



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE
MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

EFECTO DE LAS VACANCIAS EN LA
CONDENSACIÓN BOSE-EINSTEIN DE UN
GAS IDEAL DE BOSONES DENTRO DE
ESTRUCTURAS PERIÓDICAS
IMPERFECTAS

T E S I S

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

Físico

PRESENTA:

Emilio Izcoatl Guerrero Cruz



TUTOR:

Dr. Miguel Ángel Solís Atala

Ciudad de México, 2020



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.

A mi madre que me lo ha dado todo

Reconocimientos

Las cosas que me ha dado mi madre durante toda mi vida no tienen comparación, ella volvió su vida mi vida y espero que este logro sea tan grato para ella como lo es para mí. Gracias siempre.

Gracias a Tania por no soltarme la mano en todo el camino, por su amor y apoyo durante toda mi adolescencia y vida adulta.

Gracias a mis compañeros de carrera que estuvieron siempre para mí en todos los aspectos, sin ellos nunca lo hubiera logrado.

Gracias al Dr. Miguel Ángel Solís Atala por su guía que llegó incluso más allá de lo académico.

Gracias a los integrantes del grupo de muchos cuerpo cuánticos del IF, por todos los cuestionamientos y ayuda para que esta Tesis se pudiera completar.

Gracias a los miembros revisores de mi jurado conformado por José Jiménez Mier y Teran, Carlos Ramírez Ramos, Francisco Javier Sevilla Pérez y Luis Felipe Del Castillo Davila por sus valiosos comentarios y aportaciones para la conclusión de esta tesis.

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.

Emilio Izcoatl Guerrero Cruz. Ciudad de México, 2020

Resumen

En esta tesis proponemos y analizamos un modelo físico el cual consiste en un gas ideal de bosones dentro de estructuras cuasi periódicas en una y en tres dimensiones. La estructura en una dimensión simula un cristal imperfecto por la presencia de vacancias puntuales mientras que en tres dimensiones se simula un sólido con una estructura multicapas tales como la de los superconductores cupratos, donde una o varias capas están ausentes. Para ambos modelos calculamos y describimos la temperatura crítica de condensación Bose-Einstein (CBE) y algunas propiedades termodinámicas, como funciones de la proporción de vacancias. La tesis se desarrolla de la siguiente manera. En el Capítulo 1 se hace una introducción de los sistemas estudiados mostrando cómo las estructuras cuasi periódicas son generadas embebiendo al gas de bosones en un potencial Peine de Dirac imperfecto. Damos algunos antecedentes sobre intentos de describir los sistemas mencionados, describimos el método de Diferencias Finitas utilizado para resolver la ecuación de Schrödinger correspondiente y presentamos los principales resultados obtenidos. En el Capítulo 2 calculamos el espectro de energías de una partícula en un cristal 1D con vacancias empezando por mostrar cómo modelar un cristal 1D imperfecto mediante la aplicación de un potencial Peine de Dirac externo y con una proporción de deltas suprimidas. Mostramos cómo se modifican las bandas del espectro de energías del cristal perfecto conforme se introduce un porcentaje de vacancias. Se detalla el método de Diferencias Finitas usado para resolver la ecuación de Schrödinger para el gas de bosones dentro de estructuras 1D y 3D. En el Capítulo 3 se muestran algunas propiedades termodinámicas del gas de Bose dentro de las estructuras imperfectas en 1D y en 3D, poniendo énfasis en explicar la condensación Bose-Einstein en diferentes dimensiones. Especialmente, calculamos las temperaturas críticas de CBE como aquella temperatura donde el calor específico isocórico de nuestros sistemas finitos presentan un máximo, para diferentes porcentajes de vacancias. Analizamos el efecto del tamaño de nuestros sistemas sobre la temperatura de CBE aumentando el número de deltas del Peine de Dirac pero manteniendo la proporción de vacancias. En el caso en que los sistemas se vuelven infinitos pudimos dar la correspondiente temperatura crítica

a la que tienden, como función de la fracción de vacancias. Para cada uno de los sistemas estudiados, también mostramos la fracción del condensado, el potencial químico y el calor específico isocórico, todas como función de la fracción de vacancias. En el Capítulo 4 se presentan nuestras conclusiones.

Índice general

Índice de figuras	xii
1. Introducción	1
2. Espectros de energía de una partícula en un cristal 1D	5
2.1. Peine de Dirac imperfecto como un cristal con vacancias	5
2.2. Partícula en un potencial Peine de Dirac perfecto	6
2.3. Espectro de energías de una partícula en un cristal perfecto	10
2.4. Espectro de energías de una partícula en un cristal imperfecto . .	11
2.5. Método de diferencias finitas	12
3. Gas de Bose en cristales imperfectos	17
3.1. Gas ideal de bosones en 3D	17
3.1.1. Estructura multicapas	17
3.1.2. Cristal unidimensional	20
3.2. Temperatura crítica de CBE en sistemas finitos como el máximo del calor específico	21
3.2.1. Temperatura crítica como función del porcentaje de vacan- cias para el sistema 1D y 3D	22
3.3. Propiedades termodinámicas del gas ideal de Bose en un cristal 1D con vacancias	29
3.3.1. Caso con una vacancia	29
3.3.1.1. Potencial químico y su derivada	29
3.3.1.2. Fracción del condensado	31
3.3.1.3. Energía interna	32
3.3.1.4. Calor específico isocórico	33
3.3.2. Caso fracciones de vacancias	34
3.3.2.1. Potencial químico y su derivada	35
3.3.2.2. Fracción del condensado	36
3.3.2.3. Energía Interna	37

ÍNDICE GENERAL

3.3.2.4. Calor específico isocórico	38
3.4. Propiedades termodinámicas del gas ideal de Bose en multicapas 3D	39
3.4.1. Caso con una vacancia	39
3.4.1.1. Potencial químico y su derivada	39
3.4.1.2. Fracción del condensado	41
3.4.1.3. Energía interna	42
3.4.1.4. Calor específico isocórico	43
3.4.2. Caso fracciones de vacancias	45
3.4.2.1. Potencial químico y su derivada	45
3.4.2.2. Fracción del condensado	46
3.4.2.3. Energía interna	47
3.4.2.4. Calor específico isocórico	48
4. Conclusiones	51
A. Código	55
A.1. Código en Julia para resolver la ecuación de Schrödinger	55
A.2. Código en Julia para las propiedades termodinámicas del gas de bosones dentro de un cristal 1D y el gas de bosones dentro de una estructura multiplanos 3D	57
Bibliografía	65

Índice de figuras

2.1. Potencial de Kronig-Penney.	6
2.2. Potencial Peine de Dirac.	7
2.3. Gráfica de $f(P, \alpha)$ vs. αa con $P = 10$	11
2.4. Bandas de energías de un gas de bosones en un cristal formado por 101 deltas sin vacancias, $P = 10$	12
2.5. Bandas de energías de un gas de bosones en un cristal formado por 101 deltas con 20 vacancias aleatorias $P = 10$	13
2.6. Evolución de la forma en que se toma la partición (puntos) del espacio para llegar a aproximar la delta levantando un punto. Se respeta que el área de los rectángulos es 1.	16
2.7. Rectángulo formado por un sólo punto, las paredes están en x y $x + \eta/2$ y $x - \eta/2$	16
3.1. Regresión lineal para 15 % de planos removidos del gas de bosones dentro de un sistema multicapas 3D con 1001 planos iniciales. . .	24
3.2. \bar{T}_{cm}/T_0 como función del porcentaje de deltas removidas para el gas 1D de bosones dentro de un cristal con 101, 201, 501 y 1001 deltas iniciales, $P = 10$	25
3.3. Ampliación de la figura 3.2 alrededor del 15 % de vacancias donde la temperatura crítica promedio \bar{T}_{cm} muestra un máximo local T_{cmM} . . .	25
3.4. Promedio de la temperatura entre la temperatura de referencia contra el porcentaje de planos removidos para el gas 3D de bosones dentro de un cristal con 101, 201, 501 y 1001 planos iniciales, $P = 10$	27
3.5. Ampliación de la figura 3.4 en la zona de la máxima \bar{T}_{cm}	27
3.6. Potencial químico en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ del gas de bosones 1D dentro de un cristal con 101, 201, 501 y 1001 deltas menos la delta central como función de la temperatura normalizada T/T_0 , $P = 10$	30
3.7. Derivada del potencial químico del gas de bosones 1D dentro en un cristal con 101, 201, 501 y 1001 deltas originales menos la delta central contra la temperatura normalizada T/T_0 , $P = 10$	31

ÍNDICE DE FIGURAS

3.8. Fracción de condensado para un gas de bosones 1D dentro de un cristal con 101, 201, 501 y 1001 deltas menos la delta central, $P = 10$.	32
3.9. Energía interna por partícula referida a la energía interna del estado base ε_0 y dividida por $k_B T$, de un gas de bosones 1D dentro de un cristal originalmente con 101, 201, 501 y 1001 deltas menos la delta central, $P = 10$.	33
3.10. Calor específico isocórico de un gas de bosones dentro de un cristal 1D con 101, 201, 501, 1001 e infinitas deltas menos la delta central, se incluye el sistema perfecto, para todos los casos $P = 10$.	34
3.11. Potencial químico en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ de un gas de bosones 1D dentro de un cristal con 101, 201, 501 y 1001 deltas menos 15 % de deltas removidas al azar, $P = 10$.	35
3.12. Derivada del potencial químico de un gas de bosones dentro de un cristal 1D con 101, 201, 501 y 1001 deltas menos 15 % de deltas removidas al azar, $P = 10$.	36
3.13. Fracción de condensado de un gas de bosones dentro de un cristal 1D con 101, 201, 501 y 1001 deltas menos 15 % de deltas removidas al azar, $P = 10$.	37
3.14. Energía interna por partícula referida a la energía del estado base y dividida por $k_b T$ de un gas de bosones 1D dentro de un cristal con 101, 201, 501 y 1001 deltas menos 15 % de deltas removidas al azar, $P = 10$.	38
3.15. Calor específico isocórico de un gas de bosones 1D dentro de un cristal con 101, 201, 501 y 1001 deltas menos 15 % de deltas removidas al azar, $P = 10$.	39
3.16. Potencial químico en unidades de energía $\hbar^2/2ma^2$ de un gas de bosones en un sistema multicapas 3D con una dirección en la cual hay originalmente 101, 201, 501 y 1001 planos menos el central, $P = 10$.	40
3.17. Derivada del potencial químico de un gas de bosones en un sistema multicapas 3D con una dirección en la cual hay originalmente 101, 201, 501 y 1001 planos menos el central, $P = 10$.	41
3.18. Fracción de condensado de un gas de bosones en un sistema multicapas 3D con una dimensión en la cual hay 101, 201, 501 y 1001 planos menos el central, $P = 10$.	42
3.19. Energía interna de un gas de bosones en un sistema multicapas 3D con una dirección en la cual hay 101, 201, 501 y 1001 planos menos el central, $P = 10$.	43

3.20. Calor específico isocórico de un gas de bosones en un sistema multicapas 3D con una dirección en la cual originalmente hay 101, 201, 501 y 1001 planos menos el central, $P = 10$. Se incluye el sistema perfecto.	44
3.21. Potencial químico de un gas de bosones en un sistema multicapas 3D con una dirección en la cual hay 101, 201, 501 y 1001 planos menos el 15 % removidos al azar, $P = 10$	45
3.22. Derivada del potencial químico de un gas de bosones en un sistema multicapas 3D con una dirección en la cual hay 101, 201, 501 y 1001 planos menos el 15 % removidos al azar, $P = 10$	46
3.23. Fracción de condensado de un gas de bosones en un sistema multicapas 3D con una dirección en la cual originalmente hay 101, 201, 501 y 1001 planos menos el 15 % removidos al azar, $P = 10$	47
3.24. Energía interna por partícula referida a la energía del estado base ε_0 y dividida por $k_B T$ de un gas de bosones en un sistema multicapas 3D con una dirección en la cual originalmente hay 101, 201, 501 y 1001 planos menos el 15 % removidos al azar, $P = 10$	48
3.25. Calor específico isocórico de un gas de bosones en un sistema multicapas 3D con una dirección en la cual hay originalmente 101, 201, 501 y 1001 planos menos el 15 % removidos al azar, $P = 10$	49

Introducción

Existen dos tipos de partículas en la naturaleza las cuales son diferentes entre sí gracias al valor de su espín que es una característica cuántica; los fermiones tienen espín semientero y los bosones valores de espín entero. Los bosones tienen la propiedad de que más de dos pueden compartir el mismo estado cuántico por lo que a temperaturas suficientemente bajas una proporción significativa del total de partículas pueden llegar a ocupar el nivel más bajo de energía accesible del sistema. Este fenómeno es conocido como la condensación de Bose-Einstein (CBE) predicha por Einstein en 1925 [1] y setenta años después observada en el laboratorio, primero en un gas de átomos de rubidio Rb por Eric A. Cornell y Carl E. Wiemann [2], y cuatro meses después en un gas de átomos de sodio Na por Wolfgang Ketterle [3]. Los tres ganaron el premio Nobel de Física en el año 2001 por “conseguir experimentalmente la condensación Bose-Einstein.”

Desde entonces a la fecha el estudio de la CBE se ha diversificado enormemente tanto teórica como experimentalmente.

Sabemos que un gas ideal de bosones (IBG) libre puede mostrar CBE a temperatura diferente de cero sólo en dimensiones mayores que dos. Sin embargo, cuando el IBG es sujeto a un potencial externo puede presentar CBE a temperatura diferente de cero aún en dimensiones menores e igual a dos [4, 5, 6]. Una línea de investigación muy fructífera ha sido estudiar los gases de Bose dentro potenciales periódicos, en particular, dentro de redes ópticas que son generadas mediante la contrasuperposición de luz láser en una, dos o tres dimensiones [7, 8]. También es conocido que cuando el IBG se encuentra dentro de la red periódica sólo existe CBE en dimensiones mayores a dos, como en el caso del IBG libre. Pero, cuando la red periódica contiene imperfecciones tales como vacancias, la CBE se presenta en dimensiones mayores que cero [4, 9]. Aunque se han reportado [10, 11] estudios en los que las vacancias de sitios en la red propician la CBE, no se tiene cómo el número de estas vacancias afecta la magnitud de la temperatura crítica de CBE. Por ejemplo, sobre la influencia de la estructura y sus defectos sobre las propiedades del IBG mencionamos algunos. En la Ref. [10] se reportó la variación

1. INTRODUCCIÓN

del calor específico isocórico C_V de un IBG confinado a un sistema semi-infinito 3D formado por M planos permeables dentro de una caja de longitud $a(M + 1)$ con a la separación entre los planos. Allí se introdujo el desorden mediante la remoción de una fracción de los planos. También se ha avanzado en el análisis del IBG dentro de distintas estructuras tales como cadenas de puntos dispersores [9], o multifilamentos [12] para estudiar la CBE. En los trabajos propuestos en [13, 14] se analizan sistemas experimentales con desorden donde se produce la CBE con la finalidad de obtener la localización de Anderson, es decir, la ausencia de difusión de ondas en un medio desordenado. Incluso se ha reportado la CBE en sistemas d -dimensionales de bosones en los cuales la relación de dispersión de las partículas se generaliza para que las energías sean una potencia del momento de la partícula [5] más una brecha entre el nivel de energía más bajo y el siguiente [4].

Aunque las aplicaciones comerciales de los sistemas donde se presenta la CBE aún no es clara, sus aplicaciones a nivel experimental son muy prometedoras para el entendimiento de nuevos fenómenos cuánticos y como una fuente de modelos para simular la materia condensada real [8]. Por ejemplo, se cree que el fenómeno de la superfluidez está directamente relacionado con la CBE. La superfluidez consiste en un estado de la materia que tiene como principal característica la ausencia total de viscosidad en sistemas que pueden mantenerse en su fase líquida a temperaturas muy cercanas al cero absoluto. La superfluidez en el helio-4 fue identificada como tal en 1938 por P. Kapitza [15] y, por separado, por J. Allen y M. D. Misener [16] a la temperatura de 2.18 K. Notemos que la mayoría de las sustancias se solidifican a temperaturas por debajo de los 5 K, cuando sus átomos se ordenan en una red cristalina. Una de las pocas sustancias que se mantiene sin solidificarse aún a cero absoluto de temperatura, es el helio. Entre las propuestas planteadas para explicar el fenómeno de la superfluidez está aquella de F. London [17] que relacionó la CBE de los átomos de helio con su superfluidez. Hoy en día sabemos que para que un sistema de muchas partículas cuánticas presenten la superfluidez es necesario que las partículas interactúen entre ellas.

En esta tesis nos proponemos calcular y reportar el efecto del número de vacancias sobre las propiedades de un IBG dentro de estructuras periódicas imperfectas y, en particular, sobre la temperatura crítica de CBE. El problema se aborda aplicando al IBG el potencial de Kronig-Penny en el límite cuando las barreras se convierten en deltas de Dirac, es decir, en el límite de un potencial Peine de Dirac donde las deltas simularán los átomos en un cristal unidimensional o planos dispersores en un sólido multicapas tridimensional. Utilizaremos el método de Diferencias Finitas para resolver la ecuación de Schrödinger para obtener el espectro de energías de cada una de las partículas del IBG.

Del análisis de los resultados obtenidos para el C_V del sistema se concluye principalmente que el efecto de las vacancias estructurales sobre la temperatura de

CBE es que existe un porcentaje de vacancias removidas para el cual el sistema alcanza su máxima temperatura de CBE. Este porcentaje de vacancias es alrededor de 15% tanto para el cristal unidimensional como para la estructura multicapas tridimensional.

Espectros de energía de una partícula en un cristal 1D

2.1. Peine de Dirac imperfecto como un cristal con vacancias

Un cristal es un material sólido cuyos constituyentes microscópicos (que puede ser átomos, moléculas o iones) están ordenados formando una estructura cristalina que se extiende en todas las direcciones posibles manteniendo la simetría traslacional. Un cristal imperfecto entonces es aquél en el cual la simetría traslacional es interrumpida en alguno de sus puntos. Para discutir el peine de Dirac de manera apropiada primero describiremos el modelo de Kronig-Penney [21]. El potencial de Kronig-Penney ha sido usado para simular un cristal perfecto pues en una dimensión consta de barreras de anchura b y de altura V_0 , estas barreras se encuentran separadas a una distancia a entre ellas donde el valor del potencial es cero (pozos), el periodo del potencial es $a + b$. Matemáticamente puede ser escrito de la siguiente forma

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

donde Θ es la función escalón de Heaviside definida como

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } x < 0. \\ 1, & \text{si } x \geq 0. \end{cases}$$

2. ESPECTROS DE ENERGÍA DE UNA PARTÍCULA EN UN CRISTAL 1D

El peine de Dirac ocurre en el límite en el cual la anchura de las barreras se hace 0 y la altura del potencial tiende a infinito pero manteniendo la cantidad V_0b constante.

