} \int_0^\infty \varepsilon_y^{-1/2} d\varepsilon_y \frac{L_y}{\pi} \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2}} \int_0^\infty \varepsilon_z^{-1/2} d\varepsilon_z \frac{\varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z}{e^{\beta(\varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z - \mu)} - 1} \quad (6.17)$$

que se puede simplificar a la expresión siguiente

$$U = N_0\varepsilon_0 + \frac{A}{\lambda_T^2} \sum_{\varepsilon_x} [\varepsilon_x g_1(z_1) + k_B T g_2(z_1)] \quad (6.18)$$

con la ecuación (6.14), se puede reducir de la manera siguiente

$$\frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} = \frac{1}{\zeta(3/2)(M+1)a_0} \frac{T}{T_0} \sum_{\varepsilon_x} [\beta(\varepsilon_x - \varepsilon_0)g_1(z_1) + g_2(z_1)] \quad (6.19)$$

En el caso infinito tenemos que la ecuación de número está dada por

$$N = N_0 - \frac{1}{\zeta(3/2)\pi a_0} \frac{T}{T_0} \sum_{n_x} \int_0^\pi d(ak_x) \ln \left(1 - e^{-\beta(\varepsilon_{n_x}(k_x) - \mu)} \right) \quad (6.20)$$

En el caso de temperatura mayor que la crítica tenemos que la razón N_0/N es despreciable, por lo que la ecuación de número es

$$1 = -\frac{1}{\zeta(3/2)\pi a_0} \frac{T}{T_0} \sum_{n_x} \int_0^\pi d(ak_x) \ln \left(1 - e^{-\beta(\varepsilon_{n_x}(k_x) - \mu)} \right) \quad (6.21)$$

por medio de esta ecuación se obtiene numéricamente el potencial químico para temperaturas mayores que la crítica.

La energía interna está dada por la expresión

$$\frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} = \frac{1}{\zeta(3/2)\pi a_0} \frac{T}{T_0} \sum_{n_x} \int_0^\pi d(ak_x) (g_2(z_1) - \beta(\varepsilon_{n_x}(k_x) - \varepsilon_0) \ln(1 - z_1)) \quad (6.22)$$

El calor específico isocórico se obtiene derivando la expresión de la energía interna (6.22) anterior como función de de la temperatura

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{Nk_B} = \frac{T/T_0}{\zeta(3/2)\pi a_0} \sum_{n_x} \int_0^\pi d(ak_x) & \left(2g_2(z_1) - \beta \left(2\varepsilon_{n_x}(k_x) - \varepsilon_0 - \mu + T \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \ln(1 - z_1) \right. \\ & \left. + \frac{\beta(\varepsilon_{n_x}(k_x) - \varepsilon_0)}{e^{\beta(\varepsilon_{n_x}(k_x) - \mu)} - 1} \right) \end{aligned} \quad (6.23)$$

Estas expresiones del número de partículas bosónicas, energía interna y calor específico en función de la temperatura son idénticas a la obtenidas por P. Salas y sus colaboradores [50].

En la figura 6.5 se muestra el calor específico para una estructura tridimensional de

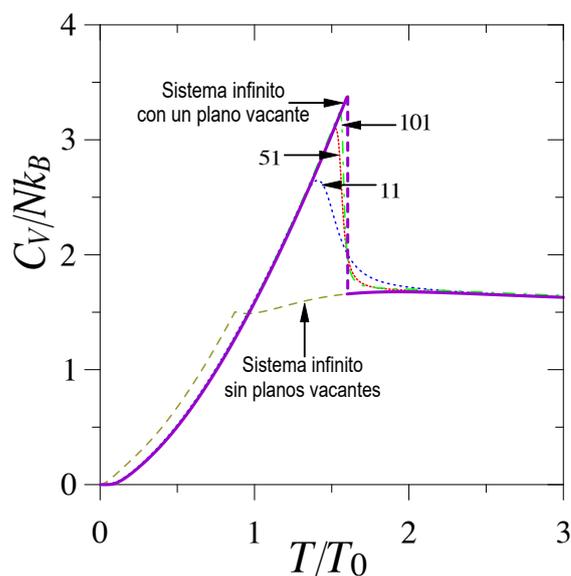


Figura 6.5: Calor específico isocórico de un gas de bosones en una estructura 3D de planos equidistantes

caja infinita con planos equidistantes donde se superponen las curvas para el caso de un número finito de líneas (11, 51 y 101) con el plano central removido, la curva continua violeta y la punteada de color olivo muestran el caso de un número infinito de planos con uno vacante y sin planos vacantes respectivamente.

Se observa que conforme se va colocando un número mayor de planos a la estructura finita con un plano vacante eventualmente tiende al caso infinito con plano vacante, el cual presenta una discontinuidad característica de una transición de fase a una temperatura crítica 1.598627 veces mayor que la temperatura crítica de un gas de bosones en una caja tridimensional con la misma densidad.

Observe, sin embargo, que en la estructura infinita sin vacancias (curva punteada de color olivo) la discontinuidad ocurre a una temperatura crítica 0.873757 veces menor que la temperatura crítica de un gas de bosones en una caja tridimensional con la misma densidad. A altas temperaturas todas las curvas tienden al valor característico del gas ideal tridimensional $3/2$.

6.3. Estructura $(d + 1)$ -dimensional: una cristalina y las demás sin estructura

Se puede generalizar las ecuaciones anteriores para el caso de un gas de bosones dentro de una estructura $(d + 1)$ -dimensional donde una dimensión actúa el potencial externo Kronig Penney y las demás corresponden al potencial de una partícula libre.

$$V(x, r_1, r_2, \dots, r_{d-1}, r_d) = V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} v_{0,n} \delta(x - na) \quad (6.24)$$

Las propiedades termodinámicas de este sistema se determinan a partir ecuación de número, el cual se obtiene al sumar la densidad de bosones para cada energía

$$N = N_0 + \sum_{\varepsilon_x} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^d \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(d/2)} \int_0^{\infty} \frac{k^{d-1} dk}{e^{\beta((\varepsilon_x + \varepsilon_k) - \mu)} - 1} = N_0 + \left(\frac{L}{\lambda_T} \right)^d \sum_{\varepsilon_x} g_{d/2}(z_1) \quad (6.25)$$

donde la fugacidad es $z_1 = e^{\beta(\mu - \varepsilon_x)}$, la energía $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ y la longitud de onda térmica $\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$.

Podemos usar la normalización usual de igualar la densidad $(d + 1)$ -dimensional con la densidad de un gas tridimensional de bosones en la temperatura crítica

$$\frac{N}{L^d L_x} = \frac{\zeta(3/2)^{\frac{d+1}{3}}}{\lambda_0^{d+1}} \quad (6.26)$$

Con el fin de obtener el potencial químico para temperatura mayor que la crítica utilizamos que $N_0/N \rightarrow 0$ por lo que la ecuación para determinar el potencial se reduce a

$$0 = -1 + \frac{1}{\zeta(3/2)^{\frac{d+1}{3}} (M+1) a_0} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\frac{d}{2}} \sum_{\varepsilon_x} g_{d/2}(z_1) \quad (6.27)$$

derivando implícitamente la ecuación anterior respecto a la temperatura, podemos obtener la derivada del potencial químico

$$\frac{1}{k_B} \frac{\partial \mu}{\partial T} = \frac{\sum_{\varepsilon_x} \beta(\mu - \varepsilon_x) g_{\frac{d}{2}-1}(z_1) - \frac{d}{2} \sum_{\varepsilon_x} g_{\frac{d}{2}}(z_1)}{\sum_{\varepsilon_x} g_{\frac{d}{2}-1}(z_1)} \quad (6.28)$$

La energía interna se obtiene con la ecuación siguiente

$$\frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} = \frac{1}{\zeta(3/2)^{\frac{d+1}{3}} (M+1) a_0} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\frac{d}{2}} \sum_{\varepsilon_x} \left[\beta(\varepsilon_x - \varepsilon_0) g_{\frac{d}{2}}(z_1) + \frac{d}{2} g_{\frac{d}{2}+1}(z_1) \right] \quad (6.29)$$

Derivando la energía respecto a la temperatura obtenemos en calor específico a volumen

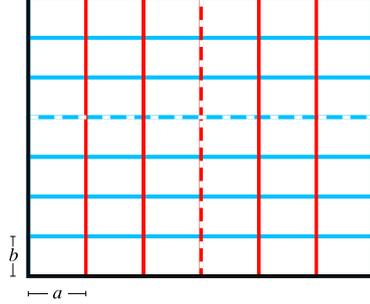


Figura 6.6: Esquema de una estructura bidimensional de multicuadros.

constante

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{Nk_B} = & \frac{1}{\zeta(3/2)^{\frac{d+1}{3}}(M+1)a_0} \left(\frac{T}{T_0}\right)^{d/2} \sum_{\varepsilon_x} \left[\left(\frac{d}{2}\right) \left(\frac{d}{2} + 1\right) g_{1+\frac{d}{2}}(z_1) \right. \\ & \left. + \frac{d}{2} g_{\frac{d}{2}}(z_1) \left(\frac{2\varepsilon_x - \varepsilon_0 - \mu}{k_B T} + \frac{1}{k_B} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) + g_{\frac{d}{2}-1}(z_1) \beta(\varepsilon_x - \varepsilon_0) \left(-\frac{\mu - \varepsilon_x}{k_B T} + \frac{1}{k_B} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \right] \end{aligned} \quad (6.30)$$

En el caso infinito tenemos la ecuación de número

$$N = N_0 + \left(\frac{L}{\lambda_T}\right)^d \frac{L_x}{\pi} \sum_{n_x=1}^{N_b} \int_{(n_x-1)\frac{\pi}{a}}^{n_x\frac{\pi}{a}} g_{\frac{d}{2}}(e^{-\beta(\varepsilon_{n_x}(k_x) - \mu)}) d(ak_x) \quad (6.31)$$

y la energía se obtiene con la siguiente expresión

$$\frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} = \frac{1}{\pi \zeta(3/2)^{\frac{d+1}{3}} a_0} \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{d}{2}} \sum_{n_x=1}^{N_b} \int_{(n_x-1)\frac{\pi}{a}}^{n_x\frac{\pi}{a}} \left(\beta(\varepsilon_{n_x}(k_x) - \varepsilon_0) g_{\frac{d}{2}}(z_1) + \frac{d}{2} g_{\frac{d}{2}+1}(z_1) \right) d(ak_x) \quad (6.32)$$

6.4. Estructura bidimensional de multicuadros

En el caso de tener un gas de bosones en una estructura bidimensional de multicuadros en forma de malla, donde el potencial externo que lo describe tiene la forma

$$V(x, y) = \sum_{n=1}^{M+1} v_{0x,n} \delta(x - na) + \sum_{m=1}^{M'+1} v_{0y,m} \delta(y - mb) \quad (6.33)$$

el cual se compone de líneas perpendiculares que forman una estructura de multicuadros en un sistema bidimensional.

En la figura 6.6 se muestra la estructura bidimensional de multicuadros, formados

por líneas perpendiculares entre sí, donde las líneas horizontales se separan una distancia b entre sí y las verticales una distancia a . Se muestra en líneas punteadas las dos líneas que sirven de imperfección en el sistema. En los cálculos posteriores, las líneas punteadas se remueven y los parámetros de red son iguales $a = b$.

La ecuación de número de partículas, se obtiene al sumar la densidad de bosones para cada energía.

$$\begin{aligned}
 N = N_0 + \sum_{\varepsilon \neq \varepsilon_0} n_\varepsilon = & \sum_{i=1}^{N_b} \sum_{n=1}^{N_b} \left[\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,1} + \varepsilon_{y,n,1} - \mu)} - 1} + \sum_{j=2}^{M+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,1} - \mu)} - 1} \right. \\
 & \left. + \sum_{m=2}^{M'+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,1} + \varepsilon_{y,n,m} - \mu)} - 1} + \sum_{j=2}^{M+1} \sum_{m=2}^{M'+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} - \mu)} - 1} \right] \quad (6.34)
 \end{aligned}$$

Para normalizar la ecuación anterior igualamos la densidad de nuestro sistema bidimensional con la densidad de bosones en una caja tridimensional evaluada en su temperatura crítica.

$$\frac{N}{(M+1)(M'+1)ab} = \frac{\zeta(3/2)^{\frac{2}{3}}}{\lambda_0^2} \quad (6.35)$$

Derivando implícitamente la ecuación de número respecto a la temperatura resolvemos para obtener la derivada del potencial químico

$$\frac{1}{k_B} \frac{\partial \mu}{\partial T} = - \frac{\sum_{\varepsilon} \beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} - \mu) \frac{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} - \mu)}}{\left(e^{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} - \mu)} - 1\right)^2}}{\sum_{\varepsilon} \frac{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} - \mu)}}{\left(e^{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} - \mu)} - 1\right)^2}} \quad (6.36)$$

Como en los casos previos sumando para cada valor de energía, el producto de la densidad de bosones por cada energía, obtenemos la energía interna del sistema

$$\begin{aligned}
 \frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} = & \frac{1}{\zeta(3/2)^{\frac{2}{3}}(M+1)(M'+1)a_0b_0} \sum_{i=1}^{N_b} \sum_{n=1}^{N_b} \left[\frac{\beta(\varepsilon_{x,i,1} + \varepsilon_{y,n,1} - \varepsilon_{1,1,1})}{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,1} + \varepsilon_{y,n,1} - \mu)} - 1} \right. \\
 & + \sum_{j=2}^{M+1} \frac{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,1} - \varepsilon_{1,1,1})}{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,1} - \mu)} - 1} + \sum_{m=2}^{M'+1} \frac{\beta(\varepsilon_{x,i,1} + \varepsilon_{y,n,m} - \varepsilon_{1,1,1})}{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,1} + \varepsilon_{y,n,m} - \mu)} - 1} \\
 & \left. + \sum_{j=2}^{M+1} \sum_{m=2}^{M'+1} \frac{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} - \varepsilon_{1,1,1})}{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} - \mu)} - 1} \right] \quad (6.37)
 \end{aligned}$$

6. Gas de Bose en estructuras cristalinas bidimensionales y tridimensionales

El calor específico a volumen constante viene dado por

$$\frac{C_V}{Nk_B} = \frac{1}{\zeta(3/2)^{\frac{2}{3}}(M+1)(M'+1)a_0b_0} \sum_{\epsilon} \frac{\beta(\epsilon_{x,i,j} + \epsilon_{y,n,m} - \epsilon_0) e^{\beta(\epsilon_{x,i,j} + \epsilon_{y,n,m} - \mu)}}{(e^{\beta(\epsilon_{x,i,j} + \epsilon_{y,n,m} - \mu)} - 1)^2} \times \left(\beta(\epsilon_{x,i,j} + \epsilon_{y,n,m} - \mu) + \frac{1}{k_B} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \quad (6.38)$$

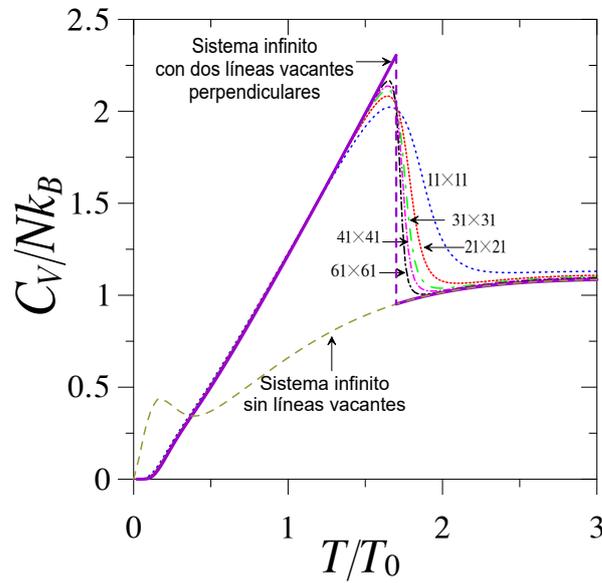


Figura 6.7: Calor específico isocórico de un gas de bosones en una estructura 2D de multicuadros.

En la figura 6.7 se muestra el calor específico para una estructura bidimensional de rectángulo con dos familias de líneas equidistantes perpendiculares, formando una estructura de multicuadros, donde se superponen las curvas para el caso de un número finito de líneas que forman multicuadros (11×11 , 21×21 , 31×31 , 41×41 y 61×61) con los ejes cartesianos centrales removidos, la curva continua violeta y la punteada de color olivo muestran el caso de una malla de multicuadros infinita con los ejes vacantes y sin ejes vacantes respectivamente.