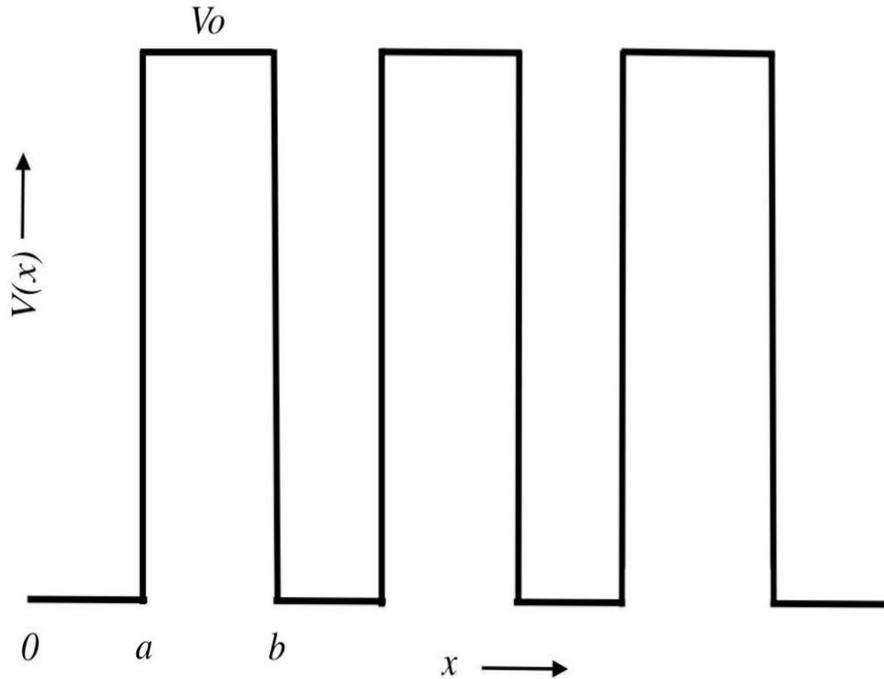


Figura 2.1: Potencial de Kronig-Penney.

El periodo del potencial Peine de Dirac es a con las deltas colocadas en las posiciones na con n cualquier número entero a lo largo de un eje que en este caso escogimos x como puede ser observado en la figura 2.2. Para generar las vacancias dentro del cristal se quita una proporción de deltas situadas al azar en las posiciones na , lo cual genera el cristal imperfecto.

2.2. Partícula en un potencial Peine de Dirac perfecto

Dado que en un GIB las interacciones entre las partículas son nulas el problema de muchas partículas puede ser reducido al de una sola partícula dentro de la estructura periódica. Con esto en mente es posible describir el sistema sin

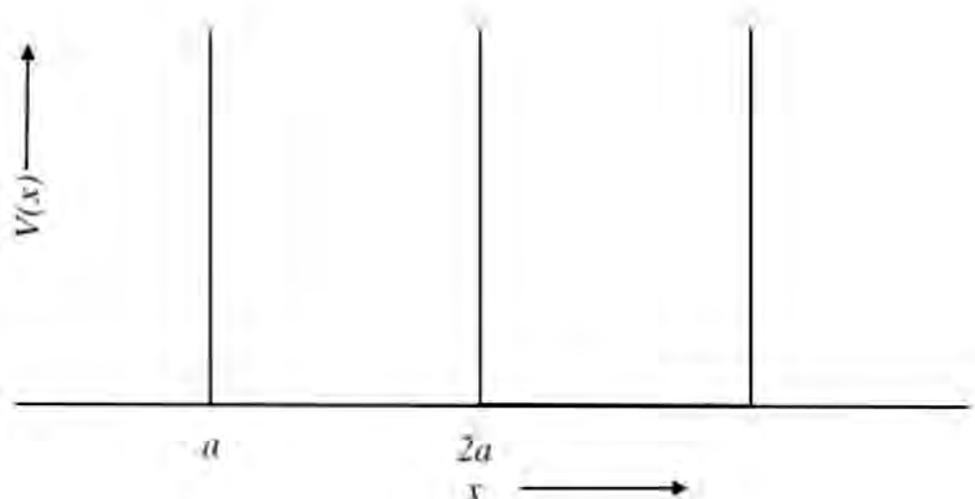


Figura 2.2: Potencial Peine de Dirac.

evolución temporal con la ecuación de Schrödinger estacionaria :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.2)$$

donde \hbar es la constante reducida de Planck, m la masa de la partícula, $\psi(x)$ es una función de onda estacionaria independiente del tiempo, $V(x)$ es el potencial aplicado a la partícula y E es la energía de la partícula. Como puede ser observado los valores de la energía obtenidos al resolver la ecuación (2.2) dependen directamente del potencial escogido. Muchos de estos casos han sido discutidos con anterioridad como el caso de la partícula libre en el cual el potencial $V_0 = 0$ por lo que la energía asociada E_l viene dada por la siguiente expresión (para más detalle ver [24])

$$E_l = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2.3)$$

con k el número de onda y m la masa de la partícula. Pensando en el potencial de KP en el límite en el cual la anchura se hace cero y la altura del potencial tiende a infinito, en la ecuación (2.2) tenemos como resultado dos ecuaciones de

2. ESPECTROS DE ENERGÍA DE UNA PARTÍCULA EN UN CRISTAL 1D

Schrödinger para describir completamente el sistema, éstas son:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \varepsilon\psi(x) = 0 \quad 0 < x < a \quad (2.4)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + (\varepsilon - V_0)\psi(x) = 0 \quad a < x < b \quad (2.5)$$

donde ε es la energía de la partícula.

La solución de las ecuaciones (2.4) y (2.5) son determinadas por el teorema de Bloch, éste plantea que para un potencial periódico la función de onda asociada a la partícula está descrita por

$$\psi(x) = e^{ikx} u_k(x) \quad (2.6)$$

con $u_k(x)$ una función periódica con el mismo periodo del potencial (más detalle de estas funciones ver [23]) y k es el cuasi-momento. Sustituyendo (2.6) en (2.4) y (2.5) obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones para $u(x)$

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

$$\frac{d^2u}{dx^2} + 2ik \frac{du}{dx} - (\beta^2 + k^2)u = 0 \quad a < x < b \quad (2.8)$$

con $\alpha^2 \equiv 2m\varepsilon/\hbar^2$ y $\beta^2 \equiv 2m(V_0 - \varepsilon)/\hbar^2$. Así las soluciones de estas ecuaciones diferenciales son

$$u_1 = Ae^{i(\alpha-k)x} + Be^{-i(\alpha+k)x} \quad 0 < x < a \quad (2.9)$$

$$u_2 = Ce^{(\beta-ik)x} + De^{-(\beta+ik)x} \quad a < x < b \quad (2.10)$$

Las constantes A, B, C y D deben satisfacer las condiciones de frontera de la función ψ además de tomar en cuenta la periodicidad. Si ψ es continua y es derivable en todo sus puntos, debe satisfacer

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad y \quad \psi_1'(0) = \psi_2'(0) \quad (2.11)$$

Es importante recordar que el teorema de Bloch implica la periodicidad de u , por lo que su derivada también lo es, entonces:

$$u_1(a) = u_2(-b) \quad y \quad u_1'(a) = u_2'(b) \quad (2.12)$$

Con estas condiciones obtenemos las siguientes relaciones entre las constantes

$$A + B = C + D \quad (2.13)$$

$$i\alpha A - i\alpha B = \beta C - \beta D \quad (2.14)$$

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

$$i(\alpha - k)Ae^{i(\alpha-k)a} - i(\alpha + k)Be^{-i(\alpha+k)a} = (\beta - ik)Ce^{(\beta-ik)b} - (\beta + ik)De^{-(\beta+ik)b} \quad (2.16)$$

que forman un sistema de ecuaciones lineales homogéneo con cuatro incógnitas. Es importante remarcar que este sistema tiene solución distinta a la trivial cuando el determinante es igual a cero. Como estamos interesados en la solución no trivial hacemos el determinante igual a cero

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

Calculando el determinante es posible demostrar que es equivalente a la siguiente expresión

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

que es conocida como la relación de KP de donde se determinan las energías que pueden tener las partículas con una k dada.

En el límite $b \rightarrow 0$ y $V_0 \rightarrow \infty$ pero $V_0 b$ una constante que denotamos como v_0 y que tiene dimensiones de energía por longitud, obtenemos el potencial Peine de Dirac que escribimos como

$$V(x) = v_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - x_n) \quad (2.18)$$

y que graficamos en la Fig. 2.2. Utilizando el límite antes mencionado podemos reescribir el factor $\frac{(\beta^2 - \alpha^2)}{2\alpha} \frac{\sinh(\beta b)}{\beta}$ de (2.17) multiplicando y dividiendo por ab de la siguiente manera

$$\lim_{b \rightarrow 0} \frac{(\beta^2 - \alpha^2)}{2\alpha} \frac{\sinh(\beta b)}{\beta} \frac{ab}{ab} = \lim_{b \rightarrow 0} \frac{2ma}{\hbar^2} \frac{(V_0 b - \varepsilon b)}{2\alpha a} \frac{\sinh(\beta b)}{\beta b} = \frac{mav_0}{\hbar^2 \alpha a} \quad (2.19)$$

por lo cual la ecuación (2.17) se convierte en

$$\frac{mav_0}{\hbar^2} \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a) = \cos(ak) \quad (2.20)$$

2.3. Espectro de energías de una partícula en un cristal perfecto

El problema se reduce al de una partícula dentro de un potencial Peine de Dirac con condiciones de frontera de Dirichlet, y que simula a una partícula dentro de un cristal infinito y perfecto. El espectro de energías es obtenido de la relación

$$P \frac{\text{sen}(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a) = \cos(ak) \quad (2.21)$$

con $P \equiv mav_0/\hbar^2$. La ecuación (2.21) no tiene una solución analítica para las energías pero es posible analizarla para encontrar gráficamente las soluciones. El lado izquierdo de la ecuación (2.21) solo depende implícitamente de los valores de α y a reescribimos la ecuación de la siguiente forma

$$f(P, \alpha a) = \cos(ak) \quad (2.22)$$

Como los valores del coseno están acotados entre 1 y -1 la función $f(P, \alpha a)$ sólo tiene soluciones entre esos valores, como se muestra en la figura (2.3). Analizando a fondo la gráfica se llega a la conclusión de que dadas P y αa el espectro de energía para los bosones está formado por bandas permitidas separadas por regiones prohibidas. Notemos que el ancho de las bandas permitidas se incrementa cuando el término αa crece esto es debido a que el término $P/\alpha a$ tiende a cero cuando esto ocurre.

En la figura 2.4 se muestran las bandas de energía de un cristal perfecto finito formado por 101 deltas sin vacancias, es posible recuperar la energía asociada a la caja de potencial de ancho a cuando $P \rightarrow \infty$ pues las bandas permitidas se adelgazan hasta convertirse en niveles de energía. Esto pasa pues la ecuación (2.21) solo tiene solución si $\text{sen}(\alpha a) = 0$ lo cual implica que $\alpha a = n\pi$ con n entero.

En el caso en el que se tenga el mismo cristal pero en un espacio finito la ecuación que se obtiene es [9]

$$\frac{P}{\alpha a} \text{sen}(\alpha a) + \cos(\alpha a) = \cos\left(\frac{n\pi}{M+1}\right); \quad n \in \mathbb{N} \quad (2.23)$$

donde M es el número total de deltas en el modelo.

Cuando $P \rightarrow 0$ recuperamos los niveles de energía de una caja de ancho $(M+1)a$.

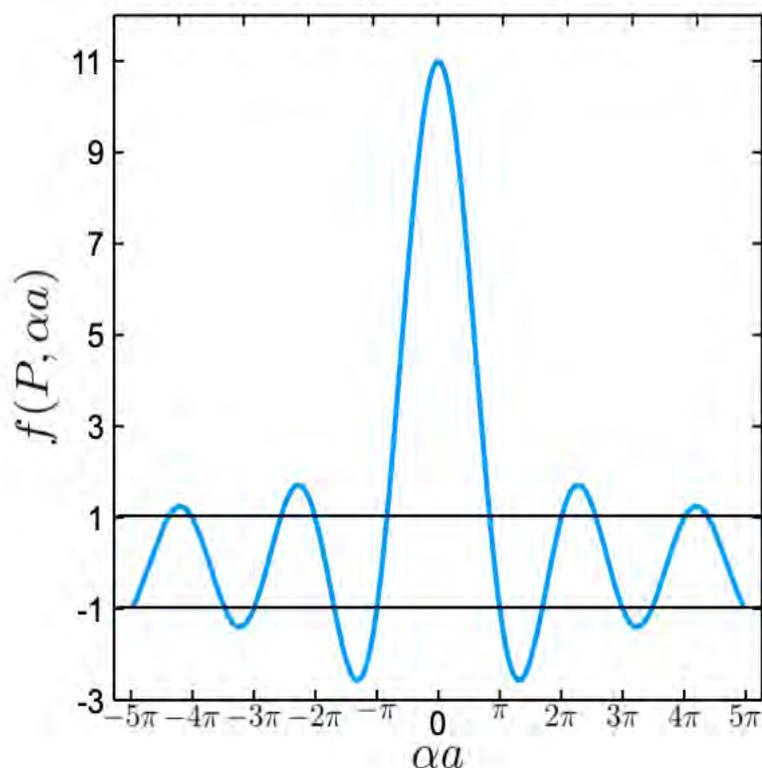


Figura 2.3: Gráfica de $f(P, \alpha)$ vs. αa con $P = 10$.

2.4. Espectro de energías de una partícula en un cristal imperfecto

Si el cristal a modelar es infinito con la delta central diferente a todas las demás la ecuación que da el espectro de energías es [9]

$$(\alpha a) \cot(\alpha a) = \frac{(\alpha a)^2 + P'^2}{2P} - P' \quad (2.24)$$

con $P' = mv'_0$ donde v'_0 es la intensidad de la delta que es diferente a todas las demás. Si el cristal es finito con una delta diferente entre M_1 deltas iguales a la izquierda y M_2 deltas iguales a la derecha de tal forma que $M = M_1 + M_2 + 1$ es el número total de deltas, el espectro de energía se obtiene de la siguiente relación [9]

$$\text{sen}[(M_1 + M_2)\theta] = 2\xi' \text{sen}[(M_1 + M_2 + 1)\theta] + 2(\xi' - \xi) \frac{\text{sen}(M_1\theta)\text{sen}(M_2\theta)}{\text{sen}(\theta)} \quad (2.25)$$

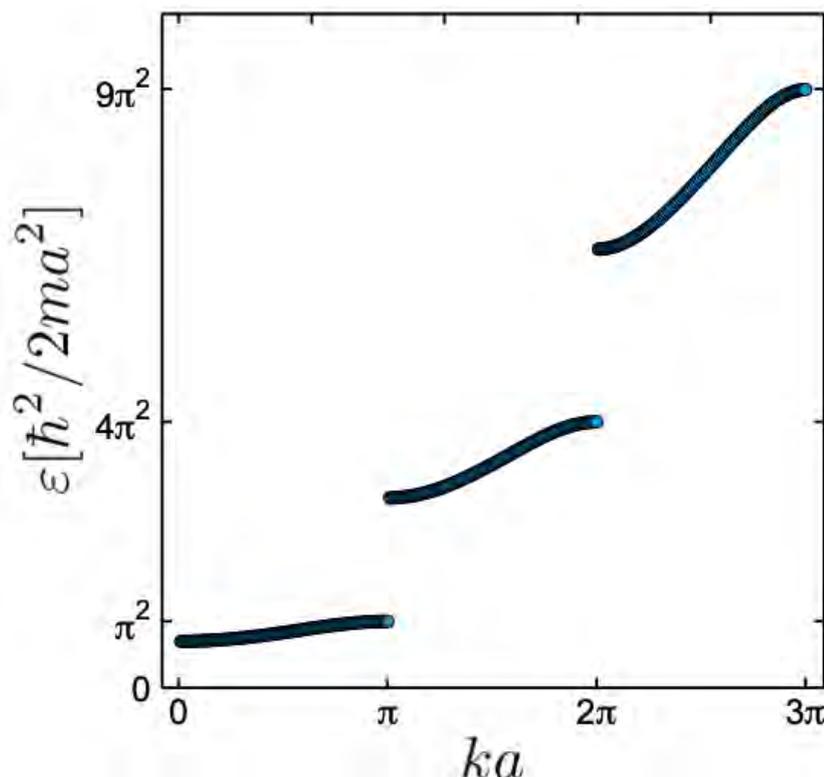


Figura 2.4: Bandas de energías de un gas de bosones en un cristal formado por 101 deltas sin vacancias, $P = 10$.

donde ξ y ξ' satisfacen $\xi = \cos(\alpha a) + P \text{sen}(\alpha a)/\alpha a = \cos(\theta)$, $\xi' = \cos(\alpha a) + P' \text{sen}(\alpha a)/\alpha a = \cos(\theta)$ y $(\alpha a)^2 = 2ma^2 E/\hbar^2$

Una consecuencia de remover deltas del cristal para volverlo imperfecto es la aparición de nuevas bandas de energía en las regiones prohibidas del espectro de energías del caso perfecto, esto se puede observar en la figura 2.5. Al llevarlo al límite en el que se retiran todas las deltas se recupera el espectro de energías asociado a la partícula libre que describe la ecuación (2.3). Para ver a detalle la explicación y la deducción analítica de la aparición de estas bandas se puede revisar [9]

2.5. Método de diferencias finitas

Como analíticamente es difícil de obtener el espectro de energías cuando se tiene muchas vacancias en posiciones al azar recurriremos al método de Diferencias

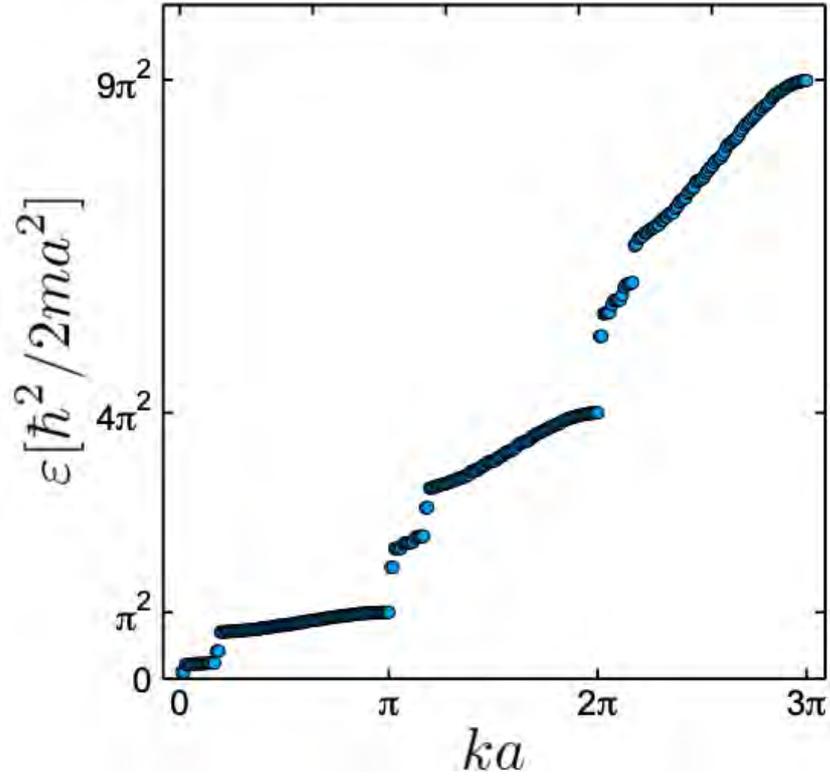


Figura 2.5: Bandas de energías de un gas de bosones en un cristal formado por 101 deltas con 20 vacancias aleatorias $P = 10$.