Se observa que conforme se va colocando un número mayor de deltas a la estructura finita con una vacancia eventualmente tiende al caso infinito con ejes vacantes, el cual presenta una discontinuidad característica de una transición de fase a una temperatura crítica 1.6943745 veces mayor que la temperatura crítica de un gas de bosones en una caja tridimensional con la misma densidad.

Observe, sin embargo, que en la estructura infinita sin vacancias (curva punteada de color olivo) no hay discontinuidad, ni transición de fase. A altas temperaturas todas las curvas tienden al valor característico del gas ideal bidimensional $2/2 = 1$.

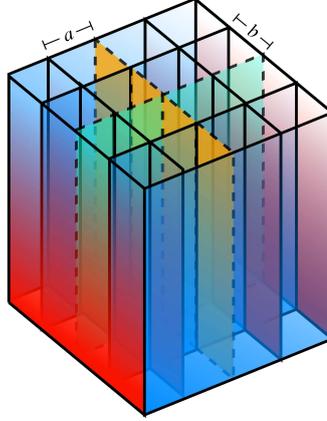


Figura 6.8: Esquema de una estructura 3D de planos perpendiculares formando tubos.

6.5. Estructura tridimensional de multitubos

En el caso de tener un gas de bosones en un sistema tridimensional cartesiano en forma de tubos, es decir el potencial externo que lo describe tiene la forma

$$V(x, y, z) = \sum_{j=1}^{M+1} v_{0x,j} \delta(x - ja) + \sum_{m=1}^{M'+1} v_{0y,m} \delta(y - mb) \quad (6.39)$$

observe que el potencial es el mismo que el del sistema bidimensional de multicuadros en el plano xy , es decir se puede descomponer la energía total en la suma de las energías de espectros de Kronig-Penney (con una imperfección), mientras que la tercera contribución corresponde a una energía continua correspondiente a la dispersión cuadrática. Esta estructura generaliza la estructura expuesta por P. Salas [51] al agregar vacancias a la estructura.

En la figura ?? se muestra un esquema de una estructura 3D de planos perpendiculares formando multitubos, formadas por la superposición de dos familias de planos perpendiculares separadas una distancia a y b respectivamente. Dos planos con bordes punteados representan planos imperfectos, los cuales son removidos y además se cumple que $a = b$, para efectuar los cálculos termodinámicos.

El número de partículas usando la normalización correspondiente se puede expresar en términos del área de nuestro sistema como

$$\frac{1}{N} = \frac{1}{\zeta(3/2)(M+1)(M'+1)a_0b_0} \quad (6.40)$$

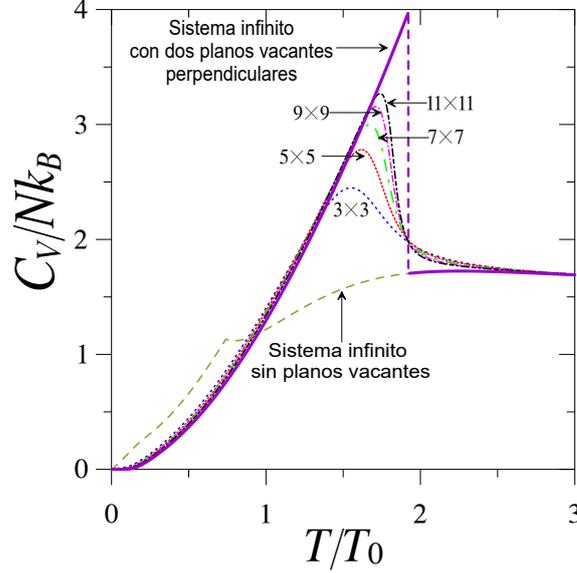


Figura 6.9: Calor específico isocórico de un gas de bosones en una estructura 3D de multitubos.

La ecuación de número tras la normalización correspondiente (6.40)

$$0 = -1 + \frac{1}{N} \sqrt{\frac{T}{T_0}} \sum_{i=1}^{N_b} \sum_{j=1}^{M+1} \sum_{n=1}^{N_b} \sum_{m=1}^{M'+1} g_{\frac{1}{2}}(e^{\beta(\mu - (\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m}))}) \quad (6.41)$$

tras desarrollar la suma

$$1 = \frac{1}{N} \sqrt{\frac{T}{T_0}} \sum_{i=1}^{N_b} \sum_{n=1}^{N_b} \left[g_{\frac{1}{2}}(e^{-\beta(\varepsilon_{x,i,1} + \varepsilon_{y,n,1} - \mu)}) + \sum_{j=2}^{M+1} \sum_{m=2}^{M'+1} g_{\frac{1}{2}}(e^{-\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} - \mu)}) \right. \\ \left. + \sum_{j=2}^{M+1} g_{\frac{1}{2}}(e^{-\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,1} - \mu)}) + \sum_{m=2}^{M'+1} g_{\frac{1}{2}}(e^{-\beta(\varepsilon_{x,i,1} + \varepsilon_{y,n,m} - \mu)}) \right] \quad (6.42)$$

En el límite termodinámico donde el número de dispersores delta tiende a infinito sólo el último sumando sobrevive convirtiéndose en una integral sobre la primera zona de Brillouin para las energías de cada banda

$$1 = \frac{1}{\zeta(3/2)\pi^2 a_0 b_0} \sqrt{\frac{T}{T_0}} \sum_{n_x=1}^{N_b} \sum_{n_y=1}^{N_b} \int_{(n_x-1)\pi}^{n_x\pi} \int_{(n_y-1)\pi}^{n_y\pi} g_{\frac{1}{2}}(e^{-\beta(\varepsilon_{n_x}(k_x) + \varepsilon_{n_y}(k_y) - \mu)}) d(ak_x) d(bk_y) \quad (6.43)$$

derivando implícitamente (6.41) respecto a la temperatura se obtiene la derivada del potencial químico respecto a la temperatura

$$\frac{1}{k_B} \frac{\partial \mu}{\partial T} = \frac{\sum_{\varepsilon_x} \beta(\mu - \varepsilon_x) g_{-\frac{1}{2}}(z_1) - \frac{1}{2} \sum_{\varepsilon_x} g_{\frac{1}{2}}(z_1)}{\sum_{\varepsilon_x} g_{-\frac{1}{2}}(z_1)} \quad (6.44)$$

y la energía tiene por ecuación

$$\begin{aligned} \frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} &= \frac{1}{\zeta(3/2)(M+1)(M'+1)a_0 b_0} \sqrt{\frac{T}{T_0}} \sum_{\varepsilon_x} \sum_{\varepsilon_y} \left[\beta(\varepsilon_x + \varepsilon_y - \varepsilon_0) g_{1/2}(\mathbf{e}^{\beta(\mu - (\varepsilon_x + \varepsilon_y))}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} g_{3/2}(\mathbf{e}^{\beta(\mu - (\varepsilon_x + \varepsilon_y))}) \right] \end{aligned} \quad (6.45)$$

Derivando la ecuación de la energía respecto a la temperatura se obtiene el calor específico a volumen constante

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{1}{\zeta(3/2)(M+1)(M'+1)a_0 b_0} \sqrt{\frac{T}{T_0}} \sum_{\varepsilon_x} \left[\left(\frac{3}{4} \right) g_{\frac{3}{2}}(z_1) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} g_{\frac{1}{2}}(z_1) \left(\frac{2\varepsilon_x - \varepsilon_0 - \mu}{k_B T} + \frac{1}{k_B} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) + g_{-\frac{1}{2}}(z_1) \beta(\varepsilon_x - \varepsilon_0) \left(-\frac{\mu - \varepsilon_x}{k_B T} + \frac{1}{k_B} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \right] \end{aligned} \quad (6.46)$$

la energía en el caso de un número infinito de deltas es

$$\frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} = \frac{\sqrt{T/T_0}}{\pi^2 \zeta(3/2) a_0 b_0} \sum_{n_x, n_y}^{N_b} \int_{(n_x-1)\pi}^{n_x \pi} d(ak_x) \int_{(n_y-1)\pi}^{n_y \pi} d(bk_y) \left(\beta(\varepsilon_{n_x}(k_x) + \varepsilon_{n_y}(k_y) - \varepsilon_0) g_{\frac{1}{2}}(z_1) + \frac{1}{2} g_{\frac{3}{2}}(z_1) \right) \quad (6.47)$$

Para el potencial gran canónico

$$\frac{PV}{Nk_B T} = \frac{1}{\pi^2 \zeta(3/2) a_0 b_0} \sqrt{\frac{T}{T_0}} \sum_{n_x, n_y=1}^{N_b} \int_{(n_x-1)\pi}^{n_x \pi} d(ak_x) \int_{(n_y-1)\pi}^{n_y \pi} d(bk_y) g_{\frac{3}{2}}(\mathbf{e}^{-\beta(\varepsilon_{n_x}(k_x) + \varepsilon_{n_y}(k_y) - \mu)}) \quad (6.48)$$

En la figura 6.9 se muestra el calor específico para una estructura tridimensional de caja infinita con dos familias de planos equidistantes perpendiculares entre sí formando una estructura de tubos, en la figura se superponen las curvas para el caso de un número finito de planos ($3 \times 3 \times 3$, $5 \times 5 \times 5$, $7 \times 7 \times 7$, $9 \times 9 \times 9$ y $11 \times 11 \times 11$) con dos planos perpendiculares removidos, la curva continua violeta y la punteada de color olivo muestran el caso de un número infinito de planos con uno vacante y sin planos vacantes respectivamente.

Se observa que conforme se va colocando un número mayor de planos perpendiculares a la estructura finita eventualmente tiende al caso infinito con los dos planos

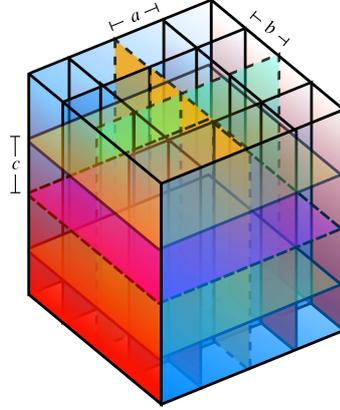


Figura 6.10: Esquema de un estructura 3D de planos perpendiculares formando cubos.

vacantes, el cual presenta una discontinuidad característica de una transición de fase a una temperatura crítica 1.926196 veces mayor que la temperatura crítica de un gas de bosones en una caja tridimensional con la misma densidad.

Observe, sin embargo, que en la estructura infinita sin vacancias (curva punteada de color olivo) la discontinuidad ocurre a una temperatura crítica 0.7406197 veces menor que la temperatura crítica de un gas de bosones en una caja tridimensional con la misma densidad. A altas temperaturas todas las curvas tienden al valor característico del gas ideal tridimensional $3/2$.

6.6. Estructura tridimensional de multicubos

En el caso de tener una familia de planos perpendiculares a los tres ejes cartesianos, el cual se puede representar por el potencial externo

$$V(x, y, z) = \sum_{j=1}^{M+1} v_{0x,j} \delta(x - ja) + \sum_{m=1}^{M'+1} v_{0y,m} \delta(y - mb) + \sum_{q=1}^{M''+1} v_{0z,q} \delta(z - qc) \quad (6.49)$$

en el que se observa que es son tres familias de planos perpendiculares entre sí, formando un potencial de cubos.

En la figura ?? se observa un esquema de un estructura tridimensional de multicubos. Esta estructura es formada por tres familias de planos perpendiculares con parámetro de red a , b y c respectivamente. Tres planos con bordes punteados representan los planos imperfectos. Para los cálculos termodinámicos, los planos imperfectos son removidos y se cumple que $a = b = c$.

Se utiliza la igualdad entre la densidad del sistema con la densidad ρ_0 de un gas 3D de bosones en T_0

$$\frac{N}{(M+1)(M'+1)(M''+1)abc} = \rho_0 = \frac{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}{\lambda_0^3} \quad (6.50)$$

donde consideramos que el volumen de nuestro sistema finito es $(M+1)(M'+1)(M''+1)abc$. luego la ecuación del número de partículas se escribe como

$$\begin{aligned}
 N = & \sum_{i=1}^{N_b} \sum_{n=1}^{N_b} \sum_{p=1}^{N_b} \left[\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,1} + \varepsilon_{y,n,1} + \varepsilon_{z,p,1} - \mu)} - 1} + \sum_{j=2}^{M+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,1} + \varepsilon_{z,p,1} - \mu)} - 1} \right. \\
 & + \sum_{m=2}^{M'+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,1} + \varepsilon_{y,n,m} + \varepsilon_{z,p,1} - \mu)} - 1} + \sum_{q=2}^{M''+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,1} + \varepsilon_{y,n,1} + \varepsilon_{z,p,q} - \mu)} - 1} \\
 & + \sum_{j=2}^{M+1} \sum_{m=2}^{M'+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} + \varepsilon_{z,p,1} - \mu)} - 1} + \sum_{m=2}^{M'+1} \sum_{q=2}^{M''+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,1} + \varepsilon_{y,n,m} + \varepsilon_{z,p,q} - \mu)} - 1} \\
 & \left. + \sum_{j=2}^{M+1} \sum_{q=2}^{M''+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,1} + \varepsilon_{z,p,q} - \mu)} - 1} + \sum_{j=2}^{M+1} \sum_{m=2}^{M'+1} \sum_{q=2}^{M''+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} + \varepsilon_{z,p,q} - \mu)} - 1} \right] \quad (6.51)
 \end{aligned}$$

donde el primer término de la suma es

$$\begin{aligned}
 & \sum_{i=1}^{N_b} \sum_{n=1}^{N_b} \sum_{p=1}^{N_b} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,1} + \varepsilon_{y,n,1} + \varepsilon_{z,p,1} - \mu)} - 1} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{x,1,1} + \varepsilon_{y,1,1} + \varepsilon_{z,1,1} - \mu)} - 1} \\
 & + \sum_{p=2}^{N_b} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{x,1,1} + \varepsilon_{y,1,1} + \varepsilon_{z,p,1} - \mu)} - 1} + \sum_{n=2}^{N_b} \sum_{p=1}^{N_b} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{x,1,1} + \varepsilon_{y,n,1} + \varepsilon_{z,p,1} - \mu)} - 1} \quad (6.52) \\
 & + \sum_{i=2}^{N_b} \sum_{n=1}^{N_b} \sum_{p=1}^{N_b} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,1} + \varepsilon_{y,n,1} + \varepsilon_{z,p,1} - \mu)} - 1}
 \end{aligned}$$

Usando la anterior normalización (6.50) se puede escribir la ecuación de número

$$1 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N_b} \sum_{j=1}^{M+1} \sum_{n=1}^{N'_b} \sum_{m=1}^{M'+1} \sum_{p=1}^{N''_b} \sum_{q=1}^{M''+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} + \varepsilon_{z,p,q} - \mu)} - 1}, \quad (6.53)$$

de la cual se puede obtener numéricamente el potencial químico. Donde la derivada del potencial químico respecto a la temperatura es

$$\frac{1}{k_B} \frac{\partial \mu}{\partial T} = - \frac{\sum_{\varepsilon} \beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} + \varepsilon_{z,p,q} - \mu) \frac{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} + \varepsilon_{z,p,q} - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} + \varepsilon_{z,p,q} - \mu)} - 1)^2}}{\sum_{\varepsilon} \frac{e^{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} + \varepsilon_{z,p,q} - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} + \varepsilon_{z,p,q} - \mu)} - 1)^2}} \quad (6.54)$$

donde la suma \sum_{ε} es la suma sobre los índices de las bandas y de las deltas

6. Gas de Bose en estructuras cristalinas bidimensionales y tridimensionales

$$\sum_{\varepsilon} = \sum_{i=1}^{N_b} \sum_{j=1}^{M+1} \sum_{n=1}^{N'_b} \sum_{m=1}^{M'+1} \sum_{p=1}^{N''_b} \sum_{q=1}^{M''+1} \quad (6.55)$$

Para la ecuación de energía en función de la temperatura es

$$\frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N_b} \sum_{j=1}^{M+1} \sum_{n=1}^{N'_b} \sum_{m=1}^{M'+1} \sum_{p=1}^{N''_b} \sum_{q=1}^{M''+1} \frac{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} + \varepsilon_{z,p,q} - \varepsilon_0)}{\mathbf{e}^{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} + \varepsilon_{z,p,q} - \mu)} - 1} \quad (6.56)$$

El calor específico a volumen constante es

$$\frac{C_V}{Nk_B} = \frac{1}{N} \sum_{\varepsilon} \frac{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} + \varepsilon_{z,p,q} - \varepsilon_0) \mathbf{e}^{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} + \varepsilon_{z,p,q} - \mu)}}{(\mathbf{e}^{\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} + \varepsilon_{z,p,q} - \mu)} - 1)^2} \times \left(\beta(\varepsilon_{x,i,j} + \varepsilon_{y,n,m} + \varepsilon_{z,p,q} - \mu) + \frac{1}{k_B} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \quad (6.57)$$

En el límite en que el número de dispersores delta tienda a infinito entonces la energía es

$$\frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} = \frac{1}{\pi^3 \zeta(3/2) a_0 b_0 c_0} \sum_{n_x, n_y, n_z}^{N_b} \iiint \frac{\beta(\varepsilon_{n_x}(k_x) + \varepsilon_{n_y}(k_y) + \varepsilon_{n_z}(k_z) - \varepsilon_0) abc d^3 k}{\mathbf{e}^{\beta(\varepsilon_{n_x}(k_x) + \varepsilon_{n_y}(k_y) + \varepsilon_{n_z}(k_z) - \mu)} - 1} \quad (6.58)$$

donde la triple integral \iiint es la tres integraciones sucesivas sobre cada banda en las tres direcciones

$$\iiint = \int_{(n_x-1)\pi}^{n_x\pi} \int_{(n_y-1)\pi}^{n_y\pi} \int_{(n_z-1)\pi}^{n_z\pi} \quad (6.59)$$

El calor específico a volumen constante es

$$\frac{C_V}{Nk_B} = \sum_{n_x, n_y, n_z}^{N_b} \iiint \frac{\beta(\varepsilon_{n_x}(k_x) + \varepsilon_{n_y}(k_y) + \varepsilon_{n_z}(k_z) - \varepsilon_0) \mathbf{e}^{\beta(\varepsilon_{n_x}(k_x) + \varepsilon_{n_y}(k_y) + \varepsilon_{n_z}(k_z) - \mu)}}{\zeta(3/2) \pi^3 a_0 b_0 c_0 (\mathbf{e}^{\beta(\varepsilon_{n_x}(k_x) + \varepsilon_{n_y}(k_y) + \varepsilon_{n_z}(k_z) - \mu)} - 1)^2} \times \left(\beta(\varepsilon_{n_x}(k_x) + \varepsilon_{n_y}(k_y) + \varepsilon_{n_z}(k_z) - \mu) + \frac{1}{k_B} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \quad (6.60)$$

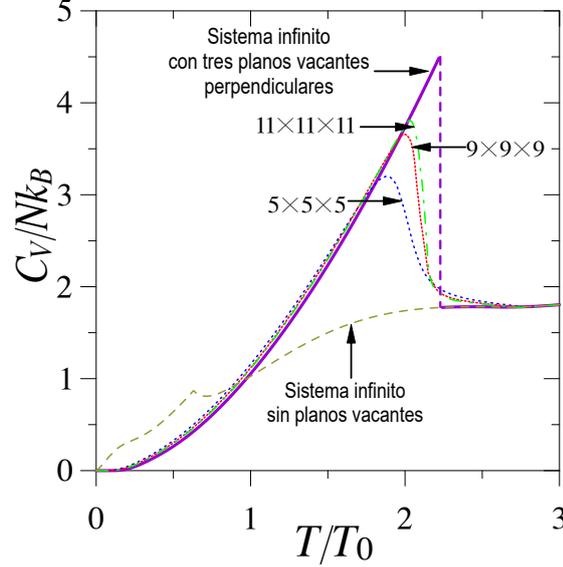


Figura 6.11: Calor específico isocórico de un gas de bosones en una estructura 3D de multicubos.

donde la derivada del potencial químico respecto a la temperatura es

$$\frac{1}{k_B} \frac{\partial \mu}{\partial T} = - \frac{\sum \iiint \beta(\varepsilon_{n_x}(k_x) + \varepsilon_{n_y}(k_y) + \varepsilon_{n_z}(k_z) - \mu) \frac{e^{\beta(\varepsilon_{n_x}(k_x) + \varepsilon_{n_y}(k_y) + \varepsilon_{n_z}(k_z) - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_{n_x}(k_x) + \varepsilon_{n_y}(k_y) + \varepsilon_{n_z}(k_z) - \mu)} - 1)^2}}{\sum \iiint \frac{e^{\beta(\varepsilon_{n_x}(k_x) + \varepsilon_{n_y}(k_y) + \varepsilon_{n_z}(k_z) - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_{n_x}(k_x) + \varepsilon_{n_y}(k_y) + \varepsilon_{n_z}(k_z) - \mu)} - 1)^2}} \quad (6.61)$$

donde en las últimas tres ecuaciones se denota la suma sobre los números de banda como

$$\sum = \sum_{n_x, n_y, n_z}^{N_b} = \sum_{n_x=1}^{N_b} \sum_{n_y=1}^{N_b} \sum_{n_z=1}^{N_b} . \quad (6.62)$$

En la figura 6.11 se muestra el calor específico para una estructura tridimensional de caja infinita con tres familias de planos equidistantes perpendiculares entre sí, en la figura se superponen las curvas para el caso de un número finito de planos ($5 \times 5 \times 5$, $9 \times 9 \times 9$ y $11 \times 11 \times 11$) con los planos cartesianos centrales removidos, la curva continua violeta y la punteada de color olivo muestran el caso de un número infinito de planos con uno vacante y sin planos vacantes respectivamente.

Se observa que conforme se va colocando un número mayor de planos perpendiculares a la estructura finita eventualmente tiende al caso infinito con los tres planos cartesianos vacantes, el cual presenta una discontinuidad característica de una transición de fase a una temperatura crítica 2.2221356 veces mayor que la temperatura crítica de un gas de bosones en una caja tridimensional con la misma densidad.

Observe, sin embargo, que en la estructura infinita sin vacancias (curva punteada

6. Gas de Bose en estructuras cristalinas bidimensionales y tridimensionales

de color olivo) la discontinuidad ocurre a una temperatura crítica 0.609201 veces menor que la temperatura crítica de un gas de bosones en una caja tridimensional con la misma densidad. A altas temperaturas todas las curvas tienden al valor característico del gas ideal tridimensional $3/2$.

Estructura	d	d_L	d_{KP}	T_c/T_0 perfecto	T_c/T_0 con vacancia
Libre 1D	1	1	0	0	–
Multilíneas	1	0	1	0	0.82793
Libre 2D	2	2	0	0	–
Multicintas	2	1	1	0	1.26072
Multicuadros	2	0	2	0	1.69438
Libre 3D	3	3	0	1	–
Multiplanos	3	2	1	0.87376	1.59863
Multitubos	3	1	2	0.74062	1.92620
Multicubos	3	0	3	0.60920	2.22214

Tabla 6.1: Temperaturas críticas de un gas de bosones no interactuante en diferentes estructuras d -dimensionales periódicamente perfectas y con vacancia con $a_0 = 1$.

La tabla 6.1 resume las temperaturas críticas de un gas de bosones no interactuante en diferentes estructuras d -dimensionales periódicamente perfectas y con vacancia. Dependiendo de la estructura, la vacancia puede ser un punto en la estructura unidimensional, en las estructuras bidimensionales: una línea en la estructura de multicintas, líneas perpendiculares en la estructura de multicuadros y en las estructuras tridimensionales: un plano en la estructura de multiplanos o planos perpendiculares vacantes en la de multitubos o multicubos.

En esta tabla d_L representa el número de dimensiones con espectro libre (una relación de dispersión energía como el cuadrado del momento) y d_{KP} representa el número de dimensiones ortogonales con espectro de Kronig-Penney en el límite de deltas, por lo que $d = d_L + d_{KP}$. Se observa que en el caso de una estructura perfecta periódica no hay transición de condensación a una temperatura crítica distinta de cero para dimensiones menores a iguales a dos.

En el caso de una estructura con una vacancia, se observa que conforme la estructura es más complicada, la estructura se vuelve más entretejida como en el caso bidimensional de multicintas a multicuadros o tridimensional de multiplanos a multitubos a multicubos, la temperatura crítica aumenta; en cambio la temperatura crítica disminuye para las estructuras periódicas entre más complejas estas sean para el caso tridimensional.

Asimismo, observe que todas las temperaturas críticas se encuentran normalizadas respecto a la temperatura crítica del gas libre tridimensional.

Conclusiones

En el Capítulo 2 de esta tesis hemos calculado analíticamente las propiedades termodinámicas de un gas d -dimensional de bosones de masa m y de espín cero con una relación de energía proporcional al momento elevado a un exponente $s > 0$ más una brecha energética entre la energía del estado base y la del primer estado excitado, generalizando el sistema discutido por V. Aguilera [56] al añadir la brecha energética propuesta por F. London [20].

La presencia de esta brecha energética permite alcanzar una condensación de Bose-Einstein a una temperatura crítica finita y no nula, para cualquier valor del factor positivo $d/s > 0$. Para temperaturas menores que la crítica el potencial químico toma el valor de la energía del estado base y se puede calcular de manera numérica el potencial químico para temperatura mayor que la crítica. Por otra parte, si no hay brecha energética, la temperatura crítica es diferente de cero sólo si ocurre que $d/s > 1$. Además, para estos valores $d/s > 1$ la temperatura crítica calculada sin brecha energética es menor que con brecha $\Delta > 0$, es decir, el efecto de la brecha energética es aumentar la temperatura crítica en todos los casos presentados.

En cuanto a las propiedades termodinámicas se tiene que el gran potencial y por ende la ecuación de estado (presión en función del volumen y número de partículas) es dependiente de los factores de dimensión d , exponente s y de la brecha energética Δ , sin embargo, se puede reescribir la ecuación de estado en términos de una longitud de onda térmica independiente de la brecha como lo obtuvo Z. Yan [57].

En el caso de la energía interna y su homóloga la entalpía como función de la temperatura presenta un pico abrupto en la temperatura crítica T_c , por lo que el calor específico isocórico sufre una discontinuidad en T_c , donde la magnitud del es creciente como función del factor d/s . A temperaturas muy bajas el calor específico isocórico decae exponencialmente como función de la temperatura, mientras que a temperaturas muy altas tiende al valor del gas ideal clásico d/s . Un comportamiento análogo experimenta el calor específico isobárico, el cual se puede escribir en términos del calor específico isocórico. Además, se tiene que el factor γ , la razón entre los calores específicos isobárico e isocórico toma el valor 2 a temperaturas cercanas a cero Kelvin.

Para cualquier valor de d/s la entropía crece monótonamente en función de la temperatura, pero tiene un cambio no suave en la temperatura crítica. La energía libre de Gibbs también experimenta un cambio no suave en T_c pero en cambio decrece con la temperatura, ya que esta energía libre es proporcional al potencial químico $G = \mu N$. El potencial químico μ para valores de temperatura menores que la crítica toma el valor

del estado base y decrece sin límite para temperaturas mayores que la crítica. La energía libre de Helmholtz es decreciente también, sin embargo, tiene un comportamiento suave para toda temperatura.

En el Capítulo 3 obtenemos el espectro de energía de una partícula dentro de un cristal unidimensional con una imperfección, el cual presenta una brecha energética entre el estado más bajo de energía y el primer estado excitado. Primero, se calcula el espectro de energías de una partícula en un potencial externo de Kronig Penney [46] en el límite de un peine de Dirac, es decir, en una estructura unidimensional de deltas separadas una distancia a entre sí. En el caso de un cristal perfecto, la estructura es completamente periódica y se puede aprovechar el teorema de Bloch y los métodos de matrices de transferencia y dispersión, así como el uso de la función de Green para solucionar la ecuación de Schrödinger y con ello obtener la función de onda y la relación de dispersión, que es, la energía E en función de la magnitud del cuasimomento k de Bloch. El espectro presenta una serie de bandas continuas permitidas separadas por bandas prohibidas para la energía.

Sin embargo, para encontrar la relación de dispersión de la estructura cristalina con una imperfección, que en este trabajo se modela como una delta con factor de impenetrabilidad P' diferente a la de las demás deltas del cristal con impenetrabilidad $P \neq P'$, se aprovecha tratar a la delta diferente como un dispersor que une las funciones de onda soluciones del cristal periódico perfecto antes y después del dispersor. La matriz de dispersión tiene justo una divergencia para valores complejos del cuasimomento k , los cuales forman una serie de valores discretos de la energía conocidos como estados impuros, los cuales se encuentran en las bandas prohibidas del espectro del cristal perfecto. Aunque estos estados se conocen en la literatura desde hace tiempo no se habían aprovechado en tratar de explicar el fenómeno de la condensación de Bose-Einstein.

También se encuentra una ecuación explícita para las energías de los estados impuros con dos imperfecciones separadas l deltas del cristal perfecto, de la cual se observa que, en este caso hay dos estados impuros en la banda prohibida, y además que si las dos imperfecciones están alejadas una de otra $l \rightarrow \infty$, no hay acoplamiento entre ellas y el espectro se degenera al de una sola imperfección, lo cual es físicamente esperado.

En el Capítulo 4 se calcula analíticamente el espectro de energías para una partícula en un cristal imperfecto modelado con M deltas iguales más una delta central de intensidad diferente, usando la matriz de transferencia que resulta del producto de las M matrices para cada delta. Con el fin de obtener el espectro, se aprovecha el teorema de Cayley-Hamilton para reescribir el producto de matrices iguales en términos de los polinomios de Chebychev evaluados en la traza de la matriz de transferencia y posteriormente se imponen condiciones de frontera tanto periódicas como de Dirichlet.

En el espectro se obtienen ciertos valores discretos de energía de las bandas del cristal perfecto, debido a que sólo se escogen los valores de cuasimomento k y energía E que cumplan las condiciones de frontera, además también se obtienen las energías correspondientes a los estados impuros que les corresponden cuasimomentos complejos.

La densidad de probabilidad del estado base tiene derivada discontinua en la posición de las deltas. En el caso de un cristal sin vacancias la densidad de probabilidad es periódica, sin embargo, se distorsiona en presencia de una imperfección, ya que conforme el valor de la impenetrabilidad disminuye, la partícula tiene mayor probabilidad de

encontrarse dentro de la imperfección.

En el Capítulo 5 obtenemos las propiedades termodinámicas de un gas de bosones dentro de una estructura unidimensional que simulamos aplicando a las partículas del gas un potencial externo de deltas igualmente espaciadas en una caja. Los cálculos se realizaron usando el espectro de energías de la partícula dentro del número finito de deltas con la central removida con condiciones de frontera de Dirichlet y comparándolo con el espectro de un número infinito de deltas con una de ellas removida.

Se normalizó la energía y la distancia entre las deltas con parámetros conocidos de un gas ideal tridimensional de bosones libre.

En la dependencia de la brecha energética en función de la separación de las deltas, se observa que cuando la separación entre ellas es muy grande ($a_0 = a/\lambda_0 \rightarrow \infty$) nos conduce a un espectro continuo de una partícula libre unidimensional sin brecha energética, la cual no presenta transición de fase.

En cambio se observa que, cuando la separación entre las deltas es más estrecha $a_0 \rightarrow 0$, la brecha tiende a un valor finito $\Delta/k_B T_0 \rightarrow P_0^2/4\pi$, en particular para $P_0 = 10$ el límite es $\frac{25}{\pi}$. Esto se debe a que las deltas se concentran densamente entre sí, el sistema se vuelve análogo al de un estado ligado de una delta atractiva (de intensidad negativa), obteniéndose el máximo valor de la brecha energética, numéricamente igual al valor absoluto de la energía del estado ligado.

La temperatura crítica de CBE como función de la impermeabilidad de la delta diferente y se observó que conforme el valor de la impermeabilidad es menor (o mayor) respecto a la del cristal perfecto, la temperatura crítica es cada vez más alta y cuando el cristal es perfecto la temperatura crítica es cero [33].

Con el fin de obtener las propiedades termodinámicas se toma el valor $a_0 = 1$ y se calcula numéricamente el potencial químico. Se observa que, para el caso del espectro discreto de un número finito de deltas con una imperfección, las curvas de los potenciales termodinámicos evidencian que no hay una transición de fase, pero conforme se aumenta el número de deltas, se obtiene la transición de fase a una temperatura crítica $T_c \approx 0.82$.