Finitas. El método de Diferencias Finitas es un método numérico para resolver ecuaciones diferenciales discretizando las derivadas de los términos involucrados en la ecuación diferencial cambiándolos por cocientes diferenciales. Este método convierte una ecuación diferencial ordinaria o parcial que puede ser lineal o no, en un sistema de ecuaciones similares algebraicas. El sistema obtenido después de la discretización puede ser resuelto por métodos algebraicos. Tomemos cualquier función $f(x)$ y la aproximamos por el teorema de Taylor de la siguiente manera:

$$f(x + \eta) \approx f(x) + f'(x)\eta + \frac{\eta^2}{2}f''(x + \eta) \quad (2.26)$$

Es conveniente utilizar los dos primeros términos del desarrollo (2.25). El tercer término del orden $O(\eta^2)$ determina que el error de la aproximación es proporcional a η^2 , así la ecuación (2.25) queda aproximada de la siguiente manera

$$f(x + \eta) \approx f(x) + f'(x)\eta + O(\eta^2) \quad (2.27)$$

2. ESPECTROS DE ENERGÍA DE UNA PARTÍCULA EN UN CRISTAL 1D

Es posible despreciar el término del error para una η suficientemente pequeña y la aproximación de la primera derivada es:

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \eta) - f(x)}{\eta} \quad (2.28)$$

volviendo a derivar tenemos

$$f''(x) \approx \frac{f'(x + \eta) - f'(x)}{\eta} \quad (2.29)$$

podemos sustituir $f'(x)$ por lo encontrado en (2.28) mientras que para $f'(x + \eta)$ tenemos la siguiente aproximación

$$f'(x + \eta) \approx \frac{f(x + 2\eta) - f(x + \eta)}{\eta} \quad (2.30)$$

sustituyendo (2.28) y (2.30) en (2.29) encontramos la siguiente ecuación

$$f''(x) \approx \frac{f(x + 2\eta) - 2f(x + \eta) + f(x)}{\eta^2} \quad (2.31)$$

Gracias a estas aproximaciones podemos utilizar la representación matricial y resolver el problema algebraicamente.

Con lo anterior en mente el método de Diferencias Finitas es una buena herramienta para resolver una ecuación que analíticamente es complicada como es el caso de la ecuación de Schrödinger (2.2) con el potencial Peine de Dirac (2.18). La ecuación (2.2) es una ecuación diferencial lineal y para computadoras actuales resolver matrices con precisión no supone un problema más allá de la capacidad de memoria de la misma por lo cual el método es el óptimo.

La discretización es de la siguiente forma. Consideremos que las funciones f son eigenvectores del hamiltoniano H y satisfacen la ecuación de Schrödinger unidimensional, además consideremos los puntos del espacio como $x_j = j\eta$; $j = 0, 1, 2, \dots, r$. La solución $f(x)$ deberá ser solución para cada punto x_j por lo que

$$\hat{H}_j f(x_j) = E_j f(x_j) \quad (2.32)$$

donde los eigenvalores E_j son las energías de una partícula con función de onda f y $H_j = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{d^2}{dx_j^2} + V(x_j)$

Como para cada punto x_j se cumple la ecuación por lo que obtenemos es el siguiente sistema:

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 f(x_0) &= E_1 f(x_0) \\ \hat{H}_2 f(x_1) &= E_2 f(x_1) \\ &\dots \\ &\dots \\ &\dots \\ \hat{H}_r f(x_r) &= E_r f(x_r) \end{aligned}$$

2. ESPECTROS DE ENERGÍA DE UNA PARTÍCULA EN UN CRISTAL 1D

Por lo anterior la incertidumbre se va reduciendo cuando la distancia η decrece, por lo que es importante tener una buena partición que depende directamente del número de deltas que se quieran poner en el sistema. En tesis las particiones para 101, 201, 501 y 1001 deltas fueron tales que entre dos deltas contiguas introdujimos 100, 50, 30 y 20 espacios respectivamente, tales que la partición total fue de 10201, 10101, 15061, 20041 respectivamente. Notamos que una buena aproximación para $1/\eta$ es del orden del cuadrado de la partición que se escogió.

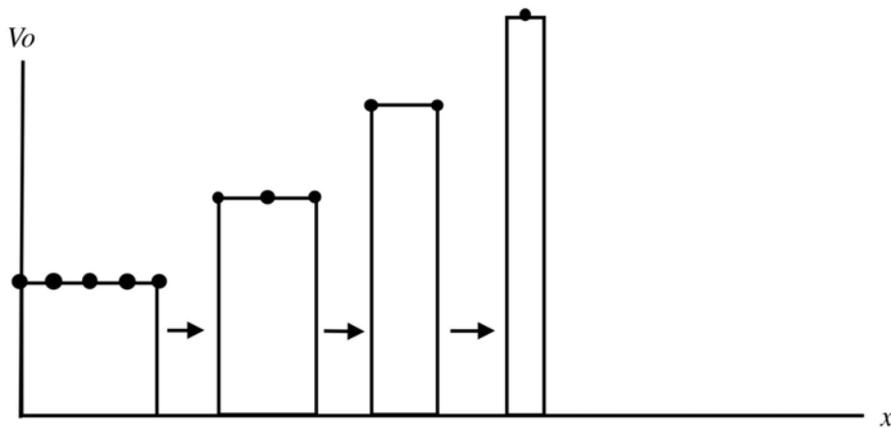


Figura 2.6: Evolución de la forma en que se toma la partición (puntos) del espacio para llegar a aproximar la delta levantando un punto. Se respeta que el área de los rectángulos es 1.

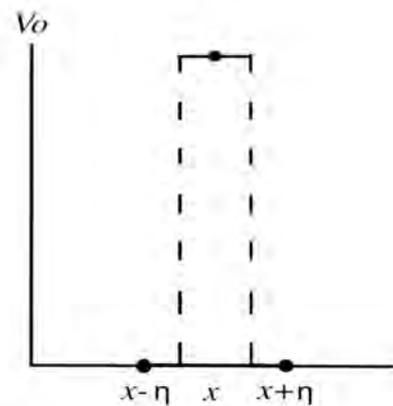


Figura 2.7: Rectángulo formado por un sólo punto, las paredes están en x y $x+\eta/2$ y $x x - \eta/2$.

Gas de Bose en cristales imperfectos

3.1. Gas ideal de bosones en 3D

En el caso general de un gas de Bose d -dimensional cuyas partículas no interactúan entre sí y no se toman en cuenta ningún tipo de espín, las ecuaciones asociadas de la temperatura crítica y el calor específico isocórico son [5]

$$T_c = \frac{c_s}{k_B} \left[\frac{s\Gamma(d/2)(2\pi)^d n}{2\pi^{d/2}\Gamma(d/2)g_{d/s}(1)} \right]^{s/d} \quad (3.1)$$

$$C_V(T) = Nk_B \frac{(d/s)(d/s + 1)g_{d/s+1}(1)^{2/3}}{g_{d/s}(1)} \quad (3.2)$$

n es N/L^d la densidad de número de partículas d -dimensional, $\Gamma(d/2)$ es la función gamma de argumento $d/2$, k_B es la constante de Boltzmann, d es la dimensión del sistema, s es el exponente de la relación energía momento (i.e. la relación de dispersión) $\varepsilon_k = c_s k^s$. La ecuación (3.1) implica que en una dimensión y en dos dimensiones no hay CBE a temperatura crítica diferente de cero para un gas ideal donde $\varepsilon_k = c_2 k^2$ con $c_2 = \hbar^2/2m$. Esto se observa pues la función de Bose $g_{d/s}(1)$ dependiente de d/s diverge para valores de $d/2 \leq 2$. En 3 dimensiones para un gas ideal de bosones libre la temperatura crítica T_0 a la cual se da la CBE es

$$T_0 = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left[\frac{\rho}{\zeta(3/2)} \right]^{(2/3)} \quad (3.3)$$

donde k_B la constante de Boltzmann, ρ la densidad del gas de bosones en 3D y $\zeta(3/2)$ la zeta de Riemann.

3.1.1. Estructura multicapas

Primero consideremos la estructura multicapas 3D en donde se tiene un gas ideal de Bose dentro de una caja de lados L_x, L_y, L_z tal que $L_x L_y L_z = V$ con V

3. GAS DE BOSE EN CRISTALES IMPERFECTOS

el volumen del sistema. De las tres direcciones una de ellas tiene planos infinitos perpendiculares a la dirección z con una separación a entre ellas y en las otras dos las partículas son libres. Se pueden encontrar las ecuaciones de la termodinámica del gas de bosones partiendo de la ecuación de número:

$$N = N_0 + N_e = N_0 + \sum_{k_x} \sum_{k_y} \sum_{k_z} \frac{1}{z_1^{-1} e^{\beta(\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y})} - 1} \quad (3.4)$$

con $z_1^{-1} = e^{\beta(\varepsilon_{k_z} - \mu)}$. Las sumas son sobre todos los valores posibles de la energía excepto el del estado base pues ese estado está considerado en N_0 . Utilizando el límite termodinámico en el cual $N \rightarrow \infty$ y $V \rightarrow \infty$ pero $N/V = cte = \rho$, además si pensamos que $L_x = L_y = L$ podemos escribir la expresión como

$$N = N_0 + \frac{L^2}{4\pi^2} \sum_{k_z} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_x dk_y}{z_1^{-1} e^{\beta(\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y})} - 1} \quad (3.5)$$

Si tomamos $k_{\perp}^2 = k_x^2 + k_y^2$ esto implica que $\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} = \frac{\hbar^2}{2m} k_{\perp}^2$ entonces podemos escribir la ecuación en coordenadas polares de la siguiente manera:

$$N = N_0 + \frac{L^2}{4\pi^2} \sum_{k_z} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{k_{\perp} dk_{\perp} d\theta}{z_1^{-1} e^{\beta(\frac{\hbar^2}{2m} k_{\perp}^2)} - 1} = N_0 + \frac{L^2}{4\pi^2} 2\pi \sum_{k_z} \int_0^{\infty} \frac{k_{\perp} dk_{\perp}}{z_1^{-1} e^{\beta(\frac{\hbar^2}{2m} k_{\perp}^2)} - 1} \quad (3.6)$$

Haciendo el cambio de variable $s = \beta \frac{\hbar^2}{2m} k_{\perp}^2$ y $ds = \frac{\beta \hbar^2}{m} k_{\perp} dk_{\perp}$ podemos escribir la ecuación (3.6) como:

$$N = N_0 + \frac{L^2}{2\pi} \frac{m}{\beta \hbar^2} \sum_{k_z} \int_0^{\infty} \frac{ds}{z_1^{-1} e^s - 1} \quad (3.7)$$

Por último, se compara la integral con la función de Bose correspondiente, se divide todo el sistema entre V y la densidad de partículas de nuestro sistema se iguala a la densidad del gas ideal de bosones en 3D que es $\rho_{3D} = \frac{N}{L^2(M+1)a} = \frac{\zeta(3/2)}{\lambda_0^3}$ donde λ_0 es la longitud de onda de De Broglie y $\zeta(3/2)$ es la función zeta de Riemann valuada en $3/2$. No hay que perder de vista que la suma sobre k_z sigue corriendo sobre todas las energías accesibles en la dirección z . Para dejar de escribir el término N_0 en la ecuación (3.7) éste puede entrar a la suma y la única diferencia es que ésta contaría desde la energía del estado base. Haciendo las sustituciones correspondientes, la ecuación (3.7) se convierte en

$$1 = -\frac{\lambda_0}{\zeta(3/2)(M+1)a} \frac{T}{T_0} \sum_{k_z} \ln(1 - \exp(\beta(\mu - \varepsilon_{k_z}))) \quad (3.8)$$

Para calcular la derivada del potencial químico derivamos la expresión anterior y se obtiene:

$$0 = \sum_{kz} (\ln(1 - \exp(\beta(\mu - \varepsilon_{kz}))) - \sum_{kz} \frac{\exp(\beta(\mu - \varepsilon_{kz}))}{1 - \exp(\beta(\mu - \varepsilon_{kz}))} \left(T \frac{\partial \mu}{\partial T} \beta + \beta(\varepsilon_{kz} - \mu) \right)) \quad (3.9)$$

de donde despejando el término deseado da como resultado:

$$T \frac{\partial \mu}{\partial T} \beta = \frac{\sum_{kz} (\ln(1 - \exp(\beta(\mu - \varepsilon_{kz}))) - \beta \frac{\exp(\beta(\mu - \varepsilon_{kz}))}{1 - \exp(\beta(\mu - \varepsilon_{kz}))} (\varepsilon_{kz} - \mu))}{\sum_{kz} \frac{\exp(\beta(\mu - \varepsilon_{kz}))}{1 - \exp(\beta(\mu - \varepsilon_{kz}))}} \quad (3.10)$$

Es posible encontrar la expresión para la energía interna partiendo de la siguiente expresión, donde de nueva cuenta las sumas son sobre todas las energías accesibles para cada dirección

$$U = \sum_{kx} \sum_{ky} \sum_{kz} \frac{\varepsilon_{kx} + \varepsilon_{ky} + \varepsilon_{kz}}{e^{\beta(\varepsilon_{kx} + \varepsilon_{ky} + \varepsilon_{kz} - \mu)} - 1} \quad (3.11)$$

lo cual en el al límite termodinámico se puede escribir

$$U = \frac{L^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{kz} \frac{\varepsilon_{kx} + \varepsilon_{ky} + \varepsilon_{kz}}{e^{\beta(\varepsilon_{kx} + \varepsilon_{ky} + \varepsilon_{kz} - \mu)} - 1} dk_x dk_y \quad (3.12)$$

donde no hemos separado la contribución del estado base. Haciendo el cambio de variable $\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{kx} + \varepsilon_{ky}$ tenemos

$$U = \frac{L^2}{4\pi^2} \int \int \sum_{kz} \frac{\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_{kz}}{e^{\beta(\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_{kz} - \mu)} - 1} dk_x dk_y \quad (3.13)$$

Para calcular las integrales hacemos el mismo cambio de coordenados realizado en (3.5) así la ecuación (3.13) queda

$$U = \frac{L^2 m}{2\pi \hbar^2} \int_0^{\infty} \sum_{kz} \left[\frac{1}{\beta^2} \frac{x}{z_1^{-1} e^x - 1} + \frac{1}{\beta} \frac{\varepsilon_{kz}}{z_1^{-1} e^x - 1} \right] dx \quad (3.14)$$

que en términos de las funciones de Bose se puede escribir como:

$$U = \frac{L^2 m}{2\pi \hbar^2} \sum_{kz} \left[\frac{g_2(z_1)}{\beta^2 \Gamma(2)} + \frac{g_1(z_1) \varepsilon_{kz}}{\beta \Gamma(1)} \right] \quad (3.15)$$

Dividiendo ambos miembros entre $Nk_B T$, cambiando el término N por la ecuación (3.7), refiriendo esta energía respecto a la energía del estado base y agrupando términos se obtiene:

$$\frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} = \frac{L^2 m}{2\pi \hbar^2 N} \sum_{kz} \left[\frac{1}{\beta} g_2(z_1) + (\varepsilon_{kz} - \varepsilon_0) g_1(z_1) \right] \quad (3.16)$$

3. GAS DE BOSE EN CRISTALES IMPERFECTOS

Utilizando la densidad del gas de bosones en 3D y dividiendo todo entre $\frac{k_B T_0}{k_B T}$

$$\frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} = \frac{\lambda_0}{\zeta(3/2)(M+1)a} \frac{T}{T_0} \sum_{kz} [g_2(z_1) + \beta(\varepsilon_{kz} - \varepsilon_0)g_1(z_1)] \quad (3.17)$$

Por último usando que $C_V = (\partial U / \partial T)_V$ se obtiene

$$\begin{aligned} C_V / Nk_B = & \frac{\lambda_0}{\zeta(3/2)(M+1)a} \frac{T}{T_0} \sum_{kz} [2g_2(z_1) + \\ & g_1(z_1)(\beta(2\varepsilon_{kz} - \varepsilon_0 - \mu) + \frac{1}{k_B} \frac{\partial \mu}{\partial T}) + \\ & g_0(z_1)\beta(\varepsilon_{kz} - \varepsilon_0)(-\beta(\mu - \varepsilon_{kz}) + \frac{1}{k_B} \frac{\partial \mu}{\partial T})] \end{aligned} \quad (3.18)$$

3.1.2. Cristal unidimensional

Para el caso unidimensional sólo hay CBE para un IBG a temperatura distinta de cero cuando la estructura presenta imperfecciones [19]. Para calcular las propiedades termodinámicas del sistema 1D partimos de la ecuación de número para partículas bosónicas

$$N = N_0 + \sum_{\varepsilon \neq \varepsilon_0} n_\varepsilon \quad (3.19)$$

donde N_0 es el número de partículas que se encuentran en el estado base, n_ε es la función de distribución de Bose, i.e. $1/(e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1)$, μ es el potencial químico, $\beta = 1/k_B T$ con k_B la constante de Boltzmann y T la temperatura, para hacer más fácil visualmente la notación consideraré el término N_0 dentro de la suma y ésta correrá sobre todas las energías posibles

$$N = \sum \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} \quad (3.20)$$

Supongamos que el gas se encuentra en una caja cuyo lado mide L y dividimos la expresión (3.20) entre L el resultado es

$$N/L = \sum \frac{1}{L(e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1)} \quad (3.21)$$

por otro lado sabemos que $L = (M+1)a$ donde M es el número de deltas en el sistema y a la separación entre ellas. Volvemos a utilizar la densidad ρ del gas ideal de bosones libres en 3D para fijar a densidad lineal \mathcal{L} del sistema unidimensional.

Ocupamos ρ como una convención de manera que $\rho^{1/3} = \mathcal{L}$ es expresada de la siguiente manera $\mathcal{L} = \frac{N}{(M+1)a} = \rho^{1/3}$

$$\zeta(3/2)^{1/3} = \lambda_0 \mathcal{L} = \frac{N}{(M+1)a} \quad (3.22)$$

Por último podemos hacer lo siguiente:

$$1 = \frac{1}{\zeta(3/2)^{1/3}} \frac{N}{(M+1)a} \quad (3.23)$$

Para calcular la $d\mu/dT$ derivamos (3.23) respecto a la temperatura obtenemos lo siguiente

$$0 = \sum \frac{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1)^2} \left[-\frac{\beta(\varepsilon - \mu)}{T} - \beta \frac{\partial \mu}{\partial T} \right] \quad (3.24)$$

por último despejamos y obtenemos la siguiente relación

$$\frac{\partial \mu}{\partial T} = - \frac{\sum \frac{\beta(\varepsilon-\mu)e^{\beta(\varepsilon-\mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1)^2}}{\sum \frac{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1)^2}} \quad (3.25)$$

La energía interna del sistema referida a la energía $N\varepsilon_0$ es la siguiente

$$U - N\varepsilon_0 = \sum \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} \quad (3.26)$$

De nueva cuenta la suma corre sobre todos los posibles valores de la energía accesibles en el sistema. Para obtener el calor específico isocórico basta con derivar la energía interna por lo que tenemos

$$C_V = \frac{dU}{dT} = \sum \frac{-\varepsilon e^{\beta(\varepsilon-\mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1)^2} \left((\varepsilon - \mu) \frac{d\beta}{dT} - \beta \frac{d\mu}{dT} \right) \quad (3.27)$$

3.2. Temperatura crítica de CBE en sistemas finitos como el máximo del calor específico

En sistemas infinitos la condensación de Bose-Einstein ocurre a una temperatura bien definida $T_c(\infty)$ donde el calor específico muestra un cambio brusco (pico ó salto), mientras que en sistemas finitos el pico o salto se suaviza por lo que la temperatura asociada a la CBE proponemos que sea en la temperatura T_{cm} en la que el C_V alcanza un máximo y que en el límite termodinámico el valor

T_{cm} tiende a $T_c(\infty)$.