Los potenciales termodinámicos del cristal infinito imperfecto tienen un comportamiento muy similar al reproducido en el Capítulo 2: la energía interna y la entalpía presentan un pico, el gran potencial y la entropía presentan un cambio no suave y los calores específicos isocórico e isobárico presentan una discontinuidad en la temperatura crítica, en cambio la energía libre de Helmholtz permanece suave como función de la temperatura.

En el Capítulo 6, se obtuvieron las temperaturas críticas de un gas de bosones no interactuante en diferentes estructuras d -dimensionales: la vacancia puede ser un punto en la estructura unidimensional; en las estructuras bidimensionales puede ser una línea en la estructura de multicintas ó dos líneas perpendiculares en la estructura de multicuadros; en las estructuras tridimensionales puede ser un plano en la estructura de multiplanos o planos perpendiculares vacantes en la de tubos o cubos.

En el caso de una estructura perfecta periódica no hay transición de condensación a una temperatura crítica distinta de cero para dimensiones menores a iguales a dos, al igual que en el caso del gas de bosones sin estructura. En el caso de una estructura con una vacancia, además, conforme la estructura es más entretrejida como en el caso 2D de líneas a malla o tridimensional de planos a tubos a cubos, la temperatura crítica

aumenta; en cambio la temperatura crítica disminuye para el gas de bosones dentro de las estructuras periódicas perfectas tridimensionales entre más entretejidas sean.

En recapitulación, nuestra propuesta de la presencia de una brecha energética entre la energía más baja y la energía del primer estado excitado ocasiona una condensación en un gas ideal de bosones sin interacción en sistemas de baja dimensión, o bien, incrementa la temperatura crítica respecto al caso sin brecha. Esto se interpreta intuitivamente, debido a que las partículas deben superar la brecha de energía para pasar al nivel excitado. Esto puede ser interesante para buscar sistemas estables que alcancen condensación a temperaturas ligeramente más elevadas.

Se ha mencionado que diversos autores plantean el uso de redes ópticas periódicas para confinar gases ultrafríos, nuestra propuesta de usar imperfecciones al superponer pulsos en estas redes podría atraer nuevos efectos que pueden ser comparados con nuestros resultados ideales. De hecho, la presencia de una vacancia ocasiona que existe la densidad de probabilidad de la partícula se incremente en el lugar de la vacancia, por lo que este modelo podría aprovechar las ventajas de una red óptica y las de un potencial de atrapamiento, distinto al armónico.

Por otra parte, este texto generaliza diferentes expresiones encontradas en los cursos básicos de Mecánica Estadística, Termodinámica y Cuántica, por lo que puede servir de base para otros estudiantes interesados en estos tópicos.

Sin embargo, el modelo que proponemos considera que la partícula no se ve afectada por la presencia de las demás, lo cual sería imposible, debido a que la vacancia sirve para confinar las partículas, haciendo que su densidad aumente en esta región, ocasionando que las interacciones se vuelvan determinantes.

En el apéndice C se exponen resultados de diversos autores sobre un gas con interacciones. Aunque el objetivo de esta tesis fue resolver el caso ideal sin interacciones ocupando métodos para resolver la ecuación lineal de Schrödinger, se puede trabajar el modelo propuesto con la ecuación no lineal de Schrödinger, conocida como ecuación de Gross-Pitaevskii (GP). En este apéndice mostramos una corrección a primer orden de la temperatura crítica usando la brecha energética e interacciones en una trampa armónica y también se usa la aproximación de Thomas-Fermi. En el espectro de energía de la estructura de bandas del caso fuertemente interactuante de la ecuación no lineal (GP) aparecen “Swallowtails”, producto de la histéresis de un superfluido, cosa que en nuestros resultados sin interacciones no aparecen, pero sirve de base para un proyecto futuro.

Casos límite de gas de bosones reportados en la literatura

En esta sección del apéndice revisaremos algunos casos específicos reportados en la literatura, evaluando algunos parámetros en nuestras ecuaciones generalizadas del primer capítulo de la tesis.

A.1. Gas de bosones en un sistema $d > 0$ dimensional con relación de energía momento generalizada $\varepsilon \propto k^s$ con $s > 0$ con razón $d/s > 1$ y sin brecha energética $\Delta = 0$

Sustituyendo $\Delta = 0$ en nuestras expresiones para las diferentes propiedades termodinámicas del primer capítulo: la temperatura crítica, la fracción de condensado, la energía interna, el calor específico isocórico y su salto en la temperatura crítica T_0 para $d/s > 1$. Tales expresiones ya han sido reportadas previamente [56].

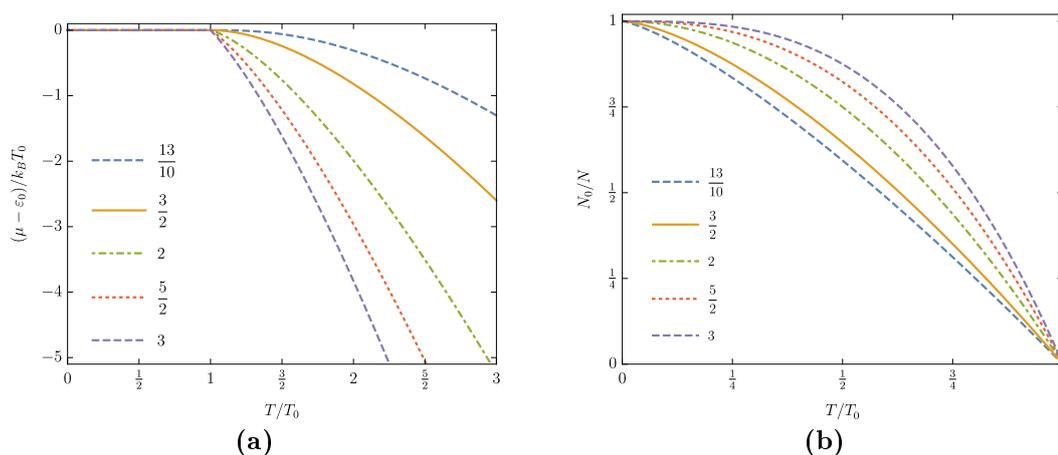


Figura A.1: (a) Potencial químico y (b) fracción del condensado como función de la temperatura normalizada T/T_0 sin brecha para $d/s = 13/10, 3/2, 2, 5/2, 3$.

Usaremos la notación T_0 para describir la temperatura crítica del caso sin brecha energética con el fin de no confundir con la temperatura T_c dependiente de la brecha energética $\Delta \neq 0$.

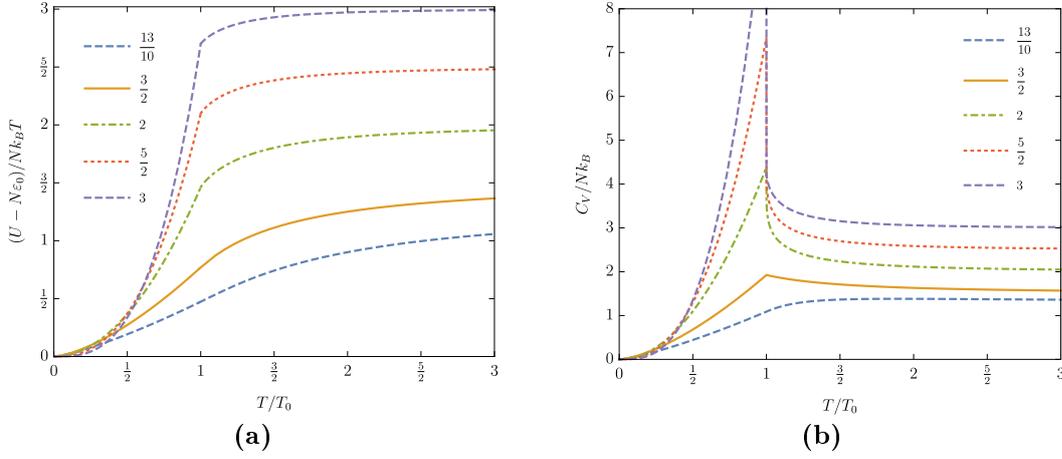


Figura A.2: (a) Energía interna y (b) calor específico isocórico como función de la temperatura normalizada T/T_0 sin brecha para $d/s = 13/10, 3/2, 2, 5/2, 3$.

Además estas expresiones generalizan las obtenidas en el capítulo 13 del libro de Pathria [2].

Temperatura crítica

De la ecuación (2.6), tenemos la expresión de la temperatura crítica

$$T_0 = \frac{c_s}{k_B} \left(\frac{s(2\pi)^d \Gamma(d/2) n}{2\pi^{d/2} \Gamma(d/s) \zeta(d/s)} \right)^{s/d}. \quad (\text{A.1})$$

Fracción de condensado

Al sustituir $\Delta = 0$ en la ecuación (2.9) se obtiene que para toda T , la fracción de condensado es

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{d/s} \frac{g_d(e^{\beta(\mu - \varepsilon_0)})}{\zeta(d/s)}, \quad (\text{A.2})$$

de donde se satisface que $\mu = \varepsilon_0$ en $T < T_0$. En la figura A.1a se observa el comportamiento no creciente del potencial químico respecto a la temperatura en el caso sin brecha, observe que la caída es más abrupta cuando d/s crece. En la figura A.1b se muestra que la fracción de condensado decrece monótonicamente de manera similar a la figura 2.3.

Energía interna

Al sustituir $\Delta = 0$ en (2.20) se obtiene que la energía interna por partícula es

$$\frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} = \frac{d(T/T_0)^{d/s}}{s} \frac{g_{d+1}(e^{\beta(\mu - \varepsilon_0)})}{\zeta(d/s)}. \quad (\text{A.3})$$

En la figura A.2a se muestra la energía interna en función de la temperatura para

A.1 Gas de bosones en un sistema $d > 0$ dimensional con relación de energía momento generalizada $\varepsilon \propto k^s$ con $s > 0$ con razón $d/s > 1$ y sin brecha energética $\Delta = 0$

distintos valores de la razón d/s , donde se observa que la función es siempre continua, a bajas temperaturas tiende al valor del estado base con un comportamiento convexo y que a altas temperaturas tiende al valor del gas ideal clásico $U \rightarrow N\varepsilon_0 + (d/s)Nk_B T$.

Calor específico isocórico

De la ecuación (2.23), tenemos para $T > T_0$ que el calor específico isocórico

$$\frac{C_V}{Nk_B} = \frac{d}{s} \left[\left(1 + \frac{d}{s}\right) \frac{g_{\frac{d}{s}+1}^{\frac{d}{s}}(e^{\beta(\mu-\varepsilon_0)})}{g_{\frac{d}{s}}^{\frac{d}{s}}(e^{\beta(\mu-\varepsilon_0)})} - \left(\frac{d}{s}\right) \frac{g_{\frac{d}{s}}^{\frac{d}{s}}(e^{\beta(\mu-\varepsilon_0)})}{g_{\frac{d}{s}-1}^{\frac{d}{s}}(e^{\beta(\mu-\varepsilon_0)})} \right] \quad (\text{A.4})$$

y para $T \leq T_0$ de la ecuación (2.24) el calor específico es

$$\frac{C_V}{Nk_B} = \frac{d}{s} (T/T_0)^{d/s} \left[\left(1 + \frac{d}{s}\right) \frac{\zeta\left(\frac{d}{s} + 1\right)}{\zeta\left(\frac{d}{s}\right)} \right] \quad (\text{A.5})$$

En la figura A.2b se muestra el comportamiento del calor específico isocórico como función de la temperatura, se observa que a temperatura menor que la crítica $T < T_0$ es creciente respecto a la temperatura, alcanzando un máximo en $T = T_0$ y para temperatura mayor que la crítica el comportamiento es decreciente.

Salto del calor específico isocórico

En el caso sin brecha, se puede observar que para $d/s \leq 2$ el calor específico isocórico es continuo en la temperatura crítica, sin embargo, como lo reportamos en el segundo capítulo en la ecuación (2.26) el salto del calor específico isocórico

$$\frac{\Delta C_V}{Nk_B} = \left(\frac{d}{s}\right)^2 \frac{\zeta\left(\frac{d}{s}\right)}{\zeta\left(\frac{d}{s}-1\right)} \text{ con } d/s > 2, \quad (\text{A.6})$$

expresión que también presenta Pethick [3]. Observe que el calor específico sin brecha A.2b no siempre presenta un salto discontinuo, a diferencia del calor con brecha $\Delta \neq 0$ de la figura 2.5 la cual siempre presenta un salto. Este comportamiento también lo muestra la figura del salto 2.6.

Calor específico isobárico

Sustituyendo en la ecuación (2.36) una brecha energética nula $\Delta = 0$, nos queda para temperatura mayor que la crítica $T > T_0$ la siguiente expresión

$$\frac{C_P}{Nk_B} = \left(1 + \frac{d}{s}\right)^2 \frac{g_{\frac{d}{s}+1}^2(e^{\beta(\mu-\varepsilon_0)}) g_{\frac{d}{s}-1}^{\frac{d}{s}}(e^{\beta(\mu-\varepsilon_0)})}{g_{\frac{d}{s}}^3(e^{\beta(\mu-\varepsilon_0)})} - \frac{d}{s} \left(1 + \frac{d}{s}\right) \frac{g_{\frac{d}{s}+1}^{\frac{d}{s}}(e^{\beta(\mu-\varepsilon_0)})}{g_{\frac{d}{s}}^{\frac{d}{s}}(e^{\beta(\mu-\varepsilon_0)})}. \quad (\text{A.7})$$

De la ecuación (2.38) el calor específico isobárico para temperaturas menores a la crítica

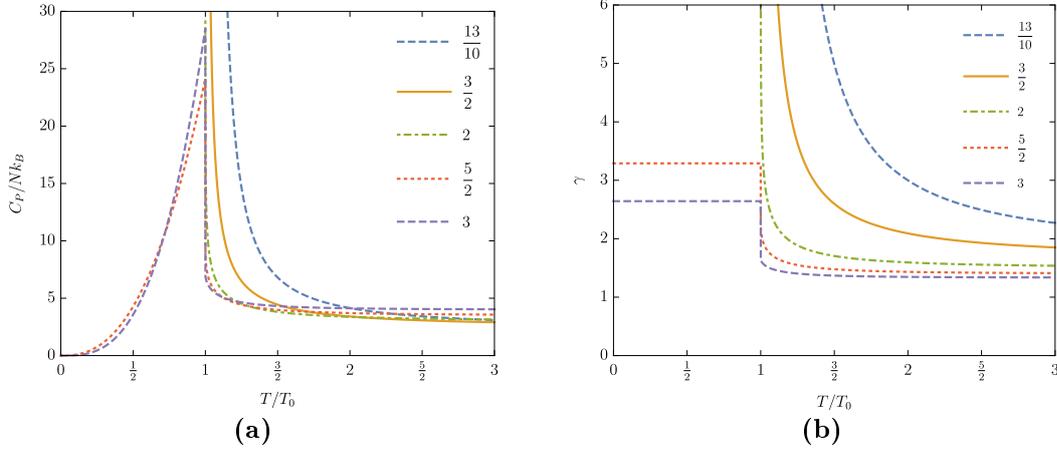


Figura A.3: (a) Calor específico isobárico y (b) factor γ como función de la temperatura normalizada T/T_0 sin brecha para $d/s = 13/10, 3/2, 2, 5/2, 3$.

$T \leq T_0$ es la misma expresión anterior en el caso $\mu = \varepsilon_0$ para $d/s > 2$ [58]. Sin embargo, esta expresión diverge para el caso $1 < d/s \leq 2$ por el factor $g_{\frac{d}{s}-1}^{\frac{d}{s}}(z \rightarrow 1)$, cabe mencionar que Pathria [2] usa esta condición de divergencia para definir un exponente crítico, pero que en el caso con brecha $\Delta \neq 0$ no existe tal divergencia debido a que el salto siempre es finito (2.39).

En la figura (A.3a) se observa el calor específico isobárico como función de la temperatura, donde se muestra que para los casos con fracción $d/s < 2$ el calor isobárico diverge para temperatura menor a la crítica, sin embargo el salto se mantiene finito para $d/s > 1$ como se muestra en 2.10.

Coefficiente $\gamma = C_P/C_V$

El coeficiente gamma C_P/C_V para $T > T_c$ se obtiene de la expresión (2.40)

$$\gamma \equiv \frac{C_P}{C_V} = 1 + \left(\frac{s}{d}\right)^2 \frac{C_V}{Nk_B} \frac{g_{\frac{d}{s}-1}^{\frac{d}{s}}(z_1)}{g_{\frac{d}{s}}^{\frac{d}{s}}(z_1)}. \quad (\text{A.8})$$

y para $T \leq T_c$ el coeficiente gamma diverge en el caso $d/s < 2$ y adquiere

$$\gamma = 1 + \frac{s}{d} \left(1 + \frac{d}{s}\right) \frac{\zeta\left(\frac{d}{s} + 1\right) \zeta\left(\frac{d}{s} - 1\right)}{\left(\zeta\left(\frac{d}{s}\right)\right)^2} \quad \text{con } \frac{d}{s} > 2 \quad (\text{A.9})$$

En la figura A.3b se muestra el factor gamma en función de la temperatura. Se observa un comportamiento diferente al del caso con brecha 2.11, debido a que para temperatura $T < T_0$ el caso sin brecha toma un valor constante o diverge, a diferencia del caso con brecha el cual crece hasta llegar a un máximo en la temperatura crítica para cualquier valor de d/s .

Entropía

A.1 Gas de bosones en un sistema $d > 0$ dimensional con relación de energía momento generalizada $\varepsilon \propto k^s$ con $s > 0$ con razón $d/s > 1$ y sin brecha energética $\Delta = 0$

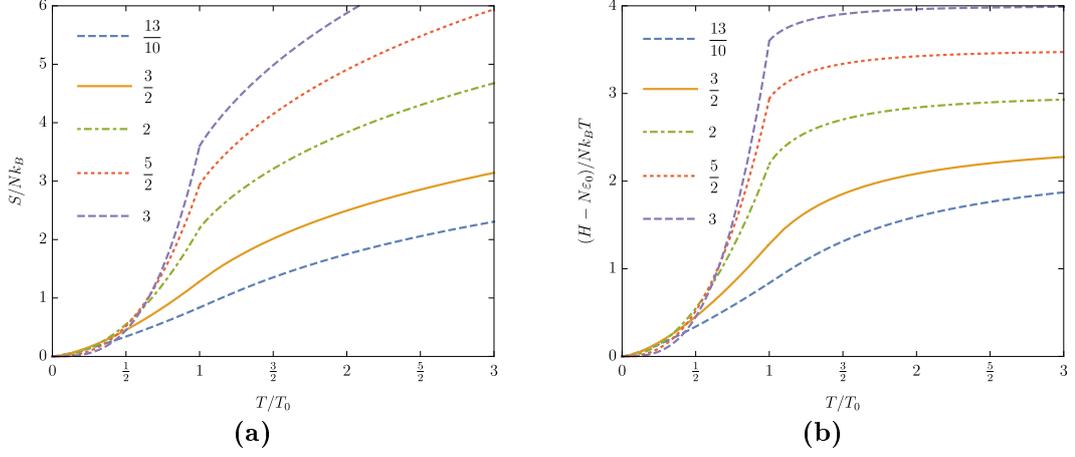


Figura A.4: (a) Calor específico isobárico y (b) factor γ como función de la temperatura normalizada T/T_0 sin brecha para $d/s = 13/10, 3/2, 2, 5/2, 3$.

De la ecuación (2.44) la entropía viene dada por

$$\frac{S}{Nk_B} = \frac{(T/T_0)^{d/s}}{\zeta(d/s)} \left[\left(\frac{d}{s} + 1 \right) g_{\frac{d}{s}+1} \left(e^{\beta(\mu-\varepsilon_0)} \right) \right] + \frac{\varepsilon_0 - \mu}{k_B T}. \quad (\text{A.10})$$

En la figura A.4a se muestra la entropía en función de la temperatura, la cual crece monótonamente y es cóncava. Este comportamiento es similar al de la figura con brecha 2.12.

Entalpía

De la ecuación (2.46) la entalpía es

$$\frac{H}{Nk_B T} = \frac{(T/T_0)^{d/s}}{\zeta(d/s)} \left[\left(\frac{d}{s} + 1 \right) g_{\frac{d}{s}+1} \left(e^{\beta(\mu-\varepsilon_0)} \right) \right] + \frac{\varepsilon_0}{k_B T}. \quad (\text{A.11})$$

En la figura A.4a se muestra que la entropía como función de la temperatura crece monótonamente. Sin embargo tiene un comportamiento distinto al de la figura 2.12, ya que esta última presenta un pico en la temperatura crítica para cualquier valor de d/s .

Energía libre de Helmholtz

De la ecuación (2.45) la energía libre de Helmholtz es

$$\frac{F}{Nk_B T} = \frac{\mu}{k_B T} - (T/T_0)^{d/s} \frac{g_{\frac{d}{s}+1} \left(e^{\beta(\mu-\varepsilon_0)} \right)}{\zeta(d/s)}. \quad (\text{A.12})$$

En la figura A.5a se muestra la energía libre de Helmholtz en función de la temperatura, la cual decrece suave, convexa y monótonamente. Este comportamiento es similar

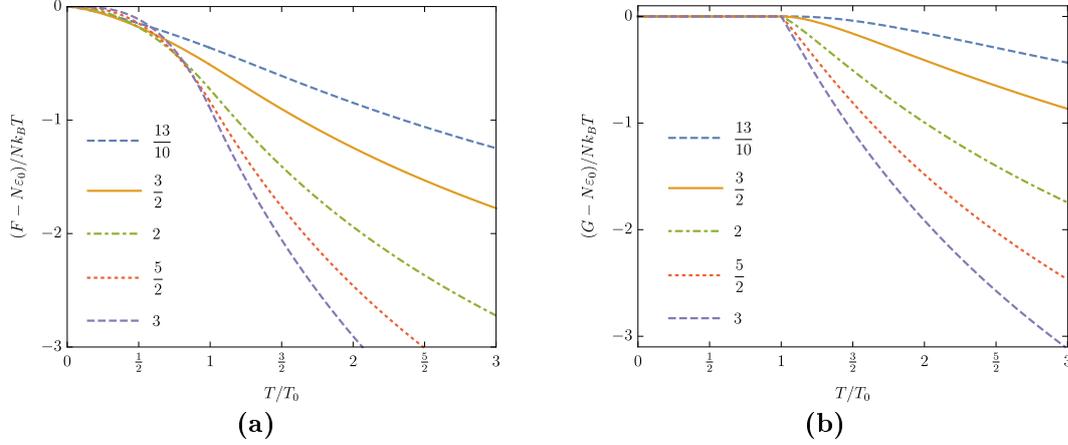


Figura A.5: (a) Energía libre de Helmholtz y (b) de Gibbs como función de la temperatura normalizada T/T_0 sin brecha para $d/s = 13/10, 3/2, 2, 5/2, 3$.

al de la figura con brecha 2.13.

Energía libre de Gibbs

La energía libre de Gibbs está dada por $G = U + PV - TS = H - TS = \mu N$. En la figura A.5b se muestra que la energía libre de Gibbs en función de la temperatura no es creciente y a pesar de ser continua, a valores d/s grandes tiene un cambio abrupto en la temperatura crítica. Este comportamiento es similar al de la figura con brecha 2.15.

A.2. Gas bosónico tridimensional ($d = 3$) con energía proporcional al cuadrado del momento $s = 2$

A.2.1. Gas ideal $d = 3$ de bosones con $s = 2$ con brecha energética

$$\Delta > 0$$

En el caso particular de sustituir los valores $s = 2$, $d = 3$ y $\Delta > 0$ nuestras expresiones reproducen los resultados de M. A. Solís [69].

Además se obtienen adicionalmente el salto del calor específico isobárico en la temperatura crítica T_c , la entropía, la entalpía y las expresiones de la energías libres de Helmholtz y Gibbs.

Temperatura crítica

De la ecuación (2.6) tenemos que

$$T_c = \frac{c_2}{k_B} \left(\frac{8\pi^{3/2}n}{g_{\frac{3}{2}} \left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T_c}} \right)} \right)^{2/3} = \frac{h^2}{2\pi m k_B} \left(\frac{N}{V g_{\frac{3}{2}} \left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T_c}} \right)} \right)^{2/3} \quad (\text{A.13})$$

donde se uso que $c_2 = h^2/2\pi mk_B$.

Fracción de condensado

De la ecuación (2.10) tenemos que la fracción de condensado es

$$\frac{N_0}{N} = 1 - (T/T_c)^{3/2} \frac{g_{\frac{3}{2}}\left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}}\right)}{g_{\frac{3}{2}}\left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T_c}}\right)}. \quad (\text{A.14})$$

Energía Interna

Usando la ecuación (2.20) obtenemos la energía interna por partícula dada por

$$\frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} = \frac{(T/T_c)^{\frac{3}{2}}}{g_{\frac{3}{2}}\left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T_c}}\right)} \left[\frac{3}{2} g_{\frac{5}{2}}(z_1) + \frac{\Delta}{k_B T} g_{\frac{3}{2}}(z_1) \right]. \quad (\text{A.15})$$

Calor específico isocórico

Para temperaturas $T > T_c$, usando (2.23) el calor específico isocórico es dado por

$$\frac{C_V}{Nk_B} = \frac{15}{4} \frac{g_{\frac{5}{2}}(z_1)}{g_{\frac{3}{2}}(z_1)} - \frac{9}{4} \frac{g_{\frac{3}{2}}(z_1)}{g_{\frac{1}{2}}(z_1)}. \quad (\text{A.16})$$

En $T \leq T_c$ usando (2.24) se cumple

$$\frac{C_V}{Nk_B} = \left(1 - \frac{N_0}{N}\right) \left[\frac{15}{4} \frac{g_{\frac{5}{2}}\left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}}\right)}{g_{\frac{3}{2}}\left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}}\right)} + \left(\frac{\Delta}{k_B T}\right)^2 \left(\frac{g_{\frac{1}{2}}\left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}}\right)}{g_{\frac{3}{2}}\left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}}\right)} \right) + 3 \frac{\Delta}{k_B T} \right]. \quad (\text{A.17})$$

Salto del calor específico isocórico

De la ecuación (2.26) tenemos que el salto del calor específico isocórico es

$$\frac{\Delta C_V}{Nk_B} = \frac{g_{\frac{3}{2}}(z_{0c})}{g_{\frac{1}{2}}(z_{0c})} \left[3 + \frac{\Delta}{k_B T_c} \frac{g_{\frac{1}{2}}(z_{0c})}{g_{\frac{3}{2}}(z_{0c})} \right]^2, \quad (\text{A.18})$$

donde $z_{0c} \equiv e^{-\frac{\Delta}{k_B T_c}}$.

A.2.2. Propuesta de London para la superfluidez del He⁴ [25].

London [20] propuso explicar el fenómeno de superfluidez del He⁴ como un condensado de Bose Einstein. Se propone una ecuación para el espectro de energía de la forma

$$\varepsilon = \begin{cases} 0, & k = l = n = 0 \\ \Delta + \frac{\hbar^2}{2m^*}(k^2 + l^2 + n^2)V^{-\frac{2}{3}}, & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (\text{A.19})$$

la cual es análoga a la relación de dispersión energía-momento (2.1). En este caso m^* es una masa “efectiva” y Δ es el ancho de la brecha energética.

Para describir estadísticamente un líquido, se debe considerar fuerzas de interacción, lo cual es una tarea difícil, por lo que se trabajan con modelos simplificados. El modelo de Guggenheim y también mencionado por Bijl [22], trabaja con un “potencial suavizado” el cual añade una excitación en forma de una brecha energética a la energía cinética análoga al espectro (A.19) de una sola partícula. La necesidad de esta brecha se justifica al considerar que el volumen de un líquido a diferencia del gas depende poco del cambio de temperatura y presión, en cambio depende fuertemente del tamaño de sus moléculas. La propuesta del modelo de un potencial suave reemplaza al potencial de fuerzas interactuantes de N moléculas por un promedio, el potencial suave, el cual sólo depende del volumen molar del fluido y que se añade a la energía cinética de excitación de cada partícula.

Los parámetros m^* y Δ son determinados usando las condiciones experimentales: la condensación de Bose Einstein ocurre en $T_c = 2.186 K$ y que la entropía en T_c coincide con el valor de la entropía en la temperatura de la transición lambda $s_\lambda = 0.375 \text{ cal/K/g}$. De forma que la temperatura crítica viene dado por la ecuación (A.13).

La masa efectiva m^* se puede escribir en términos del número de partículas N de nuestro texto por medio de

$$m^* = \rho \frac{V}{N} \quad (\text{A.20})$$

donde ρ expresa la densidad de masa.

Los valores experimentales requieren que $\Delta \approx 4k_B T_\lambda$ donde T_λ es la temperatura de la transición lambda. Entonces en una aproximación se tiene que $g_n \left(e^{-\frac{\Delta}{k_B T}} \right) \approx e^{-\frac{\Delta}{k_B T}}$.

En el caso del número de partículas para $T < T_c$ en el estado excitado de la ecuación (A.14) se obtiene

$$\frac{\rho_e}{\rho} \approx \frac{N_e}{N} = \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} e^{\frac{\Delta}{k_B T_c} - \frac{\Delta}{k_B T}}. \quad (\text{A.21})$$

Análogamente de la ecuación (A.15) se tiene que los límites de la energía interna en la temperatura crítica

$$U(T_c^-) \approx N k_B T \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \left(\frac{3}{2} + \frac{\Delta}{k_B T} \right) e^{\frac{\Delta}{k_B T_c} - \frac{\Delta}{k_B T}} \quad (\text{A.22})$$

$$U(T_c^+) \approx Nk_B T \left(\frac{3}{2} + \frac{\Delta}{k_B T} \right) \quad (\text{A.23})$$

De las ecuaciones (A.16) y (A.17) se tiene que los límites del calor específico isocórico en la temperatura crítica

$$\frac{C_V(T_c^-)}{Nk_B} \approx \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \left(\frac{15}{4} + 3 \frac{\Delta}{k_B T} + \left(\frac{\Delta}{k_B T} \right)^2 \right) e^{\frac{\Delta}{k_B T_c} - \frac{\Delta}{k_B T}} \quad (\text{A.24})$$

$$\frac{C_V(T_c^+)}{Nk_B} \approx \frac{3}{2} \quad (\text{A.25})$$

donde el salto de la discontinuidad viene dado por

$$\frac{\Delta C_V}{Nk_B} \approx \left(\frac{3}{2} + \frac{\Delta}{k_B T} \right)^2 \quad (\text{A.26})$$

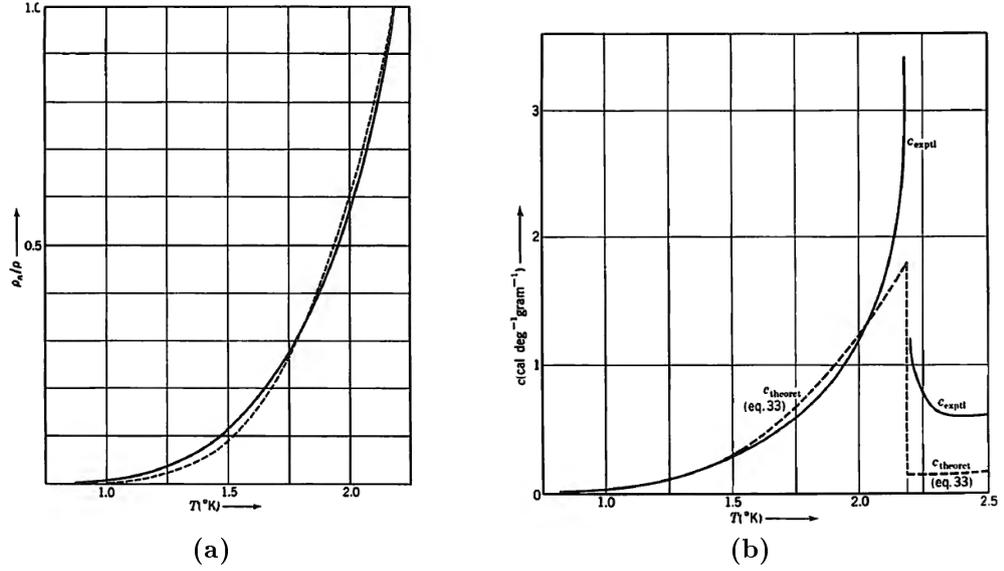


Figura A.6: (a) Concentración del fluido y (b) calor específico isocórico del He^4 . En línea punteada se muestra la curva teórica y en línea continua la curva experimental. Figura extraída [25].