La razón por la cual escogimos utilizar el máximo valor del calor específico para asociarlo como la temperatura crítica del sistema finito es porque en el sistema infinito donde ocurre una transición de fase de segundo orden que se muestra como una discontinuidad en la gráfica del C_V , se observa que se vuelve a simplemente un máximo para el sistema finito correspondiente como ya se ha estudiado con anterioridad [9]. También en [18] se analiza también la posibilidad de considerar otros parámetros diferentes del máximo del C_V para identificar la temperatura crítica del sistema finito pero se concluye que la temperatura del máximo C_V es lo más indicado.

3.2.1. Temperatura crítica como función del porcentaje de vacancias para el sistema 1D y 3D

Tal como lo sugiere Pathria y Pajkowski [18] se calculó la temperatura crítica T_{cm} para el gas de bosones no interactuantes con 101, 201, 501, 1001 deltas/planos y el límite al infinito de deltas/planos. En todos los casos se quitaron diversos porcentajes de deltas/planos al azar excepto donde se indica.

Cuando el gas de bosones se encuentra confinado en un cristal unidimensional con diferente número de deltas totales, al cual se le quita al azar un porcentaje específico del número total de deltas localizamos la temperatura a la cual el C_V presenta un máximo cuya magnitud aumenta conforme aumentamos el tamaño del sistema con la confianza de que cuando el sistema se vaya al infinito el máximo se convierta en un salto característico de una transición de fase de segundo orden y es ahí donde se da la CBE. Esta T_{cm} puede variar dependiendo del tamaño total del sistema y de en que parte del sistema se le quiten las deltas o planos. Como explicamos en la parte de las propiedades termodinámicas, éstas dependen de la energía del sistema. De esta manera para para abarcar más posibilidades de arreglos del sistema, se quitó el mismo porcentaje de deltas/planos en distintas posiciones del espacio de manera aleatoria, con esto se obtuvieron diferentes espectros de energías para cada uno de esos sistemas con un porcentaje de vacancias al azar, resolviendo la ecuación de Schrödinger correspondiente con el método de Diferencias Finitas. Después se calculó el C_V para cada uno de los distintos arreglos de vacancias y se identificó la temperatura T_{cm} donde el valor de C_V adquiriera un máximo. El número de veces que se modificó el arreglo al azar se consideró suficientes cuando el error porcentual en la temperatura máxima promedio \bar{T}_{cm} fue menor al 2% y se tomó la medición como confiable. Un ejemplo de las mediciones del valor máximo del C_V y su respectiva T_{cm}/T_0 se puede encontrar en la Tabla 3.1. En la Tabla 3.2 se muestran los valores de \bar{T}_{cm}/T_0 para 101, 201, 501 y 1001 deltas iniciales con diferentes porcentajes de vacancias removidas al azar.

3.2 Temperatura crítica de CBE en sistemas finitos como el máximo del calor específico

En la Tabla 3.3 se muestra \bar{T}_{cm}/T_0 para 101, 201, 501 y 1001 planos iniciales con diferentes porcentajes de vacancias al azar. Para calcular el valor de la temperatura en el límite en el que el sistema se vuelve infinito únicamente se hizo una regresión lineal con los datos obtenidos de los sistema de bosones en 1D y para aquellos en 3D para $M=101, 201, 501$ y 1001 deltas/planos y para los diferentes porcentajes de deltas removidas. En la figura 3.1 se muestra esta regresión para el caso multiplanos con 15 % de planos removidos.

Tirada	T_{cm}/T_0	máximo de C_V/Nk_B
1	1.64	3.417
2	1.64	3.417
3	1.63	3.413
4	1.64	3.413
5	1.64	3.417
6	1.64	3.417
7	1.64	3.416
8	1.64	3.417
9	1.64	3.417
10	1.63	3.412
Promedio	1.64	3.416
Incertidumbre	± 0.01	± 0.004

Tabla 3.1: Valores de la temperatura T_{cm}/T_0 a la que se encuentra el C_V máximo para el gas de bosones dentro de un cristal multicapas 3D con 1001 planos originales a los que se quitaron al azar 15 % de ellos. Se hicieron 10 tiradas debido a que el valor de la temperatura en estas tiradas sólo cambió 0.01 su valor, así que su error porcentual estaba por debajo del 2 %

3. GAS DE BOSE EN CRISTALES IMPERFECTOS

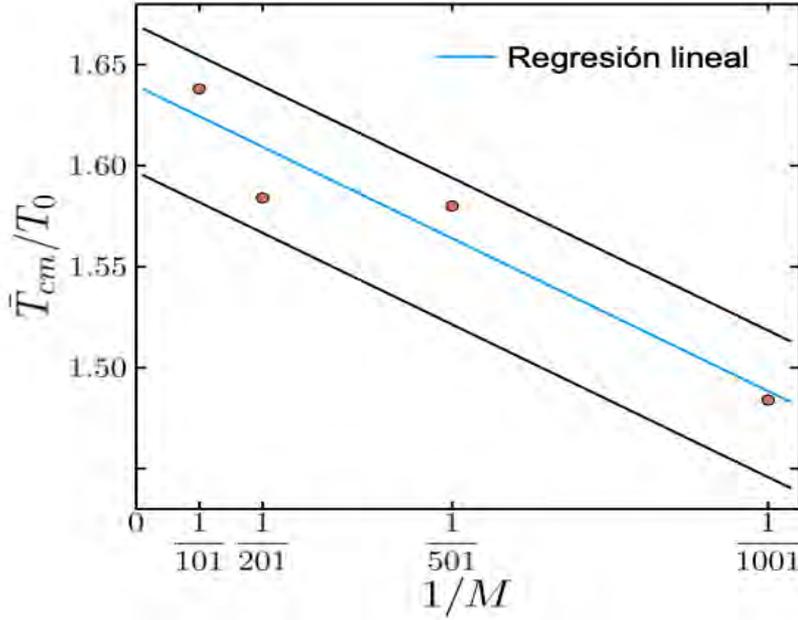


Figura 3.1: Regresión lineal para 15% de planos removidos del gas de bosones dentro de un sistema multicapas 3D con 1001 planos iniciales.

La curva que se ajustó es una recta de la forma $y = mx + b$. Para conocer el término b en el infinito de cada porcentaje de deltas/planos removidos bastó con conocer la ordenada al origen haciendo $m = 0$ de la recta ajustada pues cuando el número de deltas $M \rightarrow \infty$ el cociente $1/M \rightarrow 0$. Para conocer la incertidumbre del parámetro b se siguió lo propuesto por Manzur [26] en donde se ajusta una recta por debajo y otra por arriba a la dada por el método de mínimos cuadrados. Estas líneas se ajustan tomando en cuenta el error de los puntos a los que se les hizo la regresión lineal. Con estas nuevas líneas se conocen b_{max} y b_{min} , y se calcula la incertidumbre del parámetro b así

$$\Delta b = \frac{b_{max} - b_{min}}{2} \quad (3.28)$$

En la figura 3.1 se pueden apreciar estas rectas, para este ejemplo el valor de b_{min} es 1.59 mientras que el valor de b_{max} es 1.68 por lo que la temperatura de los máximos del C_V cuando $M \rightarrow \infty$ tiende al valor $T_{cm} = 1.641 \pm 0.078$ como puede verse en la Tabla 3.4

3.2 Temperatura crítica de CBE en sistemas finitos como el máximo del calor específico

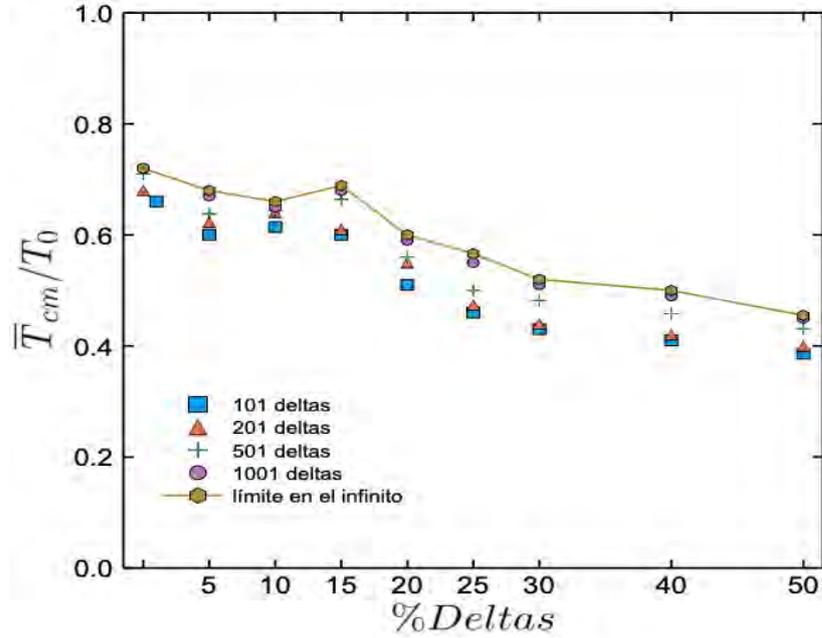


Figura 3.2: \bar{T}_{cm}/T_0 como función del porcentaje de deltas removidas para el gas 1D de bosones dentro de un cristal con 101, 201, 501 y 1001 deltas iniciales, $P = 10$.

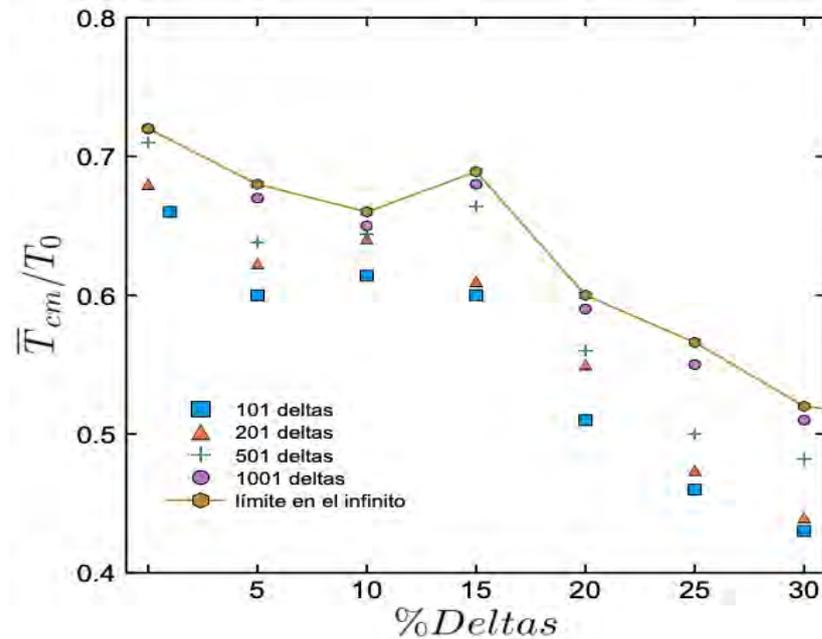


Figura 3.3: Ampliación de la figura 3.2 alrededor del 15% de vacancias donde la temperatura crítica promedio \bar{T}_{cm} muestra un máximo local T_{cmM} .

3. GAS DE BOSE EN CRISTALES IMPERFECTOS

En la figura 3.2 cada punto muestra el promedio de todas las temperaturas obtenidas para cada porcentaje de deltas removidas, excepto en el caso donde se removió una delta pues esa fue siempre la de en medio del sistema. Como ya se mencionó anteriormente la incertidumbre es menor al 2% además se muestra un máximo local de \bar{T}_{cm}/T_0 para el sistema unidimensional se encuentra entre 10% y 15% de vacancias aunque cuando se quita una delta el valor de \bar{T}_{cm}/T_0 también está por encima y muy cercano al encontrado entre 10%-15%. La Tabla 3.2 muestra los valores de los puntos mostrados en la figura 3.2.

$\% \backslash M$	101	201	501	1001	∞
5	0.600	0.623	0.638	0.670	0.680 ± 0.045
10	0.614	0.641	0.644	0.650	0.660 ± 0.075
15	0.600	0.610	0.664	0.680	0.689 ± 0.049
20	0.510	0.550	0.560	0.590	0.600 ± 0.050
25	0.460	0.474	0.500	0.550	0.566 ± 0.069
30	0.430	0.444	0.482	0.510	0.520 ± 0.050
40	0.410	0.420	0.458	0.493	0.500 ± 0.048
50	0.386	0.400	0.431	0.450	0.455 ± 0.037

Tabla 3.2: Tabla de valores de \bar{T}_{cm}/T_0 del sistema 1D del gas de bosones dentro de un cristal 1D con $M = 101, 201, 501$ y 1001 deltas iniciales para distintos porcentajes de vacancias. La cuarta columna muestra el valor de $T_{cm\infty}/T_0$ y la incertidumbre está asociada a la regresión lineal hecha para predecir el caso de $M = \infty$.

3.2 Temperatura crítica de CBE en sistemas finitos como el máximo del calor específico

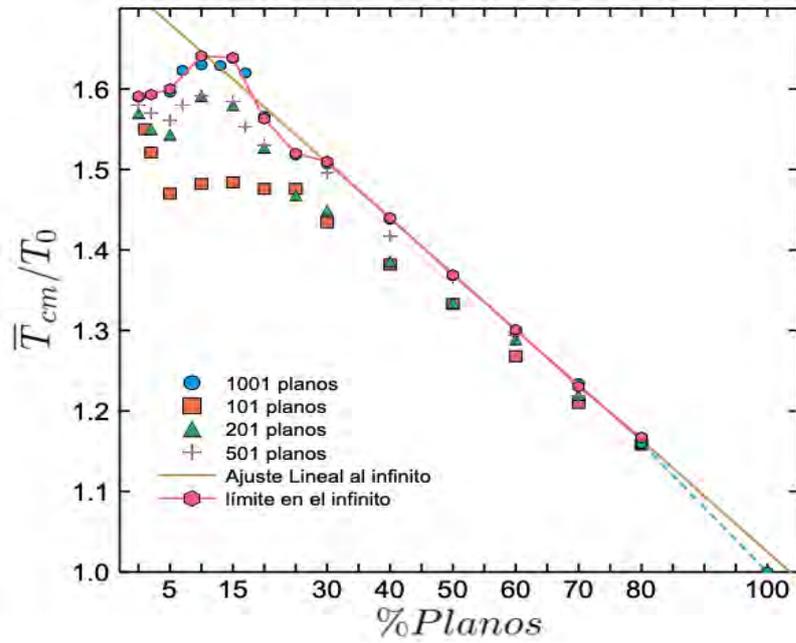


Figura 3.4: Promedio de la temperatura entre la temperatura de referencia contra el porcentaje de planos removidos para el gas 3D de bosones dentro de un cristal con 101, 201, 501 y 1001 planos iniciales, $P = 10$.

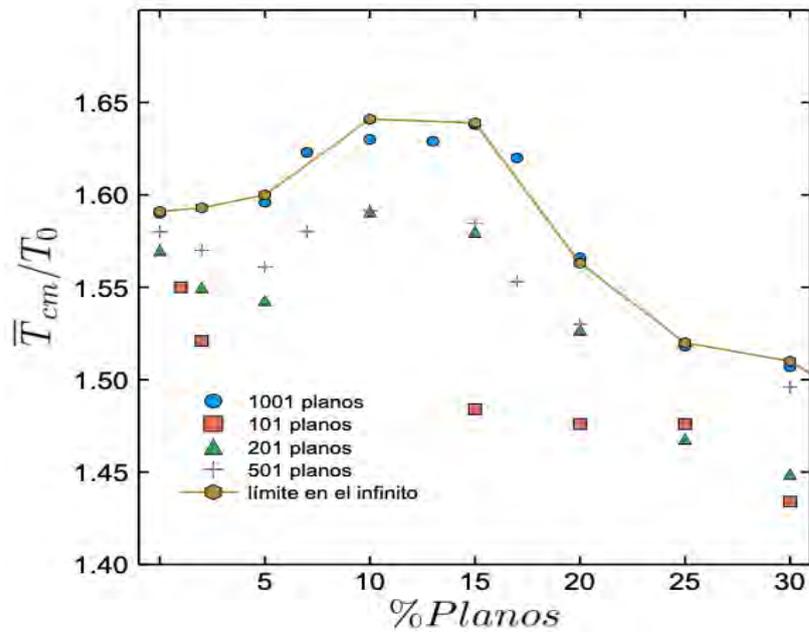


Figura 3.5: Ampliación de la figura 3.4 en la zona de la máxima \bar{T}_{cm} .

3. GAS DE BOSE EN CRISTALES IMPERFECTOS

La figura 3.4 muestra la gráfica de los valores \bar{T}_{cm}/T_0 para un sistema 3D donde en una de las direcciones hay planos mientras que en las dos restantes las partículas se mueven libremente. Cada punto muestra el promedio de la estadística hecha para la T_{cm}/T_0 donde de nueva cuenta el máximo de esta temperatura T_{cmM} está entre 10% y 15% de planos removidos. Se hizo un ajuste lineal para el caso infinito tomando los puntos a partir del 30% de planos removidos al azar, esto con el fin de corroborar el valor de T_{cm} cuando se remueve toda la estructura. En la Tabla 3.3 se muestran los valores de los puntos mostrados en la figura 3.4.

$\% \backslash M$	101	201	501	1001	∞
5	1.470	1.543	1.561	1.596	1.597 ± 0.049
10	1.482	1.591	1.592	1.630	1.600 ± 0.076
15	1.484	1.580	1.584	1.638	1.641 ± 0.078
20	1.476	1.527	1.530	1.566	1.563 ± 0.053
25	1.476	1.468	1.518	1.518	1.520 ± 0.024
30	1.434	1.449	1.496	1.507	1.510 ± 0.015
40	1.382	1.386	1.417	1.438	1.440 ± 0.037
50	1.333	1.334	1.366	1.368	1.396 ± 0.028
60	1.268	1.289	1.294	1.298	1.301 ± 0.027
70	1.210	1.220	1.219	1.234	1.230 ± 0.020
80	1.158	1.160	1.164	1.167	1.167 ± 0.012

Tabla 3.3: Tabla de valores de \bar{T}_{cm}/T_0 del sistema 3D del gas bosones dentro de un cristal con $M = 101, 201, 501$ y 1001 planos iniciales para distintos porcentajes de vacancias. La cuarta columna muestra el valor de $T_{cm\infty}/T_0$ y la incertidumbre está asociado a la regresión lineal hecha para predecir el caso de $M = \infty$.

Resumiendo, en el caso del gas de bosones en un cristal 1D los datos tienen su valor más elevado cuando se remueve una delta, conforme aumentamos la fracción de vacancias la \bar{T}_{cm} disminuye para luego alcanzar un máximo cerca del 10%-15% de deltas removidas y termina con los valores agrupándose y tendiendo a cero que es lo que se espera pues cuando el sistema no tiene estructura no existe CBE con temperatura mayor que cero.

Para el sistema del gas de bosones en multicapas 3D la gráfica tiene el mismo comportamiento empezando con un valor elevado cuando se remueve un plano, luego alcanza un máximo cerca del 10 %-15 % que a diferencia del caso con una dimensión es más pronunciado y termina con los valores agrupándose y tendiendo al valor de la temperatura en el cual existe una transición de fase pues en 3D aún sin estructura se sabe que existe CBE.

Gas de Bose en una caja infinita				
	Libre	con Peine de Dirac	con Peine de Dirac menos 1	con Peine de Dirac menos 15 %
1D	0	0	0.828	0.689 ±0.049
3D	1	0.874	1.599	1.641 ±0.078

Tabla 3.4: Tabla de valores de \bar{T}_{cm}/T_0 para el gas ideal de bosones en 1D y 3D dentro de una caja de longitud infinita sin Peine de Dirac, con Peine de Dirac sin vacancias, con Peine de Dirac con 1 vacancias y con 15 % de vacancias.

En la tabla 3.4 resumimos los valores de las temperaturas criticas para el gas ideal de bosones en 1D y 3D sin Peine de Dirac, con Peine de Dirac sin vacancias, con Peine de Dirac con 1 vacancias y con 15 % de vacancias.

3.3. Propiedades termodinámicas del gas ideal de Bose en un cristal 1D con vacancias

3.3.1. Caso con una vacancia

Ahora se mostrarán las siguientes propiedades termodinámicas del gas ideal de Bose dentro de una caja 1D con 101, 201, 501 y 1001 deltas igualmente espaciadas a una distancia a , en todas será removida la delta del centro del sistema dejando la mitad de las deltas del lado izquierdo y la otra mitad del lado derecho desde donde fue removida delta central. Es necesario volver a mencionar que todos los cálculos se hicieron con condiciones de frontera de Dirichlet.

3.3.1.1. Potencial químico y su derivada

Para conocer el C_V de manera precisa era necesario obtener el potencial químico y su derivada con respecto a la temperatura.

Notemos que el potencial químico para temperaturas bajas tiende al valor del estado base de la energía del sistema en cuestión. Para temperaturas mayores a

3. GAS DE BOSE EN CRISTALES IMPERFECTOS

la crítica el potencial químico empieza a disminuir su valor respecto a la energía del estado base como se muestra en la figura 3.6.

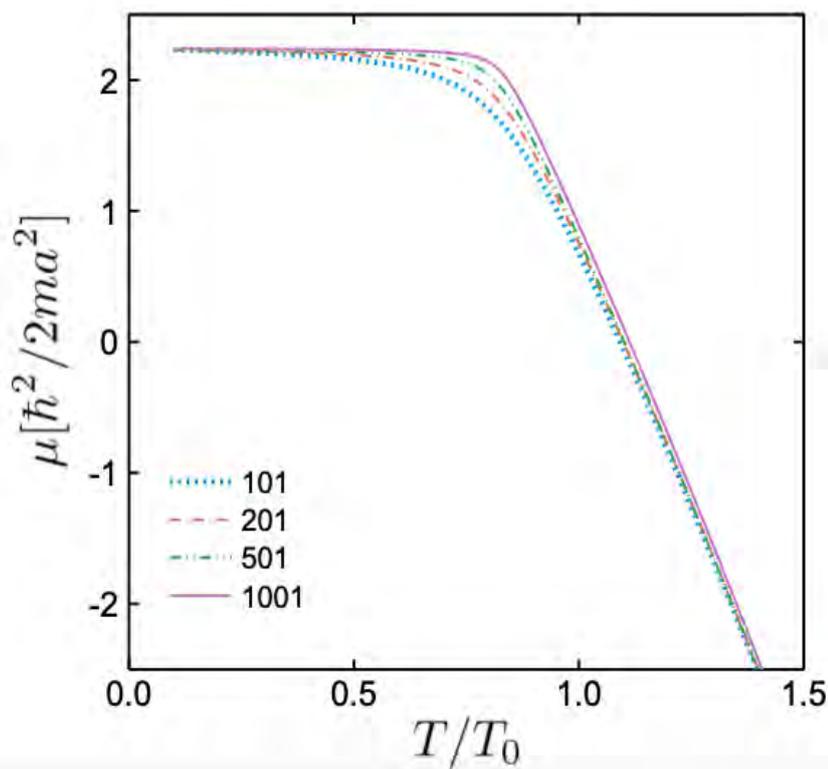


Figura 3.6: Potencial químico en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ del gas de bosones 1D dentro de un cristal con 101, 201, 501 y 1001 deltas menos la delta central como función de la temperatura normalizada T/T_0 , $P = 10$.

La derivada del potencial la obtenemos gracias a la ecuación (3.25) en ella observamos que la derivada es siempre decreciente. La figura 3.7 muestra este comportamiento.

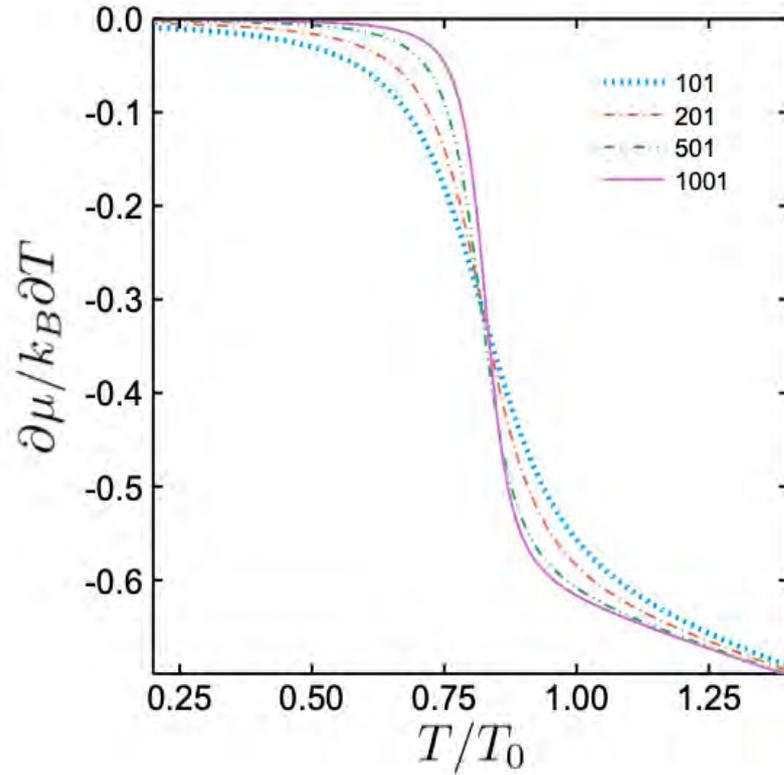


Figura 3.7: Derivada del potencial químico del gas de bosones 1D dentro en un cristal con 101, 201, 501 y 1001 deltas originales menos la delta central contra la temperatura normalizada T/T_0 , $P = 10$.

3.3.1.2. Fracción del condensado

La fracción del condensado definida como

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{N_e}{N} \quad (3.29)$$

escribiendo N y N_e como se dedujo a partir de la ecuación de número (3.4), la fracción condensada en una dimensión se puede escribir como

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{1}{\zeta(3/2)^{1/3}} \frac{1}{(M+1)a} \sum \frac{1}{(e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1)} \quad (3.30)$$

La gráfica es mostrada en la figura 3.8 donde se aprecia que para los 4 sistemas analizados a una temperatura cero la fracción de condensado parte de uno y llega a cero en T_{cm}/T_0

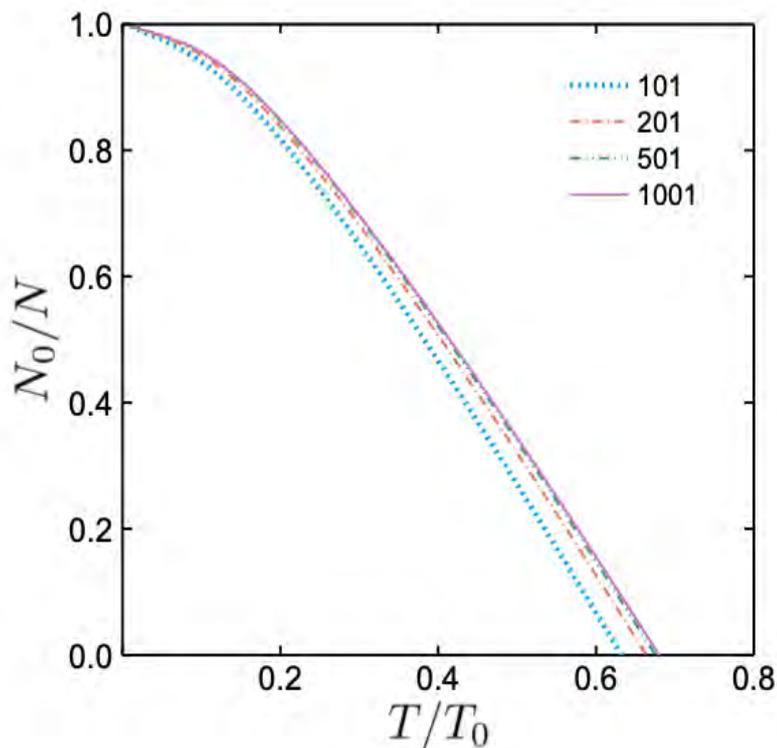


Figura 3.8: Fracción de condensado para un gas de bosones 1D dentro de un cristal con 101, 201, 501 y 1001 deltas menos la delta central, $P = 10$.

3.3.1.3. Energía interna

La gráfica 3.9 muestra que la energía por partícula referida a la energía del estado base ε_0 y dividido $k_B T$ crece de manera casi lineal hasta el valor de la temperatura donde el C_V alcanza su valor máximo en T_{cm} , después de cruzar este valor la energía empieza a decrecer y a temperaturas altas tiende a un valor constante $1/2$ que como se sabe es el valor de un gas clásico unidimensional.

Con la ecuación (3.25) es posible conseguir la siguiente expresión dividiendo todo entre $Nk_B T$

$$\frac{U - N\varepsilon_0}{Nk_B T} = \sum \frac{\beta(\varepsilon - \varepsilon_0)}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1} \quad (3.31)$$

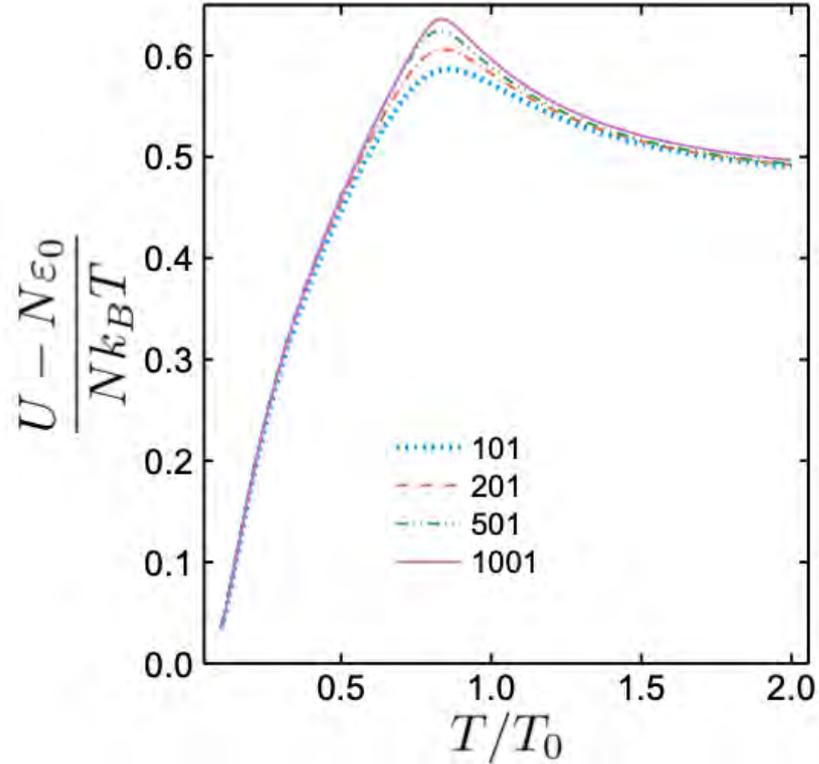


Figura 3.9: Energía interna por partícula referida a la energía interna del estado base ε_0 y dividida por $k_B T$, de un gas de bosones 1D dentro de un cristal originalmente con 101, 201, 501 y 1001 deltas menos la delta central, $P = 10$.

3.3.1.4. Calor específico isocórico

Estudiamos el calor específico isocórico con el fin de conocer mejor la transición de fase que ocurre cuando se obtiene la CBE. Una transición de fase muestra el momento en el que el sistema cambia su estado en términos de las variables termodinámicas asociadas a éste. Una clasificación de las transiciones de fase desde el punto de vista clásico fue hecha por Ehrenfest [25] donde la transición de fase implica la existencia de discontinuidades en alguna derivada de la energía interna, estableciendo el orden de la transición como el orden de la derivada de la energía interna que presenta la discontinuidad, como el C_V es la derivada de la energía respecto a la temperatura, si ésta presenta alguna discontinuidad entonces el sistema presenta una transición de segundo orden. Como en este caso el sistema es finito tenemos únicamente un cambio abrupto hasta llegar el sistema infinito como se observa en la figura 3.10

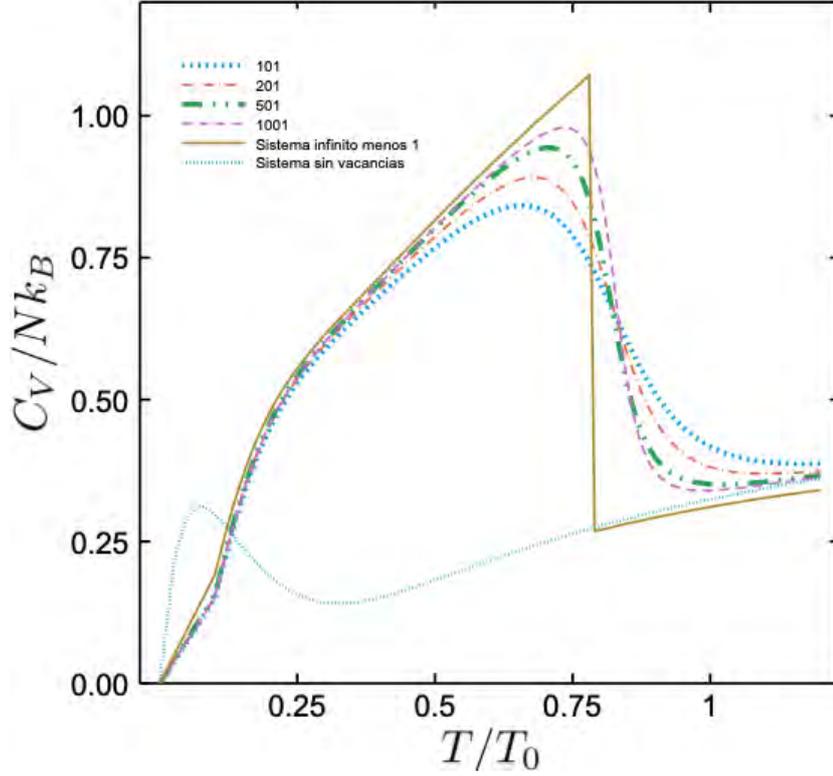


Figura 3.10: Calor específico isocórico de un gas de bosones dentro de un cristal 1D con 101, 201, 501, 1001 e infinitas deltas menos la delta central, se incluye el sistema perfecto, para todos los casos $P = 10$.

En la figura 3.10 se muestra el calor específico isocórico de 4 sistemas cada uno con mayor cantidad de deltas hasta llegar al sistema con deltas infinitas, recreando los cálculos mostrados en [9]. La delta central ha sido removida. Es posible notar que conforme va creciendo el sistema en número de deltas el valor de la temperatura asociado a la transición de fase también crece hasta convertirse en una transición de fase real en el infinito, para un sistema con infinitas deltas. También mostramos el C_V para el sistema perfecto, donde se muestra que no existe un CBE pues la curva no muestra la característica discontinuidad que ocurre en transiciones de fase de segundo orden.

3.3.2. Caso fracciones de vacancias

Los sistemas de los cuales se mostrarán las propiedades cuando se remueven porcentajes de vacancias serán aquellos que tienen 15% de vacancias, que son los sistemas que cuentan con la máxima \bar{T}_{cm} es decir T_{cmM} , como se puede observar

en la figura 3.2. Es importante aclarar que este caso no representa la máxima T_{cmM} del sistema, pues ésta se encuentra cuando se remueve una sola delta, sin embargo representa la máxima T_{cmM} para los casos donde se remueven varias deltas al azar.

3.3.2.1. Potencial químico y su derivada

Debido a que cuando se introducen alrededor de 10% de vacancias el estado base de energía del sistema baja, el potencial químico se ve afectado pues para temperaturas debajo de la temperatura crítica éste toma el valor del estado base del espectro de energía como es posible observar en la figura 3.11, mientras que la derivada del potencial químico se encuentra en la figura 3.12.

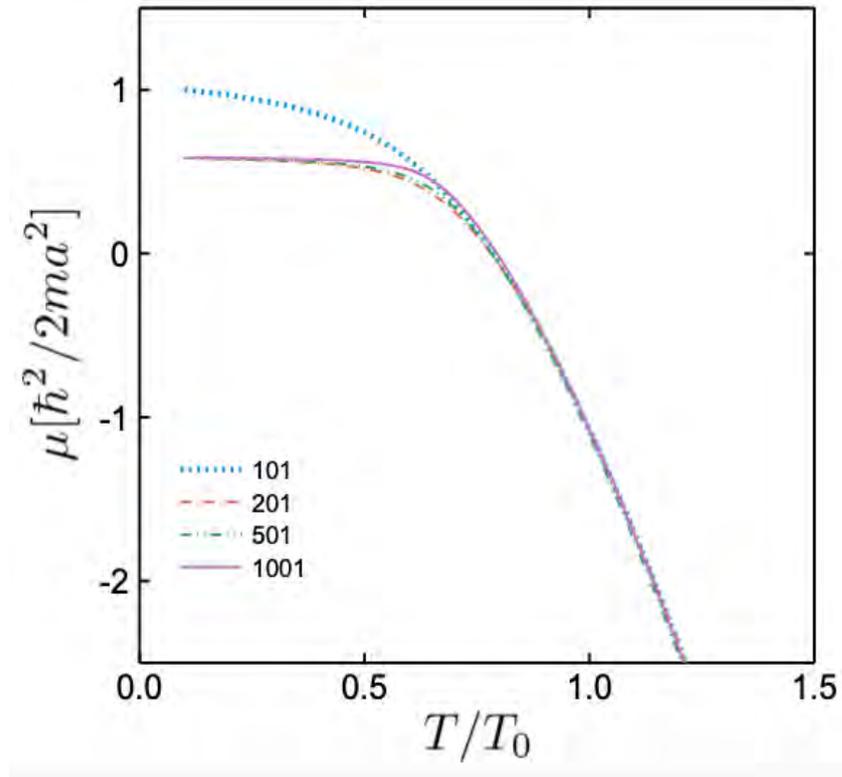


Figura 3.11: Potencial químico en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ de un gas de bosones 1D dentro de un cristal con 101, 201, 501 y 1001 deltas menos 15% de deltas removidas al azar, $P = 10$.