Experimentalmente se tiene un ajuste a la curva de la concentración del fluido normal

$$\frac{\rho_n}{\rho} \approx 1.24 \times 10^4 T^4 + \left(\frac{T}{T_\lambda} \right)^{3/2} e^{\frac{\Delta}{k_B T_\lambda} - \frac{\Delta}{k_B T}}. \quad (\text{A.27})$$

London escoge para su ajuste los valores de la brecha y de la masa efectiva

$$\frac{\Delta}{k} = 8.8\text{K} \text{ y } m^* = 9.1m_{He} \quad (\text{A.28})$$

Mientras que para el caso del calor específico por gramo en el que se observa la transición lambda propone un ajuste

$$C_V(T_c^-) = 5.62 \times 10^3 T^3 + 0.0547 \left(\frac{T}{T_\lambda} \right)^{3/2} \left(\frac{15}{4} + 3 \frac{\Delta}{k_B T} + \left(\frac{\Delta}{k_B T} \right)^2 \right) e^{\frac{\Delta}{k_B T_\lambda} - \frac{\Delta}{k_B T}} \quad (\text{A.29})$$

$$C_V(T_c^+) = 5.62 \times 10^3 T^3 + 0.0819 \quad (\text{A.30})$$

El primer término de la concentración que depende de la potencia cuarta de la temperatura y el primer término de la capacidad calorífica proporcional a la potencia triple de la temperatura es debido al comportamiento fonónico.

Se observa que el ajuste teórico del calor específico no representa satisfactoriamente la curva experimental debido a que el salto es finito en el caso teórico. Aún así, cabe mencionar que para $T < T_\lambda$ las fórmulas son idénticas que las que propone Landau con su modelo de excitaciones elementales, ya que él asume que el espectro de sus rotones presenta una brecha. También otro aspecto a destacar es que este modelo propuesto por London, retomando las ideas de Bijl [22], es un modelo simplificado el cual suaviza las interacciones entre pares de moléculas y las reemplaza con un campo constante, de manera que aunque bastante simple, nos explica la transición lambda y el mecanismo de dos fluidos [26]. Nuestra propuesta en la tesis es crear un potencial externo que pudiera replicar en el espectro de energía la brecha propuesta por los autores mencionados.

Modelo de Kronig-Penney

Un modelo clásico para describir la estructura electrónica dentro de un cristal periódico unidimensional es el creado por R. Kronig y W.G.Penney. En este apéndice se proponen tres distintas soluciones para resolver el modelo propuesto por ambos autores.

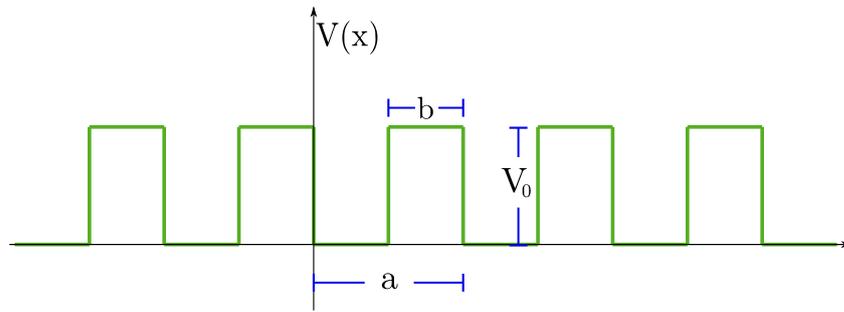


Figura B.1: Potencial de Kronig-Penney.

Considerando un potencial periódico formado por una infinidad de escalones de altura V_0 de ancho b separados una distancia a entre sí.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } na \leq x \leq (n+1)a - b \\ V_0 & \text{si } (n+1)a - b \leq x \leq (n+1)a \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

con n un número natural.

Explotaremos el uso del teorema de Bloch para resolver el problema, por lo que solo nos concentraremos en el caso del primer periodo del potencial.

Sustituimos el potencial (B.1) dentro de la ecuación de Schrödinger estacionaria siguiente

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi, \quad (\text{B.2})$$

obtenemos los siguientes casos.

Para $0 < x < (a - b)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (\text{B.3})$$

se obtiene como solución

$$\psi(x) = A_1 e^{i\kappa x} + B_1 e^{-i\kappa x} \quad (\text{B.4})$$

donde

$$\kappa^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (\text{B.5})$$

que es la norma al cuadrado del vector de onda asociado a la energía.

En cambio para $-b < x < 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - V_0) \psi \quad (\text{B.6})$$

se obtiene como solución

$$\psi(x) = C_1 e^{iqx} + D_1 e^{-iqx} \quad (\text{B.7})$$

donde

$$q^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \quad (\text{B.8})$$

De acuerdo con el teorema de Bloch, la solución a la ecuación de Schrödinger (B.2) de un potencial periódico se puede escribir como el producto de una función de onda por una función periodica del mismo periodo que el potencial dado.

En nuestro caso tenemos que la función de onda se puede escribir como

Para $0 < x < a - b$

$$\psi(x) = A_1 e^{i\kappa x} + B_1 e^{-i\kappa x} = e^{ikx} u(x) \quad (\text{B.9})$$

donde

$$u(x) = A_1 e^{i(\kappa-k)x} + B_1 e^{-i(\kappa+k)x} \quad (\text{B.10})$$

De manera análoga para $-b < x < 0$ con función de onda $\psi(x) = e^{ikx} u(x)$ se tiene que

$$u(x) = C_1 e^{i(q-k)x} + D_1 e^{-i(q+k)x} \quad (\text{B.11})$$

Ahora las condiciones de continuidad de la función de onda $\psi(x)$ y su derivada respecto a la posición $\psi(x) \equiv \frac{d\psi}{dx}$ en el inicio de la barrera satisfacen

$$C_1 + D_1 = \psi(0^-) = \psi(0^+) = A_1 + B_1 \quad (\text{B.12})$$

$$iq(C_1 - D_1) = \psi'(0^-) = \psi'(0^+) = i\kappa(A_1 - B_1) \quad (\text{B.13})$$

y por el teorema de Bloch, se tiene la periodicidad de la función $u(x)$ y su derivada $u'(x) \equiv \frac{du}{dx}$, por lo que

$$\begin{aligned} C_1 e^{-i(q-k)b} + D_1 e^{i(q+k)b} &= u(-b) = u(a-b) \\ &= A_1 e^{i(\kappa-k)(a-b)} + B_1 e^{-i(\kappa+k)(a-b)} \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

$$\begin{aligned}
i(q-k)C_1e^{-i(q-k)b} - i(q+k)D_1e^{i(q+k)b} &= u'(-b) = u'(a-b) \\
&= i(\kappa-k)A_1e^{i(\kappa-k)(a-b)} - i(\kappa+k)B_1e^{-i(\kappa+k)(a-b)}
\end{aligned} \tag{B.15}$$

La solución no trivial del sistema de cuatro ecuaciones (B.12), (B.13), (B.14) y (B.15) satisface la relación de dispersión

$$\cos(ka) = \cos(qb)\cos(\kappa(a-b)) - \frac{\kappa^2 + q^2}{2\kappa q} \sin(qb)\sin(\kappa(a-b)) \tag{B.16}$$

En el caso particular del límite de deltas de Dirac, las barreras se hacen muy altas comparado a su ancho, es decir

$$b \rightarrow 0, V_0 \rightarrow \infty \tag{B.17}$$

tal que V_0b permanezca constante. Conservando solo términos a primer orden

$$\sin(qb) \rightarrow qb \quad \cos(\kappa b) \rightarrow 1 \tag{B.18}$$

La expresión queda de la manera más compacta

$$\cos(ka) = \cos(\kappa a) + P \frac{\sin(\kappa a)}{\kappa a} \tag{B.19}$$

con

$$P = \frac{mV_0ba}{\hbar^2} \tag{B.20}$$

que es la solución de un potencial tipo peine de Dirac.

Modelos de un gas de bosones con interacciones

En esta sección del apéndice se calcula la fracción del condensado y la temperatura crítica de un gas de bosones débilmente interactuante confinado en una trampa descrita por un potencial genérico de ley de potencia.

Aunque el modelo que se utilizó durante todo el trabajo anterior, no es un potencial de atrapamiento de potencia, de acuerdo con el capítulo 4, la densidad de partículas se localiza fuertemente en la vacancia, por lo que se puede tratar el potencial de la vacancia como un potencial de confinamiento, que en una analogía se puede tratar como un potencial que obedece un potencial radial que va como ley de potencia.

C.1. Espectro semiclásico para gas diluido

En una primera aproximación, a temperaturas bajas las interacciones se modelan por una interacción de contacto $U_0\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Esto se justifica debido a que muy bajas temperaturas la energía cinética y la densidad del gas son muy bajas.

El gas diluido puede entonces ser descrito por medio de la ecuación de Gross-Pitaevskii [70] d -dimensional para un potencial de simetría radial

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,t) + V(r)\psi(r,t) + U_0|\psi(r,t)|^2\psi(r,t) \quad (\text{C.1})$$

donde m es la masa de los átomos y $\psi(r,t)$ describe la función de onda dependiente del tiempo t y la posición radial r . Esta función de onda satisface la condición de normalización

$$N = \int dv|\psi|^2. \quad (\text{C.2})$$

El término U_0 representa la interacción entre las partículas y se puede escribir en términos de la longitud de dispersión a_s de onda s

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}, \quad (\text{C.3})$$

donde se supone que la longitud de dispersión a_s es pequeña en comparación a la distancia media entre los átomos. Si la longitud de dispersión es positiva la interacción es repulsiva y si es negativa es atractiva. Para átomos, la longitud de dispersión es del orden de unos cuantos radios de Bohr, pero en algunos isotopos es mayor.

En esta sección nos interesa analizar el caso de interacción repulsiva con el fin de analizar la competencia con el término de la brecha discutido en el segundo capítulo.

Con el fin de discutir con resultados previos se propone un potencial radial dado por

$$V(r) = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \left(\frac{r}{r_0} \right)^n, \quad (\text{C.4})$$

donde $r_0 = \sqrt{\hbar/m\omega_0}$ es una longitud característica de normalización de la trampa. Este potencial fue trabajado por Castellanos [71].

En la aproximación semiclásica, se interpreta al cuadrado de la función de onda con la densidad espacial de partículas $|\psi(r)|^2 = n(r)$ de un gas de bosones diluido que obedece un espectro tipo Hartree-Fock

$$\varepsilon(r, p) = \varepsilon_0 + \frac{p^2}{2m} + \Delta + V(r) + 2U_0 n(r) \quad (\text{C.5})$$

el cual es análoga al caso sin interacción dado por la relación de energía-momento (2.1) para el caso $s = 2$.

C.2. Distribución de Bose radial

En este caso la distribución estadística de los bosones es una función sobre el espacio fase $2d$ -dimensional

$$n(r, p) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon(r, p) - \mu)} - 1} \quad (\text{C.6})$$

donde la condición de normalización (C.2) nos exige que el número de partículas sea

$$N = \int d^d r n(r) \quad (\text{C.7})$$

donde a su vez $n(r)$ representa la distribución radial, que se obtiene al integrar sobre el momento la distribución (C.6)

$$n(r) = \int d^d p n(r, p) = \lambda^{-d} g_{d/2} (e^{\beta(\mu - \varepsilon_0 - \Delta - V(r) - 2U_0 n(r))}) = \lambda^{-d} g_{d/2} (z_1 e^{-\beta(V(r) + 2U_0 n(r))}) \quad (\text{C.8})$$

donde λ es la longitud de onda térmica generalizada dada por (2.17). La fugacidad z_1 ya se había definido en el segundo capítulo como

$$z_1 \equiv e^{\beta(\mu - \varepsilon_0 - \Delta)} \quad (\text{C.9})$$

Observe que la expresión de la distribución radial (C.8) generaliza la ecuación de número (2.5) del Capítulo 2.

Si la interacción es débil, se puede desarrollar la expresión a primer orden en U_0 , dando por resultado

$$n(r) = n_0(r) \left(1 - \frac{2U_0}{kT} \lambda^{-d} g_{\frac{d}{2}-1}^d(z_1 e^{-\beta V(r)}) \right) \quad (\text{C.10})$$

donde $n_0(r)$ es la distribución radial sin interacción ($U_0 = 0$),

$$n_0(r) = \lambda^{-d} g_{\frac{d}{2}}^d(z_1 e^{-\beta V(r)}) \quad (\text{C.11})$$

Al integrar la condición de normalización (C.7) se obtiene

$$N = N_0 + \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_0} \right)^{\frac{d}{2} + \frac{d}{n}} \frac{2^{\frac{d}{n}} \Gamma\left(\frac{d}{n} + 1\right)}{2^{\frac{d}{2}} \Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} g_{\frac{d}{2} + \frac{d}{n}}^d(z_1) \left[1 - 2 \frac{U_0}{k_B T} \frac{1}{\lambda^d} \frac{G_{\frac{d}{2}, \frac{d}{2}-1, \frac{d}{n}}^d(z_1)}{g_{\frac{d}{2} + \frac{d}{n}}^d(z_1)} \right] \quad (\text{C.12})$$

donde la función $G_{l,m,p}$ se expresa por medio de la serie

$$G_{l,m,p} = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^{i+j}}{i^l j^m (i+j)^p}. \quad (\text{C.13})$$

La temperatura crítica de un gas de bosones T_0 en el caso $d/2 > 1$ sin interacción entre las partículas y sin término de brecha, se obtiene de la ecuación de número (C.12), obteniendo

$$k_B T_0 = \hbar \omega_0 \left(\frac{2^{\frac{d}{2}} \Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right) N}{2^{\frac{d}{n}} \Gamma\left(\frac{d}{n} + 1\right) \zeta\left(\frac{d}{2} + \frac{d}{n}\right)} \right)^{\frac{n}{d} \frac{2}{n+2}}. \quad (\text{C.14})$$

esta expresión para la temperatura crítica y la fracción de condensado débilmente interactuante (C.12) generalizan las expresiones (24) y (25) de Bagnato [44].

La expresión de la presión es

$$P = \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_0} \right)^{\frac{d}{2} + \frac{d}{n}} \frac{2^{\frac{d}{n}} \Gamma\left(\frac{d}{n} + 1\right)}{2^{\frac{d}{2}} \Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} g_{\frac{d}{2} + \frac{d}{n} + 1}^d(z_1) \left[1 - 2 \frac{U_0}{k_B T} \frac{1}{\lambda^d} \frac{G_{\frac{d}{2}+1, \frac{d}{2}, \frac{d}{n}}^d(z_1)}{g_{\frac{d}{2} + \frac{d}{n} + 1}^d(z_1)} \right] \quad (\text{C.15})$$

C.3. Corrimiento de la temperatura crítica

Para obtener el corrimiento de la temperatura crítica debido a la interacción débil entre los átomos, seguimos el método propuesto por Salasnich [72], al hacer un desarrollo de Taylor a primer orden en la expresión de número (C.12) alrededor de $\mu = \varepsilon_0$,

$T_c = T_0$, $\Delta = 0$ y $U_0 = 0$:

$$N(T, \mu, \Delta, U_0) \approx N(T_0, \varepsilon_0, 0, 0) + \frac{\partial N}{\partial T}(T_0, \varepsilon_0, 0, 0)(T - T_0) + \frac{\partial N}{\partial \mu}(T_0, \varepsilon_0, 0, 0)(\mu - \varepsilon_0) + \frac{\partial N}{\partial \Delta}(T_0, \varepsilon_0, 0, 0)\Delta + \frac{\partial N}{\partial U_0}(T_0, \varepsilon_0, 0, 0)U_0, \quad (\text{C.16})$$

después de hacer el álgebra correspondiente de la serie de Taylor (C.16), tenemos que el corrimiento de la temperatura crítica (en $T = T_c$) viene dado por la expresión

$$\frac{T_c - T_0}{T_0} = -\frac{1}{k_B T_0} \frac{1}{\left(\frac{d}{2} + \frac{d}{n}\right) \zeta\left(\frac{d}{2} + \frac{d}{n}\right)} \left[\zeta\left(\frac{d}{2} + \frac{d}{n} - 1\right) (\mu - \varepsilon_0 - \Delta) - \frac{2U_0}{\lambda_0^d} G_{\frac{d}{2}, \frac{d}{2}-1, \frac{d}{n}}(1) \right]. \quad (\text{C.17})$$