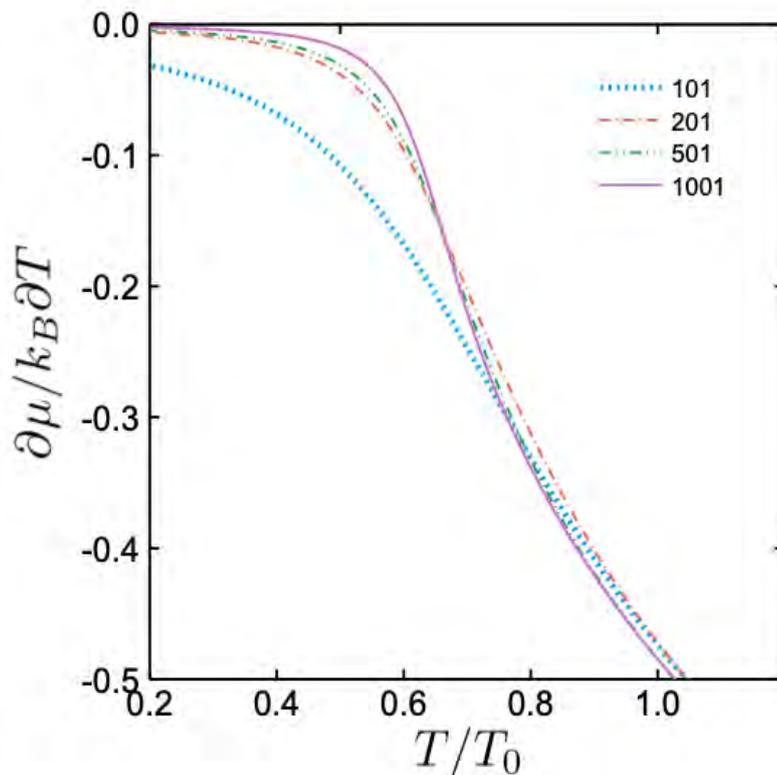


Figura 3.12: Derivada del potencial químico de un gas de bosones dentro de un cristal 1D con 101, 201, 501 y 1001 deltas menos 15% de deltas removidas al azar, $P = 10$.

La derivada potencial químico sigue con el mismo comportamiento decreciente donde hay un punto de inflexión en T_{cm}/T_0 para todos los sistemas mostrados.

3.3.2.2. Fracción del condensado

La fracción de condensado cuando se remueven 15% de vacancias en todos los sistemas es casi el mismo como la figura 3.13 muestra.

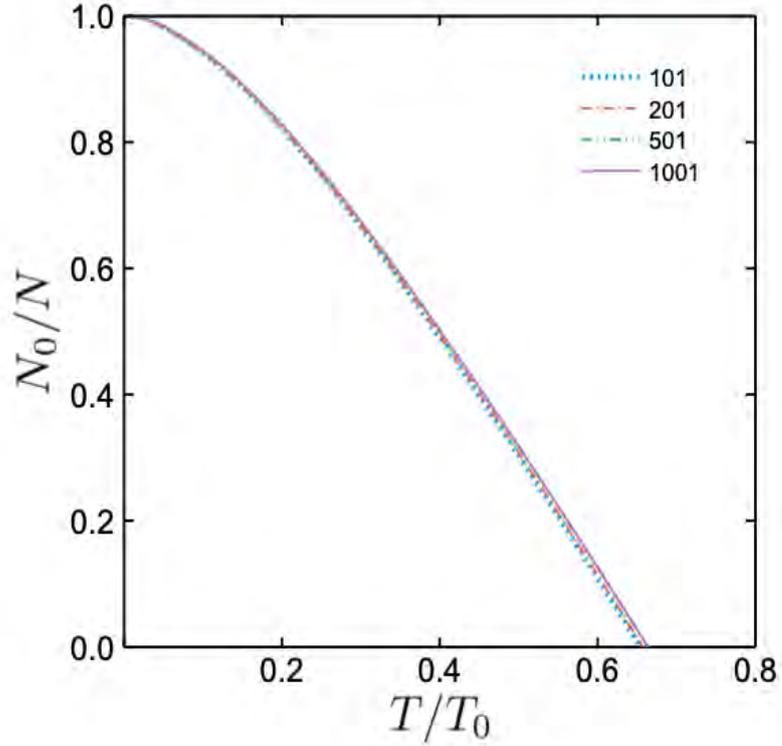


Figura 3.13: Fracción de condensado de un gas de bosones dentro de un cristal 1D con 101, 201, 501 y 1001 deltas menos 15% de deltas removidas al azar, $P = 10$.

3.3.2.3. Energía Interna

La energía por partícula, referida a la energía del estado base y dividida por $k_B T$, también muestra un comportamiento parecido al caso en el que sólo una delta es removida con la diferencia de que el valle en T_{cm}/T_0 está menos acentuado, después de esta temperatura el valor al que tiende es al de un gas ideal clásico en una dimensión. La figura 3.14 muestra este comportamiento.

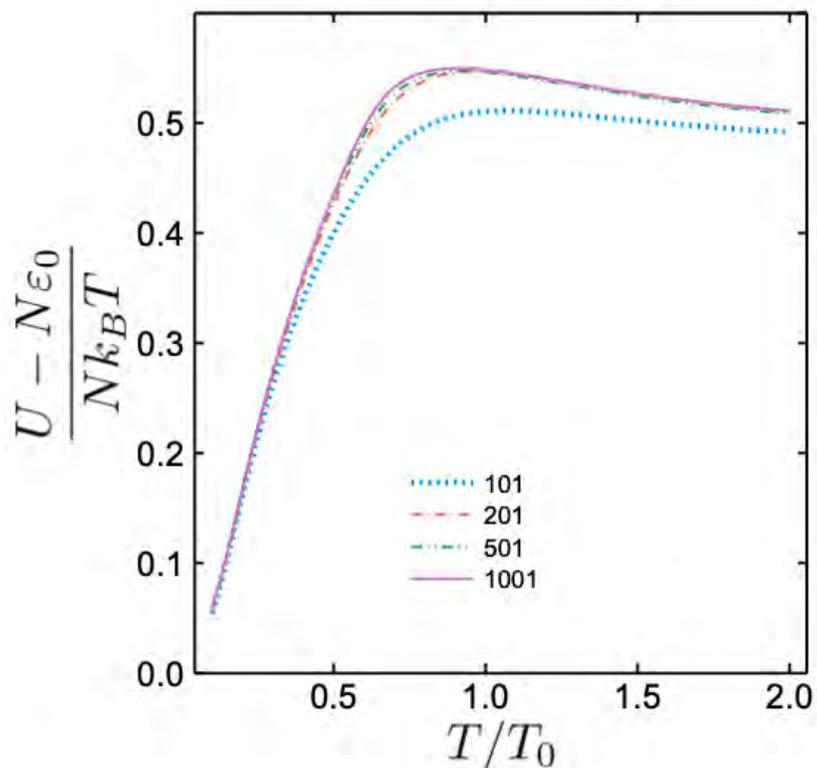


Figura 3.14: Energía interna por partícula referida a la energía del estado base y dividida por $k_B T$ de un gas de bosones 1D dentro de un cristal con 101, 201, 501 y 1001 deltas menos 15% de deltas removidas al azar, $P = 10$.

3.3.2.4. Calor específico isocórico

La figura 3.15 muestra un comportamiento similar al caso en el que sólo una delta es removida, la diferencia se encuentra en que los valores del C_V están por debajo de los del caso anteriormente mencionado.

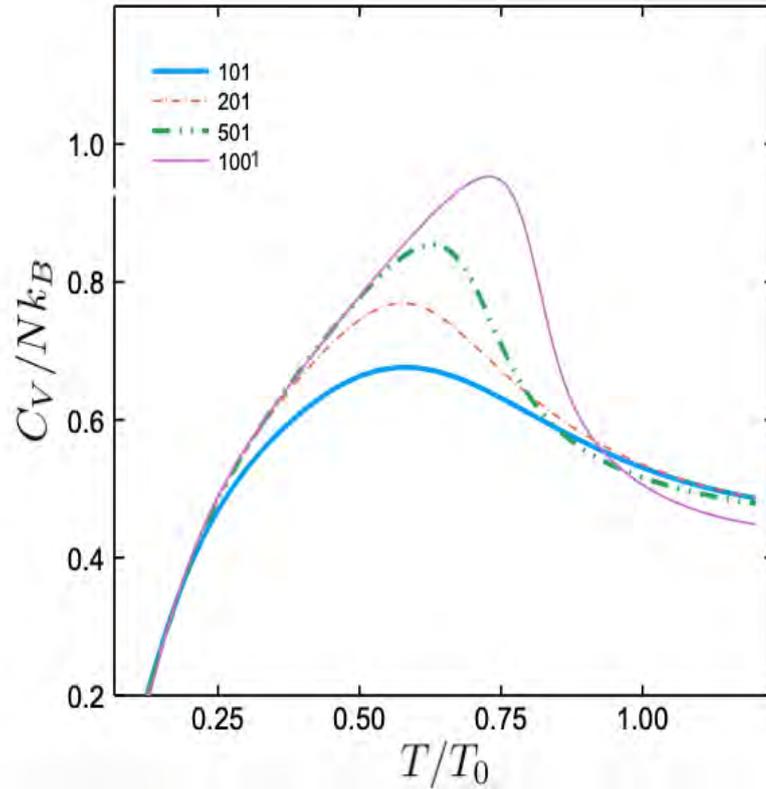


Figura 3.15: Calor específico isocórico de un gas de bosones 1D dentro de un cristal con 101, 201, 501 y 1001 deltas menos 15% de deltas removidas al azar, $P = 10$.

3.4. Propiedades termodinámicas del gas ideal de Bose en multicapas 3D

3.4.1. Caso con una vacancia

Ahora se mostrarán las siguientes propiedades termodinámicas de un sistema de un gas de bosones en multicapas 3D con una dirección llena de 101, 201, 501 y 1001 planos, se volverá a remover la barrera de en medio del sistema, dejando la misma cantidad de planos hacia la izquierda y la derecha del mismo.

3.4.1.1. Potencial químico y su derivada

El comportamiento del potencial químico y de su derivada son análogos al caso 1D, partiendo el primero de un valor cercano al de la energía del estado

3. GAS DE BOSE EN CRISTALES IMPERFECTOS

base hasta T_{cm} para después volverse decreciente, mientras que la derivada vale 0 hasta T_{cm} y empieza a decrecer. Esto se observa en las figuras 3.16 y 3.17

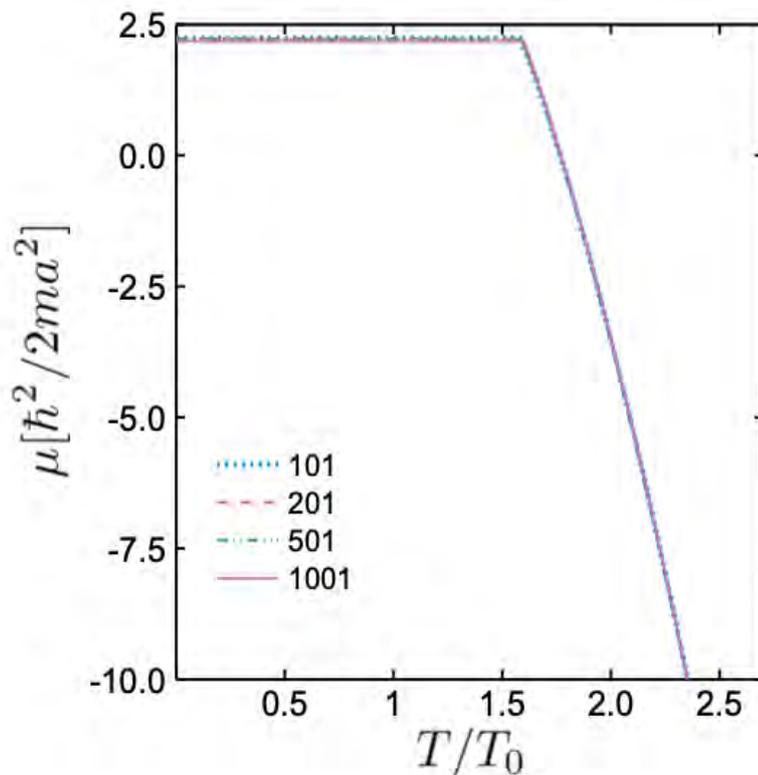


Figura 3.16: Potencial químico en unidades de energía $\hbar^2/2ma^2$ de un gas de bosones en un sistema multicapas 3D con una dirección en la cual hay originalmente 101, 201, 501 y 1001 planos menos el central, $P = 10$.

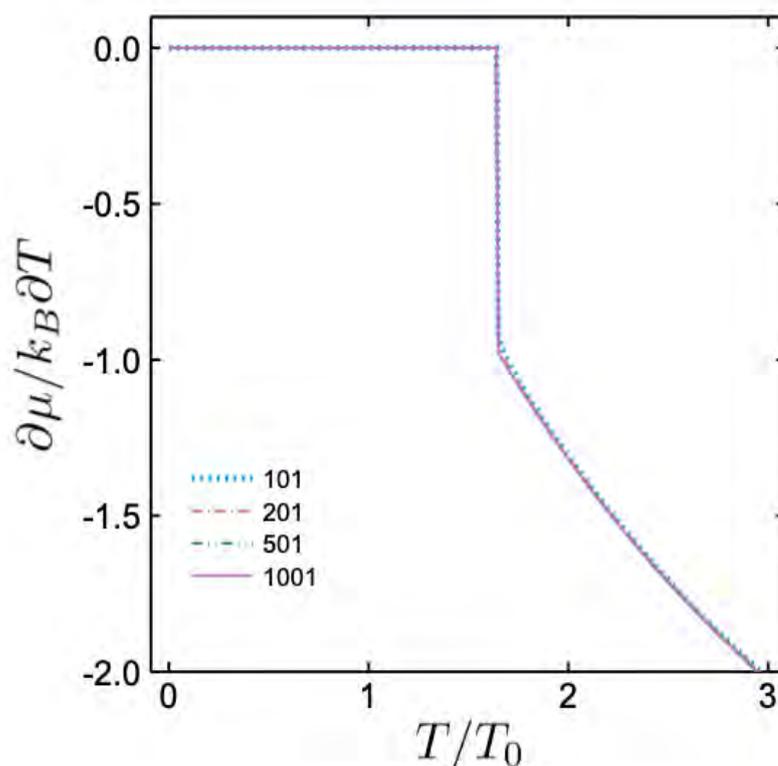


Figura 3.17: Derivada del potencial químico de un gas de bosones en un sistema multicapas 3D con una dirección en la cual hay originalmente 101, 201, 501 y 1001 planos menos el central, $P = 10$.

3.4.1.2. Fracción del condensado

La fracción del condensado definida como

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{N_e}{N} \quad (3.32)$$

escribiendo N y N_e como se dedujo a partir de la ecuación (3.7) tenemos el condensado de la siguiente forma

$$\frac{N_0}{N} = 1 + \frac{\lambda_0}{\zeta(3/2)(M+1)a} \frac{T}{T_0} \sum_{kz} \ln(1 - \exp(\beta(\mu - \varepsilon_{kz}))) \quad (3.33)$$

La gráfica 3.18 de N_0/N como función de la temperatura T/T_0 muestra que la fracción condensada es decreciente, valiendo cero para cada sistema en el punto donde está su T_{cm}/T_0 respectivamente.

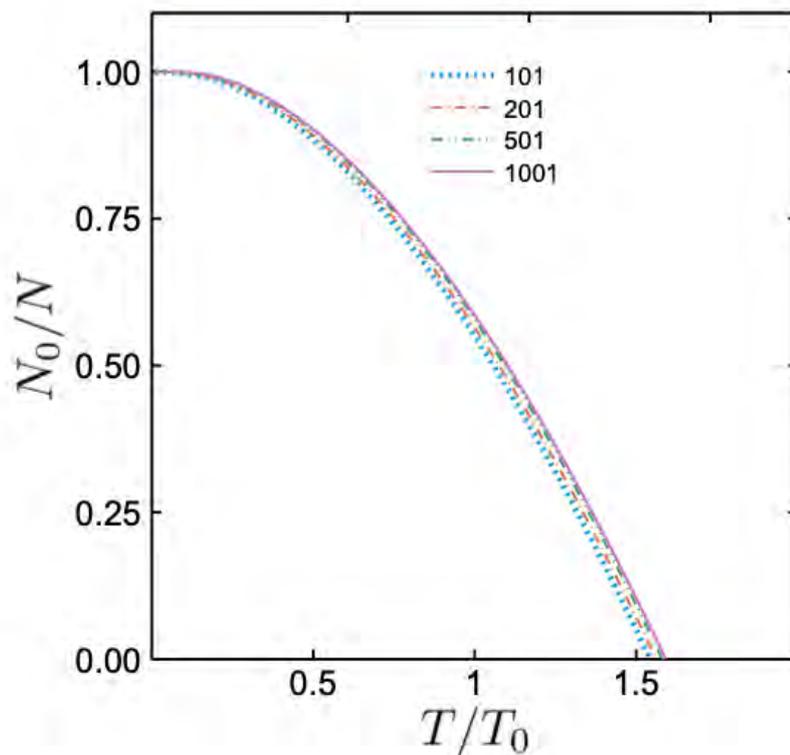


Figura 3.18: Fracción de condensado de un gas de bosones en un sistema multicapas 3D con una dimensión en la cual hay 101, 201, 501 y 1001 planos menos el central, $P = 10$.

3.4.1.3. Energía interna

La figura 3.19 muestra la energía interna por partícula, referida a la energía del estado base ε_0 y dividida por $k_B T$, de nuevo como es de esperarse para valores mayores a T_{cm}/T_0 la curva tiende a $3/2$ que es la energía de un gas libre clásico en tres dimensiones. Antes de esta T_{cm}/T_0 la energía $(U - N\varepsilon_0)/Nk_B T$ es estrictamente creciente.

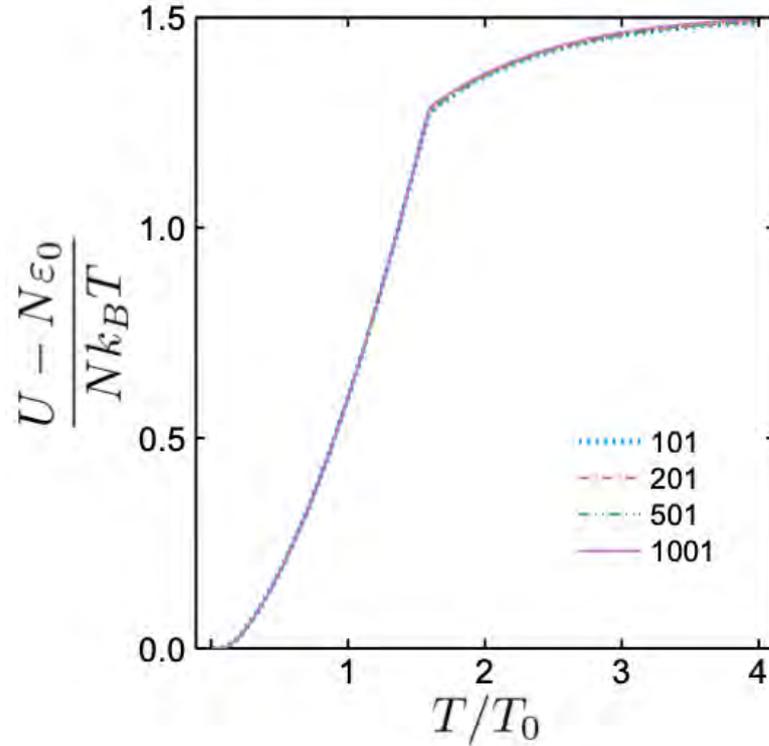


Figura 3.19: Energía interna de un gas de bosones en un sistema multicapas 3D con una dirección en la cual hay 101, 201, 501 y 1001 planos menos el central, $P = 10$.