Usando la condición de gas débilmente interactuante, tenemos que a temperatura crítica de condensación T_c y para un número grande de número de partículas N , se puede usar la aproximación de campo medio para el potencial químico de la forma

$$\mu_c \approx \varepsilon_0 + 2U_0 n_0(r=0) \quad (\text{C.18})$$

donde $n_0(r=0, \Delta=0) \approx \lambda_0^{-d} \zeta\left(\frac{d}{2}\right)$ en un primer orden de aproximación de acuerdo con (C.11) y sustituyendo en (C.17), nos da la expresión para el corrimiento de la temperatura crítica

$$\frac{T_c - T_0}{T_0} = \frac{\Delta}{\hbar\omega_0} \Lambda_\Delta N^{-\frac{n}{d} \frac{2}{n+2}} - \frac{2U_0}{\hbar\omega_0} \left(\frac{m\omega_0}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{d}{2}} \Lambda_{U_0} N^{\frac{n}{d} \frac{d-2}{n+2}} \quad (\text{C.19})$$

donde $r_0 = \sqrt{\hbar/m\omega_0}$, el coeficiente Λ_Δ es dependiente de los parámetros d y n se define como

$$\Lambda_\Delta(d, n) \equiv \frac{\zeta\left(\frac{d}{2} + \frac{d}{n} - 1\right)}{\left(\frac{d}{2} + \frac{d}{n}\right) \zeta\left(\frac{d}{2} + \frac{d}{n}\right)} \left(\frac{2^{\frac{d}{2}} \Gamma\left(\frac{d}{n} + 1\right) \zeta\left(\frac{d}{2} + \frac{d}{n}\right)}{2^{\frac{d}{2}} \Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} \right)^{\frac{n}{d} \frac{2}{n+2}} \quad (\text{C.20})$$

y análogamente el coeficiente Λ_{U_0} es

$$\Lambda_{U_0}(d, n) \equiv \frac{\zeta\left(\frac{d}{2}\right) \zeta\left(\frac{d}{2} + \frac{d}{n} - 1\right) - G_{\frac{d}{2}, \frac{d}{2}-1, \frac{d}{n}}(1)}{\left(\frac{d}{2} + \frac{d}{n}\right) \zeta\left(\frac{d}{2} + \frac{d}{n}\right)} \left(\frac{2^{\frac{d}{2}} \Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)}{2^{\frac{d}{n}} \Gamma\left(\frac{d}{n} + 1\right) \zeta\left(\frac{d}{2} + \frac{d}{n}\right)} \right)^{\frac{n}{d} \frac{d-2}{n+2}}. \quad (\text{C.21})$$

De esta expresión se observa que la corrección de la brecha energética *compite* con el término de la interacción repulsiva ($U_0 > 0$), es decir dependiendo del valor de la brecha energética Δ , del exponente del potencial radial n , del parámetro de interacción U_0 y de las fracciones $d/2$ y d/n , puede que la temperatura crítica sea mayor o menor

que la del caso ideal, aún con interacciones repulsivas.

En el caso en que $d/2 > 1$ y $d/n > 1$ entonces

$$\begin{aligned} \frac{T_c - T_0}{T_0} &= \frac{\Delta}{\hbar\omega_0} \Lambda_\Delta N^{-\frac{n}{d} \frac{2}{n+2}} - \frac{2U_0}{\hbar\omega_0} \frac{2^{\frac{d}{2}}}{r_0^d} \Lambda_{U_0} N^{\frac{n}{d} \frac{d-2}{n+2}} \\ &= \Lambda_\Delta N^{-\frac{n}{d} \frac{2}{n+2}} \left(\frac{\Delta}{\hbar\omega_0} - \frac{2U_0}{\hbar\omega_0} \left(\frac{m\omega_0}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{d}{2}} \frac{\Lambda_{U_0}}{\Lambda_\Delta} N^{\frac{n}{n+2}} \right) \end{aligned} \quad (\text{C.22})$$

observe que si el número N es muy grande, el término acompañado de la interacción se vuelve importante y predomina el término de la brecha energética, haciendo que la temperatura crítica sea menor que la del caso ideal $T_c < T_0$, el corrimiento es negativo como lo indica Castellanos [71]. Aún así puede que el término de la brecha haga una ligera corrección, en el caso en que la interacción sea extremadamente pequeña, lo que hace que la temperatura crítica con brecha sea mayor que la del caso ideal.

En particular para el caso tridimensional $d = 3$ con energía proporcional al cuadrado del momento $s = 2$, $c_2 = \hbar^2/2m$, el corrimiento se convierte

$$\frac{T_c - T_0}{T_0} = \frac{\Delta}{\hbar\omega_0} \Lambda_\Delta N^{-\frac{2n}{3(n+2)}} - \frac{a_s}{r_0} \frac{2^{3/2}}{\pi^{1/2}} \Lambda_{U_0} N^{\frac{n}{3(n+2)}} \quad (\text{C.23})$$

donde $a = \frac{mU_0}{4\pi\hbar^2}$ es la longitud de dispersión de onda s y $r_0 \equiv \sqrt{\hbar/m\omega_0}$.

En el caso más usual, la ley de potencias es cuadrática $n = 2$, representando un oscilador armónico

$$\frac{T_c - T_0}{T_0} = \frac{\Delta}{\hbar\omega_0} \Lambda_\Delta N^{-\frac{1}{3}} - \frac{a_s}{r_0} \frac{2^{3/2}}{\pi^{1/2}} \Lambda_{U_0} N^{\frac{1}{6}} \quad (\text{C.24})$$

con $\Lambda_\Delta \approx 0.485$ y $(2^{3/2}/\pi^{1/2})\Lambda_{U_0} \approx 1.33$.

Vemos que para un número muy grande de partículas, el término que contiene la brecha no contrarresta significativamente el término con interacción. En el caso de que la brecha no estuviera presente, el término de interacción repulsiva ($U_0 > 0$) decrece la temperatura crítica respecto al caso ideal, con la brecha energética apenas puede competir para aumentar ligeramente la temperatura crítica

Para hacer un cálculo numérico simple, proponemos el caso del condensado repulsivo ^{87}Rb con parámetros $a_s = 109a_0 \approx 5.8$ nm, $\omega = 674.2$ Hz, $r_0 = 1.04$ μm y $N \approx 10^5$ [73], el error de la temperatura crítica (C.24) da un error relativo de -5% , en cambio si se propone que la brecha sea en el máximo de los casos $\Delta \approx \hbar\omega_0$, el error aumenta apenas significativamente a -4% .

El caso sin brecha ha sido estudiado previamente, de hecho Pethick p.294 [3] discute que las interacciones repulsivas logran reducir la temperatura de transición como consecuencia de que ellas bajan la densidad central de la nube, como se muestra en la ecuación (C.12). Asimismo, Smith hace mediciones de precisión para obtener las desviaciones de la temperatura crítica en trampas armónicas [74].

C.4. Aproximación de Thomas Fermi

Para nubes grandes se puede obtener una expresión analítica de la energía y del potencial químico al despreciar la energía cinética de Gross-Pitaevskii (C.1), a esto se le conoce como aproximación de Thomas Fermi. Por simplicidad tomaremos que la energía del estado base es cero $\varepsilon_0 = 0$.

$$[\Delta + V(\mathbf{r}) + U_0|\psi(\mathbf{r})|^2] \psi(\mathbf{r}) = \mu\psi(\mathbf{r}) \quad (\text{C.25})$$

donde μ es el potencial químico. Esto nos da una solución para la densidad radial

$$n(r) = |\psi(\mathbf{r})|^2 = (\mu - \Delta - V(\mathbf{r})) / U_0 \quad (\text{C.26})$$

para la región espacial donde $V(\mathbf{r}) \leq \mu - \Delta$ y $\psi(\mathbf{r}) = 0$ si no se cumple la condición. Por simplicidad, para comparar con la literatura, se propone el potencial de un oscilador armónico tridimensional anisotrópico con una brecha

$$V(\mathbf{r}) = \frac{m}{2} (\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2). \quad (\text{C.27})$$

Introducimos la longitud característica y la frecuencia promedio geométrica

$$r_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\bar{\omega}}} \quad \text{con} \quad \bar{\omega} = (\omega_1\omega_2\omega_3)^{1/3}. \quad (\text{C.28})$$

En esta aproximación la región espacial de la nube es un elipsoide de semiejes

$$R_i^2 = \frac{2(\mu - \Delta)}{m\omega_i^2} \quad \text{con} \quad i = 1, 2, 3, \quad (\text{C.29})$$

donde se observa que el efecto aparente de esta brecha energética es disminuir la región espacial de la nube. Observe, sin embargo, que en la aproximación TF el término de la brecha también debería ser despreciable respecto a la energía potencial y el potencial químico.

El número de partículas se puede obtener con la ecuación de normalización (C.2), obteniéndose

$$N = \frac{8\pi}{15} \left(\frac{2}{m\bar{\omega}^2} \right)^{3/2} \frac{(\mu - \Delta)^{5/2}}{U_0} \approx \frac{8\pi}{15} \left(\frac{2}{m\bar{\omega}^2} \right)^{3/2} \frac{\mu^{5/2}}{U_0}, \quad (\text{C.30})$$

de la cual se puede obtener el potencial químico

$$\mu \approx \frac{\hbar\bar{\omega}}{2} \left(15N \frac{a_s}{r_0} \right)^{2/5} \quad (\text{C.31})$$

donde a es la longitud de dispersión (C.3). Como el cambio de la energía interna respecto

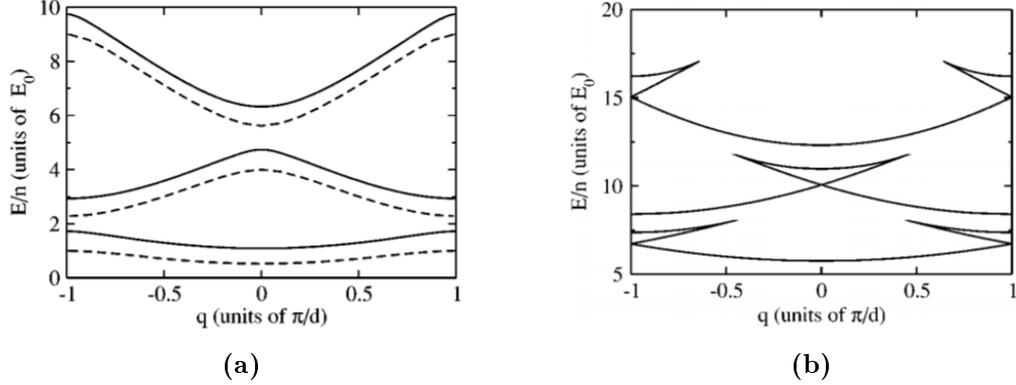


Figura C.1: Estructura de bandas para los casos de interacción repulsiva: (a) débilmente interactuante $U_0 n = E_0$ y (b) fuertemente interactuante $U_0 n = 10E_0$. Las líneas punteadas muestran la estructura de bandas de KP. [12]

al número de partículas $\mu = \partial U / \partial N$ es el potencial químico entonces

$$\frac{U}{N} \approx \frac{5}{7} \frac{\hbar \bar{\omega}}{2} \left(15N \frac{a_s}{r_0} \right)^{2/5}. \quad (\text{C.32})$$

Por el teorema del virial [75] se tiene que la energía de interacción E_{int} en términos de la energía potencial es $E_{pot} = \frac{3}{2} E_{int}$, además la energía total U en la aproximación TF donde la energía cinética es despreciable es entonces $U \approx E_{pot} + E_{int} = \frac{5}{2} E_{int}$.

Experimentalmente se ocupan dos parámetros, uno extensivo conocido como el parámetro global de volumen y otro intensivo de presión

$$\mathcal{V} = \frac{1}{\bar{\omega}^3} \quad \Pi = \frac{E_{int}}{3\mathcal{V}} \quad (\text{C.33})$$

donde ocupando la aproximación de la energía interna (C.32) se puede obtener

$$\Pi = \frac{m}{21} \left(\frac{15\hbar^2 a}{m^2} \right)^{2/5} \left(\frac{N}{\mathcal{V}} \right)^{7/5}, \quad (\text{C.34})$$

esta ecuación en el límite de temperatura cero reportada por Castilho y colaboradores [76].

C.5. Ecuación de Gross Pitaevskii con potencial de Kronig Penney

En esta última sección discutimos los resultados de los autores Seaman et al. [12] y Danshita [13], los cuales reportan haber resuelto la ecuación de Gross Pitaevskii (GP) usando un potencial de Kronig Penney. Esta sección no es de nuestra autoría,

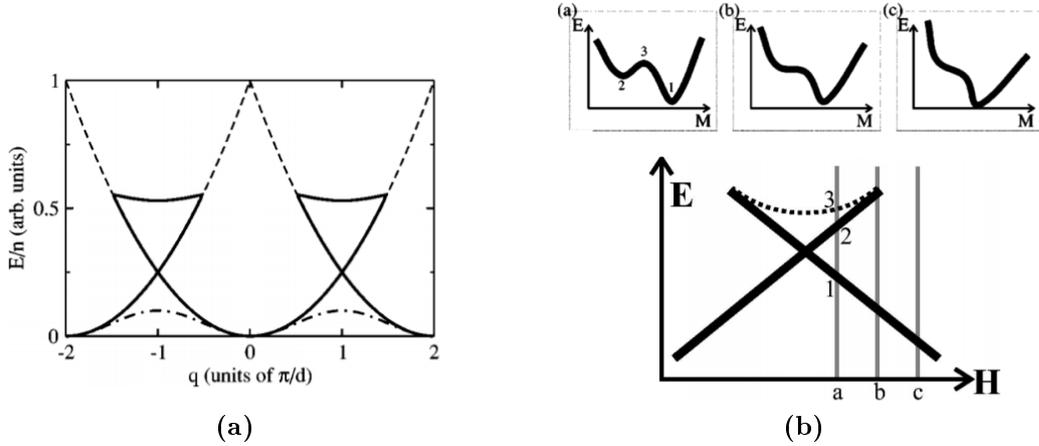


Figura C.2: (a) Energía en función del cuasimomento para: (en línea punteada) un sistema libre no interactuante, (en línea punto- raya) un sistema periódico no interactuante y (en línea sólida) un sistema periódico fuertemente interactuante. (b) Analogía magnética que explica la optimización de la energía y su relación con la “Swallowtail”.

pero consideramos que sus resultados pueden servir de base para un proyecto futuro, generalizando estos resultados al introducir una imperfección en el potencial KP. Para mantener la discusión breve, sólo mencionaré el caso de interacciones repulsivas.

De acuerdo con B. Seaman [12], realizando las normalizaciones $E_0 = \hbar^2/2md^2$ y d como parámetro de red (en lugar de a que se usa en este escrito), obtiene que las interacciones deforman el espectro usual de Kronig Penney.

En la figura C.1a se expone la gráfica de la estructura de bandas en el caso débilmente interactuante, se observa que las bandas son ligeramente desplazadas hacia arriba debido a la interacción repulsiva.

Sin embargo cuando la interacción es más fuerte, la estructura comienza a formar ciclos en forma de cola de golondrina “Swallowtails” en los bordes de las zonas de Brillouin (PZB) en las bandas impares y en el centro de la PZB para las bandas pares.

La presencia de estas colas se debe al comportamiento histórico de un condensado superfluido. Para un sistema libre no interactuante la energía es cuadrática con el momento como se muestra en línea punteada en la figura C.2a.

En este caso libre, como el sistema no cambia mediante una traslación de 2π en el momento, la dispersión cuadrática se repite en cada múltiplo entero de 2π . Cuando se tiene un potencial periódico, por el teorema de Bloch, la energía muestra bandas oscilantes en función del momento al resolver la ecuación de Schrödinger lineal B.2, como lo muestra la curva punto- raya de la figura C.2a.

Sin embargo, un condensado interactuante, es un superfluido que apantalla el potencial periódico y su banda de energía será similar al de partícula libre, hasta un momento crítico, determinado por la velocidad del sonido promedio. Cuando la velocidad del fluido excede esta velocidad crítica, se pierde la habilidad de apantallar la red, se observa que tras cruzar la PZB, existen estados que tienen el mismo cuasimomento del cristal pero diferentes valores de energía, formándose un ciclo “Swallowtail”.