3.4.1.4. Calor específico isocórico

En 3D se muestra que para cualquier sistemas multicapas perfecto o con vacancias de planos siempre existe CBE con una transición de fase que puede pasar de segundo orden a primer orden cuando todos los planos desaparecen.

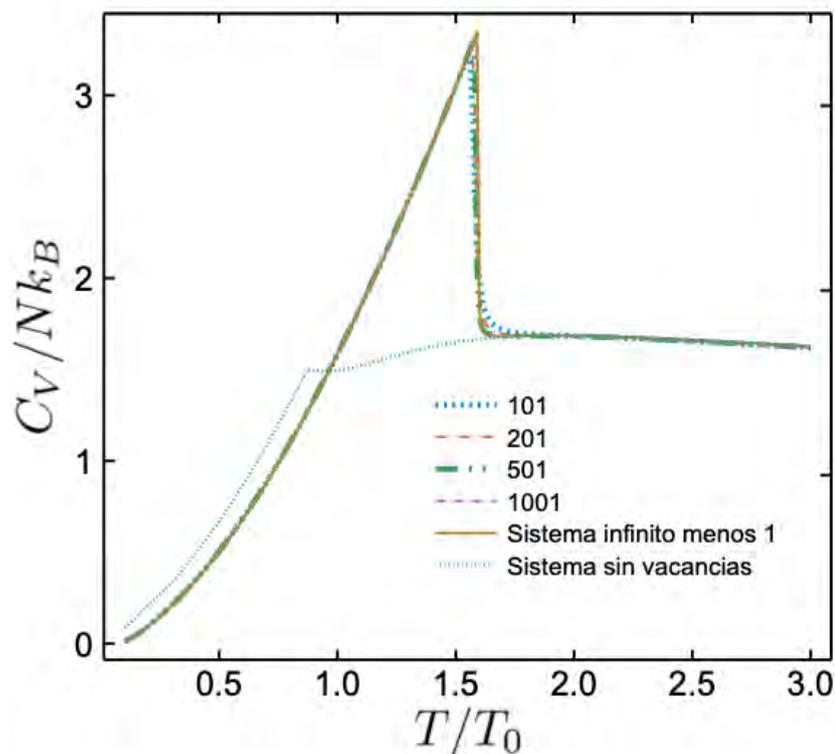


Figura 3.20: Calor específico isocórico de un gas de bosones en un sistema multicapas 3D con una dirección en la cual originalmente hay 101, 201, 501 y 1001 planos menos el central, $P = 10$. Se incluye el sistema perfecto.

También notamos en la figura 3.20 que para temperaturas mayores a la T_{cm} la tendencia de la curva es ir hacia $3/2$ que es el valor esperado para un gas libre en 3 dimensiones. Por otro lado el sistema sin vacancias (línea punteada) no muestra el salto característico de una transición de fase de 2do orden. Es importante notar que únicamente el caso infinito muestra una transición real, mientras que los casos finitos muestran un máximo suavizado alrededor del salto del caso infinito. Puede observarse que conforme aumentamos el tamaño del sistema el máximo del C_V se parece cada vez más al salto del C_V del caso infinito. Podríamos proponer que nuestro caso con 1001 deltas reproduce al caso infinito para toda temperatura excepto en T_c

3.4.2. Caso fracciones de vacancias

3.4.2.1. Potencial químico y su derivada

Estas dos propiedades se comportan igual al caso con un plano removido. Sus gráficas se muestran en las figuras 3.21 y 3.22

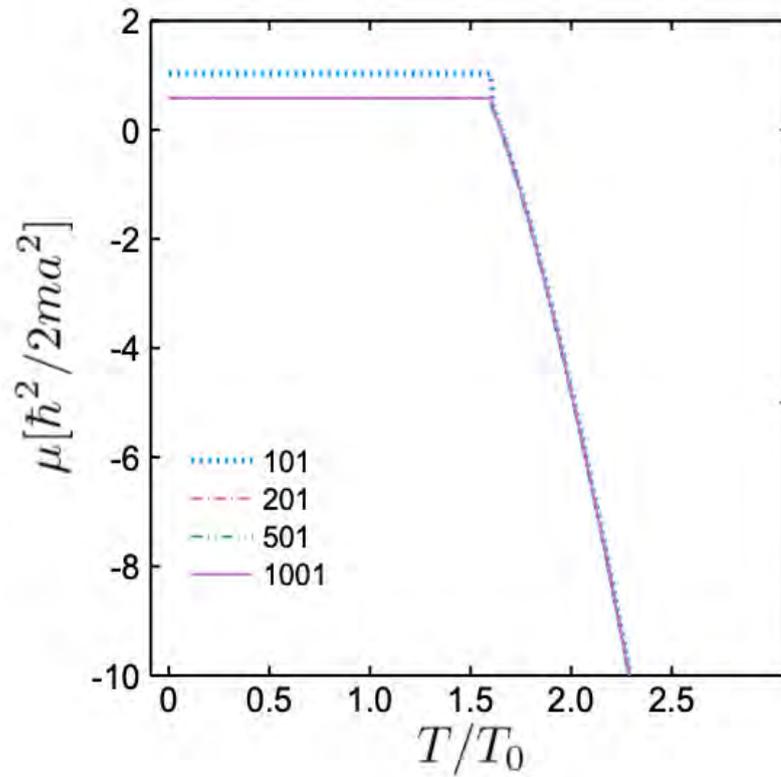


Figura 3.21: Potencial químico de un gas de bosones en un sistema multicapas 3D con una dirección en la cual hay 101, 201, 501 y 1001 planos menos el 15% removidos al azar, $P = 10$.

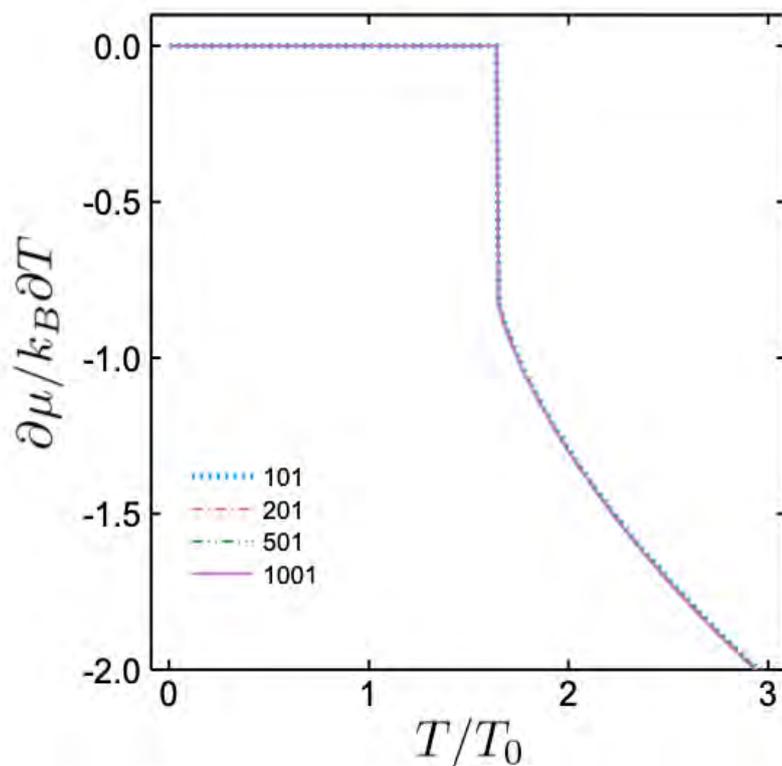


Figura 3.22: Derivada del potencial químico de un gas de bosones en un sistema multicapas 3D con una dirección en la cual hay 101, 201, 501 y 1001 planos menos el 15% removidos al azar, $P = 10$.

3.4.2.2. Fracción del condensado

La fracción del condensado se calcula con la ecuación (3.33) la figura 3.23 muestra su comportamiento en el que a temperaturas cercanas a cero la fracción de condensado vale uno mientras que vale cero en donde se encuentra la T_{cm} para cada sistema. Teniendo una mayor fracción condensada conforme el sistema fue creciendo.

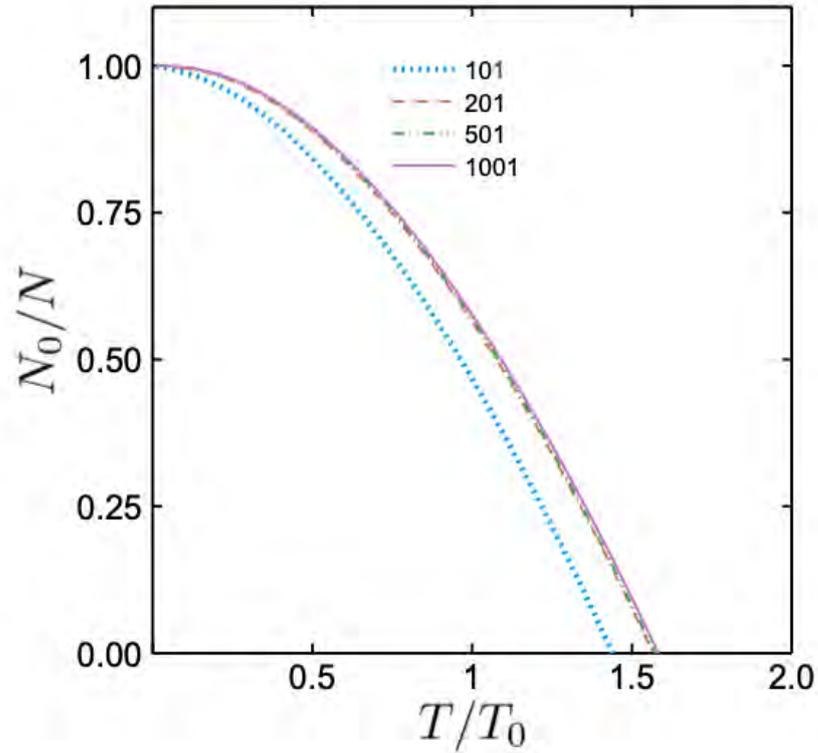


Figura 3.23: Fracción de condensado de un gas de bosones en un sistema multicapas 3D con una dirección en la cual originalmente hay 101, 201, 501 y 1001 planos menos el 15% removidos al azar, $P = 10$.

3.4.2.3. Energía interna

En este sistema la curva de la energía interna por partícula, referida a la energía del estado base y dividida entre $k_B T$, mostrada en la figura 3.24 se vuelve más suave, lo que tiene sentido pues cuando se remueven todas los planos la energía se vuelve la de un gas libre en 3 dimensiones.

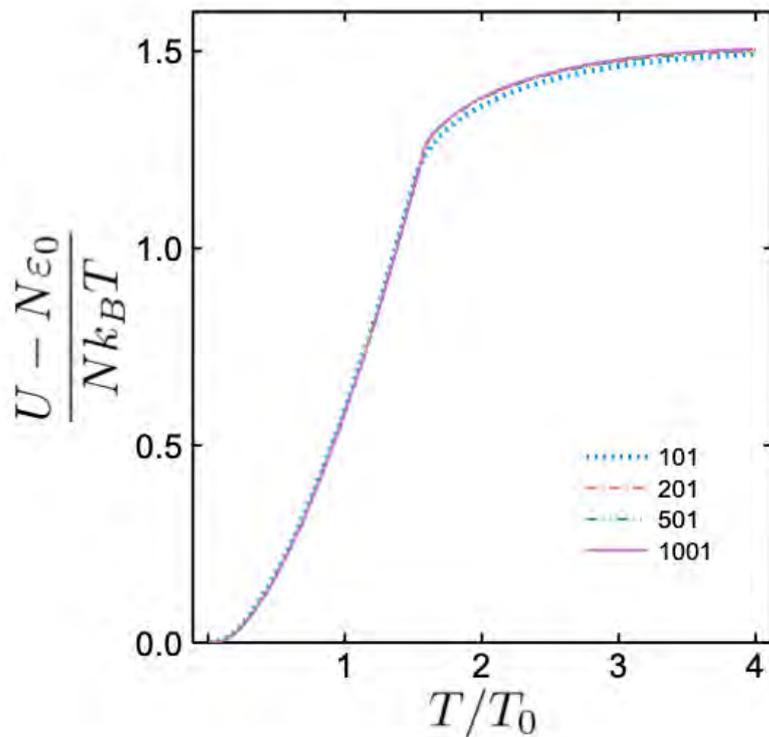


Figura 3.24: Energía interna por partícula referida a la energía del estado base ε_0 y dividida por $k_B T$ de un gas de bosones en un sistema multicapas 3D con una dirección en la cual originalmente hay 101, 201, 501 y 1001 planos menos el 15% removidos al azar, $P = 10$.

3.4.2.4. Calor específico isocórico

En este sistema notamos que el valor de la temperatura crítica aumenta como es visto en la figura 3.25 más allá de eso el comportamiento de la curva es igual al caso con un solo plano removido. Notemos que conforme el sistema va creciendo en número de deltas la curva del C_V muestra la transición de manera más clara. Con lo visto en la figura 3.20 el caso con 1001 es muy parecido al caso en el infinito por lo que esperaríamos que esa curva tenga la misma tendencia.

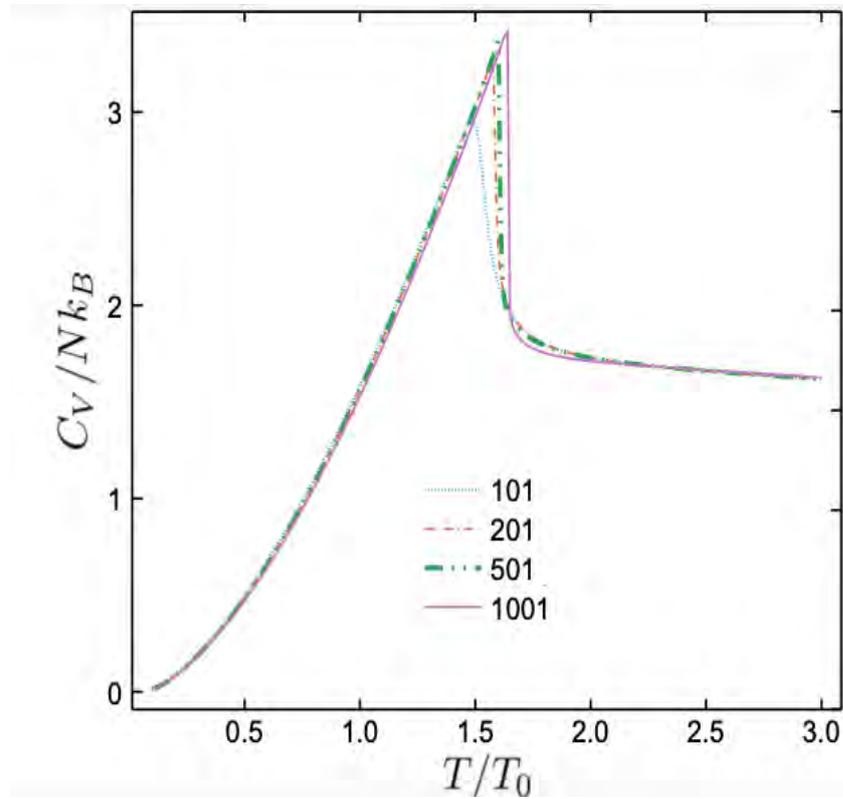


Figura 3.25: Calor específico isocórico de un gas de bosones en un sistema multicapas 3D con una dirección en la cual hay originalmente 101, 201, 501 y 1001 planos menos el 15% removidos al azar, $P = 10$.

Conclusiones

Hemos calculado las temperaturas críticas de CBE de un gas ideal de Bose dentro de estructuras periódicas imperfectas en una y tres dimensiones. Las estructuras se generan aplicando al gas de bosones un potencial Peine de Dirac en una dirección tal que en el sistema 1D generan una cadena de puntos dispersivos como átomos en un cristal mientras que en 3D se generan estructuras multicapas. Las vacancias se forman quitando al azar una fracción de deltas del potencial Peine de Dirac tal que en el sistema unidimensional se producen vacancias puntuales mientras que en 3D las vacancias son de planos. El tamaño del sistema se varió aumentando el número de deltas originales manteniendo constante la separación entre las deltas. El valor de la temperatura crítica de la CBE en el límite termodinámico se obtuvo como la ordenada en el origen de la recta ajustada a las temperaturas críticas como función del inverso del número de deltas, lo cual se realizó para cada una de las fracciones de vacancias.

Al calcular el espectro de energías de una partícula dentro de la estructura imperfecta observamos que por cada vacancia en el cristal se genera un nivel de energía en la región prohibida del espectro de energías del cristal perfecto pudiendo llegar a formar un nuevo paquete de energías. También observamos que la brecha entre el nivel de energía del estado base y el primer nivel excitado, es la causante del aumento de la temperatura crítica de CBE del gas de Bose en las estructuras imperfectas, al grado de propiciar condensación Bose Einstein a temperatura diferente de cero en 1D y 2D. Sin embargo, conforme aumentamos el número de vacancias y por ende el número de niveles en las zonas prohibidas, el tamaño de la brecha disminuye y su presencia se diluye con la consecuente disminución de la temperatura crítica de CBE.

Calculamos el calor específico isocórico de cada uno de los sistemas como función del número de deltas del potencial completo y de la fracción de vacancias. El efecto del tamaño del sistema se ve reflejado en que el calor específico presenta un máximo redondeado más que una cúspide característica de la CBE en los sistemas infinitos.

4. CONCLUSIONES

Para calcular las temperaturas críticas de CBE, consideramos que los sistemas estudiados aquí son finitos, por lo que tomamos como una temperatura crítica virtual la temperatura donde el calor específico presenta el máximo. Virtual porque conforme agrandamos los sistemas el máximo del C_V tiende a una cúspide.

Para los casos en los que las estructuras en 1D y 3D tienen una sola vacancia central reproducimos los resultados previamente reportados en [28]. En este caso las propiedades del sistema infinito son calculadas exactamente.

Cuando el sistema tiene más de una vacancia, el número de formas en que esta fracción puede acomodarse en el sistema es $M!/(M-N)!N!$ (donde M es el número de deltas originales y N el número de vacancias) que en la mayoría de los casos estudiados aquí es un número grande en términos de lo que una computadora puede manejar. De aquí que fue necesario calcular la temperatura crítica virtual T_{cm} (donde se encuentra el máximo del C_V) para varias posibilidades de acomodo de las vacancias para luego hacer un promedio para obtener la \bar{T}_{cm}/T_0 promedio para cada uno de los casos estudiados aquí: $M = 101, 201, 501, 1001$; con fracciones de vacancias iguales a 5 %, 10 %, 15 %, 20 % hasta alcanzar el 80 %.

Para el gas de bosones dentro de un sistema multicapas 3D la temperatura crítica como función de la fracción de vacancias sube rápidamente y encuentra su máximo en alrededor del 15 % de planos removidos para luego descender lentamente hasta alcanzar el valor de temperatura crítica T_0 diferente de cero a la cual se da el CBE del gas ideal dentro de una caja.

En el gas de bosones dentro de un cristal 1D la temperatura crítica promedio parte del valor de la T_{cm}/T_0 para el sistema con una vacancia, primero disminuye y luego aumenta a un valor máximo alrededor del 10-15 % de vacancias para luego descender hasta cero cuando se han removido todas las deltas lo cual es de esperar pues como ya se mencionó anteriormente en una caja unidimensional no existe CBE a temperatura diferente de cero.