Para entender esto Muller [77] hace una analogía con un sistema magnético. En

la figura C.2b se observan tres gráficas superiores de la energía en función de la magnetización M : en el caso (a) se tienen dos mínimos locales y un máximo local, (b) se tienen un punto de inflexión y un mínimo, y en (c) un mínimo absoluto, donde el campo magnético H controla el paso entre cada caso. En la figura C.2b inferior se muestra la relación de la energía con el campo, en el que se observa el “Swallowtail”, donde para cada valor del campo se pueden tener un único, dos o tres valores de energía. Observe de la figura energía-magnetización, la presencia de dos mínimos requiere la existencia de un máximo, esto ocasiona que se forme una curva en forma de asiento, la existencia de múltiples mínimos indica histéresis en el sistema.

Volviendo a nuestro caso de red periódica, los dos mínimos en la energía corresponden a que el fluido se mueve hacia la izquierda o derecha, pero corresponden al mismo valor de cuasimomento.

Esto que se acaba de mencionar ha sido trabajado en una red periódica sin imperfecciones. Como perspectiva al futuro, se puede proponer resolver estos sistemas fuertemente interactuantes y analizar que sucede con las colas “Swallowtails” en presencia de imperfecciones.

También queda la pregunta, sobre que pasa con los estados impuros en este caso interactuante, sin embargo, en este apéndice se han propuesto las bases para continuar en esa dirección.

Es importante aclarar que el objetivo de esta tesis fue resolver el caso ideal sin interacciones ocupando métodos para resolver la ecuación **lineal** de Schrödinger, por lo que estos métodos no serían aplicables en el caso no lineal GP. Aún así, se pretende que este trabajo sirva como teoría base para futuros proyectos.

Gracias.

Referencias

- [1] A. Einstein, “Quantentheorie des einatomigen idealen gases”, Akademie-Vorträge, 237-244 (1924). [1](#)
- [2] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics* (Elsevier, Oxford, 1996). [1](#), [9](#), [10](#), [67](#), [118](#), [120](#)
- [3] C. J. Pethick y H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* (Cambridge University Press, UK, 2002). [1](#), [17](#), [18](#), [119](#), [135](#)
- [4] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, E. A. Cornell, “Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor” *Science* **269**, 198 (1995). [1](#)
- [5] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, M. J. Van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.*, **75**, 3969 (1995). [1](#)
- [6] J. M. McGuirk, G. T. Foster, J. B. Fixler, M. J. Snadden y M. A. Kasevich, “Sensitive absolute-gravity gradiometry using atom interferometry” *Phys. Rev. A* **65**, 033608 (2002). [1](#)
- [7] P. Asenbaum, C. Overstreet, T. Kovachy, D. D. Brown, J. M. Hogan y M. A. Kasevich, “Phase Shift in an Atom Interferometer due to Spacetime Curvature across its Wave Function” *Phys. Rev. Lett.* **118**, 183602 (2017). [1](#)
- [8] C. Gross, T. Zibold, E. Nicklas, J. Estève y M. K. Oberthaler, “Nonlinear atom interferometer surpasses classical precision limit”, *Nature* **464**, 1165–1169 (2010). [2](#)
- [9] I. Bloch, “Ultracold quantum gases in optical lattices”, *Nature Physics* **1**, 22-30 (2005). [2](#)
- [10] M. Greiner, I. Bloch, O. Mandel, T.W. Hänsch y T. Esslinger, “Bose–Einstein condensates in 1d- and 2d optical lattices”, *Applied Physics B* **73**, 769-772 (2014). [2](#), [5](#), [29](#)
- [11] L. Fallani, L. De Sarlo, J. E. Lye, M. Modugno, R. Saers, C. Fort y M. Inguscio, “Observation of Dynamical Instability for a Bose-Einstein Condensate in a Moving 1D Optical Lattice”, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 140406 (2004). [2](#), [29](#), [51](#)
- [12] B. T. Seaman, L. D. Carr y M. J. Holland, “Nonlinear band structure in Bose-Einstein condensates: Nonlinear Schrödinger equation with a Kronig-Penney potential”, *Phys. Rev. A* **71**, 033622 (2005). [xxvii](#), [2](#), [29](#), [137](#), [138](#)

REFERENCIAS

- [13] I. Danshita y S. Tsuchiya, “Stability of Bose-Einstein condensates in a Kronig-Penney potential”, *Phys. Rev. A* **75**, 033612 (2007). [2](#), [29](#), [137](#)
- [14] E. Castellanos, C. Escamilla-Rivera, A. Macias y D. Nuñez, “Scalar field as a Bose-Einstein condensate?” *Journal of Cosmology and Astroparticle Physics* **11**, 034 (2014). [2](#)
- [15] W. H. Keesom y A. P. Keesom, “New measurements on the specific heat of liquid helium”, *Physica* **2**, 557–574 (1935). [2](#)
- [16] H. Fröhlich, “Zur Theorie des λ -punktes des heliums”, *Physica IV* **8**, 640-644 (1937). [2](#)
- [17] J. Allen y A. D. Misener, “New Phenomena Connected with Heat Flow in Helium II”, *Nature* **141**, 243-244 (1938). [2](#)
- [18] J. Allen y A. D. Misener, “Flow Phenomena in Liquid Helium II”, *Nature* **142**, 643-644 (1938). [2](#)
- [19] W.H. Keesom y K.W. Taconis, “On the structure of solid helium”, *Physica* **5**, 280 (1938). [2](#)
- [20] F. London, “The λ -phenomenon of liquid helium and the Bose-Einstein degeneracy”, *Nature* **141**, 643-644 (1938). [2](#), [113](#), [124](#)
- [21] P. L. Kapitza, “Heat transfer and superfluidity of helium II”, *Phys. Rev* **60**, 354–355 (1941). [3](#)
- [22] A. Bijl, J. de Boer y A. Michels, “Properties of liquid helium II”, *Physica* **8**, 655-675 (1941). [3](#), [124](#), [126](#)
- [23] T. Matsubara, “Quantum-statistical theory of liquid helium”, *Prog. of Theor. Phys.* **6**, 714–730 (1951). [3](#)
- [24] M. Toda, “Molecular theory of liquid helium”, *Progress of Theoretical Physics* **4**, 458-479 (1951). [3](#)
- [25] F. London, *Superfluids* (Dover, New York, 1964). [XXI](#), [XXVI](#), [3](#), [9](#), [124](#), [125](#)
- [26] S. Balibar, “Laszlo Tisza and the two-fluid model of superfluidity” *Comp. Ren. Phys.* **18** (9-10), (2017). [3](#), [126](#)
- [27] N. M. Hugenholtz, D. Pines, “Ground-state energy and excitation spectrum of a system of interacting bosons” *Physical Review* **116** (3), 489–506 (1959). [3](#)
- [28] A. Schmitt, “Introduction to superfluidity, Field-theoretical approach and applications”, arXiv:1404.1284v2 (2014). [3](#)
- [29] N. Wada, M. Hieda, R. Toda, y T. Matsushita, “Observation of superfluidity in two- and one-dimensions”, *Low. Temp. Phys* **39**, 786-792 (2013). [4](#)

-
- [30] N. Wada, J. Taniguchi y H. Ikegami, “Helium-4 bose fluids formed in one-dimensional 18 Å diameter pores”, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 4322-4325 (2001). [4](#)
- [31] N. D. Mermin y H. Wagner, “Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic heisenberg models”, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133-1136 (1966). [4](#), [11](#)
- [32] L. Landau y Lifshitz, *Mecánica Estadística* (Reverte, 1994). [4](#)
- [33] L. van Hove, “Sur l’intégrale de configuration pour les systèmes de particules À une dimension”, *Physica* **16**, 137-143 (1950). [4](#), [115](#)
- [34] P. C. Hohenberg, “Existence of long-range order in one and two dimensions”, *Phys. Rev.* **158**, 383-386 (1966). [4](#)
- [35] N. Bogoliubov, “On the theory of superfluidity”, *Jour. of Phys.* **11**, 20–32 (1947). [4](#)
- [36] B. Irsigler, “Dimensional phase transition in an ultracold bose gas”, Master’s thesis, Freie Universität Berlin (2016). [4](#)
- [37] J. Cuesta y A. Sánchez, “General non-existence theorem for phase transitions in one-dimensional systems with short range interactions, and physical examples of such transitions”, *Jour. of Stat. Phys.* **115**, 869–893 (2004). [4](#)
- [38] C. Kittel, “Phase transition of a molecular zipper”, *Am. Jour. Phys.* **37**, 917-920 (1969). [4](#)
- [39] I. Brunelli, G. Giusiano, F. P. Mancini, P. Sodano y A. Trombettoni, “Topology-induced spatial Bose–Einstein condensation for bosons on star-shaped optical networks”, *Jour. Phys.* **B37(7)**, S275–S286 (2004). [4](#)
- [40] E. Vidal, R. Lima y M. Lyra, “Bose-Einstein condensation in the infinitely ramified star and wheel graphs”, *Phys. Rev.* **E83**, 061137-1 061137-7 (2011). [5](#)
- [41] P. Buonsante, R. Burioni, D. Cassi y A. Vezzani, “Bose-Einstein condensation on inhomogeneous networks: Mesoscopic aspects versus thermodynamic limit”, *Phys. Rev.* **66**, 094207 (2002). [5](#)
- [42] N. de Oliveira, T. dos Santos, F. de Moura, M. Lyra y M. Serva, “Critical behavior of the ideal-gas Bose-Einstein condensation in the apollonian network”, *Phys. Rev.* **E 88**, 022139 (2013). [5](#)
- [43] W.J. Mullin and A. R. Sakhel, “Generalized Bose–Einstein condensation”, *Jour. Low Temp. Phys.* **166**, 125–150 (2012). [5](#)
- [44] V. Bagnato, D. E. Pritchard y D. Kleppner, “Bose-Einstein condensation in an external potential”, *Phys. Rev.* **A35**, 4354-4358 (1987). [5](#), [133](#)
- [45] M. Grether, M. Fortes, M. de Llano, J. del Río, F. Sevilla, M. A. Solís y A. A. Valladares, “Harmonically trapped ideal quantum gases”, *Phys. Rev.* **23**, 117-124 (2003). [5](#)
-

REFERENCIAS

- [46] R. L. Kronig y W.G. Penney, “Quantum mechanics of electrons in crystal lattices”, Proc. R. Soc. Lond A**130**, 499–513 (1931). [5](#), [29](#), [114](#)
- [47] D.J Griffiths y C. A. Steinke, “Waves in locally periodic media”, American Journal of Physics **69**, 769–772 (2001). [5](#), [38](#)
- [48] D. S. Saxon y R. A. Hutner, “Some electronic properties of a one-dimensional crystal model”, Philips Res. Rep. **4**, 81-122 (1949). [5](#), [31](#), [48](#), [60](#)
- [49] M. Steslicka y S. Sengupta, “Kronig-penney model for impurity states”, Physica **54**, 402–410 (1971). [5](#), [45](#), [60](#)
- [50] P. Salas, M. Fortes, M. de Llano y F. J. Sevilla, “Bose-Einstein condensation in multilayers”, J Low Temp Phys **159**, 540-548 (2010). [6](#), [99](#)
- [51] P. Salas, F. J. Sevilla y M. A. Solís, “Boson gas in a periodic array of tubes”, Jour. Low Temp. Phys. **168**, 540-548 (2012). [6](#), [105](#)
- [52] P. Salas, M. Fortes, M. A. Solís y F. Sevilla, “Specific heat of underdoped cuprate superconductors from a phenomenological layered boson-fermion model”, Phys. Rev. A**82**, 033632 (2010). [6](#)
- [53] O. A. Rodríguez y M. A. Solís, “BEC and dimensional crossover in a boson gas within multi-slabs”, Jour. of Low Temp. Phys. **175**, 435–441 (2013). [6](#)
- [54] V. Barragán, M. Fortes, P. Salas y M. A. Solís, “Bose gas in disordered, finite-layered systems”, International Journal of Modern Physics B**30(17)**, 1650099 (2016). [6](#)
- [55] G. Guijarro y M. A. Solís, “Finite size effect on the specific heat of a bose gas in multi-filament cables”, Jour. Low Temp Phys **183**, 152–160 (2016). [6](#), [69](#)
- [56] V. C. Aguilera-Navarro, M de Llano y M. A. Solís, “Bose-Einstein condensation for general dispersion relations”, Eur. J. Phys **20**, 177-182 (1999). [9](#), [17](#), [18](#), [113](#), [117](#)
- [57] Z. Yan, “General thermal wavelength and its applications”, Phys. Rev. E**21**, 625-631 (2000). [15](#), [113](#)
- [58] Y. M. Poluektov, “Isobaric Heat Capacity of an Ideal Bose Gas”, Russ. Phys. Jour **44(6)**, 627-630 (2001). [22](#), [120](#)
- [59] B. Eiermann, P. Treutlein, Th. Anker, M. Albiez, M. Taglieber, K.-P. Marzlin y M. K. Oberthaler, “Dispersion Management for Atomic Matter Waves”, Phys. Rev. Lett. **91**, 060402 (2003). [29](#)
- [60] J. C. Mason y D. C. Handscomb, *Chebyshev polynomials* (Chapman & Hall/CRC, Florida, 2003). [53](#)
- [61] S. R. Elliot, *Physics of amorphous materials* p.203 (Longman Group Limited, Cambridge, 1983). [66](#)
- [62] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics* (Cambridge University Press, UK, 2017). [71](#)

-
- [63] M. N. Khlopkin, “The specific heat of Nb_3Sn in magnetic fields up to 19 T”, Zh. Eksp. Teor. Fiz **90**, 286-293 (1986). [84](#), [94](#)
- [64] M. W. Cole, V. H. Crespi, G. Stan, C. Ebner, J. M. Hartman, S. Moroni y M. Boninsegni, “Condensation of Helium in Nanotube Bundles”, Phys. Rev. Lett **84** 38883 (2000). [94](#)
- [65] H. K. Andersen, “Bose-Einstein condensates in optical lattices”, University of Aarhus, Dinamarca, PhD Thesis (2008). [xxvi](#), [93](#)
- [66] D. M. Eagles, “Bose-Einstein condensation in finite-length channels composed of weakly interacting filaments”, Physics **C301**, 165 (1998). [94](#)
- [67] J. G. Bednorz y K. A. Muller, “Possible High T_c Superconductivity in the Ba-La-Cu-O System”, Z. Phys. **B64**, 189 (1986). [94](#)
- [68] J. H. Eggert, J. Z. Hu, H. K. Mao, L. Beauvais, R. L. Meng y C. W. Chu, “Compressibility of the $\text{HgBa}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+2+d}$ ($n = 1, 2, 3$) high-temperature superconductors”, Phys. Rev. **B49**, 15299 (1994). [94](#)
- [69] M. A. Solis, “Tamm’s surface states and Bose-Einstein condensation”, arXiv:1605.04354 (2018). [122](#)
- [70] L. P. Pitaevskii, “Vortex lines in an imperfect Bose gas”. Sov. Phys. JETP **13** (2), 451-454 (1961). [131](#)
- [71] E. Castellanos, C. Escamilla-Rivera y M. J. Reyes-Ibarra, “Stability analysis of a Bose-Einstein condensate trapped in a generic potential”, Eur. Phys. J. **D90**, 156 (2018). [132](#), [135](#)
- [72] L. Salasnich, “Stability analysis of a Bose-Einstein condensate trapped in a generic potential”, Int. Jour. of Mod. Phys. **B16**, 2185-2190 (2002). [133](#)
- [73] J. Rogel-Salazar, “The Gross–Pitaevskii equation and Bose–Einstein condensates”, Eur. J. Phys. **34**(2), 247-257 (2013). [135](#)
- [74] R.P. Smith, R. L. Campbell, N. Tammuz y Z. Hadzibabic, “Effects of Interactions on the Critical Temperature of a Trapped Bose Gas”. Phys. Rev. Lett **106**(25), 250403 (2011). [135](#)
- [75] A.F. Pacheco y J. Sañudo, “Verification of the virial theorem in the Thomas-Fermi model.”, Phys. A: Stat. Mechs. and Its Apps. **151**, 113-123 (1988). [137](#)
- [76] P. C. M. Castilho, F.J. Poveda-Cuevas, J. A. Seman, R. F. Shiozaki, G. Roati, S.R. Muniz, D. V. Magalhaes y V. S. Bagnato, “Equation of state for a trapped quantum gas: remnant of a zero-point energy effects”, New J. Phys. **18**, 023014 (2016). [137](#)
- [77] Mueller, E. J. “Superfluidity and mean-field energy loops: Hysteretic behavior in Bose-Einstein condensates”, Physical Review **A66**(6), 063603 (2002). [138](#)
-