Aunque conocemos la fracción de vacancias que propicia una temperatura crítica virtual de CBE máxima, las causas tenemos que buscarlas en la forma en que se agrupan los niveles de energías que aparecen en las bandas prohibidas conforme vamos aumentando el número de vacancias. Proyecto que está en marcha

En el caso del gas de bosones unidimensional es importante notar que cuando se remueve una delta el valor de la T_{cm}/T_0 virtual es mayor que las demás temperaturas virtuales promedio \bar{T}_{cm}/T_0 de los casos donde se aumenta la fracción de vacancias. En el sistema del gas de bosones dentro de la estructura multicapas los casos con una vacancia tienen una \bar{T}_{cm}/T_0 menor que la temperatura máxima promedio \bar{T}_{cmM}/T_0 para el sistema con M deltas iniciales y diferentes fracciones de vacancias. Esto puede ser debido a que en el sistema 3D hay dos dimensiones donde las partículas se mueven libremente y el hecho de quitar un plano tiene un menor efecto en la posición del máximo del calor específico.

Es importante mencionar que el gas de bosones en el cristal 1D y en la es-

estructura multicapas 3D ambos con 1001 deltas/planos las temperaturas máximas promedio \bar{T}_{cm} son muy cercanas a la obtenida en el límite del sistema infinito, por lo que se podría decir que esta estructura es muy parecida a la del sistema infinito al menos en lo que respecta a la magnitud de las temperatura crítica virtual promedio, lo cual se puede ver en las Tablas 3.2 y 3.3. Respecto a la incertidumbre reportadas para el límite en el infinito esta puede hacerse más pequeña analizando la temperatura crítica virtual de más sistemas con otras M para poder hacer una regresión lineal más precisa.

Por último, también es importante señalar que ante la variación de la fracción de vacancias las propiedades termodinámicas de los sistemas estudiados muestran el mismo comportamiento cualitativo aunque sus magnitudes son diferentes, pero siempre tendiendo como límite al caso infinito.

A.1. Código en Julia para resolver la ecuación de Schrödinger

Función que genera la matriz asociada la ecuación de Schrödinger debido al método de diferencias finitas, basta con introducir el potencial deseado para encontrar la energía asociada a ese sistema específico

```
1 function eigenvaluesdeltaequi(N,V)
2
3     vectora=-1*ones(N)
4     vectorb=+2*ones(N+1)
5     vectorc=-1*ones(N)
6     U1=(N^2)*LinearAlgebra.Tridiagonal(vectora,vectorb,vectorc)
7     U3=U1+V
8     eigvals(Matrix(U3))
9
10 end
```

Ejemplo de potencial que genera un cristal perfecto con mil un deltas

```
1 function milundeltas(N,j,V0)
2
3     L=zeros(N)
4     for i in 1:j:N
5         L[i]=V0
6     end
7     L[1]=0
8     L[N]=0
9     return Matrix(Diagonal(L))
10
11 end
```

A. CÓDIGO

Ejemplo de potencial que genera un cristal imperfecto con 101 deltas con 20 vacancias al azar

```
1  deltas10=[]
2  while length(deltas10) <20
3      n=rand(101:100:10201)
4      if ! (n in deltas10)
5          push!(deltas10 ,n)
6      end
7  end
8  function ciendeltasmenos20(N,j , V )
9      L=zeros(N)
10     for i in 1:j:N
11         L[i]=V0
12     end
13     L[1]=0
14     L[N]=0
15     L[deltas10 [1]]=0
16     L[deltas10 [2]]=0
17     L[deltas10 [3]]=0
18     L[deltas10 [4]]=0
19     L[deltas10 [5]]=0
20     L[deltas10 [6]]=0
21     L[deltas10 [7]]=0
22     L[deltas10 [8]]=0
23     L[deltas10 [9]]=0
24     L[deltas10 [10]]=0
25     L[deltas10 [11]]=0
26     L[deltas10 [12]]=0
27     L[deltas10 [12]]=0
28     L[deltas10 [13]]=0
29     L[deltas10 [14]]=0
30     L[deltas10 [15]]=0
31     L[deltas10 [16]]=0
32     L[deltas10 [17]]=0
33     L[deltas10 [18]]=0
34     L[deltas10 [19]]=0
35     L[deltas10 [20]]=0
36     return Matrix(Diagonal(L))
37
38 end
```

A.2. Código en Julia para las propiedades termodinámicas del gas de bosones dentro de un cristal 1D y el gas de bosones dentro de una estructuras multiplanos 3D

Potencial químico y su derivada del gas de bosones dentro de un cristal 1D

```

1  function potencialquimico(Nb,Nd,mu,T,e)
2      sum=0
3      for i in 1:(Nb*(Nd+1))
4          sum+=(1/(((zeta(3/2))^(1/3))*(Nd+1)))*(1/(exp((e[i]-mu)/(4*
           pi*T))-1))
5      end
6      return sum
7  end
8
9  function potencialq(e,n,r,l,k,s1,s2)
10     =[]
11     for i in r:l:k
12         g(x)=potencialquimico(s1,s2,x,i,e)-1
13         r=find_zero(g, n ,Order0())
14         push!(mu,r)
15     end
16     return mu
17 end
18
19
20 function derivadapotencialq(Nb,Nd,mu,T,e)
21     sum=0
22     sum1=0
23     q=0
24     for i in 1:(Nb*(Nd+1))
25         num=sum+=((((e[i]-mu)/(4*pi*T))*(exp((e[i]-mu)/(4*pi*T))))/(
           exp((e[i]-mu)/(4*pi*T))-1)^2)
26         dem=sum1+=((exp((e[i]-mu)/(4*pi*T)))/(exp((e[i]-mu)/(4*pi*T)
           )-1)^2)
27         q=-(num/dem)
28     end
29     return q
30 end
31
32 function devpotencialq(e,n,r,l,k,s1,s2)

```

A. CÓDIGO

```
33     demu=[]
34     for i in r:l:k
35         g(x)=potencialquimico(s1,s2,x,i,e)-1
36         r=find_zero(g,n,Order0())
37         qr=derivadapotencialq(s1,s2,r,i,e)
38         push!(demu,qr)
39     end
40     return demu
41 end
```

Fracción del condensado del gas de bosones dentro de un cristal 1D

```
1  function condensado1D(Nb,Nd,mu,T,e)
2  sum=0
3  con=0
4  for i in 1:(Nb*(Nd+1))
5  sum+=((1/(((zeta(3/2))^(1/3))*(Nd+1))))*(1/(exp((e[i]-mu)/(4*pi*T))
6  )-1))
7  con=(1-sum)
8  end
9  return con
10 end
11 function fconden1D(e,n,r,l,k,s1,s2)
12 fcon=[]
13
14 for i in r:l:k
15     cond=condensado1D(s1,s2,n,i,e)
16     push!(fcon,cond)
17 end
18 return fcon
19 end
```

Energía interna del gas de bosones en un cristal 1D

```
1
2  function EnergiaInterna1D(Nb,Nd,mu,T,e)
3  sum1=0
4  sum2=0
5  for i in 1:(Nb*(Nd+1))
6  sum1+= ((1/(((zeta(3/2))^(1/3))*(Nd+1))))*(((e[i]-e[1])/(4*pi
7  *T))/(exp((e[i]-mu)/(4*pi*T))-1)))
8  end
9  return sum1
10 end
```

A.2 Código en Julia para las propiedades termodinámicas del gas de bosones dentro de un cristal 1D y el gas de bosones dentro de una estructuras multiplanos 3D

```

11 function EnergiaU1D(e,n,r,l,k,s1,s2)
12     U=[]
13
14     for i in r:l:k
15         g(x)=potencialquimico(s1,s2,x,i,e)-1
16         q=find_zero(g,n,Order0())
17         Uq=EnergiaU1D(s1,s2,q,i,e)
18
19     push!(U,Uq)
20 end
21 return U
22 end

```

Calor específico isocórico del gas de bosones dentro de un cristal 1D

```

1
2 function Calorespecifico(Nb,Nd,mu,T,demu,e)
3     Cv=0
4     for i in 1:(Nb*(Nd+1))
5         Cv+=((1/(((zeta(3/2))^(1/3))*(Nd+1))))*(((e[i]-e[1])/(4*pi*T))*
6             exp((e[i]-mu)/(4*pi*T)))/(exp((e[i]-mu)/(4*pi*T))-1)^2)*((e[
7                 i]-mu)/(4*pi*T)+demu))
8     end
9     return Cv
10 end
11
12 function ceve(e,n,r,l,k,s1,s2)
13     cve=[]
14     for i in r:l:k
15         g(x)=potencialquimico(s1,s2,x,i,e)-1
16         r1=find_zero(g,n,Order0())
17         qr=derivadapotencialq(s1,s2,r1,i,e)
18         cv=Calorespecifico(s1,s2,r1,i,qr,e)
19     push!(cve,cv)
20 end
21 return cve
22 end

```

Función polilogaritmica necesaria para los cálculos de las propiedades termodinámicas del gas de bosones dentro de una estructura multiplanos 3D

```

1function polylog(z, n)
2     sum3D=0
3     for i in 1:n
4         sum3D+=(z^(i))/(i^(n))
5     end

```

A. CÓDIGO

```
6 return sum3D
end
```

Potencial químico y su derivada del gas de bosones dentro de un sistema multiplanos 3D

```
1 function potencialquimico3D(Nb,Nd,mu,T,e)
2 sum=0
3 for i in 1:(Nb*(Nd+1))
4 sum+=-((T)/((zeta(3/2))*(Nd+1)))*(log(1-exp((-e[i]+mu)/(4*pi*T))
5 ))
6 return sum
7 end
8
9 function potencialq3D( ,n,r,l,k,s1,s2)
10 mu=[]
11 for i in r:l:k
12 g(x)=potencialquimico3D(s1,s2,x,i,e)-1
13 r1=find_zero(g, n ,Order0())
14 push!(mu,r1)
15 end
16 return mu
17 end
18
19 function potencialq3D2(n,r,l,k)
20 mu=[]
21 for i in r:l:k
22 g=n
23 push!(mu,g)
24 end
25 return mu
26 end
27
28 function derivadapotencialq3D(Nb,Nd,mu,T,e)
29 sum=0
30 sum2=0
31 q=0
32 for i in 1:(Nb*(Nd+1))
33 num1=sum += ((1/(4*pi*T))*(mu-e[i])*((exp((mu-e[i])/(4*pi*T))
34 /((1-exp((mu-e[i])/(4*pi*T)))))+log(1-exp((mu-e[i])/(4*pi*T))))
35 num2=sum2 += ((exp((mu-e[i])/(4*pi*T)))/(1-exp((mu-e[i])/(4*pi*
36 T))))
37 q= (num1/num2)
38 end
```

A.2 Código en Julia para las propiedades termodinámicas del gas de bosones dentro de un cristal 1D y el gas de bosones dentro de una estructuras multiplanos 3D

```

37 return q
38 end
39
40 function devpotencialq3D( ,n,r,l,k,s1,s2)
41     demu=[]
42     for i in r:l:k
43         g(x)=potencialquimico3D(s1,s2,x,i,e)-1
44         r1=find_zero(g,n,Order0())
45         qr=derivadapotencialq3D(s1,s2,r1,i,e)
46         push!(demu,qr)
47     end
48     return demu
49 end
50
51
52 function devpot0(r,l,k)
53     mu=[]
54     for i in r:l:k
55         g=0
56         push!(mu,g)
57     end
58     return mu
59 end

```

Fracción de condensado de un gas de bosones dentro de un sistema multiplanos 3D

```

1     function condensado(Nb,Nd,mu,T,e)
2         sum=0
3         con=0
4         for i in 1:(Nb*(Nd+1))
5             sum+=((((T)/((zeta(3/2))*(Nd+1)))*(log(1-exp((-e[i]+mu)/(4*pi
6                 *T))))))
7         con=(1+sum)
8         end
9         return con
10    end
11
12 function fconden(e,mu,r,l,k,s1,s2)
13     fcon=[]
14     for i in r:l:k
15         cond=condensado(s1,s2,mu,i,e)
16         push!(fcon,cond)
17     end
18     return fcon

```

A. CÓDIGO

```
18 end
```

Energía interna de un gas de bosones dentro de un sistema multiplanos 3D

```
1 function Energ_ainterna(Nb,Nd,mu,T,e)
2 sum2=0
3 for i in 1:(Nb*(Nd+1))
4     sum2+= ( ((T)/((zeta(3/2))*(Nd+1))) * ((polylog(exp((mu-e[i]
5         ])/(4*pi*T)),2,300))-((e[i]-e[1])/(4*pi*T))*log(1-exp((mu
6         -e[i])/(4*pi*T))))))
7 end
8 return sum2
9 end
10
11 function Energ_ainternaU(e,mu,r,l,k,s1,s2)
12 U=[]
13 for i in r:l:k
14     g(x)=potencialquimico3D(s1,s2,x,i,e)-1
15     r1=find_zero(g, n ,Order0())
16     Ur=Energ_ainterna(s1,s2,r1,i,e)
17 push!(U,Ur)
18 end
19 return U
20 end
21
22 function Energ_ainternaU2(e,mu,r,l,k,s1,s2)
23 U=[]
24
25 for i in r:l:k
26     Ur=Energ_ainterna(s1,s2,mu,i,e)
27
28 push!(U,Ur)
29 end
30 return U
31 end
```

Calor específico isocórico del gas de bosones dentro de una estructura multiplanos 3D

```
1
2 function Calorespecifico3D2(Nb,Nd,mu,T,demu,e)
3 Cv=0
4 for i in 1:(Nb*(Nd+1))
5     Cv += ((T/(zeta(3/2)*(Nd+1)))*(2*(polylog(exp((mu-e[i])/(4*pi*
```

A.2 Código en Julia para las propiedades termodinámicas del gas de bosones dentro de un cristal 1D y el gas de bosones dentro de una estructuras multiplanos 3D

```

        T)) ,2 ,300)) -((log(1-exp((mu-e [ i ])/(4*pi*T)))))*(((2*e [ i ]-e[1]-
mu)/(4*pi*T))+demu)))+(((exp((mu-e [ i ])/(4*pi*T)))/(1-exp((mu
-e [ i ])/(4*pi*T)))))*(e [ i ]-e [1])/(4*pi*T))*(-(mu-e [ i ])/(4*pi*
T))+demu))))))
6   end
7   return Cv
8   end
9
10  function ceve3D2(e,mu,r,l,k,s1,s2)
11  cve=[]
12  for i in r:l:k
13      qr=derivadapotencialq3D(s1,s2,mu,i,e)
14      cv=Calorespecifico3D2(s1,s2,mu,i,qr,e)
15  push!(cve,cv)
16  end
17  return cve
18  end
19
20  function ceve3D(e,n,r,l,k)
21  cve=[]
22  for i in r:l:k
23      g(x)=potencialquimico3D(s1,s2,x,i,e)-1
24      r1=find_zero(g,n,Order0())
25      qr=derivadapotencialq3D(s1,s2,r1,i,e)
26      cv=Calorespecifico3D(s1,s2,r1,i,qr,e)
27  push!(cve,cv)
28  end
29  return cve
30  end

```


Bibliografía

- [1] A. Einstein, “Quantentheorie des einatomigen idealen Gases”, *Sitzungsber. phys.-math., Gesamtsitzung* **10**, 245 (1924) [1](#)
- [2] 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](#)
- [3] W. Ketterle, et al., “Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms”, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995) [1](#)
- [4] J. G. Martínez-Herrera, et al., “Bose gas with generalized dispersion relation plus an energy gap”, *Phys. Scr.* **94** 075002 (2019) [1](#), [2](#)
- [5] V.C. Aguilera-Navarro, M. de Llano, M. A. Solís, “Bose–Einstein condensation for general dispersion relations”, *Eur. J. Phys.* **20** 177-82 (1999) [1](#), [2](#)
- [6] V. Bagnato, D. E. Pritchard, D. Kleppner, “Bose-Einstein condensation in an external potential”, *Phys. Rev. A* **35** 10 (1986) [1](#)
- [7] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, I. Bloch, “Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms”, *Nature* **415** (2002) [1](#)
- [8] I. Bloch, J. Dalibard, W. Zwerger, “Many-Body Physics with Ultracold Gases”, *arXiv:0704.3011v2* (2008) [1](#), [2](#)
- [9] J. García , “Condensación Bose Einstein en cristales con vacancias”, Tesis de Maestría (Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, 2018) [1](#), [2](#), [10](#), [11](#), [12](#), [22](#), [34](#)
- [10] V. E. Barragán, M. Fortes, M. A. Solís, P. Salas, “Bose gas in disordered, finite layered System”, *Inter. J. of Modern Phys. B* **30**, 1650099 (2015) [1](#)

BIBLIOGRAFÍA

- [11] P. Salas, “Calor específico de cupratos”, Tesis de Doctorado (Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, 2012) [1](#)
- [12] G. Guijarro, “Gas de Bose en cables multifilamentos”, Tesis de Maestría (Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, 2015) [2](#)
- [13] J. Billy, V. Josse, Z. Zuo, A. Bernard, B. Hambrecht, et al., “Direct observation of Anderson localization of matter-waves in a controlled disorder”, *Nature* **453**, 891 (2008) [2](#)
- [14] G. Modugno, “Anderson localization in Bose-Einstein condensates”, *Reports on Progress in Physics* **73**, 102401 (2010) [2](#)
- [15] P. Kapitza, “Viscosity of Liquid Helium below the λ -Point”, *Nature* **141** 74 (1938) [2](#)
- [16] J. Allen, A. D. Misener, “New Phenomena Connected with Heat Flow in Helium II”, *Nature* **141**, 243 (1938) [2](#)
- [17] F. London, “The λ -Phenomenon of Liquid Helium and the Bose-Einstein Degeneracy”, *Nature* **141**, 643 (1938) [2](#)
- [18] H. R. Pajkowski, R. K. Pathria, “Criteria for the onset of Bose-Einstein condensation in ideal systems confined to restricted geometries”, *J. Phys. A* **10**, 561 (1977) [22](#)
- [19] C. J. Pethick y H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* (Cambridge University Press, UK, 2002) [20](#)
- [20] J. Allen, A. D. Misener, “Flow Phenomena in Liquid Helium II”, *Nature* **142**, 643 (1938)
- [21] R. de L. Kronig, W. G. Penney, “Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices”, *Proy. Roy. Soc.* **130**, 499 (1930) [5](#)
- [22] D. A. McQuarrie, *The Kronig-Penney Model; A single Lecture Illustrating the band Structure of solids*, The Chemical Education (Springer, USA, 1996)
- [23] S. Botman, S. Leble, “Bloch wave scattering on pseudopotential impurity in 1D Dirac comb model”, arXiv:1511.04758 (2015) [8](#)
- [24] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, 2nd Edition, (Pearson Education, USA, 2005) [7](#)
- [25] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*, 3th edition (Elsevier, USA, 2011) [33](#)

- [26] A. Manzur ,“Análisis gráfico. Parte II. Cálculo de incertidumbres”, Dpto. de Física, ContactoS **76**, 49 (2010) [24](#)
- [27] B. Carnahan, H. A. Luther, J. O. Wilkes, *Applied Numerical Methods* (John Wiley and Sons, USA 1969)
- [28] J. García, et al., “Raising the Bose-Einstein critical temperatura with vacancies”, en proceso [52](#)